数值计算方法

第四章

数值积分和数值微分

数值积分的基本思想

- 数值求积方法
  - 取[*a*,*b*]内若干节点x_k 处的高度 $f(x_k)$通过加权平均的方法近似地得出积分值

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

  - 求积公式的截断误差或余项

$$R[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

- 数值求积方法的特点
  - 直接利用积分区间[*a*, *b*]上一些离散节点的函数值进行线性组合来近似计算定积分的值

代数精度

- 数值求积方法是近似方法，为了保证精度，自然希望求积公式对尽可能多的函数是准确的
- 例4.1.1：设积分区间[a, b]为[0, 2]，用梯形公式和辛普森公式计算积分并比较
  - 解：梯形公式为

$$\int_0^2 f(x)dx \approx f(0) + f(2)$$

  - 辛普森公式为

$$\int_0^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(0) + 4f(1) + f(2)]$$

代数精度

- 取 $f(x)=1, x, x^2, x^3, x^4$时，梯形公式和辛普森公式的计算结果与准确值比较如下表所示

$f(x)$	1	x	x^2	x^3	x^4
准确值	2	2	2.67	4	6.40
梯形公式计算值	2	2	4	8	16
辛普森公式计算值	2	2	2.67	4	6.67

代数精度

- **定义4.1：** 求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 对于

$$f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^m$$

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_m x^m$$

均准确成立，即 $R[f] \equiv 0$ 而对于 $f(x) = x^{m+1}$ 不能准确成立，则称该求积公式具有***m***次代数精度。

代数精度

- 求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 具有**m**次代数精度的条件

$$\begin{cases} f(x)=1, \sum_{k=0}^{n} A_k = b-a \\ f(x)=x, \sum_{k=0}^{n} A_k x_k = \frac{1}{2}(b^2-a^2) \\ \qquad\cdots\cdots\cdots\cdots \\ f(x)=x^m, \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^m = \frac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1}) \end{cases}$$

- 代数精度越高，求积公式越精确
- 梯形公式和中矩形公式具有**1**次代数精度，辛普森公式具有**3**次代数精度

代数精度

- 代数精度只是定性的描述了数值求积公式的精确程度，并不能定量的表示数值求积公式误差的大小
- 凡至少具有零次代数精度的求积公式一定满足 ***f*(*x*)=1**时，等式两端相等

$$\int_a^b 1dx = \sum_{k=0}^{n} A_k 1$$

即

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$$

- 求积系数的基本特征：求积系数之和等于积分区间长度

代数精度和节点的关系

- **定理4.1：对于给定的*n*+1个（相异）节点x_k, k=0, 1, …, *n*，总存在求积系数A_k, k=0, 1, …, *n*, 使求积公式**

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

至少有*n*次的代数精度

代数精度和节点的关系

- 可以用代数精度为标准构造求积公式，即由节点数写出求积公式
  - 例：给定两个节点***a***、***b***，其对应的函数值为***f*(*a*)**、***f*(*b*)**，构造的求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(a) + A_1 f(b)$$

  - 两个节点至少有一次代数精度，当 ***f*(*x*)=1, *x*** 时，求积公式准确成立，即有

代数精度和节点的关系

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a \\ A_0 a + A_1 b = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2) \end{cases}$$

- 通过上面两个方程，解出

$$A_0 = A_1 = \frac{b-a}{2}$$

- 所以构造出的求积公式为

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

也就是梯形公式

插值求积公式

- 主要实现思想
  - 用插值多项式代替被积函数，用插值多项式的积分近似被积函数的积分
- 实现步骤
  - 设已知函数 $f(x)$,给定节点 $a \le x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n \le b$，及函数值$f(x_k)$
  - 构造n次插值多项式$P_n(x)$，其对应的插值型求积公式为

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

插值求积公式

- 将

$$P_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$$

代入，有

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

$$=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\left[\int_a^b l_k(x)dx\right]=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)A_k$$

- 求积系数 $A_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$

插值求积公式

- **定义4.2：求积公式** $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ **，其系数** $A_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$ **时，则称求积公式为插值求积公式**
- **定理4.2: *n*+1个节点的求积公式** $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ **至少具有 *n* 次代数精度的充要条件是该公式是插值求积公式**
  - ***n*+1个节点的插值求积公式至少有*n*次代数精度，所以构造求积公式后应该验算所构造的求积公式的代数精度**
  - 例如，插值求积公式

插值求积公式

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

的三个节点至少有2次代数精度，是否有3次代数精度呢？

- 将$f(x)=x^3$代入公式两端，左端和右端都等于$\frac{1}{4}(b^4-a^4)$，公式两端严格相等
- 再将$f(x)=x^4$代入公式两端，两端不相等
- 所以该求积公式具有3次代数精度

插值求积公式

- **例4.1.2：考察求积公式**

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{2}[f(-1)+2f(0)+f(1)]$$

的代数精度

- 解：设$f(x)=1$，公式左边 $\int_{-1}^{1} 1dx = 2$

  公式右边 $\frac{1}{2}(1+2+1)=2$

- 设$f(x)=x$，公式左边 $\int_{-1}^{1} xdx = 0$

  公式右边 $\frac{1}{2}(-1+2\times 0+1)=0$

插值求积公式

- 设$f(x)=x^2$，公式左边 $\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3}$

  公式右边 $\frac{1}{2}(1+2\times 0+1)=1$

- 因此此求积公式只有1次代数精度
- 三个节点的求积公式不一定具有2次代数精度，其原因就是求积公式不是插值型的

插值求积公式

- 插值求积公式的特点
  - 复杂函数***f*(*x*)**积分转化为计算多项式积分
  - 求积系数 $A_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$ 只与区间和节点有关，而与被积函数无关，可预先算定
  - 求积系数之和为区间长度

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$$

  - ***n*+1**个节点的插值求积公式至少具有***n***次代数精度

构造插值求积公式的步骤

- 例4.1.3：对 $\int_0^3 f(x)\mathrm{d}x$ ，构造一个至少有3次代数精度的求积公式
  - 解：4个节点至少有3次代数精度，在[0, 3]上选0，1，2，3
  - 利用求积系数的公式

$$A_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$$

得到

$$A_0=\int_0^3 l_0(x)\mathrm{d}x=\int_0^3\frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)}\mathrm{d}x=\frac{3}{8}$$

$$A_1=A_2=\frac{9}{8},A_3=\frac{3}{8}$$

构造插值求积公式的步骤

- 所以有

$$\int_0^3 f(x)\mathrm{d}x \approx (3/8)[f(0)+3f(1)+3f(2)+f(3)]$$

- 用$f(x)=x^4$代入，左边$\int_0^3 x^4\mathrm{d}x = 48.6$

  右边 $\frac{3}{8}(0^4+3\times1^4+3\times2^4+3^4)=48.75$

- 两端不相等，只有3次精度

柯特斯求积系数表

n	c_k								
1	1/2	1/2							
2	1/6	2/3	1/6						
3	1/8	3/8	3/8	1/8					
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90				
5	19/288	25/96	25/144	25/144	25/96	19/288			
6	41/840	9/35	9/280	34/105	9/280	9/35	41/840		
7	751/ 17280	3577/ 17280	1323/ 17280	2989/ 17280	2989/ 17280	1323/ 17280	3577/ 17280	751/ 17280	
8	989/ 28350	5888/ 28350	-928/ 28350	10496/ 28350	-4540/ 28350	10496/ 28350	-928/ 28350	5888/ 28350	989/ 28350

常用的低阶牛顿－柯特斯公式

- 当n=1（一阶）时，有

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)[\frac{1}{2}f(x_0)+\frac{1}{2}f(x_1)]$$

梯形公式

$$T=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$$

相当于用直线$P_1(x)$代替$f(x)$计算积分

常用的低阶牛顿—柯特斯公式

- 当n=2（二阶）时，有

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)[\frac{1}{6}f(x_0)+\frac{4}{6}f(x_1)+\frac{1}{6}f(x_2)]$$

抛物线(辛普森)公式

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

相当于用过两个端点和中点的二次 抛物线$P_2(x)$代替$f(x)$计算积分

常用的低阶牛顿—柯特斯公式

- 例4.2.1：用梯形公式、辛普森公式和柯特斯公式求积分 $\int_0^1 e^x \, dx$ ，并与精确值比较
  - 解：梯形公式

$$\int_0^1 e^x \, dx \approx \frac{1-0}{2}\left(e^1 + e^0\right) \approx \frac{1}{2} \times 3.718 = 1.859$$

  - 辛普森公式

$$\int_0^1 e^x dx \approx \frac{1-0}{6}(e^0 + 4 \times e^{\frac{1}{2}} + e^1) \approx \frac{1}{6} \times 10.31317 \approx 1.71886$$

常用的低阶牛顿一柯特斯公式

- 柯特斯公式

$$x_k = a + kh, k = 0,1,2,3,4, h = \frac{b-a}{4}$$

$$x_0 = 0, x_1 = \frac{1}{4}, x_2 = \frac{1}{2}, x_3 = \frac{3}{4}, x_4 = 1$$

$$\int_0^1 \mathrm{e}^x \mathrm{d}\,x \approx \frac{1-0}{90}\left(7\times\mathrm{e}^0 + 32\times\mathrm{e}^{\frac{1}{4}} + 12\times\mathrm{e}^{\frac{1}{2}} + 32\times\mathrm{e}^{\frac{3}{4}} + 7\times\mathrm{e}^1\right)$$

$$\approx \frac{1}{90}\times 154.64544 = 1.71828$$

- 精确值 $\int_0^1 \mathrm{e}^x \,\mathrm{d}\,x = \mathrm{e}^x\Big|_0^1 = 1.7182818\cdots$

梯形公式和辛普森公式的余项

- 梯形公式的截断误差
  - 定理4.4（梯形公式的余项）:设$f(x)$在$[a, b]$上具有连续的二阶导数，则梯形公式的余项

$$R_T = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \quad a \ll \eta \le b$$

  - 证：由牛顿-柯特斯公式的余项公式可知梯形公式的余项为

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

梯形公式和辛普森公式的余项

- 因$f''(\xi)$在$[a, b]$上连续，而$(x-a)(x-b)$在$[a,b]$上不变号，即$(x-a)(x-b)\le 0$，利用广义积分中值定理，在$[a, b]$上存在一点η，使

$$\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx = f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{6}f''(\eta)$$

- 因此

$$R_T = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta), \quad a \ll \eta \le b$$

梯形公式和辛普森公式的余项

- 例4.2.5：导出左矩形公式 的余项

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}\,x \approx (b-a)\,f(a)$$

  - 解：将$f(x)$在$x=a$处进行泰勒展开

$$f(x) = f(a) + f'(\xi)(x-a)$$

其中$\xi \in [a, b]$，且依赖于x，即$f'(\xi)$是依赖于x的连续函数

  - 对上式两边在$[a, b]$上积分，有

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}\,x = \int_a^b f(a)\,\mathrm{d}\,x + \int_a^b f'(\xi)(x-a)\,\mathrm{d}\,x = (b-a)f(a) + \int_a^b f'(\xi)(x-a)\,\mathrm{d}\,x$$

梯形公式和辛普森公式的余项

- 左矩形公式的余项为

$$R_L = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - (b-a)f(a) = \int_a^b f'(\xi)(x-a)\,\mathrm{d}x$$

- **$(x\text{-}a)$在$[a, b]$上不变号，由广义积分中值定理知，至少有一点$\eta\in[a, b]$，使**

$$R_L = \int_a^b f'(\xi)(x-a)\,\mathrm{d}x = f'(\eta)\int_a^b (x-a)\,\mathrm{d}x$$

即

$$R_L = \frac{1}{2} f'(\eta)(b-a)^2, \eta\in[a,b]$$

梯形公式和辛普森公式的余项

- 例4.2.6：导出中矩形求积公式 的余项

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

梯形公式和辛普森公式的余项

- 解：将*f*(*x*)在 $x=\frac{a+b}{2}$ 处做泰勒展开式

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

- 两边积分得

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b f(\frac{a+b}{2})dx+\int_a^b f'(\frac{a+b}{2})(x-\frac{a+b}{2})dx+\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-\frac{a+b}{2})^2 dx$$

$$=(b-a)f(\frac{a+b}{2})+\int_a^b f'(\frac{a+b}{2})(x-\frac{a+b}{2})dx+\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-\frac{a+b}{2})^2 dx$$

- 余项

梯形公式和辛普森公式的余项

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

$$=\int_a^b f'(\frac{a+b}{2})(x-\frac{a+b}{2})dx+\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-\frac{a+b}{2})^2dx$$

- $(x-\frac{a+b}{2})^2$ 在[*a*, *b*]上不变号，由广义积分中值定理可得，至少存在一点$\eta\in[a,b]$，使得

$$\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-\frac{a+b}{2})^2dx=\frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b (x-\frac{a+b}{2})^2dx$$

- 因此有余项

梯形公式和辛普森公式的余项

$$R=\int_a^b f'(\frac{a+b}{2})(x-\frac{a+b}{2})dx+\frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b(x-\frac{a+b}{2})^2dx$$

$$=\frac{1}{24}f''(\eta)(b-a)^3 \qquad \eta\in[a,b]$$

复化求积法

- 复化梯形公式
  - 将积分区间等分成*n*个小区间，在每个小区间上分别用梯形求积公式求积分，然后再将其结果加起来
  - 设$f(x)$在$[a,b]$上有连续的二阶导数，*n*是正整数，将$[a,b]$等分成*n*个小区间

$$[x_0, x_1], \cdots, [x_k, x_{k+1}], \cdots, [x_{n-1}, x_n]$$

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

复化求积法

- 在$[x_k, x_{k+1}]$上，运用梯形公式

$$I_k = \frac{h}{2}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right]$$

- 然后将各子区间的积分值相加

$$T_n = \sum_{k=0}^{n-1} I_k = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right]$$

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

复化求积法

- **例4.2.8：用*n*=6的复化梯形公式计算积分的近似值**

$$\int_4^{5.2} \ln x \, \mathrm{d}x$$

  - **解：**

$$f(x) = \ln x,\ \ a = 4,\ \ b = 5.2,\ \ b - a = 1.2$$

$$n = 6, \quad h = \frac{5.2 - 4}{6} = 0.2$$

$$\int_4^{5.2} \ln x dx \approx \frac{0.2}{2}[f(4) + f(5.2) + 2f(4.2) + 2f(4.4)$$

$$+2f(4.6) + 2f(4.8) + 2f(5)] \approx 1.827655$$

复化求积法

- 例4.2.9：用n=6的复化梯形公式计算积分

$$\int_{0.5}^{3.5} \sqrt{x}dx$$

- 解：

$$f(x) = \sqrt{x}, \ \ a = 0.5, \ \ b = 3.5, \ \ b - a = 3$$

$$n = 6, \quad h = 0.5$$

$$\int_{0.5}^{3.5} \sqrt{x}dx \approx \frac{0.5}{2}[f(0.5) + f(3.5) + 2f(1) + 2f(1.5) + 2f(2) + 2f(2.5) + 2f(3)] \approx 4.12056$$

复化求积法

- 复化辛普森公式
  - 将$[x_k, x_{k+1}]$对分，中点记为 $x_{k+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_k + x_{k+1}}{2}$
  - 则复化辛普森（抛物线）求积公式为

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

$$= \frac{h}{6}[f(x_0) + 4f(x_{\frac{1}{2}}) + f(x_1) + f(x_1) + 4f(x_{1+\frac{1}{2}}) + f(x_2)$$

$$+ f(x_2) + 4f(x_{2+\frac{1}{2}}) + f(x_3) + \cdots + f(x_{n-1}) + 4f(x_{n-\frac{1}{2}}) + f(x_n)]$$

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

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

复化求积法

- **例6.2.11：利用数据表**

x_k	0	1/8	1/4	3/8	1/2	5/8	3/4	7/8	1
$f(x_k)$	4	3.93846	3.76470	3.50685	3.20000	2.87640	2.46000	2.26549	2

计算积分

$$I^* = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

复化求积法

- **解：取$n = 8$，用复化梯形公式**

$$T_8 = \frac{1}{8}\times\frac{1}{2}\left[f(0)+2f\left(\frac{1}{8}\right)+2f\left(\frac{1}{4}\right)+2f\left(\frac{3}{8}\right)+2f\left(\frac{1}{2}\right)\right.$$

$$\left.+2f\left(\frac{5}{8}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)+2f\left(\frac{7}{8}\right)+f(1)\right]$$

$$=3.13899$$

- **取n=4，用辛普森公式**

复化求积法

$$S_4=\frac{1}{4}\times\frac{1}{6}\left[f(0)+4f\left(\frac{1}{8}\right)+2f\left(\frac{1}{4}\right)+4f\left(\frac{3}{8}\right)+2f\left(\frac{1}{2}\right)\right.$$

$$\left.+4f\left(\frac{5}{8}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)+4f\left(\frac{7}{8}\right)+f(1)\right]$$

$$=3.14159$$

- 比较T_8 与S_4两个结果，它们都需要调用$f(x)$ 9次，工作量基本相同，但精度差别却很大
- 这项计算结果表明，复化辛普森公式是一种精度较高的求积公式

复化求积法

- 例4.2.13：用复化梯形公式、复化辛普森公式（用7个点上的函数值）计算积分 $\int_0^{\frac{\pi}{6}} \sqrt{4-\sin^2\varphi}\,d\varphi$ 的近似值

φ	0	$\frac{\pi}{36}$	$\frac{2\pi}{36}$	$\frac{3\pi}{36}$	$\frac{4\pi}{36}$	$\frac{5\pi}{36}$	$\frac{6\pi}{36}$
$f(\varphi)$	2	1.99810	1.99245	1.98318	1.97054	1.95484	1.93649

复化求积法

- 解：复化梯形法用7个点上的函数值计算，***n*=6**，$h=\dfrac{\pi}{36}$

$$T_6=\frac{1}{2}\times\frac{\pi}{36}[2+2\times(1.99810+1.99245+1.98318$$

$$+1.97054+1.95484)+1.93649]=1.03562$$

- 复化辛普森法用7个点上的函数值计算，***n*=3**，$h=\dfrac{\pi}{18}$

$$S_3=\frac{1}{6}\times\frac{\pi}{18}[2+4\times(1.99810+1.98318+1.95484)$$

$$+2\times(1.99245+1.97054)+1.93649]=1.03576$$