2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第十二讲：数值积分与微分 – 2

第四章 §2 & §6

主讲人：张治国

zgzhang@szu.edu.cn

深圳大学 医学部 生物医学工程学院

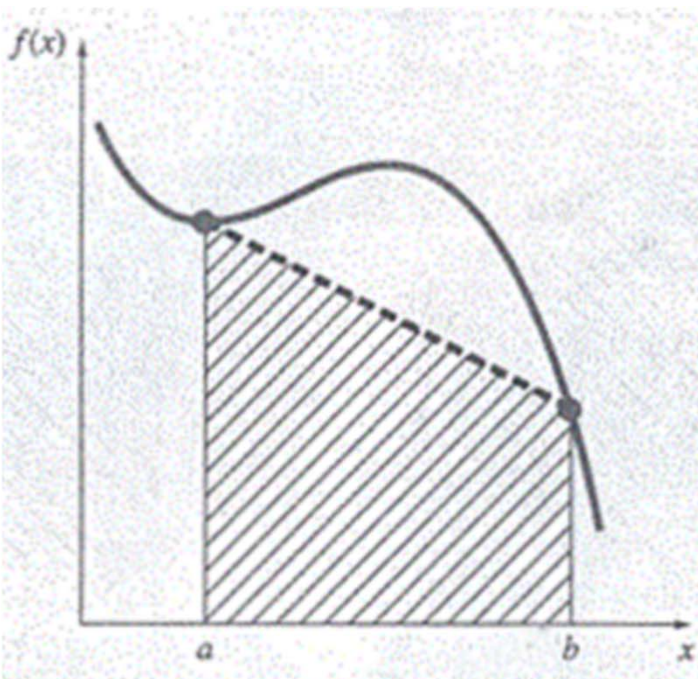
SHENZHEN UNIVERSITY HEALTH SCIENCE CENTER SCHOOL OF BIOMEDICAL ENGINEERING

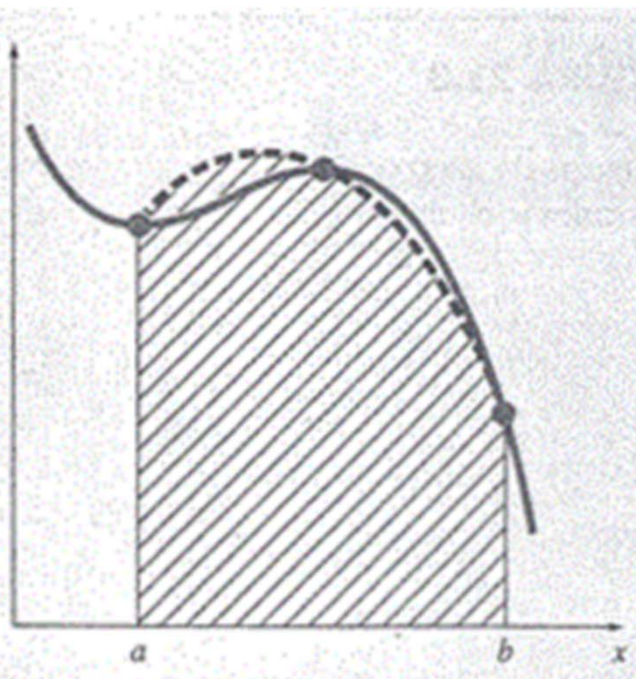
上节课回顾

- 为了克服求 $f(x)$ 原函数的困难和便于计算，介绍了利用等距节点的Lagrange插值多项式建立的Newton-Cotes公式。
- 介绍了求积系数 A_k 和Cotes系数 $C_k^{(n)}$ 的计算。
- 简介了Newton-Cotes公式的代数精度、余项、和稳定性。

上节课回顾

梯形求积公式图示　　Simpson求积公式图示





本节课内容

第四章 数值积分与微分

§2 复合求积法

2-1 复合求积公式

2-2 复合求积公式的余项及收敛的阶

2-3 步长的自动选择

2-4 复合Simpson求积的算法设计

§6 数值微分

6-1 插值型求导公式

6-2 样条求导公式

§2 复合求积法

2-1 复合求积公式

- 为提高求积的精确度，将积分区间 $[a, b]$ 等份成 n 个子区间，在每个子区间上利用低阶求积公式， 然后将所有子区间的计算结果求和，就得到 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上积分的近似值，该方法称为复合求积法。

- 公式推导：将积分区间 $[a, b]$ 等份成 n 个子区间，

  $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 0,1,\cdots,n-1$，各区间的长度（步长）

  为 $h=(b-a)/n$ 。

2-1 复合求积公式

1. 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$, $k=0,1,\cdots,n-1$ 上利用梯形公式，

得
$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$

因此
$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$
$$=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]$$
$$=\frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]$$

- 将
$$T_n=\frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \qquad (2.1)$$

称为复合梯形公式。

2-1 复合求积公式

2. 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$, $k=0,1,\cdots,n-1$ 上利用Simpson公式，得

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left(f(x_k) + 4f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right) + f(x_{k+1}) \right)$$

因此 $\displaystyle\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left(f(x_k) + 4f\left(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\right) + f(x_{k+1}) \right)$

$$= \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right]$$

$$= \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right]$$

- 将 $$S_n = \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right] \qquad (2.2)$$

称为复合Simpson公式。

2-1 复合求积公式

3. 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 0,1,\cdots,n-1$ 上利用Cotes公式，同理可得

$$C_n = \frac{b-a}{90n}\left[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/4}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2})\right.$$
$$\left. + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+3/4}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)\right] \quad (2.3)$$

称为复合Cotes公式。

2-1 复合求积公式

- 例1 依次用 $n=8$ 的复合梯形公式、$n=4$ 的复合Simpson公式及 $n=2$ 的Cotes公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\,dx$$

- 解：当 $n=8$ 时，$h=1/8=0.125$，所需各节点数值见下表

k	x_k	$f(x_k)$	k	x_k	$f(x_k)$
0	0	1.0000000	5	0.625	0.9361556
1	0.125	0.9973978	6	0.75	0.9088516
2	0.25	0.9896158	7	0.875	0.8771925
3	0.375	0.9767267	8	1	0.8414709
4	0.5	0.9588510			

2-1 复合求积公式

- 由公式(2.1)，(2.2)，(2.3)，有

$$T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1) \right] = 0.9556909$$

$$S_4 = \frac{1}{24}\{ f(0) + f(1) + 2[f(0.25) + f(0.5) + f(0.75)] +$$
$$4[f(0.125) + f(0.375) + f(0.625) + f(0.875)]\}$$
$$= 0.9460833$$

$$C_2 = 0.9460832$$

（精确值为 $I = 0.9460831$）

- 可见，复合梯形公式精度较低，复合Simpson公式精度和复杂度都令人满意，使用更普遍。

2-2 复合求积公式的余项及收敛的阶

- 当 n 足够大时，复合求积公式的余项近似表达式为（证明略，见pp128-129）

复合梯形公式：
$$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \tag{2.5}$$

复合Simpson公式：
$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 [f'''(b) - f'''(a)] \tag{2.7}$$

复合Cotes公式：
$$I - C_n \approx -\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 [f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)] \tag{2.9}$$

- 当 $n \to \infty$ $(h \to 0)$ 时，复合求积公式 T_n，S_n，及 C_n 都收敛于定积分值 I，且收敛速度一个比一个快。

2-2 复合求积公式的余项及收敛的阶

- 为了比较数值积分公式收敛的快慢，引入收敛阶的概念。
- 定义2.1 如果一种复合求积公式 I_n，当 $h \to 0$ 时，有

$$\lim_{h \to 0} \frac{I - I_n}{h^p} = c \qquad (c \neq 0)$$

则称求积公式 I_n 是 $p\,(\geq 1)$ 阶收敛的。

- 综上易知，复合求积公式 T_n，S_n，及C_n 分别是2，4及6阶收敛的。

2-3 步长的自动选取

- 计算精度与步长有关，但如何根据精度自动选择步长?

- 由复合梯形公式余项公式，有

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \tag{2.10}$$

- 步长的自动选取：规定的误差限为ε，令 $\Delta = |T_{2n} - T_n|/3$，只要 $\Delta \le \varepsilon$ 成立，则停止计算。
- 先取步长 $h = b - a$，计算 T_1，步长折半计算 T_2，则 $\Delta = |T_2 - T_1|/3$；如果 $\Delta \le \varepsilon$，则停止计算，取 $I \approx T_2$；如果 $\Delta > \varepsilon$，则步长折半，计算 T_4及 $\Delta = |T_4 - T_2|/3$，$\cdots$，直到 $\Delta \le \varepsilon$。这时最后一个步长和算得的积分值就是最终满足精度的合适的步长和积分近似值。

2-3 步长的自动选取

- 由Simpson公式的余项公式，得

$$I - S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) \tag{2.11}$$

- 由Cotes余项的近似公式，得

$$I - C_{2n} \approx \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n) \tag{2.12}$$

- 类似地，记 $\Delta = \frac{1}{15}|S_{2n} - S_n|$ 或 $\Delta = \frac{1}{63}|C_{2n} - C_n|$，在确定步长时，采用类似上面的步长逐次折半的方法，用 Δ 是否小于 ε 作为步长折半计算是否停止的标志。

2-3 步长的自动选取

- 例2 用变步长的复合Simpson公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

给定误差限 $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-6}$。

2-3 步长的自动选取

- 解：取 $h = b - a = 1$，则

$$S_1 = \frac{1}{6}[f(0) + 4f(0.5) + f(1)] = 0.9461459$$

- 将步长折半，$h = 0.5$，则

$$S_2 = \frac{1}{12}\{f(0) + 4[f(0.25) + f(0.75)] + 2f(0.5) + f(1)\}$$
$$= 0.94608688$$

- 由于$\Delta = |S_2 - S_1|/15 = 0.39\times10^{-4} > \varepsilon$，故步长折半，$h = 0.25$,

$$S_4 = 0.9460833$$

- 由于$\Delta = |S_4 - S_2|/15 = 2.4\times10^{-7} < \varepsilon$，故

$$I \approx S_4 = 0.9460833$$

§ 6 数值微分

6-1 插值型求导公式

- 问题：不管 $f(x)$ 的表达式是否给定，已知 $f(x)$ 在 $n+1$ 个互异的节点

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$$

上的函数值 $\{f_k\}_{k=0}^{n}$，若 $f(x)$ 导数存在，那么如何采用数值方法去求 $f(x_k)$ 导数?

- 公式的简单推导：

假设 $f^{(n+1)}(x)$ 存在，则

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\text{，}\ \xi_x \in [a,b] \qquad (6.1)$$

6-1 插值型求导公式

- 对(6.1)式求导，得

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

- 当 $x=x_k, k=0,1,\cdots,n$ 时，有

$$f'(x_k)=L_n'(x_k)+\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0,\,j\neq k}^{n}(x_k-x_j)\right),\ k=0,1,\cdots,n \qquad (6.2)$$

- 因此，利用 $L_n'(x_k)$ 近似代替 $f'(x_k)$ ：

$$f'(x_k)\approx L_n'(x_k)$$

所产生的误差为

$$E_n(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0,\,j\neq k}^{n}(x_k-x_j)\right),\ k=0,1,\cdots,n \qquad (6.3)$$

6-1 插值型求导公式

- 应用时多采用 $n=1, 2, 4$ 的二点、三点和五点插值求导公式：

- 1. 两点公式：当 $n=1$ 时，

$$L_1'(x)=\sum_{k=0}^{1} f_k\left(\prod_{j=0,j\neq k}^{1}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)'=\sum_{k=0}^{1} f_k\prod_{j=0,j\neq k}^{1}\frac{1}{x_k-x_j} \tag{6.4}$$

令 $h=x_1-x_0$ ，得如下两点公式：

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{1}{h}(f_1-f_0)-\dfrac{h}{2}f^{(2)}(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{1}{h}(f_1-f_0)+\dfrac{h}{2}f^{(2)}(\xi) \end{cases} \tag{6.5}$$

6-1 插值型求导公式

- 2. 三点公式：

$$
\begin{cases}
f'(x_0) = \dfrac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) + \dfrac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi) & (6.7) \\
f'(x_1) = \dfrac{1}{2h}(-f_0 + f_2) - \dfrac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi) & (6.8) \\
f'(x_2) = \dfrac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \dfrac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi) & (6.9)
\end{cases}
$$

称之为带余项的三点数值微分公式，其中(6.8)也称为（三点）中点公式。

6-1 插值型求导公式

- 3. 五点公式：见P154

$$
\begin{cases}
f'(x_0)=\dfrac{1}{12h}(-5f_0+48f_1-36f_2+16f_3-3f_4)+\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi)\\
f'(x_1)=\dfrac{1}{12h}(-3f_0-10f_1+18f_2-6f_3+f_4)-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi)\\
f'(x_2)=\dfrac{1}{12h}(f_0-8f_1+8f_3-f_4)-\dfrac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi)\\
f'(x_3)=\dfrac{1}{12h}(-f_0+6f_1-18f_2+10f_3+3f_4)-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi)\\
f'(x_4)=\dfrac{1}{12h}(3f_0-16f_1+36f_2-48f_3+25f_4)+\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi)
\end{cases}
\tag{6.10}
$$

6-1 插值型求导公式

- 当步长充分小时，舍入误差可能很大；并且可能出现在相邻节点处函数值接近出现相近数相减而丧失有效数字（详见p155）。

- 数值微分公式中的步长选择应兼顾截断误差与舍入误差，并非步长越小结果越精确。不适度地减少步长，可能会使总的误差扩大。

- 步长最佳值应该使截断误差与舍入误差匹配。

6-1 插值型求导公式

- 例1 已知 $f(x)=\ln x$，利用两点公式计算 $f'(1.8)$的近似值，依次取 $h=10^n$，$n=0,-1,-2,-3,-4,-5,-6$ 。

- 解：由两点公式

$$f'(1.8)\approx\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$$

- 截断误差

$$|E(1.8)|\le\frac{h}{2}\max_{1.8\le x\le 1.8+h}|f''(x)|=\frac{h}{2\times 1.8^2}=\frac{h}{6.48}$$

6-1 插值型求导公式

- 取不同步长，计算结果如下表

h	$f'(1.8)$	$E(1.8)$	相邻两次计算的差
1	0.4418328	1.54321×10^{-1}	9.884×10^{-2}
0.1	0.5406722	1.54321×10^{-2}	1.335×10^{-2}
0.01	0.5540180	1.54321×10^{-3}	1.382×10^{-3}
0.001	0.5554000	1.54321×10^{-4}	1.491×10^{-4}
0.0001	0.5555491	1.54321×10^{-5}	9.486×10^{-5}
0.00001	0.555644	1.54321×10^{-6}	8.11×10^{-4}
0.000001	0.556455	1.54321×10^{-7}	

- 真实值为 $1/1.8 = 0.5555556$，与 $h = 0.0001$ 对应的值最接近（并非 h 越小越好）。

6-1 插值型求导公式

- 例2 给出函数表如下所示，利用三点公式求各节点的数值导数。

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f(x_i)$	1.2051709	1.4214028	1.6498588	1.8918247	2.1487213	2.4221188

6-1 插值型求导公式

- 解：$h=0.1$，由三点公式，得

$$\begin{cases} f'(x_0)\approx \dfrac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)] \\ f'(x_5)\approx \dfrac{1}{2h}[f(x_3)-4f(x_4)+3f(x_5)] \end{cases}$$

其余各点，利用中点公式(5.8)，有

$$f'(x_i)\approx \frac{1}{2h}[-f(x_{i-1})+(x_{i+1})],\quad i=1,2,3,4$$

- 计算结果如下：

x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f'(x_i)$	2.1011985	2.2234395	2.3521095	2.4943125	2.6514705	2.8164795

本节课小结

- 为了避免使用高阶Newton-Cotes公式和提高求积的精度，通常采用复合求积法。
- 其中，复合Simpson公式的复杂度居中，精度令人满意，使用较普遍。
- 与数值积分类似，可以基于Lagrange插值发展插值型求导公式。

本章小结

- 本章以插值多项式理论为基础，建立积分与微分的数值公式，因此，把建立的公式统称为插值型求积或求导公式。
- 基于等距节点的Newton-Cotes求积公式，可以设计出一系列自动取补偿的算法，其中以自动选择步长的Simpson公式最常用（逻辑简单、估计误差方便、收敛较快）。
- 其它常用数值积分微分公式还有Romberg求积算法、Gauss求积法、样条求导法等，它们有不同的特点和用途。

作业

习题四：4（计算到4位小数），

16（计算到4位小数，无需估计误差）

作业上交日期：2018年12月4日

下节课内容

第五章 常微分方程数值解法

§1 引言

§2 Runge-Kutta法