# 第五章　　数值微积分

## 第一节　数值积分公式

# 数值积分引言

计算定积分 $\boxed{I(f)=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x}$

- 微积分基本公式：$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a)$
- 但是在许多实际计算问题中

(1) $f(x)$ **表达式较复杂, 原函数难求! 甚至有时不能用初等函数表示。如** $f(x)=\dfrac{1}{1+x^4}, \ \dfrac{\sin x}{x}, \ e^{-x^2}$

(2) $f(x)$ **表达式未知，只有通过测量或实验得来的数据表示。**

此时理论的牛顿-莱布尼茨公式无效，需要利用数值方法来近似计算定积分。

# 1. 机械求积

- ：记

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

则***I***为 泛函——即将函数***F***映射为一个数。

- 由定积分中值定理，***f*(*x*)**当在**[*a*, *b*]** 上连续时，存在 $\xi\in[a,b]$，使得：

$$I(f)=(b-a)f(\xi)$$

则积分问题转化为对 $f(\xi)$ 进行估计的问题。

# 几个简单求积公式

- 定积分中值定理：$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(\xi),\quad \xi\in(a,b)$

$f(\xi)$ 可看做区间[$a$, $b$]上的平均高度（需要估计）。

✓ 分别用 $f(a)$，$f(b)$ 和 $f\left((a+b)/2\right)$ 近似 $f(\xi)$ 可得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)f(a) \longrightarrow \text{左矩形公式}Ga(f)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)f(b) \longrightarrow \text{右矩形公式}Gb(f)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \longrightarrow \text{中矩形公式}Gc(f)$$

✓ 若用 $f(a)$ 和 $f(b)$ 的算术平均值近似 $f(\xi)$，则可得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)] \longrightarrow \text{梯形公式}T(f)$$

# 机械求积公式

- 更一般地，可以用 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的一些离散点

$$a \le \boxed{x_0 < x_1 < \cdots < x_n} \le b$$

求积节点（结点）

上的值加权平均作为 $f(\xi)$ 的近似值，从而构造出

$$I(f) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \boxed{A_i} f(x_i)$$

求积系数（权）

- 记 $\boxed{Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)}$ Q(*f*)为机械求积公式。

# 牛顿–科茨（Newton-Cotes）公式

*利用被积函数的插值函数进行积分导出数值求积分公式*

- 设 $f(x)$ 在节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 上的函数值为 $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$，作 $n$ 次拉格朗日插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$$

于是有

$$\boxed{\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x \equiv \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)}$$

其中 $\boxed{A_i = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{j\ne i}^{j=0,..n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,\mathrm{d}x}$

**插值型求积公式**

# 牛顿–科茨（Newton-Cotes）公式

- 插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \text{ 其中 } A_i = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x$$

- 等分节点的插值型求积公式称为**牛顿–科茨公式**：

**取等分节点：** $x_i = a + i\,h$， $h = \dfrac{b-a}{n}$， $i = 0, 1, \ldots, n$

**令** $x = a + t\,h$ **得：**

$$A_i = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{\substack{j=0,..n \\ j\neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,\mathrm{d}x = \int_0^n \prod_{\substack{j=0,..,n \\ j\neq i}} \frac{t-j}{i-j} \cdot h\mathrm{d}t$$

$$= \frac{(b-a)(-1)^{n-i}}{n \cdot i! \cdot (n-i)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0,..,n \\ j\neq i}} (t-j)\mathrm{d}t$$

# 牛顿–科茨公式（续）

$$A_i = \frac{(b-a)(-1)^{n-i}}{n\, i!(n-i)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0,\dots,n\\ j\neq i}} (t-j)dt$$

科茨(Cotes)系数 $C_i^{(n)}$

**注：** Cotes 系数（常数） $C_i^{(n)} = A_i / (b-a)$ 仅取决于 $n$ 和 $i$，与被积函数 $f(x)$ 及积分区间 $[a, b]$ 均无关。

- 牛顿–科茨系列公式：

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$$

# 几个常见公式

$n=1$: $C_0^{(1)}=\frac{1}{2}$, $C_1^{(1)}=\frac{1}{2}$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] = T$$

梯形求积公式

$n=2$: $C_0^{(2)}=\frac{1}{6}$, $C_1^{(2)}=\frac{2}{3}$, $C_2^{(2)}=\frac{1}{6}$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\tfrac{a+b}{2})+f(b)] = S$$

抛物线求积公式

辛甫森(Simpson)求积公式

$n=4$: 科茨(Cotes)求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] = C$$

$x_i = a + i\cdot h,\quad h=(b-a)/4$

# 科茨系数表

| $n$ | $C_i^{(n)}$ | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | | | | | | | |
| 2 | $\frac{1}{6}$ | $\frac{2}{3}$ | $\frac{1}{6}$ | | | | | | |
| 3 | $\frac{1}{8}$ | $\frac{3}{8}$ | $\frac{3}{8}$ | $\frac{1}{8}$ | | | | | |
| 4 | $\frac{7}{90}$ | $\frac{16}{45}$ | $\frac{2}{15}$ | $\frac{16}{45}$ | $\frac{7}{90}$ | | | | |
| 5 | $\frac{19}{288}$ | $\frac{25}{96}$ | $\frac{25}{144}$ | $\frac{25}{144}$ | $\frac{25}{96}$ | $\frac{19}{288}$ | | | |
| 6 | $\frac{41}{840}$ | $\frac{9}{35}$ | $\frac{9}{280}$ | $\frac{34}{105}$ | $\frac{9}{280}$ | $\frac{9}{35}$ | $\frac{41}{840}$ | | |
| 7 | $\frac{751}{17280}$ | $\frac{3577}{17280}$ | $\frac{1323}{17280}$ | $\frac{2989}{17280}$ | $\frac{2989}{17280}$ | $\frac{1323}{17280}$ | $\frac{3577}{17280}$ | $\frac{751}{17280}$ | |
| 8 | $\frac{989}{28350}$ | $\frac{5888}{28350}$ | $\frac{-928}{28350}$ | $\frac{10496}{28350}$ | $\frac{-4540}{28350}$ | $\frac{10496}{28350}$ | $\frac{-928}{28350}$ | $\frac{5888}{28350}$ | $\frac{989}{28350}$ |

# 系数特点和稳定性

❑**科茨**具有以下特点：

(1) $\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = 1$

(2) $C_i^{(n)} = C_{n-i}^{(n)}$

(3) **当 $n \geq 8$ 时，出现负数，稳定性得不到保证。而且当 $n$ 较大时，由于Runge现象，收敛性也无法保证。**

**故**一般**不采用**高阶的牛顿–科茨求积公式。

❑ 当 $n \leq 7$ 时，牛顿–科茨公式是稳定的。

# 代数精度

**定义5.1** 如果对于一切次数不超过 $m$ 的多项式 $f(x)$，公式

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx \approx Q(f),\ Q(f)--\text{线性泛函}$$

准确成立，但对 $m$+1 多项式不准确，则称该求积公式有 $m$ 次代数精度。

当泛函$F(f)$对任意函数$f$，$g$,实数$k$，$l$满足

$$F(kf+lg)=kF(f)+lF(g)$$

时，称 $F(f)$为线性泛函。显然机械求积公式左$I(f)$右$Q(f)$均为线性泛函。

**例5.4**

将 $f(x)\equiv\alpha$ 分别代入矩阵公式（5.2）及梯形公式（5.5）得：

0次　　1次

$$I(f)=\int_a^b \alpha dx=(b-a)\alpha$$

$$G_a(f)=(b-a)\alpha;\ \surd\ T(f)=\frac{(b-a)}{2}(\alpha+\alpha)=(b-a)\alpha\ \surd$$

而将 $f(x)=\alpha x+\beta$ 分别代入矩阵公式（5.2）及梯形公式（5.5）得　$I(f)\neq G_a(f),\ I(f)=T(f)$

而将 $f(x)=x^2$ 代入梯形公式（5.5）得 $I(f)\neq T(f)$

*利用定义验证代数精度非常不便，而利用线性泛函的特性可简化代数精度的验证过程。*

性质5.1: 公式

$$I(f)=\int_{a}^{b} f(x)dx \approx Q(f)$$

有$m$次代数精度的充要条件为该式对$1, x, x^2, \ldots, x^m$精确成立，但对$f(x)=x^{m+1}$不精确成立.

- 要验证一个求积公式具有 $m$ 次代数精度，只需验证对$f(x)=1, x, x^2, \ldots, x^m$精确成立，但对$f(x)=x^{m+1}$不精确成立即可，即：

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^m = \int_a^b x^m \, dx = \dfrac{b^{m+1}-a^{m+1}}{m+1} \\ \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^{m+1} \neq \int_a^b x^{m+1} \, dx = \dfrac{b^{m+2}-a^{m+2}}{m+2} \end{cases}$$

# 矩形和梯形公式的代数精度

- 容易验证：
  - ✓左矩形公式 和 右矩形公式 具有 0次 代数精度。
  - ✓中矩形公式 和 梯形公式 具有 1次 代数精度。
  - ✓辛普森公式（5.6）具有3次代数精度。

可以证明：

当 $n$ 为奇数时，牛顿—科茨公式至少有 $n$ 次代数精度。

当 $n$ 为偶数时，牛顿—科茨公式至少有 $n+1$ 次代数精度。

# 举例（一）

- 例：分别用梯形公式(n=1)和simpson(n=2)公式

计算积分 $\int_0^1 e^{-x}\mathrm{d}x$

解：$a = 0,\ b = 1,\ f(x) = e^{-x}$，

由梯形公式可得

$$T = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] = \frac{1}{2}\left[e^0 + e^{-1}\right] = 0.6839$$

由 simpson 公式可得

$$S = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\tfrac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] = \frac{1}{6}\left[e^0 + 4e^{-0.5} + e^{-1}\right] = 0.6323$$

与精确值 0.6321... 相比得误差分别为 0.0518 和 0.0002。

# 举例（二）

- 例：试确定系数 $A_i$，使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度，并求出此求积公式的代数精度。

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

解：将 $f(x)=1, x, x^2$ 代入求积公式，使其精确成立得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = \int_{-1}^{1} 1dx = (1^1 - (-1)^1)/1 = 2 \\ -A_0 \qquad + A_2 = \int_{-1}^{1} xdx = (1^2 - (-1)^2)/2 = 0 \\ A_0 \qquad + A_2 = \int_{-1}^{1} x^2dx = (1^3 - (-1)^3)/3 = 2/3 \end{cases}$$

奇函数在对称区间的积分为0

解得 $A_0$=1/3, $A_1$=4/3, $A_2$=1/3，所以求积公式为:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx [f(-1)+4f(0)+f(1)]/3$$

代数精度为2次吗?

易验证该公式对 $f(x)=x^3$ 也精确成立，但对 $f(x)=x^4$ 不精确成立，所以此求积公式具有 3 次代数精度。

# 第五章　　数值微积分

## 第四节　数值微分法

# 5.4 数值微分

问题：已知 $f(x)$ 在节点 $x_0, \ldots, x_n$ 上的函数值，

如何计算在这些节点处导数的近似值？

方法1：差商法

**导数是差商的极限，因此可用差商近似导数.**

方法2：插值型求导

**先构造出 $f(x)$ 的插值多项式 $p_n(x)$，然后用 $p_n(x)$ 的导数来近似 $f(x)$ 的导数。**

## 5.4 数值微分法

由导数定义可得到一些简单的数值微分公式：

$$f'(a) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(a+\Delta x) - f(a)}{\Delta x}$$

- **1 差商法**
- **向前差商公式**

$$\boxed{f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}}$$

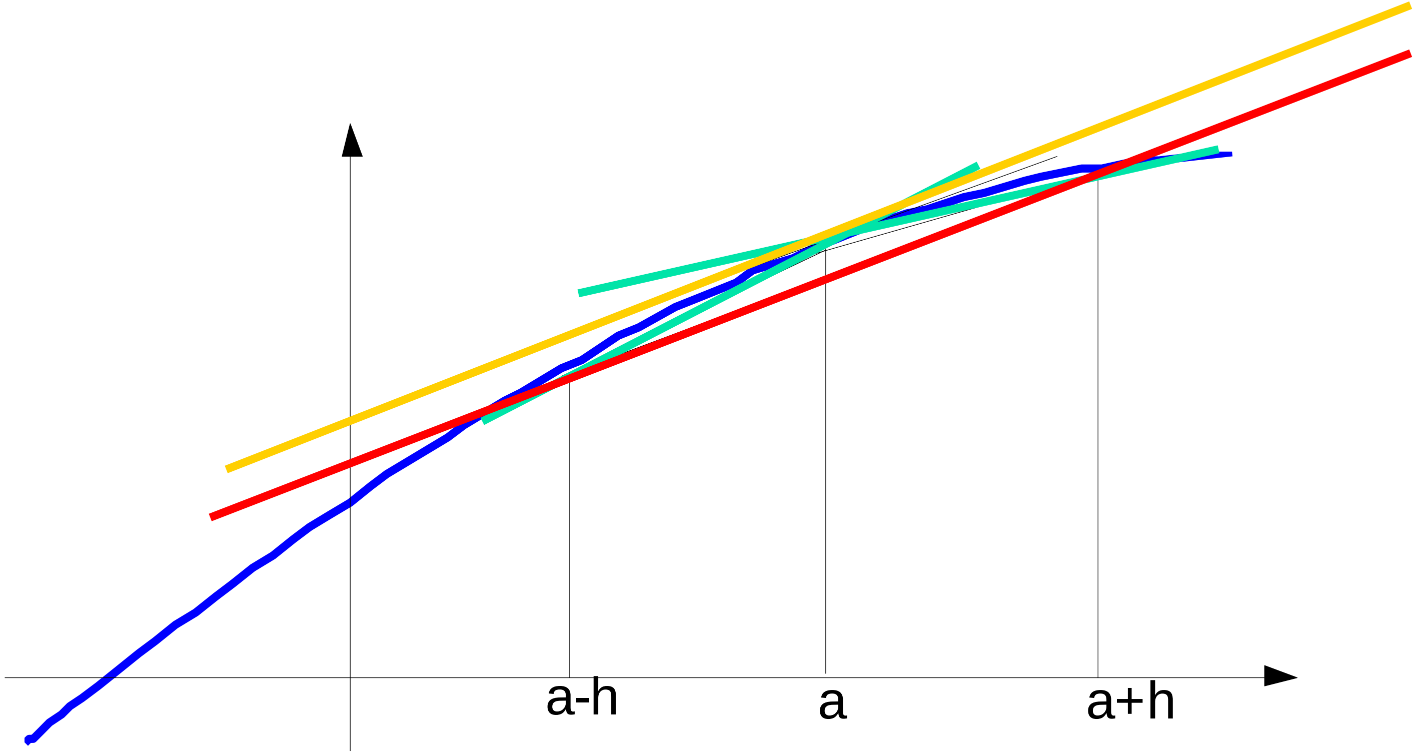
- **向后差商公式**

$$\boxed{f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}}$$

- **中心差商公式**

$$\boxed{f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}}$$

# 差商公式比较




**中心差商精度比较高**

# 插值型求导

## ——余项公式

多项式插值余项

$$f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$$

两边求导得

$$f'(x)-L_n'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\right)'$$

$$+\frac{1}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right)'$$

当$x$为某节点时

$$\boxed{f'(x)-L_n'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega'(x)\approx 0,\ (\omega(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j))}$$

# 两点公式

- 两点公式（等距）：

$n=1$，**节点** $x_0, x_1$，**步长** $h=x_1-x_0$

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)$$

$$=\frac{-(x-x_1)f(x_0)+(x-x_0)f(x_1)}{h}$$

$$\Rightarrow \boxed{L_1'(x)=\frac{1}{h}\left(f(x_1)-f(x_0)\right)}$$

**所以**

向前差商: $\boxed{f'(x_0)=\frac{1}{h}\left(f(x_0+h)-f(x_0)\right)}-\frac{h}{2}f''(\xi_0)$

向后差商: $\boxed{f'(x_1)=\frac{1}{h}\left(f(x_1)-f(x_1-h)\right)}+\frac{h}{2}f''(\xi_1)$

两点公式

# 三点公式（等距）

❑三点公式(等距):

$n=2$，步长 $h$，节点 $x_i = x_0 + ih$，$i = 0, 1, 2$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

令 $x = x_0 + th$，得

$$L_2(x_0+th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2) f(x_0) - t(t-2) f(x_1) + \frac{1}{2} t(t-1) f(x_2)$$

对t求导

$$\boxed{L_2'(x) = \frac{1}{2h}\left[(2t-3) f(x_0) - 4(t-1) f(x_1) + (2t-1) f(x_2)\right]}$$

# 三点公式（等距）

**分别令** $t = 0, 1, 2$**，得**

$$L_2'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right]$$

$$L_2'(x_1) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right]$$

$$L_2'(x_2) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right]$$

三点公式

**所以**

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0)$$

**中心差商:**

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

# 举例

- 例：已知函数 $y = e^x$ 的函数值表

| $x_i$ | 2.5 | 2.6 | 2.7 | 2.8 | 2.9 |
|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | 12.1825 | 13.4637 | 14.8797 | 16.4446 | 18.1741 |

试用两点和三点公式计算 $x = 2.7$ 处的一阶导数。

解：两点公式：

精确值y'(2.7)=y(2.7)=14.8797...

取 $x_0$ =2.6， $x_1$ =2.7，得：

向后差商： $$f'(2.7) \approx \frac{1}{0.1}\left( f(2.7) - f(2.6)\right) = 14.1600$$

若取 $x_0$ =2.7， $x_1$ =2.8，则

向前差商： $$f'(2.7) \approx \frac{1}{0.1}\left( f(2.8) - f(2.7)\right) = 15.6490$$

## 举例

精确值$y'(2.7)=y(2.7)=14.8797\ldots$

若取 $x_0=2.5$， $x_1=2.7$，则

向后差商：$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.2}\big(f(2.7)-f(2.5)\big)=13.4860$

若取 $x_0=2.7$， $x_1=2.9$，则

向前差商：$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.2}\big(f(2.9)-f(2.7)\big)=16.4720$

通常步长越小，误差也越小。

三点公式：取 $x_0=2.6$， $x_1=2.7$， $x_1=2.8$，得

中心差商：$f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.1}\big(f(2.8)-f(2.6)\big)=14.9045$

## 问题：是不是步长越小，误差一定越小？

例子：用中心差商$G(h)=\dfrac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}$计算$f(x)=\sqrt{x}$在$x=2$处的一阶导数。取4位有效数字计算。

| *h* | *G(h)* |
|---|---|
| 1 | 0.3660 |
| 0.5 | 0.3564 |
| 0.1 | 0.3535 |
| 0.05 | 0.3530 |
| 0.01 | 0.3500 |

| *h* | *G(h)* |
|---|---|
| 0.005 | 0.3500 |
| 0.001 | 0.3500 |
| 0.0001 | 0.3000 |
| 0.00001 | 0.0000 |
| ...... | ...... |

准确值f'(2)=

0.353553...

**有舍入误差的影响，步长*h*不能太小！**

## 5.5 Matlab 程序代码及应用（掌握）