《数值分析》之

数值微分和数值积分

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

http://staff.ustc.edu.cn/~yxu/

重积分的计算

- 在微积分中，二重积分的计算是用化为累次积分的方法进行的。
- 计算二重数值积分也同样采用累次积分的计算过程。简化起见，我们仅讨论矩形区域上的二重积分。
- 对非矩形区域的积分，大多可以变化为矩形区域上的累次积分。

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)dydx$$

a,b,c,d 为常数，f 在D 上连续。将它变为化累次积分

$$\begin{aligned} & \int_a^b \int_c^d f(x,y)dydx \\ = & \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)dy \right) dx \\ = & \int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)dx \right) dy \end{aligned}$$

二重积分的复化梯形公式

- 做等距节点，x轴，y轴分别有$h=\frac{b-a}{m}$, $k=\frac{d-c}{n}$
- 将x作为常数,先计算$\int_c^d f(x,y)dy$,有

$$\int_c^d f(x,y)dy \approx \frac{k}{2}\left(f(x,y_0)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x,y_i)+f(x,y_n)\right)$$

二重积分的复化梯形公式

- 再将y作为常数，在x方向，计算上式的每一项的积分

$$\int_a^b f(x,y_0)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_0,y_0)+2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j,y_0)+f(x_m,y_0)\right)$$

$$\int_a^b f(x,y_n)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_0,y_n)+2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j,y_n)+f(x_m,y_n)\right)$$

$$\int_a^b \sum_{i=1}^{n-1} f(x,y_i) = \sum_{i=1}^{n-1}\int_a^b f(x,y_i)$$

$$\approx \sum_{i=1}^{n-1}\frac{h}{2}\left(f(x_0,y_i)+2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j,y_i)+f(x_m,y_i)\right)$$

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)dydx \approx \frac{hk}{4}\Bigg(f(x_0,y_0) + f(x_0,y_n) + f(x_m,y_0) + f(x_m,y_n)$$

$$+ 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j,y_0) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j,y_n) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_0,y_i) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_n,y_i)$$

$$+ 4\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j,y_i)\Bigg)$$

- 系数，在积分区域的四个角点为1/4，4个边界为1/2，内部节点为1
- 误差

$$-\frac{(b-a)(d-c)}{12}\left(h^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}f(\xi,\eta) + k^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}f(\bar{\xi},\bar{\eta})\right)$$

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)dydx \approx hk \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{m} \omega_{i,j} f(x_j, y_i)$$

- 系数

$$U = \{u_0, u_1, \cdots, u_m\} = \{\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \cdots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3}\}$$
$$V = \{v_0, v_1, \cdots, v_n\} = \{\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \cdots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3}\}$$
$$\omega_{i,j} = u_i v_j$$

- 误差

$$-\frac{(b-a)(d-c)}{180}\left(h^4 \frac{\partial^4}{\partial x^4} f(\xi, \eta) + k^4 \frac{\partial^4}{\partial y^4} f(\bar{\xi}, \bar{\eta})\right)$$

- 主要考虑如下几类奇异积分
  1. 被积函数$f(x)$在某点具有有限跳跃，即存在$c \in [a, b]$，$f(c+) - f(c-)$为非零有限值
  2. 无界函数的积分
  3. 积分区间无界
- 上述函数的积分不能通过直接采用多项式插值逼近原函数，然后用多项式的积分代替被积函数的积分，因为插值误差的界是无限的

- 令c为间断点，那么

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx=\int_a^c f(x)dx+\int_c^b f(x)dx$$

此时可以在$[a,c-]$和$[c+,b]$上应用前面的数值积分公式，以得到$I(f)$的近似值

- 当在积分区间中具有有限个此类间断点时，可以类似处理
- 当间断点不预先知道时，需要对函数的图形进行分析，或者采用自适应积分的方法以确定间断点的存在

- 假设$\lim\limits_{x\to a+} f(x)=\infty$ (当f在$x\to b-$时为无穷可类似处理；如果是在区间内点为无界，那么可以从该内点把区间分开，再分开处理)
- 假设

$$f(x)=\frac{\phi(x)}{(x-a)^\mu},\quad 0\leqslant\mu<1$$

这里$\phi(x)$以M为界

- 那么

$$|I(f)|\leqslant M\lim_{t\to a+}\int_t^b\frac{1}{(x-a)^\mu}dx=M\frac{(b-a)^{1-\mu}}{1-\mu}$$

- 对于任意ε: $0<\varepsilon<b-a$, 积分可写为$I(f)=I_1+I_2$,

$$I_1=\int_a^{a+\varepsilon}\frac{\phi(x)}{(x-a)^\mu}dx,\qquad I_2=\int_{a+\varepsilon}^{b}\frac{\phi(x)}{(x-a)^\mu}dx$$

- I_2为正常的积分，按通常的数值积分公式计算
- 为了计算I_1, 把$\phi(x)$在$x=a$点进行Taylor展开：

$$\phi(x)=\Phi_p(x)+\frac{(x-a)^{p+1}}{(p+1)!}\phi^{(p+1)}(\xi_x),\quad p\geqslant 0$$

其中

$$\Phi_p(x)=\sum_{k=0}^{p}\frac{(x-a)^k}{k!}\phi^{(k)}(a)$$

- 从而有

$$I_1 = \varepsilon^{1-\mu} \sum_{k=0}^{p} \frac{\varepsilon^k \phi^{(k)}(a)}{k!(k+1-\mu)} + \frac{1}{(p+1)!} \int_a^{a+\varepsilon} (x-a)^{p+1-\mu} \phi^{(p+1)}(\xi_x) dx$$

- 因此当用第一项(有限和)代替I_1时，对应的误差E_1有如下估计

$$|E_1| \leqslant \frac{\varepsilon^{p+2-\mu}}{(p+1)!(p+2-\mu)} \max_{a \leqslant x \leqslant a+\varepsilon} |\phi^{(p+1)}(x)|$$

- 对于固定的p, 右端项为ε的增函数。而当$\varepsilon < 1$，并且$\phi^{(p+1)}(x)$ 随着p的增加，变化不是很快时，那么右端项随着p增加而减小
- 实际应用时，在确定计算I_1和I_2的数值公式参数时，需要保证两者的误差几乎相当

- 考虑积分

$$I(f)=\int_a^{\infty} f(x)dx$$

- $I(f)$存在的一个充分条件是

$$\exists\rho>0, \text{s.t.} \quad \lim_{x\to+\infty} x^{1+\rho}f(x)=0$$

第一种方法

- 为了计算$I(f)$, 把它分为两部分：$I(f)=I_1+I_2$, 其中

$$I_1=\int_a^c f(x)dx, \qquad I_2=\int_c^\infty f(x)dx$$

  这里要选择恰当的c，使得I_2对整个积分的贡献可以被忽略。即如果希望数值计算出来的积分值与$I(f)$的误差不超过δ, 那么要选择c使得$|I_2|\leqslant\delta/2$
- 作业：在计算积分

$$\int_0^\infty \cos^2(x)e^{-x}dx$$

  时为了使得误差不超过$\delta=10^{-3}$, 那么c应取什么值?

第二种方法

- 把积分在$c > 0$点分开，此时不需要保证第二个积分足够小
- 为了计算I_2, 引入变量代换$x = 1/t$:

$$I_2 = \int_c^{\infty} f(x)dx = \int_0^{1/c} \frac{f(1/t)}{t^2} dt := \int_0^{1/c} g(t)dt$$

- 如果$g(t)$在区间$[0, 1/c]$内连续，那么可以采用通常的数值积分方法；否则可以采用无界函数的积分方法

- 还有一种方法，需要用到正交多项式，放在Gauss积分一节中讲述

中国科学技术大学