数值积分与微分

数值积分

胡建芳

中山大学　计算机学院

数值积分

实际问题当中常常要计算积分，有些数值方法，如微分方程和积分方程的求解，也都和积分计算相联系.

对定积分 $I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ 的被积函数 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 已知，在高等数学中可用牛顿—莱布尼兹公式

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

进行计算，但在工程计算和科学研究中，经常会遇到被积函数$f(x)$的下列一些情况:

数值积分

（1）$f(x)$复杂，求原函数困难，列如

$$f(x)=\sqrt{ax^2+bx+c}$$

（2）$f(x)$的原函数不能用初等函数形式表示，例如

$$f(x)=\frac{1}{\ln x},\quad e^{-x^2},\ \sin x^2,\quad \frac{\sin x}{x}$$

（3）$f(x)$的原函数虽然可用初等函数形式表示，但其原函数表示形式相当复杂，例如

$$f(x)=\frac{1}{1+x^4}$$

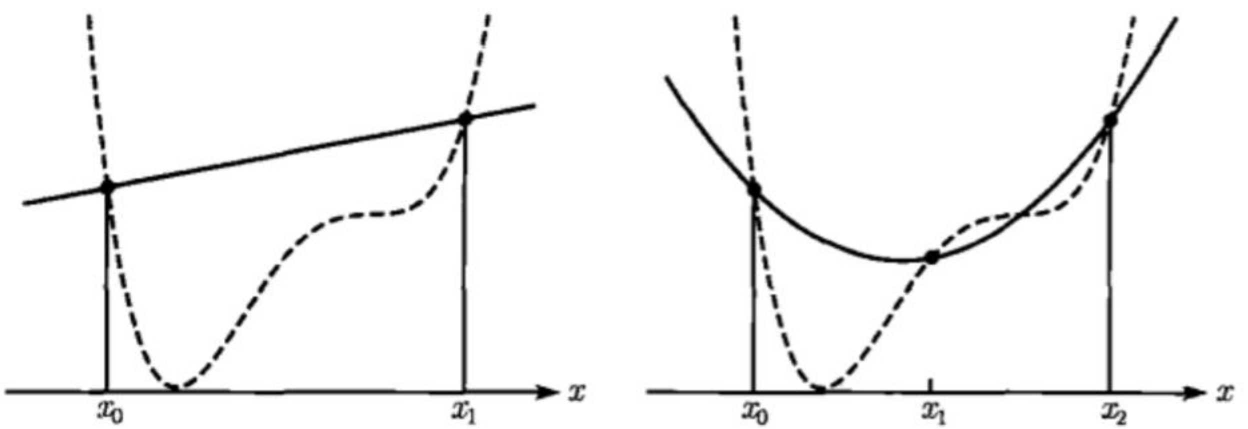
（4）$f(x)$本身没有解析表达式，其函数关系由表格或图形给出，列如为实验或测量数据.

数值积分

由积分中值定理，对连续函数$f(x)$，在区间$[a,b]$内至少存在一点ξ，使

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

只要对平均高度$f(\xi)$提供一种近似算法，便可相应地获得一种数值求积方法．即所谓矩形公式．



数值积分

例如, 用区间$[a, b]$两端点的函数值$f(a)$与$f(b)$的算术平均值作为$f(\xi)$的近似值, 可导出求积公式

$$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

这便是人们所熟知的梯形公式.

如果改用区间$[a, b]$的中点$c=(a+b)/2$处的函数值$f(c)$近似代替$f(\xi)$, 则又可导出所谓(中)矩形公式

$$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

数值积分

一般地，在区间$[a,b]$上适当选取点x_k $(k=0,1,\cdots,n)$，然后用 $f(x_k)$ 的加权平均值作为$f(\xi)$ 的近似值，可得到更为一般的求积公式

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

其中：点x_k叫求积节点，系数A_k叫求积系数. A_k仅与节点x_k的选取有关，而与被积函数$f(x)$无关.

求积公式的截断误差为

$$R(f)=I-I_n=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

$R(f)$ 又称为求积余项.

这类数值积分方法通常称为机械求积，其特点是将积分求值问题归结为函数值的计算，这就避开了牛-莱公式寻求原函数的困难.

数值积分

数值求积方法的近似方法，为要保证精度，我们自然希望求积公式能对“尽可能多”的函数准确地成立，这就提出了所谓代数精度的概念.

定义1 如果求积公式

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

(1) 对所有次数不超过m的多项式都精确成立;

(2) 至少对一个$m+1$次多项式不精确成立,

则称该公式具有m次代数精度.

数值积分

一般来说，代数精度越高，求积公式越好。

定理1　一个求积公式具有m次代数精度的充要条件是该求积公式：

(1) 对$x^k(k=0,1,\ldots,m)$精确成立；

(2) 对x^{m+1}不精确成立.

故一般地，要验证一个求积公式具有m次代数精度，只要令对于$f(x)=1, x, \cdots, x^m$求积公式精确成立等式就行.

数值积分

例1 验证梯形公式 $I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\approx\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$ 具有一次代数精度。

解 当 $f(x)=1$ 时，

$$左=\int_a^b 1\,\mathrm{d}x=b-a,$$

$$右=\frac{b-a}{2}[1+1]=b-a,$$

此时公式精确成立。

当 $f(x)=x$ 时，

$$左=\int_a^b x\,\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\left(b^2-a^2\right)$$

$$右=\frac{b-a}{2}[a+b]=\frac{b^2-a^2}{2}$$

公式也精确成立。

当 $f(x)=x^2$ 时，

$$左=\int_a^b x^2\,\mathrm{d}x=\frac{1}{3}\left(b^3-a^3\right)$$

$$右=\frac{b-a}{2}[a^2+b^2],$$

公式对x^2不精确成立.

故由定理1知，梯形公式的代数精度为1次.

数值积分

对于求积公式

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

给定$n+1$个互异的求积节点$x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}, x_n$，
令求积公式对$f(x)=1, x, \cdots, x^n$精确成立,即得

$$\begin{cases} A_0+A_1+\cdots+A_n=b-a \\ A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=\dfrac{b^2-a^2}{2} \\ \quad\cdots \\ A_0x_0^n+A_1x_1^n+\cdots+A_nx_n^n=\dfrac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} \end{cases}$$

求解该方程组即可确定求积系数A_k, 所得到的求积公式至少具有n次代数精度.

数值积分

例2 确定求积公式中的待定系数，使其代数精度尽量高，并指明求积公式所具有的代数精度.

$$I=\int_{-2h}^{2h}f(x)\,\mathrm{d}x\approx A_{-1}f(-h)+A_0f(0)+A_1f(h)$$

解 令$f(x)=1,x,x^2$代入公式两端并令其相等，得

$$\begin{cases}A_{-1}+A_0+A_1=4h\\ A_{-1}(-h)+A_1h=0\Rightarrow -A_{-1}+A_1=0\\ A_{-1}(-h)^2+A_1h^2=\dfrac{2}{3}(2h)^3\Rightarrow A_{-1}+A_1=\dfrac{16}{3}h\end{cases}$$

解得

$$A_{-1}=A_1=\frac{8}{3}h,\ A_0=-\frac{4}{3}h$$

数值积分

得求积公式为

$$I=\int_{-2h}^{2h}f(x)\,\mathrm{d}x\approx\frac{8}{3}hf(-h)-\frac{4}{3}hf(0)+\frac{8}{3}hf(h)$$

令 $f(x)=x^3$，得

$$0=\int_{-2h}^{2h}x^3\,\mathrm{d}x=\frac{8}{3}h[(-h)^3+h^3]=0$$

令 $f(x)=x^4$，得

$$\frac{64}{5}h^5=\int_{-2h}^{2h}x^4\,\mathrm{d}x\neq\frac{8}{3}h[(-h)^4+h^4]=\frac{16}{3}h^5$$

故求积公式具有3次代数精度.

数值积分：插值型积分

设给定一组节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n \le b$

且已知$f(x)$在这些节点上的函数值$f(x_k)$, 则可求得$f(x)$

的拉格朗日插值多项式(因为$L_n(x)$的原函数易求)

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) \quad \text{则 } f(x) \approx L_n(x)$$

其中$l_k(x)$为插值基函数, 取 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x$

即

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

$$(A_k = \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}\,x \quad k = 0,1,\cdots,n)$$

由上式确定系数的公式称为插值型求积公式。

数值积分

由插值余项定理，其求积余项为

$$R(f)=I-I_n=\int_a^b[f(x)-L_n(x)]\mathrm{d}x$$

$$=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)\mathrm{d}x \qquad 其中\ \xi=\xi(x)$$

如果求积公式是插值型的，按照插值余项式子，对于次数不超过n的多项式$f(x)$，其余项 $R(f)$ 等于零，因而这时求积公式至少具有n次代数精度.

数值积分

反之，如果求积公式至少具有n次代数精度，则它必定是插值型的. 事实上，这时求积公式对于插值基函数$l_k(x)$应准确成立，即有

$$\int_a^b l_k(x)dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x) = A_k .$$

注意到$l_k(x_j)=\delta_{kj}$，上式右端实际上即等于A_k，因而下面式子成立.

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}\,x \quad k = 0,1,\cdots,n.$$

数值积分

结论1 具有$n+1$个节点的数值求积公式

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

是插值型求积公式的充要条件为：该公式至少具有n次代数精度。

这时令$f(x)=1$代入又有结论为

结论2 对插值型求积公式的系数必有

$$\sum_{k=0}^{n}A_k=\int_a^b \mathrm{d}x=b-a.$$

数值积分：收敛性与稳定性

定义2 在求积公式$\sum A_k f(x_k)$中，若

$$\lim_{\substack{n\to\infty\\ h\to 0}}\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=\int_a^b f(x)dx.$$

其中$h=\max(x_i-x_{i-1})$，则称求积公式$\sum A_k f(x_k)$是**收敛的**.

在求积公式$\sum A_k f(x_k)$中，由于计算$f(x_k)$可能产生误差δ_k，实际得到 $\tilde{f}_k$ 即 $f(x_k)=\tilde{f}_k+\delta_k$ 记

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k),\quad I_n(\tilde{f})=\sum_{k=0}^{n} A_k \tilde{f}_k.$$

如果对任给小正数$\varepsilon>0$，只要误差$|\delta_k|$充分小就有

$$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right|=\left|\sum_{k=0}^{n} A_k[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right|\le\varepsilon,$$

它表明求积公式$\sum A_k f(x_k)$计算是**稳定的**，由此给出

定义3 对任给小正数ε>0，若存在δ>0，只要

$$\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right| \le \delta \ (k=0,1,\cdots,n)$$ 就有

$$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right| = \left|\sum_{k=0}^{n} A_k[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right| \le \varepsilon,$$

成立，则称求积公式$\Sigma A_k f(x_k)$是**稳定的**，

数值积分

定理2 若求积公式$\sum A_k f(x_k)$中所有系数$A_k>0$，则此求积公式是稳定的.

证明 对任给$\varepsilon>0$，若取$\delta=\varepsilon/(b-a)$，对所有k都有

$$\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|\le\delta\,(k=0,1,\cdots,n)$$

则有

$$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right|$$

$$\le\sum_{k=0}^{n}\left|A_k\right|\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|$$

$$\le\delta\sum_{k=0}^{n}A_k=\delta(b-a)=\varepsilon.$$

故求积公式是稳定的.

数值积分：牛顿-柯特斯公式

设将积分区间$[a,b]$划分成n等分,步长$h=\dfrac{b-a}{n}$,

求积节点取为$x_k=a+kh$ $(k=0,1,\cdots,n)$,由此构造插值型求积公式,则其求积系数为

$$A_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\prod_{j\neq k}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\mathrm{d}x\qquad(k=0,1,\cdots,n)$$

引入变换$x=a+th$,则有

$$A_k=h\int_0^n\prod_{\substack{j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}\mathrm{d}t=\frac{b-a}{n}\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j\neq k}}^{n}(t-j)\mathrm{d}t$$

$$(k=0,1,\cdots,n)$$

数值积分

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

记 $C_k^{(n)} = \dfrac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!} \displaystyle\int_0^n \prod_{j \neq k}^{n} (t-j)\,\mathrm{d}t \qquad (k=0,1,\cdots,n)$

则 $A_k = (b-a)C_k^{(n)}$，于是得求积公式

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$$

称为n 阶牛顿-柯特斯 (Newton-Cotes)公式, $C_k^{(n)}$ 称为柯特斯系数。

显然, 柯特斯系数与被积函数$f(x)$ 和积分区间$[a,b]$无关, 且为容易计算的多项式积分.

数值积分

常用的柯特斯系数表

n	$C_k^{(n)}$						
1	1/2	1/2					
2	1/6	4/6	1/6				
3	1/8	3/8	3/8	1/8			
4	7/90	32/90	12/90	32/90	7/90		
5	19/288	75/288	50/288	50/288	75/288	19/288	
6	41/840	216/840	27/840	272/840	27/840	216/840	41/840

数值积分

当n=1时，柯特斯系数为

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)dt = -\frac{1}{2}(t-1)^2\Big|_0^1 = \frac{1}{2},$$

$$C_1^{(1)} = \int_0^1 t dt = \frac{1}{2}t^2\Big|_0^1 = \frac{1}{2},$$

这时的牛顿-柯特斯公式为一阶求积公式，就是我们所熟悉的梯形公式，即

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

数值积分

当n=2时，柯特斯系数为

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6},$$

$$C_1^{(2)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6},$$

$$C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6},$$

相应的牛顿-柯特斯公式为二阶求积公式，就是辛普森(simpson)公式(又称为抛物形求积公式)，即

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

数值积分

$n=4$ 时的牛顿–柯特斯公式就特别称为柯特斯公式. 其形式是

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

式中 $x_k=a+kh$ $(k=0,1,2,3,4)$, $h=(b-a)/4$.

拟合

作业：

$x=a$ 到 $x=b$ 的 $f(x)$ 所定义的曲线弧长由积分 $\int_a^b \sqrt{1+f'(x)^2}\mathrm{d}x$ 给出. 取 $m=32$ 用复合 Simpson 法则近似以下曲线的长度:

(a) $y=x^3, x\in[0,1]$; (b) $y=\tan x, x\in[0,\frac{\pi}{4}]$; (c) $y=\arctan x, x\in[0,1]$.

m为区间等分的份数。

群名称：数值计算方法
群　号：1132838842

THE END