数值积分和数值微分

Lucian Xu (app1eDog)

2023 年 6 月 2 日

数值积分和数值微分

对于定积分 $I(f)=\int_a^b f\mathrm{d}x$, 一般的数值积分的公式为:

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

插值型求积公式

插值型求积公式

给定 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$, 已知 $f(x)$ 在这些点的函数值. 根据插值理论, $f(x)$ 的 n 次插值多项式 $L_n(x)$ 为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^n f(x_k)\prod_{j=0,j\neq k}^n \frac{x-x_j}{x_k-x_j}=\sum_{k=0}^n f(x_k)I_k(x).$$

这时

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \\ &\approx \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=0}^n \left(\int_a^b I_k(x)\mathrm{d}x\right) f(x_k) \quad := I_n(f), \end{aligned}$$

其中 $A_k=\int_a^b I_k(x)\mathrm{d}x$.

Def 5.1 积分系数形如上述 $A_k=\int_a^b I_k(x)\mathrm{d}x$ 的积分公式被称为插值型求积公式.

记 $R(f)=I(f)-I_n(f)$, 被称为插值型求积公式的截断误差, 根据插值多项式的余项可以估计截断误差为

$$R(f)=I(f)-I_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^n (x-x_i)\mathrm{d}x, \xi\in(a,b).$$

Def 5.2 如果 x_k 是等距的, 则对应的插值型求积公式为 Newton-Cotes 公式.

这时

$$A_k=\int_a^b I_k(x)\mathrm{d}x=(b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!\cdot(n-k)!}\int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^n (t-j)\mathrm{d}t, k=0,1,\cdots,n.$$

再次进行记号的简化, 设

$$C_{n,k}=\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!\cdot(n-k)!}\int_0^n \prod_{j=0,j\neq k}^n (t-j), k=0,1,\cdots,n,$$

则 Newton-Cotes 公式可以写成

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

给出一些特殊取值的情形: 1. 2 个点的插值型求积公式, 这时 $n=1, h=b-a$,

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

称为梯形公式. 2. 3 个点的插值型求积公式, 这时 $n=2, h=\frac{b-a}{2}$,

$$S(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right),$$

称为 Simpson 公式. 3. 5 个点的插值型求积公式, 这时 $n=4, h=\frac{b-a}{4}$,

$$C(f) = \frac{b-a}{90}\left(7f(a)+32f\left(\frac{3a+b}{4}\right)+12f\left(\frac{a+b}{2}\right)+32f\left(\frac{a+3b}{4}\right)+7f(b)\right),$$

称为 Cotes 公式.

代数精度

$n+1$ 个点的插值型公式求积公式的代数精度至少是 n.

Th 5.3

求积公式 $I_n(f) = \sum\limits_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的代数精度至少是 n 等价于该求积公式是插值型求积公式.

梯形公式, Simpson 公式和 Cotes 公式

巴拉巴拉一堆计算, 结论大概是

$$\begin{aligned} R_T(f) &= const_T \cdot (b-a)^3 f^{(2)}(\xi), xi \in (a,b), \\ R_S(f) &= const_S \cdot (b-a)^5 f^{(4)}(\xi), xi \in (a,b), \\ R_C(f) &= const_C \cdot (b-a)^7 f^{(6)}(\xi), xi \in (a,b). \end{aligned}$$

复化求积公式

将区间 $[a,b]$ 等分, 每一个区间的积分分开计算, 也就是 $I(f) = \sum\limits_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x$.

复化梯形公式

对每一个小区间的积分应用梯形公式, 就得到了复化梯形公式.

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

先说先验误差, 不妨设 $f^{(2)}(x)$ 有界, 对于给定精度 ε, 只要 h 满足

$$\frac{b-a}{12}Mh^2\leqslant\varepsilon,$$

就会有

$$|I(f)-T_n(f)|\leqslant\varepsilon.$$

后验误差是在倍增的基础上得到的, 对于给定精度 ε, 如果

$$\frac{1}{3}|T_{2n}(f)-T_n(f)|\leqslant\varepsilon,$$

就会有

$$|I(f)-T_n(f)|\leqslant\varepsilon.$$

接着有一个递推式

$$T_{2n}(f)=\frac{1}{2}T_n(f)+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right).$$

复化 Simpson 公式

记 $x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left(x_k+x_{k+1}\right)$, 对每一个小区间应用 Simpson 公式, 就得到了复化 Simpson 公式.

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

这时先验误差和后延误差的条件分别变成了

$$\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4M\leqslant\varepsilon,$$

以及

$$\frac{1}{15}|T_{2n}(f)-T_n(f)|\leqslant\varepsilon,$$

这里的 M 是对 $f^{(4)}$ 的控制.

复化 Cotes 公式

记 $x_{k+\frac{1}{4}}=\frac{1}{4}\left(3x_k+x_{k+1}\right), x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left(x_k+x_{k+1}\right), x_{k+\frac{3}{4}}=\frac{1}{4}\left(x_k+3x_{k+1}\right)$, 对每一个小区间应用 Cotes 公式, 就得到了复化 Cotes 公式.

$$C_n(f)=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{90}\left(7f(x_k)+32f\left(x_{k+\frac{1}{4}}\right)+12f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)+32f\left(x_{k+\frac{3}{4}}\right)+7f(x_{k+1})\right).$$

这时先验误差和后延误差的条件分别变成了

$$\frac{b-a}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 M\leqslant\varepsilon,$$

以及

$$\frac{1}{63}|T_{2n}(f)-T_n(f)|\leqslant\varepsilon,$$

这里的 M 是对 $f^{(6)}$ 的控制.

复化求积公式的阶数

Def 5.4

如果存在正整数 p 和非负常数 C 使得

$$\lim_{h\to 0}\frac{I(f)-I_n(f)}{h^p}=C,$$

则称公式 $I_n(f)$ 是 p 阶的.

Romberg 求积法

以梯形公式为例, 在计算后延误差的时候有 $I(f)-T_{2n}(f)\approx\frac{1}{3}(T_{2n}(f)-T_n(f))$, 上式可以写成

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

这表明可以用上式右边近似 $I(f)$.

计算发现

$$
\begin{aligned}
\frac{4}{3}T_{2n}(f)-\frac{1}{3}T_n(f) &= \frac{4}{3}\sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{h}{4}\left(f(x_k)+f(x_{k+\frac{1}{2}})\right)+\frac{h}{4}\left(f(x_{k+\frac{1}{2}}+f(x_{k+1}))\right)\right) \\
&\quad -\frac{1}{3}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}\left(f(x_k)+f(x_{k+1})\right) \\
&= \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left(f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}}+f(x_{k+1}))\right) \\
&= S_n(f).
\end{aligned}
$$

也就是说对梯形公式进行 Romberg 求积即可得到 Simpson 公式. 同样地, 对 Simpson 公式进行 Romberg 求积会得到 Cotes 公式. 接着对 Cotes 公式进行 Romberg 求积得到的被称为 Romberg 公式, 其是 8 阶的, 从而可以得到

$$
I(f)-R_{2n}(f)\approx\frac{1}{255}(R_{2n}(f)-R_n(f)).
$$

区间等分数 (n)	$T_n(f)$		$S_n(f)$		$C_n(f)$		$R_n(f)$
1	T_1		S_1		$C_1(f)$		$R_1(f)$
	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$
2	T_2		S_2		$C_2(f)$		$R_2(f)$
	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$
4	T_4		S_4		$C_4(f)$		$\vdots$
	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$	$\nearrow$	$\downarrow$		
8	T_8		S_8		$\vdots$		
	$\downarrow$	$\nearrow$	$\vdots$				
16	T_{16}						
	$\vdots$						

Gauss 求积公式

Def 5.5

如果 $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$ 的代数精度为 $2n+1$, 那么这个求积公式为 Gauss-Legendre 公式, 对应的点 x_k 称为 Gauss 点.

Th 5.6

$I_n(f)$ 是计算积分 $I(f)$ 的插值型求积公式, 记

$$W_{n+1}=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$

那么求积公式 $I(f)\approx I_n(f)$ 是 Gauss 求积公式 (代数精度 $2n+1$ 或 $\{x_k\}$ 为 Gauss 点) $\Leftrightarrow W_{n+1}$ 与任意一个次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 正交.

Gauss - Legendre 求积公式

Def 5.7

正交多项式. 正交多项式 $\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$.

Th 5.8

设 $\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ 为区间 $[a,b]$ 上的正交多项式序列, 那么对任意的 n, 多项式

$$g_0(x),g_1(x),\cdots,g_n(x)$$

都线性无关. 那么它们构成的 n 次多项式空间的一组基, 从而 $g_n(x)$ 与任意一个次数不超过 $n-1$ 的多项式正交.

Th 5.9

设 $\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ 为区间 $[a,b]$ 上的正交多项式序列, 则 $g_n(x)$ 在 (a,b) 上有 n 个不同的零点.

(why?)

Def 5.10

Legendre 多项式:

$$P_n(t)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n(t^2-1)^n}{\mathrm{d}t},n=0,1,2,\cdots$$

Th 5.11

Legendre 多项式序列是 $[-1,1]$ 上的正交多项式序列.

区间 $[-1,1]$ 上的 Gauss 公式

根据前面 Legendre 多项式的介绍, 可以想到 $n+1$ 次 Legendre 多项式 $P_{n+1}(t)$ 的零点就是 Gauss 点. 那么求积系数为

$$A_k=\int_{-1}^{1}\prod_{j=0,j\neq k}^{n}\frac{t-t_j}{t_k-t_j}\mathrm{d}t,k=0,1,\cdots,n.$$

1. 当 $n=0$ 时, $t_0=0, A_0=2$, 得到 1 个节点的 Gauss 公式

$$\int_{-1}^{1} g(t)\mathrm{d}t \approx 2g(0).$$

2. 当 $n=1$ 时, $t_0=-\frac{1}{\sqrt{3}}, t_1=\frac{1}{\sqrt{3}}, A_0=1, A_1=1$, 得到 2 个节点的 Gauss 公式

$$\int_{-1}^{1} g(t)\mathrm{d}t \approx g\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+g\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

3. 当 $n=2$ 时, $t_0=-\sqrt{\frac{3}{5}}, t_1=0, t_2=\sqrt{\frac{3}{5}}, A_0=\frac{5}{9}, A_1=\frac{8}{9}, A_2=\frac{5}{9}$, 得到 3 个节点的 Gauss 公式

$$\int_{-1}^{1} g(t)\mathrm{d}t \approx \frac{5}{9}g\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+\frac{8}{9}g\left(0\right)+\frac{5}{9}g\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right).$$

区间 $[a,b]$ 上的 Gauss 公式

只需要想办法把区间 $[-1,1]$ 迁移变成区间 $[a,b]$ 即可.

考虑变换 $x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$, 可得

$$I(f)=\int_{-1}^{1}\frac{b-a}{2}f\left(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t\right)\mathrm{d}t,$$

接着由 $[-1,1]$ 上的 Gauss 公式可以得到 $[a,b]$ 上的 Gauss 公式

$$\begin{aligned} I_n(f) &= \sum_{k=0}^{n}\frac{b-a}{2}A_k' f\left(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t_k\right) \\ &= \sum_{k=0}^{n} A_k f\left(x_k\right). \end{aligned}$$

Gauss 公式的截断误差

设 $f(x)\in C^{2n+2}[a,b]$, 截断误差为

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b f(x)-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k) \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b W_{n+1}^2(x)\mathrm{d}x, \end{aligned}$$

其中 $W_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j), \xi \in (a, b)$.

Th 5.12

Gauss 公式的代数精度最多 $2n + 1$.

Gauss 公式的稳定性和收敛性

Th 5.13

Gauss 公式的求积系数 $A_k > 0$.

先说稳定性.

在利用求积公式时, $f(x_k)$ 往往是存在误差的, 实际上得到的是 $I_n(\tilde{f}) = \sum_{k=0}^{n} A_k \tilde{f}_k$.

Def 5.14,

对于求积公式 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$, 其近似值 $I_n(\tilde{f}) = \sum_{k=0}^{n} A_k \tilde{f}_k$, 如果对任意 $\varepsilon > 0$, 存在 $\delta > 0$, 当 $\max_{0 \leqslant k \leqslant n} |f(x_k) - \tilde{f}(x_k)| < \delta$ 时, 有 $|I_n(f) - I_n(\tilde{f})| < \varepsilon$, 就称这个求积公式是稳定的.

Th 5.15

Gauss 公式是稳定的.

(Why?)

再说收敛性.

Def 5.16

给定求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k^{(n)} f(x_k^{(n)})$, 如果任意 $\varepsilon > 0$, 存在正整数 $N > 0$, 当 $n > N$, 有 $|I(f) - I_n(f)| < \varepsilon$, 则称该求积公式收敛.

Th 5.17

设 $f(x) \in C[a, b]$, 则 Gauss 公式收敛.

(Why?)

带权积分

积分

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

称为带权积分, 其中 $\rho(x)$ 称为权, 并且要满足如下三个条件:

1. $\rho(x) \geqslant 0, x \in (a,b)$,
2. $\int_a^b \rho(x)\mathrm{d}x > 0$,
3. 对 $k=0,1,2,\cdots$, 积分 $\int_a^b x^k \rho(x)\mathrm{d}x$ 存在.

依旧有代数精度的定义, 代数精度为 $2n+1$ 时依旧被称为 Gauss 公式.

常用带权积分:

1. Gauss-Chebyshev 求积公式

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{n+1}\sum_{k=0}^{n} f(x_k).$$

其中 x_k 是 $n+1$ 次 Chebyshev 多项式的零点.

2. Gauss-Hermite 求积公式

$$\int_{-1}^{1} e^{-x^2} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

其中 x_k 是 $n+1$ 次 Hermite 多项式的零点.

重积分的近似计算

自然是将重积分化为累次积分对 x, y 分别利用前面的方法.

数值微分

向前差商:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h},$$

向后差商:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h},$$

中心差商:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h},$$

将 $f(x_0+h)$ 与 $f(x_0-h)$ 在 x_0 处 Taylor 展开可以得到

$$\begin{aligned}
f'\left(x_0\right)-\frac{f\left(x_0+h\right)-f\left(x_0\right)}{h} &= -\frac{h}{2} f''\left(x_0\right)+O\left(h^2\right), \\
f'\left(x_0\right)-\frac{f\left(x_0\right)-f\left(x_0-h\right)}{h} &= \frac{h}{2} f''\left(x_0\right)+O\left(h^2\right), \\
f'\left(x_0\right)-\frac{f\left(x_0+h\right)-f\left(x_0-h\right)}{2h} &= -\frac{h^2}{6} f'''\left(x_0\right)+O\left(h^3\right).
\end{aligned}$$

单单从步长 h 来看, 步长越小自然理论结果越准确, 但是从计算角度来看会造成有效数字的严重损失.

插值型求导公式

建立插值多项式 $p_n(x) \approx f(x)$, 并且取

$$f'(x) \approx p_n'(x)$$

得到的就是插值型求导公式.

截断误差为

$$f'(x)-p_n'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} W_{n+1}'(x)+\frac{W_{n+1}(x)}{(n+1)!} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d} x} f^{(n+1)}(\xi),$$

对于插值节点来说, 截断误差只有前面一项.

两点插值

插值结果为

$$p_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1} f\left(x_0\right)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0} f\left(x_1\right),$$

记 $h=x_1-x_0$, 可得

$$p_1'(x)=\frac{1}{h}(-f(x_0)+f(x_1)),$$

带余项的两点公式为

$$\begin{aligned}
f'\left(x_0\right) &= \frac{1}{h}\left[f\left(x_1\right)-f\left(x_0\right)\right]-\frac{h}{2} f''\left(\xi_0\right),\left(x_0<\xi_0<x_1\right), \\
f'\left(x_1\right) &= \frac{1}{h}\left[f\left(x_1\right)-f\left(x_0\right)\right]-\frac{h}{2} f''\left(\xi_1\right),\left(x_0<\xi_1<x_1\right).
\end{aligned}$$

三点差值

插值结果为

$$p_2(x)=\frac{\left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right)}{\left(x_0-x_1\right)\left(x_0-x_2\right)} f\left(x_0\right)+\frac{\left(x-x_0\right)\left(x-x_2\right)}{\left(x_1-x_0\right)\left(x-x_2\right)} f\left(x_1\right)+\frac{\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)}{\left(x_2-x_0\right)\left(x_2-x_1\right)} f\left(x_2\right),$$

记 $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$, 可得带余项的三点公式为

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)\,, (x_0 < \xi_0 < x_2)\,,\\
f'(x_1) &= \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi_1)\,, (x_0 < \xi_1 < x_2)\,,\\
f'(x_2) &= \frac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_2)\,, (x_0 < \xi_2 < x_2)\,.
\end{aligned}
$$