现代数值计算方法

第五章 数值积分和数值微分

Back
Close

第五章 数值积分和数值微分

在数学分析中, 积分值是通过找原函数的办法得到的. 我们知道找一个函数的原函数并非一件容易的事情, 许多函数甚至不存在初等函数表示的原函数. 因此有必要研究积分的数值计算问题.

前一章指出, 如果所给函数 $f(x)$ 比较复杂, 可以构造插值多项式 $L_n(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似表达式, 然后通过处理 $L_n(x)$ 得到 $f(x)$ 的近似结果. 本章根据这一观点讨论数值积分和数值微分.

§5.1 插值型求积公式

我们用插值多项式 $L_n(x)$ 替换积分

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

中的被积函数 $f(x)$, 然后计算

$$I = \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x \tag{5.1}$$

作为积分的近似值, 这样建立的求积公式称为插值型求积公式.

用插值多项式 $L_n(x)$ 的表达式

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

代入 (5.1) 得

$$I = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \tag{5.2}$$

Back
Close

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}\mathrm{d}x \tag{5.3}$$

$$= \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}\mathrm{d}x$$

称为求积系数, 而 $x_k\,(k=0,1,\cdots,n)$ 则称为求积节点.

一般来说, I 的值都不等于 I^* 的精确值, 它们的差称为求积公式 (5.2) 的余项, 也叫做截断误差. 由插值余项公式知, 对于插值型求积公式 (5.3), 其余项为

$$R[f] = I^* - I = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x, \tag{5.4}$$

其中 ξ 与变量 x 有关, 且 $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$.

通常用所谓的代数精度表示求积公式的误差. 下面给出代数精度的定义.

定义 5.1 如果求积公式 (5.2) 对于一个不超过 m 次的多项式是准确的, 即 $R[f]=0$; 而对于 $m+1$ 次以上的多项式是不准确的, 则称求积公式 (5.2) 的代数精度为 m.

利用代数精度的概念, 可以得到下面的结论.

定理 5.1 求积公式 (5.2) 是插值型求积公式的充要条件是: 它的代数精度至少为 n.

证 必要性. 若公式 (5.2) 是插值型求积公式, 则 (5.4) 成立. 故对于次数不超过 n 的多项式 $f(x)$, 其余项 $R[f]=0$, 故此时求积公式 (5.2) 的代数精度至少为 n.

充分性. 若求积公式 (5.2) 的代数精度至少为 n, 则它对于插值基

Back
Close

函数 $l_k(x)\,(k=0,1,\cdots,n)$ 是准确的, 即有

$$\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^{n}A_j l_k(x_j),$$

由于 $l_k(x_j)=\delta_{kj}$, 上式右边实际上就等于 A_k, 即

$$A_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$$

成立, 故 (5.2) 是插值型求积公式. □

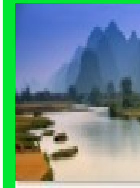
例 5.1 证明下面的求积公式具有 3 次代数精度:

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{1}{2}\big[f(0)+f(1)\big]-\frac{1}{12}\big[f'(1)-f'(0)\big]. \tag{5.5}$$

证 (1) 令 $f(x)=1$, 代入求积公式 (5.5) 得, 左边$=1=$右边.

(2) 令 $f(x)=x$, 代入求积公式 (5.5) 得,

$$\text{左边}=\int_0^1 x\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\;=\;\text{右边}=\frac{1}{2}(0+1)-\frac{1}{12}(1-1)=\frac{1}{2},$$



Back
Close

(3) 令 $f(x)=x^2$, 代入求积公式 (5.5) 得,

$$\text{左边}=\int_0^1 x^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3}\ =\ \text{右边}=\frac{1}{2}(0+1)-\frac{1}{12}(2-0)=\frac{1}{2}-\frac{1}{6}=\frac{1}{3}.$$

(4) 令 $f(x)=x^3$, 代入求积公式 (5.5) 得,

$$\text{左边}=\int_0^1 x^3\mathrm{d}x=\frac{1}{4}\ =\ \text{右边}=\frac{1}{2}(0+1)-\frac{1}{12}(3-0)=\frac{1}{2}-\frac{1}{4}=\frac{1}{4}.$$

4) 令 $f(x)=x^4$, 代入求积公式 (5.5) 得,

$$\text{左边}=\int_0^1 x^4\mathrm{d}x=\frac{1}{5}\ \neq\ \text{右边}=\frac{1}{2}(0+1)-\frac{1}{12}(4-0)=\frac{1}{2}-\frac{1}{3}=\frac{1}{6}.$$

上述表明, 求积公式 (5.5) 对不超过 3 次的多项式是准确的, 而对 3 次以上的多项式是不准确的. 根据代数精度的定义, 求积公式 (5.5) 具有 3 次代数精度. □

下面我们来讨论求积系数 A_k 的计算. 为了方便, 我们取等距节点, 即把积分区间 $[a,b]$ 剖分成 n 等分. 令步长 $h=(b-a)/n$, 并记

$x_0 = a,\ x_n = b$, 则 $n+1$ 个节点为

$$x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$

作变换

$$t = \frac{x - x_0}{h},$$

代入求积系数公式 (5.3) 得

$$\begin{aligned}
A_k &= \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}\mathrm{d}x \\
&= \int_0^n \frac{h^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{(-1)^{n-k}h^n(n-k)!\,k!} h\mathrm{d}t \qquad (5.6) \\
&= \frac{(-1)^{n-k}h}{(n-k)!\,k!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t.
\end{aligned}$$

这种等距节点的插值型求积公式通常称为牛顿-科茨公式. 下面介绍几个牛顿-科茨公式的特殊形式并分析其截断误差.

Back
Close

§5.2 几个常用的求积公式

§5.2.1 梯形公式及其误差

利用牛顿-科茨公式, 取 $n=1$, 即 $x_0=a,\ x_1=b$, 此时, $h=b-a$, 代入 (5.6), 计算得

$$A_0=\frac{(-1)^1h}{1!\,0!}\int_0^1(t-1)\mathrm{d}t=-\frac{1}{2}[(1-1)^2-(0-1)^2]h=\frac{b-a}{2},$$

$$A_1=\frac{(-1)^0h}{0!\,1!}\int_0^1 t\,\mathrm{d}t=\frac{1}{2}(1^2-0^2)h=\frac{b-a}{2}.$$

所以梯形公式为

$$T=\frac{b-a}{2}\big[f(a)+f(b)\big]. \tag{5.7}$$

由 (5.4), 梯形公式 (5.7) 的误差为:

$$R_T[f]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad (a<\eta<b). \tag{5.8}$$

Back
Close

从上述余项公式可以看出, 梯形求积公式的代数精度为 1.

例 5.2 利用梯形公式计算

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} \mathrm{d}x$$

的近似值.

解 由梯形公式 (5.7), 有

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} \mathrm{d}x \approx \frac{1-0}{2}\left(\frac{4}{1+0^2} + \frac{4}{1+1^2}\right) = 3.$$

§5.2.2 辛普森公式及其误差

利用牛顿-科茨公式, 取 $n = 2$, 即 $x_0 = a,\ x_1 = (a+b)/2,\ x_2 = b$,

Back
Close

此时, $h=(b-a)/2$, 代入 (5.6) 计算得

$$A_0=\frac{(-1)^2h}{2!\,0!}\int_0^2(t-1)(t-2)\mathrm{d}t=\frac{h}{2}\times\frac{2}{3}=\frac{h}{3}=\frac{b-a}{6},$$

$$A_1=\frac{(-1)^1h}{1!\,1!}\int_0^2t(t-2)\mathrm{d}t=-h\times\Big(-\frac{4}{3}\Big)=\frac{4h}{3}=\frac{4(b-a)}{6},$$

$$A_2=\frac{(-1)^0h}{0!\,2!}\int_0^2t(t-1)\mathrm{d}t=\frac{h}{2}\times\frac{2}{3}=\frac{h}{3}=\frac{b-a}{6}.$$

故辛普森公式为

$$S=\frac{b-a}{6}\big[f(a)+4f(c)+f(b)\big], \tag{5.9}$$

其中 $c=(a+b)/2$ 为区间 $[a,b]$ 的中点. 辛普森公式通常也称为抛物形公式.

可以证明, 辛普森公式 (5.9) 的误差为

$$R_S[f]=-\frac{1}{90}\Big(\frac{b-a}{2}\Big)^5f^{(4)}(\eta),\quad (a<\eta<b). \tag{5.10}$$

Back
Close

事实上, 假设 $f^{(4)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上近似地取定值 C_4, 将 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 的中点 $c=(a+b)/2$ 处泰勒展开

$$\begin{aligned} f(x) &= f(c)+f'(c)(x-c)+\frac{f''(c)}{2!}(x-c)^2 \qquad (5.11)\\ &+\frac{f^{(3)}(c)}{3!}(x-c)^3+\frac{C_4}{4!}(x-c)^4. \end{aligned}$$

然后将该展开式在 $[a,b]$ 上积分, 注意到函数 $x-c$ 和 $(x-c)^3$ 在 $[a,b]$ 上的积分为 0, 故右端第二项和第四项的积分值均为 0, 于是我们有

$$\begin{aligned} I^* &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \qquad (5.12)\\ &\approx f(c)(b-a)+\frac{f''(c)}{3}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3+\frac{C_4}{60}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5. \end{aligned}$$

Back
Close

另一方面, 在 (5.11) 中分别令 $x = a$ 和 $x = b$ 得

$$
\begin{aligned}
f(a) &= f(c) - f'(c)\frac{b-a}{2} + \frac{f''(c)}{2!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^2 \\
&\quad - \frac{f^{(3)}(c)}{3!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3 + \frac{C_4}{4!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
f(b) &= f(c) + f'(c)\frac{b-a}{2} + \frac{f''(c)}{2!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^2 \\
&\quad + \frac{f^{(3)}(c)}{3!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3 + \frac{C_4}{4!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4.
\end{aligned}
$$

代入辛普森公式 (5.9) 得

$$
S \approx f(c)(b-a) + \frac{f''(c)}{3}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3 + \frac{C_4}{36}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5.
$$

于是利用 (5.12), 有

$$
R_S[f] = I^* - S \approx -\frac{C_4}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta), \quad (a < \eta < b).
$$

Back
Close

由余项公式 (5.10) 可知, 辛普森公式的代数精度为 3.

例 5.3 利用辛普森公式计算

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} \mathrm{d}x$$

的近似值.

解 由辛普森公式 (5.9), 有

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} \mathrm{d}x \approx \frac{1-0}{6}\Big(\frac{4}{1+0^2} + 4 \times \frac{4}{1+0.5^2} + \frac{4}{1+1^2}\Big) = 3.1333.$$

§5.2.3 科茨公式及其误差

利用牛顿-科茨公式, 取 $n=4$, 则 $h=(b-a)/4$, 于是求积节点为 $x_0=a$, $x_1=d=x_0+h$, $x_2=c=x_0+2h$, $x_3=e=x_0+3h$, $x_4=b$,

代入 (5.6) 计算得

$$A_0 = A_4 = \frac{7}{90}(b-a), \quad A_1 = A_3 = \frac{32}{90}(b-a), \quad A_2 = \frac{12}{90}(b-a).$$

故科茨公式为

$$C = \frac{b-a}{90}\Big[7f(a) + 32f(d) + 12f(c) + 32f(e) + 7f(b)\Big]. \tag{5.13}$$

科茨公式 (5.13) 也称为布尔公式. 可以证明, 科茨公式的余项为

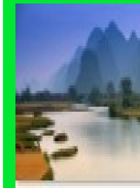
$$R_C[f] = -\frac{8}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^7 f^{(6)}(\eta), \quad (a < \eta < b). \tag{5.14}$$

由余项公式 (5.14) 可知, 科茨公式公式的代数精度为 5.

例 5.4 利用科茨公式计算

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x$$

的近似值.



解 由科茨公式 (5.13), 有

$$
\begin{aligned}
&\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x \\
&\approx \frac{1}{90}\left[7f(0)+32f(0.25)+12f(0.5)+32f(0.75)+7f(1)\right] \\
&= \frac{1}{90}\left(7\times 4+32\times\frac{64}{17}+12\times\frac{16}{5}+32\times\frac{64}{25}+7\times 2\right) \\
&= \frac{1}{90}(28+120.4706+38.4+81.92+14) \\
&= \frac{1}{90}\times 282.7906 = 3.1421.
\end{aligned}
$$

作业： P116: 5.1; 5.4.

Back
Close