Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

数值微分问题的典型提法

设 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上定义，$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ 是区间 $[a,b]$ 中的 $n+1$ 个节点。数值微分问题的典型提法是：利用函数在所给节点上的值

$$f(x_0),\ f(x_1),\ f(x_2),\ \cdots,\ f(x_n),$$

求

$$f'(x_0),\ f'(x_1),\ f'(x_2),\ \cdots,\ f'(x_n),$$

$$f''(x_0),\ f''(x_1),\ f''(x_2),\ \cdots,\ f''(x_n),$$

或更一般地, 对 $1 \leq k \leq n$, 求

$$f^{(k)}(x_0),\ f^{(k)}(x_1),\ f^{(k)}(x_2),\ \cdots,\ f^{(k)}(x_n),$$

的近似值。

利用函数的 Taylor 展开及其余项公式近似计算微商

设节点为等距的，即$x_i = a + i \cdot h$, $h = (b-a)/n$, $i = 0, 1, \cdots, n$.
设 $f(x)$ 有 k 阶微商。对$i = 1, 2, \cdots, n-1$, 由Taylor 展开公式有

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) + \cdots + \frac{h^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k-1)}(x_i) + \frac{h^k}{(k)!} f^{(k)}(\xi_{i1}^k),$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) + \cdots + \frac{(-h)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k-1)}(x_i) + \frac{(-h)^k}{(k)!} f^{(k)}(\xi_{i2}^k).$$

其中 $\xi_{i1}^k \in (x_i, x_{i+1})$, $\xi_{i2}^k \in (x_{i-1}, x_i)$. 特别地，取 $k = 2$, 得

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi_{i1}^2),$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi_{i2}^2).$$

利用函数的 Taylor 展开及其余项公式近似计算微商

若取 $k=3$, 则可得

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_{i3}^3),$$

其中 $\xi_{i3}^3 \in (x_{i-1}, x_{i+1})$ s.t. $2f'''(\xi_{i3}^3) = f'''(\xi_{i1}^3) + f'''(\xi_{i2}^3)$.

若取 $k=4$, 则可得

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi_{i4}^4),$$

其中 $\xi_{i4}^4 \in (x_{i-1}, x_{i+1})$ s.t. $2f^{(4)}(\xi_{i4}^4) = f^{(4)}(\xi_{i1}^4) + f^{(4)}(\xi_{i2}^4)$.

用差商近似微商的数值微分公式

- 一阶向前差商：$f'(x_i) \approx \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} =: h^{-1}\triangle_+ f(x_i);$
- 一阶向后差商：$f'(x_i) \approx \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} =: h^{-1}\triangle_- f(x_i);$
- 一阶中心差商:$f'(x_i) \approx \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} =: (2h)^{-1}\triangle_0 f(x_i);$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1/2}) - f(x_{i-1/2})}{h} =: h^{-1}\delta f(x_i);$$

- 二阶中心差商:

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} =: h^{-2}\delta^2 f(x_i).$$

用差商近似微商的数值微分公式的截断误差

一阶向前和一阶向后差商公式是分别忽略余项 $-\frac{h}{2}f''(\xi_{i1}^2)$ 和 $\frac{h}{2}f''(\xi_{i2}^2)$ 后得到的. 因此，它们的截断误差的量级都是 $O(h)$.

一阶中心差商公式是忽略余项 $-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_{i3}^3)$ 后得到的. 因此，它的截断误差的量级是 $O(h^2)$.

二阶中心差商公式是忽略余项 $-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_{i4}^4)$ 后得到的. 因此，它的截断误差的量级是 $O(h^2)$.

一般地说，中心差商公式（因为其对称性）比偏心的差商公式有更高的截断误差阶。另外，仅从截断误差来看, h 越小，则差商公式的逼近精度越高。

函数值的舍入误差对差商计算结果的影响

实际计算时，必须考虑数值稳定性。为此我们分析函数值的舍入误差对差商计算结果的影响。

以一阶中心差商为例。设 $f(x_{i-1})$ 和 $f(x_{i+1})$ 分别有舍入误差 ε_1 和 ε_2，令 $\varepsilon = \max\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|\}$，若忽略 h 的舍入误差，令

$$f_h'(x_i) \triangleq \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}, \qquad \tilde{f}_h'(x_i) \triangleq \frac{\tilde{f}(x_{i+1}) - \tilde{f}(x_{i-1})}{2h},$$

则由舍入误差带来的计算结果的误差限为

$$\delta(f_h'(x_i)) = |f_h'(x_i) - \tilde{f}_h'(x_i)| \le \frac{|\varepsilon_1| + |\varepsilon_2|}{2h} \le \frac{\varepsilon}{h}.$$

可见，h 越小，则舍入误差引起的计算结果的误差一般也会越大。这也说明差商公式当 h 很小时是数值不稳定的。

截断误差与舍入误差的平衡—差商逼近的理论极限

要分析差商公式的实际逼近精度，理论上说，我们应该同时考虑截断误差与舍入误差对结果的影响。仍以一阶中心差商为例，记 $e_h(f'(x_i))$ 为给定 h 时的绝对误差限，则有

$$e_h(f'(x_i)) = M\frac{h^2}{6} + \frac{\varepsilon}{h}, \quad \text{其中} \quad M = \max_{x\in(x_{i-1},x_{i+1})} |f'''(x)|.$$

不难证明：当 $h = h^* \triangleq \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}}$ 时， $e_h(f'(x_i))$ 取到最小值 $\frac{3}{2}\sqrt[3]{\frac{M\varepsilon^2}{3}}$, 此时 截断误差和舍入误差分别为 $\frac{1}{2}\sqrt[3]{\frac{M\varepsilon^2}{3}}$ 和 $\sqrt[3]{\frac{M\varepsilon^2}{3}}$.
相对误差限也有类似的结论。

总之，差商逼近的理论极限（最佳逼近精度）一般地说远低于计算机的机器精度。上例为 $\sim O(\varepsilon^{\frac{2}{3}})$ $(h \sim O(\varepsilon^{\frac{1}{3}}))$, 而二阶中心差商为 $\sim O(\varepsilon^{\frac{1}{2}})$ $(h \sim O(\varepsilon^{\frac{1}{4}}))$.

利用 Taylor 展开式建立 $f'(x)$ 各节点值间的关系式

在向前和向后 Taylor 展开式中取 $k=6$, 求和后得

$$\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=f''(x)+\frac{h^2}{12}f^{(4)}(x)+O(h^4).$$

由此得

$$f'''(x_i)=\frac{f'(x_{i+1})-2f'(x_i)+f'(x_{i-1})}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(5)}(x_i)+O(h^4).$$

在向前和向后 Taylor 展开式中取 $k=7$, 求差后得

$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(x_i)-\frac{h^4}{120}f^{(5)}(x_i)+O(h^6).$$

再将其中的 $f'''(x_i)$ 用前式右端项替换，得

利用 Taylor 展开式建立 $f'(x)$ 各节点值间的近似关系式

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{6}\frac{f'(x_{i+1}) - 2f'(x_i) + f'(x_{i-1})}{h^2} + O(h^4).$$

略去 $O(h^4)$ 项, 既得 $f'(x)$ 各节点值间的近似关系式

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{f'(x_{i+1}) - 2f'(x_i) + f'(x_{i-1})}{6},$$

或

$$f'(x_{i-1}) + 4f'(x_i) + f'(x_{i+1}) \approx \frac{3}{h}(f_{i+1} - f_{i-1}).$$

其中 $f_{i+1} = f(x_{i+1})$, $f_{i-1} = f(x_{i-1})$.

$f'(x)$ 各节点近似值满足的线性代数方程组

这就导出了 $f'(x_j), j = 0, 1, \cdots, n$ 在特殊意义下的近似值 m_j, $j = 0, 1, \cdots, n$ 所满足的线性代数方程组

$$m_{i-1} + 4m_i + m_{i+1} = \frac{3}{h}(f_{i+1} - f_{i-1}), \quad i = 1, 2, \cdots, n-1.$$

注意，我们有$n+1$ 个未知量，而只有$n-1$ 个独立的方程。因此还需要补充两个独立的条件。例如，$m_0 = f'(x_0)$, $m_n = f'(x_n)$ 已知，则可通过求解以上线性方程组得到 $\{f'(x_i)\}_{i=1}^{n-1}$ 的一组近似值 $\{m_i\}_{i=1}^{n-1}$.

该方程组的系数矩阵 A 是不可约严格主对角占优的对称矩阵, 可用追赶法求解。可以证明 $\|A^{-1}\|_\infty$ 有与 n 无关的界。

$f'(x_i)$ 的近似值 m_i 的误差方程与逼近误差的阶

由 $m_0 = f'(x_0)$, $m_n = f'(x_n)$, 以及

$$f'(x_{i-1})+4f'(x_i)+f'(x_{i+1}) = \frac{3}{h}(f_{i+1}-f_{i-1})+O(h^4), \quad i = 1, 2, \cdots, n-1,$$

$$m_{i-1} + 4m_i + m_{i+1} = \frac{3}{h}(f_{i+1} - f_{i-1}), \quad i = 1, 2, \cdots, n-1,$$

知：逼近误差 $e_i = m_i - f'(x_i)$ 满足线性代数方程组

$$\begin{cases} e_{i-1} + 4e_i + e_{i+1} = O(h^4), \quad i = 1, 2, \cdots, n-1, \\ e_0 = e_n = 0. \end{cases}$$

由此知：$\|\vec{e}\|_\infty \le \|A^{-1}\|_\infty \cdot O(h^4) = O(h^4)$.

$f'(x_i)$ 的近似值 m_i 的数值稳定性和理论逼近极限

$f'(x_i)$ 的近似值 m_i 的数值稳定性主要体现在方程组右端项的数值稳定性。而由舍入误差引起的该项的误差限为 $\frac{6\varepsilon}{h}$.

考虑总误差 $C_1\frac{6\varepsilon}{h} + C_2h^4$ 的极小化。取 $h = \sqrt[5]{\frac{3C_1\varepsilon}{2C_2}}$ $(h \sim O(\varepsilon^{\frac{1}{5}}))$. 此时，逼近达到极限精度 $O(\varepsilon^{4/5})$.

一般地说，隐式数值微分格式有较高的逼近精度和较好的数值稳定性。在条件允许的情况下，隐式格式是一个不错的选项。

插值型求导公式

设 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上定义，$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 是区间 $[a,b]$ 中的 $n+1$ 个节点，已知函数在所给节点上的值

$$f(x_0),\ f(x_1),\ f(x_2),\ \cdots,\ f(x_n),$$

设 $f(x)$ 充分光滑, 则我们可以构造插值多项式 $P_n(x)$, s.t.

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x), \qquad R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x),$$

其中 $\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$. 于是有

$$f'(x) = P_n'(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x) + \frac{\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x).$$

插值型求导公式

特别地在节点 x_i 上 $\omega_{n+1}(x_i)=0$, 所以有

$$f'(x_i)=P_n'(x_i)+\frac{f^{(n+1)}(\xi(x_i))}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_i).$$

例如，当$n=1$ 时，

$$f(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)+\frac{f''(\xi(x))}{2!}(x-x_0)(x-x_1),$$

所以有

$$f'(x_0)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}-\frac{f''(\xi(x_0))}{2!}h,$$

$$f'(x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}+\frac{f''(\xi(x_1))}{2!}h,$$

这分别给出的正是一阶微商的一阶向前和向后差商近似。

插值型求导公式

当 $n=2$，且为等距节点时，我们有

$$P_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2),$$

$$P_2'(x)=\frac{2x-x_1-x_2}{2h^2}f(x_0)-\frac{2x-x_0-x_2}{h^2}f(x_1)+\frac{2x-x_0-x_1}{2h^2}f(x_2).$$

于是由 $f'(x_i)=P_2'(x_i)+\frac{1}{3!}f'''(\xi(x_i))\omega'(x_i)$ 得

$$f'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h}+\frac{2}{3!}f'''(\xi(x_0))h^2,$$

$$f'(x_1)=\frac{f(x_2)-f(x_0)}{2h}-\frac{1}{3!}f'''(\xi(x_1))h^2,$$

$$f'(x_2)=\frac{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)}{2h}+\frac{2}{3!}f'''(\xi(x_2))h^2.$$

插值型求导公式

这就给出了一阶微商的具有二阶逼近精度的差商近似公式

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h},$$

$$f'(x_1) \approx \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h},$$

$$f'(x_2) \approx \frac{f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)}{2h},$$

其中中间的一个正是一阶中心差商公式。

插值型求导公式

与 Taylor 展开方法相比，插值型数值微分公式的构造更加灵活。节点分布可以是任意的，逼近阶也可以根据要求和条件在一定的范围内选择。还可以选择样条插值等方法以进一步提高逼近精度和数值稳定性。

另一方面，由于高次插值多项式的 Runge 现象，插值型求导公式一般只选用低次多项式。

也可以通过插值多项式或插值样条建立二阶导数的差商近似公式

数值积分的重要性

数值积分的重要性是不言而喻的。

这一方面是因为，在实际应用中常常需要在只知被积函数在某些离散点的值的条件下要求其定积分，甚或要求将未知被积函数的定积分用该函数在某些离散点处的未知值近似表出；

另一方面，即便是有解析表达式的被积函数，其原函数也往往很难，甚至无法给出显式的用初等函数给出的解析表达式，因此需要借助数值方法给出其定积分的近似值。

数值积分问题的提法

设 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上定义，$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 是区间 $[a,b]$ 中的 $n+1$ 个已知或待定的节点。数值积分问题的典型提法是：利用函数在所给节点上的值

$$f(x_0),\ f(x_1),\ f(x_2),\ \cdots,\ f(x_n),$$

求定积分

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

的近似值。

数值积分的矩形公式

设 $f(x) \in \mathbb{C}[a,b]$, 则由定积分的几何意义知

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

在数值上给出的是连续曲线 $y = f(x)$, 两直线 $x = a$, $x = b$ 与 x-坐标轴所围成的（有向）面积。

任给一点 $\hat{x} \in [a,b]$, 用常直线 $y = f(\hat{x})$ 代替曲边得矩形公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx f(\hat{x})(b-a).$$

可以证明, 矩形公式的截断误差一般是2阶的，即

$$\int_a^b f(x)\,dx = f(\hat{x})(b-a) + O((b-a)^2).$$

数值积分的中点公式

特别地，取 $\hat{x} = (a+b)/2$, 得中点公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a).$$

中点公式及更一般的矩形公式都是用常数（零次插值多项式）代替函数 $f(x)$ 做积分得到的。利用泰勒展开式

$$f(x) = f(\hat{x}) + f'(\hat{x})(x-\hat{x}) + \frac{1}{2}f''(\xi(x))(x-\hat{x})^2,$$

可以证明, 当 $f \in \mathbb{C}^2(a,b)$ 时, $\exists \eta_1 \in (a,b)$ s.t.

$$\int_a^b f(x)\,dx = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) + \frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta_1).$$

数值积分的梯形公式

若用 $x_0 = a,\ x_1 = b$ 的一次插值多项式

$$P_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b)$$

代替函数 $f(x)$ 做积分，便得到梯形公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a).$$

利用一次插值的余项表达式

$$R_1(x) = \frac{1}{2} f''(\xi(x))(x-a)(x-b) = f[a,b,x](x-a)(x-b)$$

可以证明，当 $f \in \mathbb{C}^2(a,b)$ 时，$\exists \eta_2 \in (a,b)$ s.t.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) - \frac{f''(\eta_2)}{12}(b-a)^3.$$

数值积分的 Simpson 公式(抛物线形公式)

若用 $x_0 = a,\ x_1 = (a+b)/2,\ x_2 = b$ 的二次插值多项式

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2),$$

代替函数 $f(x)$ 做积分，便得到 Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\right].$$

记 $\omega_2(x) = (x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)$，利用二次插值的余项表达式

$$R_2(x) = \frac{f'''(\xi(x))}{3!}\omega_2(x) = f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x\right]\omega_2(x)$$

可以证明，当 $f \in \mathbb{C}^4(a,b)$ 时，$\exists \eta_3 \in (a,b)$ s.t.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\Big(\frac{a+b}{2}\Big) + f(b)\right] - \frac{f^{(4)}(\eta_3)}{2880}(b-a)^5.$$

数值积分的 Simpson 公式(抛物线形公式)

事实上, 记 $q(x) = \int_a^x \omega_2(x)dx$, 记 $g(x) = f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x\right]$, 则由

$$\int_a^b g(x)\,\omega_2(x)dx = g(x)q(x)|_a^b - \int_a^b g'(x)q(x)dx,$$

及 $q(x) = \frac{1}{4}(x-a)^2(b-x)^2$ 和(见(2.4.4), (2.4.5))

$$g'(x) = \lim_{\tau\to 0} \frac{f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x+\tau\right] - f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x\right]}{\tau}$$

$$= \lim_{\tau\to 0} f\left[a, \frac{a+b}{2}, b, x+\tau, x\right] = \lim_{\tau\to 0} \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi(x, x+\tau)) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\eta(x)),$$

再由积分中值定理，即可得 Simpson 公式的余项表达式.

中点公式、梯形公式和 Simpson 公式的总结

以上求积公式都是由插值多项式导出的，它们有以下特点

- 求积公式可表示为 $\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$, 其中 A_i, x_i, $i = 0, 1, \cdots, n$, 与 f 无关, 称为求积公式的权数和节点;
- 记 $h = b - a$, 则当被积函数充分光滑时,
  - 中点公式的截断误差的量级为 $O(h^3)$;
  - 梯形公式的截断误差的量级为 $O(h^3)$;
  - Simpson 公式的截断误差的量级为 $O(h^5)$.

可以证明，当被积函数充分光滑且取等距节点时，由 n 次插值多项式导出的求积公式的截断误差 $\int_a^b f(x)\,dx - \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ 为 $O(h^{n+3})$ (若 n 为偶数)，为 $O(h^{n+2})$ (若 n 为奇数).

数值积分公式的代数精度

- 中点公式和梯形公式对不高于一次的多项式严格成立, 而 Simpson 公式则对不高于三次的多项式严格成立。
- 事实上可以证明，当被积函数充分光滑且取等距节点时，由 n 次插值多项式导出的求积公式，当 n 为偶数时，对不高于 $n+1$ 次的多项式严格成立，当 n 为奇数时，对不高于 n 次的多项式严格成立。

定义： 设 m 是一个正整数，若数值积分公式当被积函数为

$$1, x, x^2, \cdots, x^m$$

时，都严格成立，而当被积函数为 x^{m+1} 时截断误差非零，则称该数值积分公式的代数精度为 m 阶的。

数值积分公式代数精度的意义

由 Weierstrass 定理知区间 $[a, b]$ 上的连续函数可以被多项式一致逼近，且次数越高的多项式可以达到的逼近程度也越高。

因此，有理由认为，一般地说，具有较高代数精度的数值积分公式优于具有较低代数精度的数值积分公式。

代数精度是考察数值积分公式优劣的一项重要指标。

考察数值积分公式优劣的另一项重要指标是其数值稳定性。

中点公式、梯形公式和 Simpson 公式的权数都是正的，且权数之和为区间长度 $(b-a)$. 因此，它们都是数值稳定的。事实上，由舍入误差引起的数值积分值的误差最多被放大 $(b-a)$ 倍。

习题三：3 4，5； 上机习题三：1，2

Thank You!