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

微积分基本公式: $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$ 牛顿-莱布尼茨公式

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 $f(x) = \frac{1}{1+x^4}, \frac{\sin x}{x}, e^{-x^2}$
 - (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:
$$\int_{a}^{b} f(x) dx = (b-a) f(\xi), \xi \in (a,b)$$

 $f(\xi)$ 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((a+b)/2) 近似 $f(\xi)$ 可得

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx (b-a)f(a)$$

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx (b-a)f(b)$$

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx (b-a)f(b)$$

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$
中矩形公式 (5.4)

✓ 若用f(a) 和f(b) 的算术平均值近似 $f(\xi)$,则可得

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2} \longrightarrow$$
 梯形公式 (5.5)

一般求积公式

更一般地,可以用 f(x) 在 [a,b] 上的一些离散点

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

$$I(f) = \int_{a}^{b} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i})$$
 机械求积公式 求积系数

(结点)

记
$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$
,则误差为 $R(f) = I(f) - Q(f)$

问题: 什么样的求积公式误差可能会比较小呢?



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

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

精确成立,但对于某一次数为m+1的多项式f(x)不精确成立,

则称该求积公式的代数精度为m次。

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,称为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 $f(x) \equiv \alpha$ 分别代入左矩阵公式 (5.2) 及梯形公式 (5.5) 得: $I(f) = \int_a^b \alpha dx = (b-a)\alpha$ $G_a(f) = (b-a)\alpha; \ \sqrt{T(f)} = \frac{(b-a)}{2}(\alpha + \alpha) = (b-a)\alpha \ \sqrt{T(f)}$

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 $I(f) \neq T(f)$

 $G_a(f)$ 只有零次代数精度,T(f)有一次代数精度。

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 $1, x, x^2, ..., x^m$ 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 $(x) = 1, x, x^2, ..., x^m$ 精确成立,但对 $f(x) = x^{m+1}$ 不精确成立即可,即:

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

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 零次 代数精度。
- ✓中矩形公式和梯形公式具有一次代数精度。

举例 (一)

数精度,并求出此求积公式的代数精度。

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$
解: 将 $f(x) = 1$, x , x^2 代入求积公式,使其精确成立得

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

$$\frac{\text{finds and the problem}}{A_0} + A_2 = \int_{-1}^{1} x^2 dx = (1^3 - (-1)^3) / 3 = 2 / 3$$

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

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

牛顿-科茨(Newton-Cotes)公式

 \square 设 f(x) 在节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 上的函数 值为 $f(x_n), f(x_1), \dots, f(x_n)$, 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

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

其中
$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx = \int_a^b \prod_{j \neq i}^{J=0,...n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx$$
 插值型求积公式

定理 求积公式 $\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_{i} f(x_{i})$ 至少具有 n 次代

数精度的充要条件是:它是插值型的。

牛顿-科茨(Newton-Cotes)公式

插值型求积公式

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i}) + \mathbf{H} \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{H} = \int_{a}^{b} l_{i}(x) dx$$

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: $x_i = a + i h$, $h = \frac{b-a}{n}$, i = 0, 1, ..., n 令 x = a + t h 得:

$$A_{i} = \int_{a}^{b} l_{i}(x) dx = \int_{a}^{b} \prod_{j \neq i}^{j=0,...n} \frac{x - x_{j}}{x_{i} - x_{j}} dx = \int_{0}^{n} \prod_{j \neq i}^{j=0,...,n} \frac{t - j}{i - j} \cdot h dt$$

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

牛顿-科茨公式(续)

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-科茨公式:

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

几个常见公式

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

$$n = 1$$
: $C_0^{(1)} = \frac{1}{2}$, $C_1^{(1)} = \frac{1}{2}$ $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$

梯形求积公式 代数精度=1

$$n = 2$$
: $C_0^{(2)} = \frac{1}{6}$, $C_1^{(2)} = \frac{2}{3}$, $C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$ 抛物线求积公式
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] = S$$
 辛甫森(Simpson) 共和公式

抛物线求积公式

求积公式

代数精度=3

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 $n \ge 8$ 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一科茨求积公式。

当 $n \leq 7$ 时,牛顿-科茨公式是稳定的。

牛顿-科茨公式的代数精度

例:辛普森求积公式精度:

解:?

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

三次代数精度

可以证明:

当n为奇数时,牛顿一科茨公式至少有n次代数精度。

当n为偶数时,牛顿一科茨公式至少有n+1次代数精度。

举例

例:分别用梯形公式(n=1)和simpson(n=2)公式计

算积分
$$\int_0^1 e^{-x} dx$$

M:
$$a = 0, b = 1, f(x) = e^{-x}$$
,

由梯形公式可得

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

由 simpson 公式可得

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

与精确值0.6321...相比得误差分别为0.0518和0.0002。

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

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}, \quad \Delta x = h, \quad h > 0$$

向前差商公式

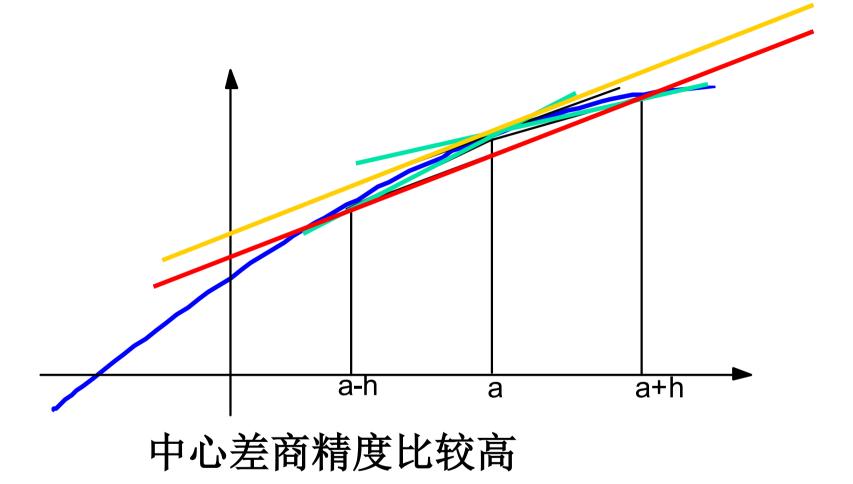
向后差商公式

$$\left| f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a - h)}{h} \right|, \quad \Delta x = -h$$

中心差商公式

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

差商公式比较



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

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

$$\xi_x$$
与 x 有关,

当
$$x$$
为某节点时, $\omega(x) = 0$, $(\omega(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j))$

$$R(x)=f'(x)-L'_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega'(x)\approx 0$$
,余项可控制

得
$$f'(x) \approx L_n'(x)$$

两点公式

两点公式(等距):

$$n = 1, \quad \text{Tin} x_0, x_1,$$

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

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

$$L_1'(x) = \frac{1}{x_1 - x_0} (f(x_1) - f(x_0))$$

$$\pm \omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)$$

设
$$x_0 = a, x_1 = a + h$$
, 步长 $h = x_1 - x_0$

$$\omega(x) = (x - a)(x - a - h) = (x - a)^{2} - h(x - a)$$

$$\omega'(x) = 2(x - a) - h$$

$$\theta(x_{0}) = -h$$

$$R(x_{0}) = f'(x_{0}) - L'_{1}(x_{0}) = \frac{f''(\xi_{x})}{2}\omega'(x_{0})$$

$$= -\frac{h}{2}f''(\xi_{0})$$

两点公式

所以
$$f'(x_0) = \frac{1}{h}(f(x_0 + h) - f(x_0)) - \frac{h}{2}f''(\xi_0)$$
,向前差商

同理,
$$h = x_0 - x_1$$
得 $x_1 = x_0 - h$

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}(f(x_0) - f(x_0 - h)) + \frac{h}{2}f''(\xi_1)$$
 向后差商

两点公式

三点公式(等距)

三点公式(等距):

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

$$L_{2}(x) = \frac{(x - x_{1})(x - x_{2})}{(x_{0} - x_{1})(x_{0} - x_{2})} f(x_{0})$$

$$+ \frac{(x - x_{0})(x - x_{2})}{(x_{1} - x_{0})(x_{1} - x_{2})} f(x_{1}) + \frac{(x - x_{0})(x - x_{1})}{(x_{2} - x_{0})(x_{2} - x_{1})} f(x_{2})$$

$$\Rightarrow x = x_0 + th, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$$

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

对t求导

$$hL_2'(x) = \frac{1}{2}[(2t-3)f(x_0) - 4(t-1)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)]$$

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

三点公式 (等距)

分别令 t=0,1,2 , 得

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

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

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

得
$$\omega'(x_0) = 2h^2$$
, $\omega'(x_1) = -h^2$, $\omega'(x_2) = 2h^2$

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

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

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

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h} \left[-f(x_0) + f(x_2) \right] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$
 中心差商:
$$f'(x_2) = \frac{1}{2h} \left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2) \right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

$$+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

$$-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

$$+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)$$

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v'(2.7)=v(2.7)=14.8797...

取 $x_0 = 2.6$, $x_1 = 2.7$, 得: $f(a) = \frac{f(a) - f(a-b)}{b}$

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

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

若取 $x_0 = 2.7$, $x_1 = 2.8$, 则 f_{cars} f_{cars

举例

精确值y'(2.7)=y(2.7)=14.8797...

若取 $x_0 = 2.5$, $x_1 = 2.7$, 则

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

若取 $x_0=2.7$, $x_1=2.9$, 则

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

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_2 =2.8, 得

中心差商: $f'(2.7) \approx \frac{1}{2 \times 0.1} (f(2.8) - f(2.6)) = 14.9045$

问题:是不是步长越小,误差一定越小?

例子:用中心差商
$$G(h) = \frac{\sqrt{2+h} - \sqrt{2-h}}{2h}$$
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	<i>G(h)</i>
1	0.3660
0.5	0.3564
0.1	0.3535
0.05	0.3530
0.01	0.3500

h	<i>G(h)</i>
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!

```
4. 确定以下求职公式的参数使其有尽可能高的代数精度。
(1) ] fear dx & c [fears + fexes + fexes], x + x + x +
cas finh fens da x A.fens + A.fens + A.fehs ch > 有 括 左 常 数 s
解: (1) 年 f(x) = 1
     1. da & 30 = 1
     € fcxx = x
     1 x da = cca + 4 + 4 + 2 = 0
     4 jes = x*
     Six dx = c cxi + xi + xi , = +
     & fear sat
     | x'da = ccx + x + x = 0
    A. = 0
Icf) : [ fenda & acf) : $ [fe-$) + fco, + fc$)
4 fcx1 = x"
Ich = $ act = $
有当次付款申请店
(4) John for da & A. forbs + Aufcos + Aufchs
Q fens & !
Jah 1 da = A. + A. + A. = 46
& fan = A
 Jah x dx = - hA. + hAs = 0
A (4) = A
 Jah x dx = KA. + KA+ = 5 h
A = 5h
Icf: = Jah fenida a Qcf: = Th [afe-ho - fco; +afeh)]
全 fcxx = x*
  Id: ad: 0
全 f(x) = x*
  Id) = 약사 ad) = 박사
有力次化软精度
3. J. fanda & A.fa-1) + A.fa-$) + Asfa$
解: 对儿从尤准确
     -A. - $A. + $A. = 0
    A + TAL + TAS = #
 ⇒ | A. = ±
| A. = 0
     A. . .
Icfs = [ fcxsdx 2 + [fc-15 + 5fc+3]
全力にかまべ
Ich = 0 Qch = - #
至少上次代数标准
取 H(A) 不起过上次为项型
He-1) = fe-1)
H c = 1 c = 1 c = 1 c = 1 c = 1
东项 Ref, = Ich - Qef)
         = 1 (2) 1 (x+1) (x-1) dx
10. 由杨道为项立寻坐 向后差商公立及其余项
瓣,用左右追出耳:
  fica = fca - fca-h)
   x. : a-h
   L. CA > = fca - h + fca - - fca - h > ca - a + h >
   Lica = fear-fea-ho
   fica = 1 cas = fca, -fca-h)
   wcx) = c x - a + h > c x - a >
        = (4-05+ L(x-0)
   m,cx) = TCX-07+Y
   fica - 1'ca = ( " " " ca)
```