

第七章 数值积分和数值微分

第七章 数值积分和数值微分

- 数值积分概述
- **Newton-Cotes**求积公式
- 外推原理与**Romberg**求积公式
- **Gauss**求积公式
- 数值微分

7.1 数值积分概述

- 求积公式和它的代数精度
- 插值型求积公式

7.1.1 求积公式和它的代数精度

对于积分 $I(f) = \int_a^b f(x)dx$

如果知道 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ ，则由Newton-Leibniz公式有

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a)$$

但是在工程技术和科学研究中,常会见到以下现象:

- (1) $f(x)$ 的解析式根本不存在,只给出了 $f(x)$ 的一些数值;
- (2) $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 求不出来,如 $F(x)$ 不是初等函数;
- (3) $f(x)$ 的表达式结构复杂,求原函数较困难.

以上这些现象, Newton-Leibniz公式很难发挥作用,只能建立积分的近似计算方法.

基本思想：利用积分区间上一些离散点的函数值的线性组合计算定积分的近似值。无需寻求原函数。

由定积分的定义
$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(\xi_i) \Delta x_i$$

知，定积分是和的极限，若用和式近似，则可表示为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$$

上式称**数值求积公式**。

ω_i ——求积系数 x_i ——求积节点

$Q = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ ——求积算式

$R = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ ——求积公式的余项

为了使一个求积公式能对更多的积分具有较好的实际计算意义，就要求它对尽可能多的被积函数都准确地成立。因此定义代数精度的概念：

定义1 若求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$$

对所有次数不超过 m 次的代数多项式 $P_k(x)(k \leq m)$ 都

准确成立,即

$$\int_a^b P_k(x)dx = \sum_{i=0}^n \omega_i P_k(x_i) \quad k = 0, 1, \dots, m$$

但对 $m + 1$ 次多项式却不能准确成立,即只要

$$\int_a^b x^{m+1}dx \neq \sum_{i=0}^n \omega_i x_i^{m+1}$$

则称该求积公式具有 m 次的代数精度。

代数精度也称
代数精确度

例 设有求积公式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_0 f(-1) + \omega_1 f(0) + \omega_2 f(1)$$

试确定系数 $\omega_0, \omega_1, \omega_2$

使其代数精度尽量高，并指出其代数精度.

解： 令公式依次对 $f(x) = 1, x, x^2$

都精确成立，即

$$\begin{cases} \omega_0 + \omega_1 + \omega_2 = \int_{-1}^1 1dx = 2 \\ -\omega_0 + \omega_2 = \int_{-1}^1 xdx = 0 \\ \omega_0 + \omega_2 = \int_{-1}^1 x^2dx = \frac{2}{3} \end{cases}$$

解得 $\omega_0 = \frac{1}{3}, \omega_1 = \frac{4}{3}, \omega_2 = \frac{1}{3}$

故该求积公式应为

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \frac{1}{3} f(-1) + \frac{4}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1)$$

对 $f(x) = x^3$ 有 $\int_{-1}^1 x^3 dx = \frac{1}{4} x^4 \Big|_{-1}^1 = 0$

$$\frac{1}{3} f(-1) + \frac{4}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1) = \frac{1}{3} (-1)^3 + \frac{4}{3} 0^3 + \frac{1}{3} 1^3 = 0$$

即对 $f(x) = x^3$ 也精确成立,

但对 $f(x) = x^4$ 不能精确成立,

因此该求积公式具3次代数精度.

7.1.2 插值型求积公式

若已知函数 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的一组节点值 $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ 以及对应的函数值 $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$, 构造 $f(x)$ 的 n 次Lagrange插值多项式:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x) f(x_k) \quad (l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)})$$

则

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L_n(x) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \cdot \int_a^b l_k(x) dx$$

若记

$$A_k = \int_a^b l_k(x) dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} dx$$

则 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ ——插值型求积公式

A_k 为求积系数.

余项:

$$R = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^n (x - x_j) dx$$

注:

(1) 当 $f(x)$ 取次数 $\leq n$ 的多项式时, $R \equiv 0$, 即含 $n+1$ 个节点的插值型求积公式至少具有 n 次代数精度.

(2) 特别地, 当 $f(x) \equiv 1$ 时, 有 $\sum_{k=0}^n A_k = b - a$

7.2 Newton-Cotes求积公式

- Newton-cotes公式的导出
- 几种低阶求积公式及其余项
- 偶阶求积公式的代数精度
- 复合求积公式

7.2.1 Newton-Cotes公式的导出

Newton-Cotes公式是指等距节点下使用Lagrange插值多项式建立的数值求积公式.

设函数 $f(x) \in C[a,b]$, 将积分区间 $[a,b]$ n 等分, 步长 $h=(b-a)/n$, 节点 $x_k=a+kh$ 为等距节点.

由插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$

知

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} dx$$

引进变换 $x=a+th$ ，则有 $dx=hdt$ ， $x_k-x_j=(k-j)h$ ，

$$x-x_j=(t-j)h，$$

可得

$$\begin{aligned} A_k &= \int_a^b l_k(x) dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)} dx \\ &= h \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{t-j}{k-j} dt \\ &= \frac{b-a}{n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{t-j}{k-j} dt \\ &= (b-a) \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k! (n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t-j) dt \end{aligned}$$

记
$$c_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t-j) dt$$

所以插值型求积公式化为

$$I_n = (b-a) \sum_{k=0}^n c_k^{(n)} f(x_k)$$

称**Newton-cotes公式**，式中 $c_k^{(n)}$ 称**柯特斯系数**。

7.2.2 几种低阶求积公式及其余项

在Newton-Cotes公式中， $n=1,2,4$ 时的公式是最常用也最重要的三个公式，称为低阶公式。

1. 梯形(trapezia)公式及其余项

取 $n=1$, 则 $x_0 = a$, $x_1 = b$, $h = b - a$

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t-j) dt$$

Cotes系数为 $C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1) dt = \frac{1}{2}$

$$C_1^{(1)} = \int_0^1 t dt = \frac{1}{2}$$

求积公式为

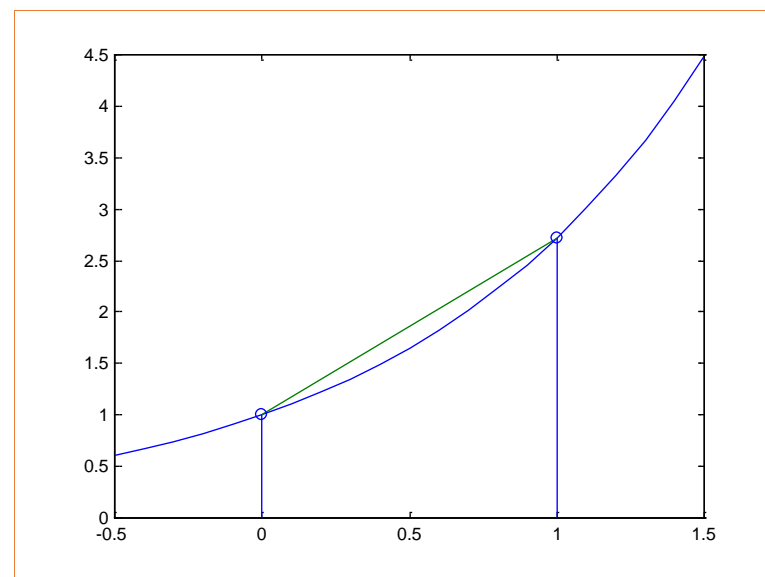
$$I_1(f) = (b-a) \sum_{k=0}^1 C_k^{(1)} f(x_k) = \frac{b-a}{2} [f(x_0) + f(x_1)]$$

即
$$I_1(f) = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

上式称为**梯形求积公式**,也称**两点公式**, 记为

$$\begin{aligned} T &= I_1(f) \\ &= \frac{(b-a)}{2} [f(a) + f(b)] \end{aligned}$$

几何意义如右图:



梯形公式的余项为

$$R(T) = R(I_1) = \int_a^b R_1(x) dx$$

$$R(T) = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2} (x-a)(x-b) dx$$

$$= \frac{f''(\eta)}{2} \int_a^b (x-a)(x-b) dx$$

$$= -\frac{f''(\eta)}{2} \frac{(b-a)^3}{6} \quad \eta \in [a, b]$$

$$= -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta)$$

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

积分中值
定理
(推广形式)

故 $|R(T)| \leq \frac{(b-a)^3}{12} M_2$ $M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$

梯形(trapezia)公式具有1次代数精度。

2.Simpson公式及其余项

取 $n = 2$, 则 $x_0 = a$, $x_1 = \frac{b+a}{2}$, $x_2 = b$, $h = \frac{b-a}{2}$

Cotes系数为

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{4} \int_0^2 (t-1)(t-2) dt = \frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)} = \frac{-1}{2} \int_0^2 t(t-2) dt = \frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)} = \frac{1}{4} \int_0^2 (t-1)t dt = \frac{1}{6}$$

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (t-j) dt$$

求积公式为

$$I_2(f) = (b-a) \sum_{k=0}^2 C_k^{(2)} f(x_k)$$

$$= (b-a) \left[\frac{1}{6} f(x_0) + \frac{4}{6} f(x_1) + \frac{1}{6} f(x_2) \right]$$

即
$$I_2(f) = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

上式称为**Simpson求积公式**，也称**三点公式**或**抛物线公式**。

记为
$$S = I_2(f)$$

Simpson公式的余项：

$$\begin{aligned} R(S) &= R(I_2) = \int_a^b R_2(x) dx \\ &= -\frac{b-a}{180} \left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \end{aligned}$$

Simpson公式具有3次代数精度。

