第六章 数值微分与积分

王志明

wangzhiming@ies.ustb.edu.cn

本 章 内 容

- 6.1 数值微分
- 6.2 牛顿-柯特斯求积公式
- 6.3 复合求积法
- 6.4 龙贝格求积法
- 6.5 高斯求积公式

§ 6.1 数值微分

§ 6.1.1 差商公式

$$f'(a)=\lim_{h\to 0}\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

近似为：

向前差商：$$f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

向后差商：$$f'(a)\approx\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$$

中心差商：$$f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$$

泰勒展开： $f(a \pm h) = f(a) \pm hf'(a) + \frac{h^2}{2!} f''(a) \pm \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(a) + \dots$

$$G_+(h) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = f'(a) + \frac{h}{2!} f''(a) + \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(a) + \dots$$

$$G_-(h) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h} = f'(a) + \frac{h}{2!} f''(a) + \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(a) + \dots$$

$$G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} = f'(a) + \frac{h^2}{3!} f^{(3)}(a) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(a) + \dots$$

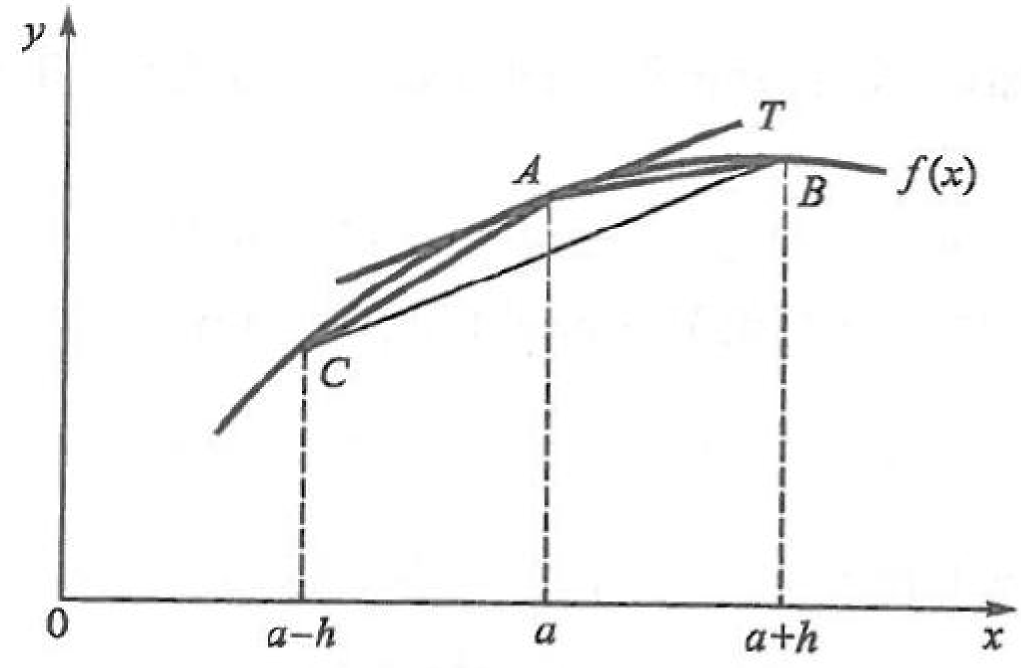

图 6－1　中点方法

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

从截断误差来看，步长越小越好；从舍入误差来看，步长不宜太小。

【例6.1】用变步长的中点法求e^x在$x=1$的导数值，设取$h=0.8$起算。

$$G(h) \approx \frac{e^{1+h} - e^{1-h}}{2h}$$

0	0.8000	3.0176529
1	0.4000	2.7913515
2	0.2000	2.7364400
3	0.1000	2.7228146
4	0.0500	2.7194146
5	0.0250	2.7185650
6	0.0125	2.7183526
7	0.0063	2.7182995
8	0.0031	2.7182863
9	0.0016	2.7182829

§ 6.1.2 中点方法的加速

$$G(h) = f'(a) + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \cdots$$

$$G\left(\frac{h}{2}\right) = f'(a) + \frac{a_1}{4} h^2 + \hat{a}_2 h^4 + \hat{a}_3 h^6 + \cdots$$

$$\boxed{G_1(h) = \frac{4}{3} G\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3} G(h)}$$

$$G_1(h) = f'(a) + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots$$

进一步，令：

$$\boxed{G_2(h) = \frac{16}{15} G_1\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{15} G_1(h)}$$

$$G_2(h) = f'(a) + \gamma h^6 + \cdots$$

$$\boxed{G_3(h) = \frac{64}{63} G_2\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{63} G_2(h)}$$

【例6.2】利用加速算法计算例e^x在$x=1$的导数值。

h	G(h)	$G_1(h)$	$G_2(h)$	$G_3(h)$
0.8	3.0176529	2.7159176	2.7182841	2.7182818
0.4	2.7913515	2.7181362	2.7182819	
0.2	2.7364400	2.7182728		
0.1	2.7228146			

§6.1.3 插值型的求导公式

利用$f(x)$在$x_k\,(k=0,1,\ldots,n)$处的函数值，求n次插值多项式$p_n(x)$,计算导数作为近似：

$$f'(x) \approx p'_n(x) \qquad E(x)=\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$$

$$f'(x)-p'_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'(x)+\frac{\omega(x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)$$

其中 $\omega(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$

3节点$x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$情况：

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

$$p_2(x_0+th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2) f(x_0) - t(t-2) f(x_1) + \frac{1}{2} t(t-1) f(x_2)$$

两边对**x**求导得：

$$p'_2(x_0+th) = \frac{1}{2h}[(2t-3) f(x_0) - 4(t-1) f(x_1) + (2t-1) f(x_2)]$$

令t=0、1、2，得到：

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

$$\boxed{f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]}$$

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

高阶导数的微分近似：

$$f^{(k)}(x) \approx p_n^{(k)}(x)$$

$$p''_2(x_0+th) = \frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]$$

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

§6.2 牛顿-柯特斯求积公式

§6.2.1 插值型求积公式及Cotes系数

设$f(x)\in c[a,b]$，求定积分$\mathrm{I}=\int_a^b f(x)dx$的近似值。

将[a,b]n等分，步长为h=(b-a)/n。取节点:

$$x_k = a + kh \quad (k = 0,1,\ldots,n)$$

f(x)可表示为**Lagrange**插值多项式及其余项之和：

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

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)dx\right)f(x_k)+\int_a^b R_n(x)dx$$

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

其中 $A_k=\int_a^b\left(\prod_{j=0,j\neq k}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)dx$

令：

$$\boxed{I_n=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)}$$

$$R(I_n)=\int_a^b R_n(x)dx=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi_x)\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)dx$$

则：

$$\boxed{I=I_n+R(I_n)}$$

在节点等距时，**x=a+th**：

$$x - x_j = (t - j)h \quad (j = 0,1,\ldots,n且j \neq k)$$

$$x_k - x_j = (k - j)h \quad (j,k = 0,1,\ldots,n且j \neq k)$$

$$A_k = \frac{h(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j=0,\, j\neq k}^{n}(t-j)dt = (b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j=0,\, j\neq k}^{n}(t-j)dt$$

定义**Cotes**系数：

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

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

n=1时：

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2} \qquad C_1^{(1)} = \int_0^1 t dt = \frac{1}{2}$$

$$\boxed{I_1 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]}$$

n=2时：

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^1 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6} \qquad C_1^{(2)} = -\frac{1}{2}\int_0^1 t(t-2)dt = \frac{4}{6}$$

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

$$\boxed{I_2 = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]}$$

表 6－2　Cotes 系数

n	C_0^n	C_1^n	C_2^n	C_3^n	C_4^n	C_5^n	C_6^n	C_7^n	C_8^n
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$		
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

在**Newton-Cotes**公式中，最重要的是**n=1、2、4**时的**3**个公式。

梯形公式：

$$\boxed{T = I_1 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]}$$

Simpson公式：

$$\boxed{S = I_2 = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]}$$

Cotes公式：

$$\boxed{C = I_4 = \frac{b-a}{90}[7f(a) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(b)]}$$

【例6.3 】用梯形公式和Simpson公式计算幂指数x^μ (μ=0, 1, 2, 3, 4)和指数函数e^x在区间[-2,0]上的积分。

$$T = I_1 = f(-2) + f(0)$$

$$S = I_2 = \frac{1}{3}(f(-2) + 4f(-1) + f(0))$$

表 6-3 计算结果

函数 $f(x)$	1	x	x^2	x^3	x^4	e^x
精确值	2	−2	2.667	−4	6.4	0.865
梯形值	2	−2	4	−8	16	1.135
Simpson 值	2	−2	2.667	−4	6.667	0.869

定义6.1 如果某个求积公式，对于任何次数不超过m的代数多项式都能准确成立，但对于m+1次代数多项式不能准确成立，则称该求积公式具有**m次代数精度**。

梯形公式、**Simpson**公式、**Cotes**公式的代数精度分别为**1**阶、**3**阶和**5**阶。

$$f(x)=a_0+a_1x$$

$$I_1=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{b-a}{2}[a_1(a+b)+2a_0]$$

$$\int_a^b (a_0+a_1x)dx=\frac{b-a}{2}[a_1(a+b)+2a_0]$$

§ 6.2.2 低阶Newton-Cotes公式的余项

积分中值定理(g(x)不变号)：

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx$$

1. 梯形公式的余项R(T)

$$R(T) = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx$$

$$\omega_2(x) = (x-a)(x-b)\text{在}(a,b)\text{不变号}$$

$$\boxed{R(T) = \frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)}$$

记h=b-a　　　　**O(h³)**

2. Simpson公式的余项R(S)

$$R(S)=\frac{1}{3!}\int_a^b f'''(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)dx$$

借助Hermite插值公式可以推出：

$$\boxed{R(S)=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \quad \eta\in(a,b)}$$

O(h⁵)

3. Cotes公式的余项R(C)

$$\boxed{R(C)=\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \quad \eta\in(a,b)}$$

$O(h^7)$

§ 6.2.3 Newton-Cotes公式的稳定性

$$由\int_a^b 1dx = b-a = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}, 得\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} \equiv 1$$

$$计算值：\bar{I}_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} \bar{f}(x_k)$$

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

$$令：\varepsilon_k = f(x_k) - \bar{f}(x_k)$$

$$误差:(b-a)\sum_{k=0}^{n}(f(x_k)-\bar{f}(x_k))C_k^{(n)} = (b-a)\sum_{k=0}^{n}\varepsilon_k C_k^{(n)}$$

$$记：\varepsilon = \max_k|\varepsilon_k|$$

当$C_k^{(n)}$均为正时：

$$\left|I_n - \bar{I}_n\right| = \left|(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} \varepsilon_k\right| \le (b-a)\sum_{k=0}^{n} |C_k^{(n)}| \cdot |\varepsilon_k|$$

$$\le (b-a)\varepsilon \sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = \varepsilon(b-a)$$ 稳定！

当$C_k^{(n)}$有正有负时：

$$(b-a)\varepsilon \sum_{k=0}^{n} |C_k^{(n)}| > \varepsilon(b-a)$$ 可能不稳定！