数学实验

Experiments in Mathematics

实验三　数值积分与微分

清华大学数学科学系

为什么要作
数值积分，数值微分

- 积分和微分是重要的数学工具，是微分方程、概率论等的基础；在实际问题中有直接应用。
- 许多函数“积不出来”，只能用数值方法，如

$$\int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} dx \ , \quad \int_a^b \frac{\sin x}{x} dx$$

- 对于用离散数据或者图形表示的函数，计算积分和微分只有求助于数值方法。

实验三的基本内容

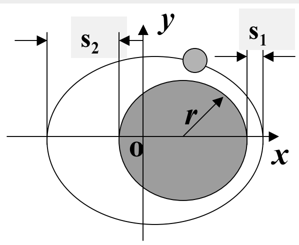
1）数值积分的梯形公式、辛普森公式和蒙特卡罗方法;

2）数值微分的三点公式;

3）用数值积分、数值微分解决实际问题

数值积分实例一

人造卫星轨道长度



近地点s_1=439km,远地点s_2= 2384km

地球半径r=6371km

a ~ 长半轴

b ~ 短半轴

由s_1, s_2, r决定

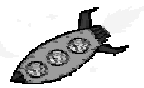
$$x = a\cos t,\ y = b\sin t \quad (0 \le t \le 2\pi)$$

轨道长度

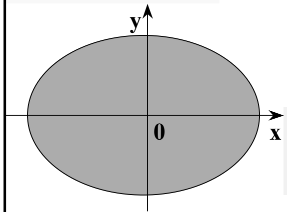
$$L = 4\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}\,dt = 4\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{a^2 \sin^2 t + b^2 \cos^2 t}\,dt$$

需要作数值积分

数值积分
实例二



炮击命中概率



目标：椭圆区域（长轴**240**米，短轴**160**米）

弹着点：二维正态分布（均值为椭圆中心，X,Y方向均方差都是100米，X,Y方向相互独立）

求炮弹命中椭圆区域的概率

$$P=\iint_{\Omega}p(x,y)dxdy,\quad \Omega:\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}\le 1\ \ (a=120,b=80)$$

$$p(x,y)=\frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\exp[-\frac{1}{2}(\frac{x^2}{\sigma_x^2}+\frac{y^2}{\sigma_y^2})],\ \sigma_x=\sigma_y=100$$

需要作数值积分

数值积分的基本思路

回忆定积分的定义

$$I=\int_a^b f(x)dx=\lim_{n\to\infty}I_n,\quad I_n=\sum_{k=1}^{n}f(\xi_k)\frac{b-a}{n}$$

n充分大时I_n就是I的数值积分

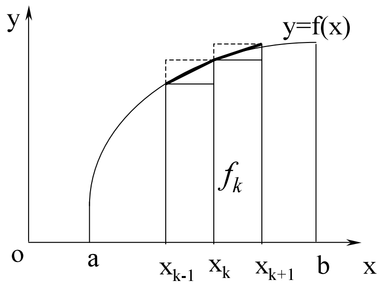
各种数值积分方法研究的是

ξ_k如何取值，区间(a,b)如何划分，

使得既能保证一定精度，计算量又小。

数值积分

1. 从矩形公式到梯形公式



$a = x_0 < x_1 < \cdots x_k \cdots < x_n = b,$

$h = \dfrac{b-a}{n}, \qquad f_k = f(x_k)$

$$L_n = h\sum_{k=0}^{n-1} f_k \qquad (1)$$

$$R_n = h\sum_{k=1}^{n} f_k \qquad (2)$$

L_n, R_n 平均，得到

梯形公式

$$T_n = h\sum_{k=1}^{n-1} f_k + \frac{h}{2}(f_0 + f_n) \qquad (3)$$

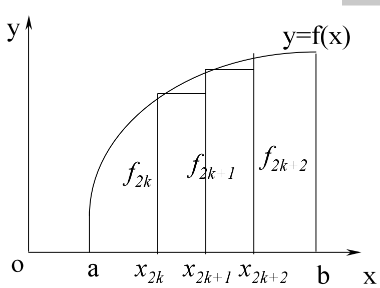
数值积分

2. 辛普森(Simpson)公式（抛物线公式）

梯形公式相当于用分段线性插值函数代替 $f(x)$

提高精度

分段二次插值函数 ⇨ 抛物线公式



每段要用相邻两小区间端点的三个函数值

区间数必须为偶数 $n = 2m$

$(x_{2k}, f_{2k}), (x_{2k+1}, f_{2k+1}), (x_{2k+2}, f_{2k+2})$

$k = 0, 1, \cdots m-1$

2. 辛普森(Simpson)公式（抛物线公式）

用$(x_{2k}, f_{2k}), (x_{2k+1}, f_{2k+1}), (x_{2k+2}, f_{2k+2})$构造 二次插值函数$s_k(x)$

$$\Rightarrow \int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} s_k(x)dx = \frac{h}{3}(f_{2k} + 4f_{2k+1} + f_{2k+2})$$

对$\boldsymbol{k}$求和(共$\boldsymbol{m}$段)，得辛普森公式：

$$S_m = \frac{h}{3}(f_0 + f_{2m} + 4\sum_{k=0}^{m-1} f_{2k+1} + 2\sum_{k=1}^{m-1} f_{2k}), \quad h = \frac{b-a}{2m} \qquad (4)$$

2000-10-7 9

梯形公式的误差估计 $T_n = h\sum_{k=1}^{n-1} f_k + \frac{h}{2}(f_0 + f_n) \approx \int_a^b f(x)dx$

$$R(f, T_n) = \int_a^b f(x)dx - T_n$$

梯形公式在每小段上是用线性插值函数$T(\boldsymbol{x})$代替 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$

$$f(x) = T(x) + \frac{f''(\eta_k)}{2}(x - x_k)(x - x_{k+1}), \quad x, \eta_k \in (x_k, x_{k+1})$$

因为：$(x-x_k)(x-x_{k+1})$在(x_k, x_{k+1})不变号，所以：

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} [f(x) - T(x)]dx = \frac{f''(\xi_k)}{2}\int_{x_k}^{x_{k+1}} (x - x_k)(x - x_{k+1})dx = -\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)$$

$$I - T_n = \int_a^b f(x)dx - T_n = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k)$$

$$\frac{I - T_n}{h^2} \to -\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx = -\frac{1}{12}(f'(b) - f'(a))$$

梯形公式的误差 $|R(f,T_n)| \le \frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}\left|f''(\xi_k)\right|$

估计 $M_2 = \max\left|f''(x)\right|, x \in (a,b)$ 因为 $n = \frac{b-a}{h}$

$$|R(f,T_n)| \le \frac{h^2}{12}M_2(b-a) \quad (5)$$

即梯形公式$\boldsymbol{T_n}$的误差是$\boldsymbol{h^2}$阶的

辛普森公式的误差估计

同理可得：

$$\frac{I - S_n}{h^4} \approx -\frac{1}{180}(f'''(b) - f'''(a))$$

$$|R(f,S_n)| \le \frac{h^4}{180}M_4(b-a) \quad (6)$$

其中 $M_4 = \max\left|f^{(4)}(x)\right|, \ x \in (a,b)$

即辛普森公式$\boldsymbol{S_n}$的误差是$\boldsymbol{h^4}$阶的。

梯形公式和辛普森公式的收敛性

若对I某个数值积分I_n有 $\lim\limits_{n\to\infty}\dfrac{I-I_n}{h^p}=c$（非零常数）

则称I_n是p阶收敛的。

$\Rightarrow$ 梯形公式 2 阶收敛，辛普森公式 4 阶收敛。

积分步长的自动选取

选定数值积分公式后，如何确定步长h以满足给定的误差ε

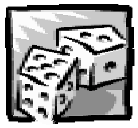
梯形公式 $I-T_n\approx-\dfrac{h^2}{12}(f'(b)-f'(a))$ $h\to h/2\ (n\to 2n)$

$$I-T_{2n}\approx\frac{1}{4}(I-T_n)\ \Rightarrow\ I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

用二分法只要 $\left|T_{2n}-T_n\right|\le\varepsilon \Rightarrow \left|I-T_{2n}\right|\le\varepsilon$

且T_{2n}可在T_n基础上计算 $T_{2n}=\dfrac{T_n}{2}+\dfrac{h}{2}\sum\limits_{k=0}^{n-1}f_{k+1/2}$

其中$f_{k+1/2}$是原分点x_k,x_{k+1}的中点（记$x_{k+1/2}$）的函数值

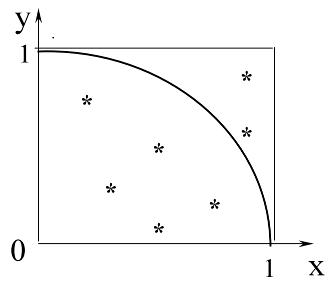


3. 蒙 特 卡 罗（Monte Carlo）方 法
——随 机 模 拟

1）随机投点法

方法的直观解释——随机投石

目的：计算1/4单位圆的面积



向单位正方形里随机投n块小石头

若有k块小石头落在1/4单位圆内，当n很大时

1/4单位圆的面积 $\frac{\pi}{4} \approx \frac{k}{n}$ （计算π的一种方法）

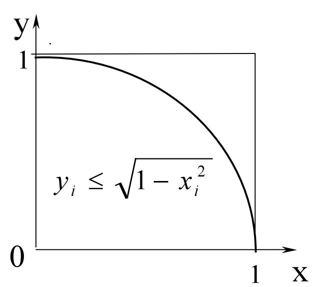
概率论的观点

投点坐标(x_i, y_i)，i=1, 2, …n，x_i, y_i是相互独立、(0, 1)内均匀分布的随机变量（(0, 1)随机数）

点(x_i, y_i)落在1/4单位圆内概率

即满足 $y_i \le \sqrt{1-x_i^2}$

$$p = \frac{\pi}{4} \approx \frac{k}{n}$$



一般地

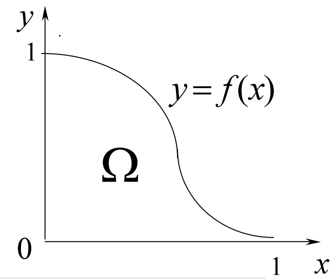
随机变量(X, Y)在单位正方形内均匀分布

$$p(x, y) = 1, \quad 0 \le x, y \le 1$$

$$P((X,Y)\in\Omega)=\iint_{\Omega}p(x,y)dxdy$$

$\Omega: 0\le x\le 1,$
$0\le y\le f(x)\le 1$

$$=\int_0^1 dx\int_0^{f(x)}1\cdot dy=\int_0^1 f(x)dx$$



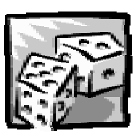
产生 **n**组(0, 1)随机数
(x_i,y_i), 其中 ***k*** 组满足

$$y_i \le f(x_i)$$

$$\Rightarrow P((X,Y)\in\Omega)\approx k/n$$

随机投点法

$$\int_0^1 f(x)dx \approx k/n,\ 0\le f(x)\le 1$$



2) 均值估计法

随机变量 X 的概率密度为 $p(x),\quad a\le x\le b$

$Y=f(X)$ 的期望为 $E(f(X))=\int_a^b f(x)p(x)dx$

若X在(0, 1)均匀分布，则 $E(f(X))=\int_0^1 f(x)dx$

产生(0,1)随机数x_i
(i=1,2,…n), n很大

$$E(f(X))\approx\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}f(x_i)$$

均值估计法

$$\int_0^1 f(x)dx\approx\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}f(x_i)$$

均值估计法的优点

• 没有 $0 \le f(x) \le 1$ 限制；

• 不要产生y_i, 不用比较 $y_i \le f(x_i)$

用随机模拟方法计算任意区间上的积分

$x = a + (b-a)u$

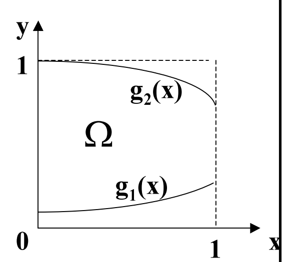
$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\int_0^1 f(a+(b-a)u)du$$

均值估计法 ⇨ $$\approx \frac{b-a}{n}\sum_{i=1}^{n} f(a+(b-a)u_i)$$

其中u_i为(0, 1)随机数

思考　若不满足 $0 \le f(x) \le 1$ ，怎样应用随机投点法

用随机模拟法计算重积分 $\iint\limits_{\Omega} f(x,y)dxdy$



$\Omega: 0 \le x \le 1,$
$0 \le g_1(x) \le y$
$\le g_2(x) \le 1$

产生相互独立的(0, 1)随机数 x_i, y_i, i =1, …n,

落在Ω内的 m个点记作(x_k, y_k), k= 1, …m

$$\iint\limits_{\Omega} f(x,y)dxdy \cong \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{m} f(x_k, y_k)$$

• 可用于任意的f, Ω, 且可推广至高维

• 结果的精度和收敛速度与维数无关

• 计算量大，精度低，结果具有随机性

用MATLAB 作数值积分

矩形公式

$$L_n = h\sum_{k=0}^{n-1} f_k \qquad R_n = h\sum_{k=1}^{n} f_k$$

Sum(x)　输入数组x(即f_k), 输出x的和(数)

cusum(x)　输入数组x, 输出x的依次累加和(数组)

梯形公式

$$T_n = h\sum_{k=1}^{n-1} f_k + \frac{h}{2}(f_0 + f_n)$$

trapz(x)　输入数组x, 输出按梯形公式x的积分(单位步长)

trapz(x,y)　输入同长度数组 x,y, 输出按梯形公式y对x的积分(步长不一定相等)

用MATLAB 作数值积分

辛普森公式

$$S_n = \frac{h}{3}\left(f_0 + f_{2m} + 4\sum_{k=0}^{m-1} f_{2k+1} + 2\sum_{k=1}^{m-1} f_{2k}\right), \qquad h = \frac{b-a}{2m}$$

quad('fun',a,b,tol)　用辛普森(2阶)公式计算以 fun.m 命名的函数在 (a, b) 上的积分

tol为相对误差，缺省时为10^{-3}

quad8('fun',a,b,tol)　用辛普森(8阶)公式计算

随机模拟　**rand(1, n)**　产生n个(0, 1)随机数

用MATLAB 作数值积分

例. 计算 $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin x dx$

1）矩形公式和梯形公式

将(0, π /2)10等分,步长h= π /20　MATLAB 5.3.lnk　shiyan311

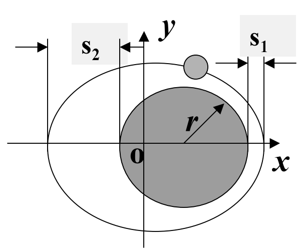
2）辛普森公式　MATLAB 5.3.lnk　shiyan312

精确、方便　无法计算用数值给出的函数的积分

3）蒙特卡罗方法（均值估计法）　MATLAB 5.3.lnk　shiyan313

结果是随机的

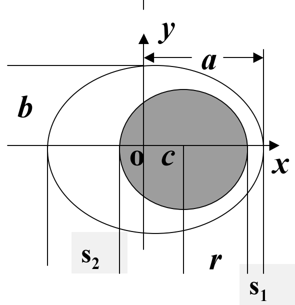
数值积分实例一　人造卫星轨道长度



$$L = 4\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{a^2 \sin^2 t + b^2 \cos^2 t}\, dt$$

a~长半轴, b~短半轴, 由s_1, s_2, r决定

s_1=439km, s_2= 2384km, r=6371km



$2a = 2r + s_2 + s_1$　$a = r + \dfrac{s_2 + s_1}{2} = 7782.5$

焦距$c = a - r - s_1$　$c = \dfrac{s_2 - s_1}{2}$

$b = \sqrt{a^2 - c^2} = 7721.5$

数值积分实例一　人造卫星轨道长度

$$L = 4\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{a^2 \sin^2 t + b^2 \cos^2 t}\, dt$$

用梯形公式和辛普森公式计算　MATLAB 5.3.lnk　shiyan32

轨道长度　L=**4.8707**×**10^4**千米

只将区间**5**等分，梯形公式就给出很好的结果

数值积分实例二

求炮弹命中椭圆区域的概率

$$P = \iint_{\Omega} p(x,y)\,dxdy\,,\ \ \Omega : \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} \le 1$$

$$a = 120\,,\, b = 80$$

$$p = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y}\exp[-\frac{1}{2}(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2})]$$

$$\sigma_x = \sigma_y = 100$$

随机模拟法

将积分域化为圆

作变换

$x = au, y = bv,$

以100(m)为单位

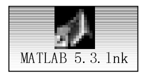
数值积分实例二

求炮弹命中椭圆区域的概率

$$P = ab \iint_{\Omega} \bar{p}(u,v)\,du\,dv$$

$$\Omega : u^2 + v^2 \le 1$$

$$\bar{p}(u,v) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}(a^2u^2+b^2v^2)}$$



shiyan33

结果具有随机性，

概率***P*=0.37~0.38**是可信的。

数 值 微 分 实 例

人 口 增 长 率

已知20世纪美国人口的统计数据为（单位：百万）

年份	1900	1910	1920	1930	1940	1950	1960	1970	1980	1990
人口	76.0	92.0	106.5	123.2	131.7	150.7	179.3	204.0	226.5	251.4

计算这些年份的人口(相对)增长率(%).

记 t 时刻的人口为 $x(t)$, 则人口(相对)增长率为

$$r(t) = \frac{dx}{dt} \Big/ x(t)$$

$\frac{dx}{dt}$需要用数值方法计算。

数值微分

函数 $y=f(x)$ 以离散值给出(如已知 $f(a), f(a+h), f(a-h)$),

计算在点 $x=a$ 处的导数

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

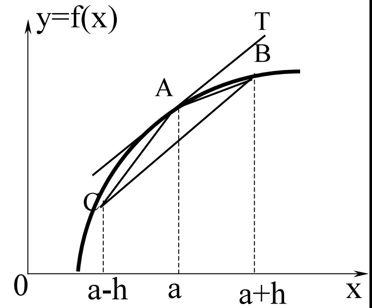
前插公式

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

后插公式

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

最常用的中点公式



数值微分

误差估计　将 $f(a \pm h)$ 在点 a 作 *Taylor* 展开

$$f(a \pm h) = f(a) \pm hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(a) \pm O(h^3)$$

三个公式代入可知,前(后)差公式的误差为**O(h)**, 中点公式误差为**O(h^2)**

数值微分的常用公式

区间 (a,b) n等分, $y=f(x)$ 在分点处数值为 (x_k, y_k),

$a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b,\ h=(b-a)/n$

数值微分的常用公式

$$f'(x_k) \cong \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h}, \quad k = 1,2,\cdots n-1$$

$$f'(x_0) \cong \frac{y_1 - y_0}{h} \Rightarrow f'(x_0) \cong \frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2h}$$

$$f'(x_n) \cong \frac{y_n - y_{n-1}}{h} \Rightarrow f'(x_n) \cong \frac{y_{n-2} - 4y_{n-1} + 3y_n}{2h}$$

以上**3**式称三点公式，误差为**O(h²)**

问题 是不是步长 **h** 越小，结果越好？

t

2000-10-7 31

例 设 $f(x) = \sqrt{x}$，求 $f'(2)$.

用 $f'(2) \cong \dfrac{\sqrt{2+h} - \sqrt{2-h}}{2h}$ 计算，对不同的 h 有

h	1	0.5	0.1	0.05	0.01
$f'(2)$	0.3660	0.3564	0.3535	0.3530	0.3500

精确值 $f'(2) = \dfrac{1}{2\sqrt{x}} = 0.3536$

h=0.1时结果最好

h太小时 y_{k+1} 与 y_{k-1} 很接近**,**二者相减引起很大的舍入误差

2000-10-7 32

数值微分实例 人口增长率

$$r(t)=\frac{dx}{dt}\Big/x(t)$$

自1900年起人口记$\boldsymbol{x_k}$，年增长率记$\boldsymbol{r_k}$

$$r_k=\frac{x_{k+1}-x_{k-1}}{20\,x_k},\quad k=1,2,\cdots 8$$

$$r_0=\frac{-3x_0+4x_1-x_2}{20x_0},\quad r_9=\frac{x_7-4x_8+3x_9}{20x_9}$$

$\boldsymbol{r_0\sim r_9}$**(%)**的计算结果为

1900	1910	1920	1930	1940	1950	1960	1970	1980	1990
2.20	1.66	1.46	1.02	1.04	1.58	1.49	1.16	1.05	1.04

2000-10-7 33

布 置 实 验

目的

- 用 **MATLAB** 掌握梯形公式、辛普森公式、蒙特卡罗方法计算数值积分;
- 通过实例学习用数值积(微)分解决实际问题

内容

《数学实验》第93页 5.2实验内容
2）**d**； **6**）； **10**）。

2000-10-7 34

补充：高斯(Gauss)公式

矩形公式**(1)**、**(2)**
梯形公式**(3)**
辛普森公式**(4)**

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \quad (7)$$

A_k是与f无关的常数

代数精度

设 $f(x)=x^k$, 用**(7)**计算 $I = \int_a^b f(x)dx$,

若对于 $k = 0,1,\cdots m$ 都有 $I_n=I$,

而当 $k=m+1$, $I_n \neq I$, 则称$\boldsymbol{I_n}$的代数精度为$\boldsymbol{m}$**.**

梯形公式的代数精度（考察$\mathbf{T_1}$）

k=1
f(x)=x

$$T_1 = \frac{h}{2}[f(a) + f(b)] = \frac{(b-a)(a+b)}{2}$$

$$I = \int_a^b x dx = \frac{b^2 - a^2}{2} \Rightarrow T_1 = I$$

k=2
f(x)=x²

$$T_1 = \frac{(b-a)(a^2+b^2)}{2}$$

$$I = \int_a^b x^2 dx = \frac{b^3 - a^3}{3} \Rightarrow T_1 \neq I$$

梯形公式的代数精度为**1**　　辛普森公式的代数精度为**3**

高斯公式的思路

取消对节点的限制，按照代数精度最大的原则，同时确定节点$\mathbf{x_k}$和系数$\mathbf{A_k}$

对于 $I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx$ 构造求积公式

$G_2 = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$ 使G_2的代数精度为3

$f(x) = 1, x, x^2, x^3$ $\int_{-1}^{1} f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$

确定 x_1, x_2, A_1, A_2

将f(x)代入计算得

$$
\begin{aligned}
A_1 + A_2 &= 2 \\
A_1 x_1 + A_2 x_2 &= 0 \\
A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 &= 2/3 \\
A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 &= 0
\end{aligned}
$$

$\Longrightarrow$ $x_1 = -1/\sqrt{3},\quad x_2 = 1/\sqrt{3},\quad A_1 = A_2 = 1$

$\Longrightarrow$ $G_2 = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$

用**n**个节点，$\mathbf{G_n}$的代数精度可达**2n-1,** 但是需解复杂的非线性方程组，实用价值不大。

常用的高斯公式

将 (a, b) 分小，把小区间变换为 $(-1，1)$，再用 G_2

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{h}{2}\sum_{k=1}^{m}[f(z_k^{(1)})+f(z_k^{(2)})]$$

$$z_k^{(1)}=\frac{x_k+x_{k-1}}{2}+\frac{h}{2\sqrt{3}},\quad z_k^{(2)}=\frac{x_k+x_{k-1}}{2}-\frac{h}{2\sqrt{3}}$$

$$h=(b-a)/m,\ \ x_k=a+kh,\ \ k=0,1,\cdots m$$