科学与工程计算方法 **Winter 2017**

Lecture 5: 数值积分和数值微分

Lecturer: Zhitao Liu *Scribes: Yusu Pan*

5.1 引言

- 微分方程初值问题

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$
$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(x,y)dx \tag{5.1}$$

- 求积节点 x_k, 求积系数 A_k, 近似求积公式 $I_n(f)$

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

5.2 梯形公式和 Simpson 求积公式

5.2.1 梯形公式和 Simpson 公式

梯形公式 (用 1 次 Lagrange 插值多项式近似代替被积函数 $f(x)$)

$$T_1 = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))R_{T_1}(f) = -\frac{h^3}{12}f''(\eta), \eta \in (a,b) \tag{5.3}$$

Simpson 求积公式 (用 2 次 Lagrange 插值多项式近似代替被积函数 $f(x)$)

$$S_1 = \int_a^b L_2(x)dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right) \tag{5.4}$$

定义 5.2.1. *(代数精确度)*

例 5.2.1. *(求求积公式与余项中的待定系数, 并给出代数精度)*

- 求积公式中代入 $f(x) = 1, x, x^2$, 求求积公式中的待定系数
- 求积公式中代入 $f(x) = x^3$, 观察求积公式两边是否相等
- 带余项的求积公式中代入 $f(x) = x^3$, 求余项中的待定系数

插值型求积公式

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{5.5}$$

定理 5.2.1. *(等距节点的插值型求积公式)*

5.2.2 复化梯形公式和复化 Simpson 公式

复化梯形公式

$$\begin{aligned} T_n(f) &= \frac{h}{2} + \left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + f(b) \right] \\ R_{T_n} &= -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\eta), \eta \in (a,b) \end{aligned} \tag{5.6}$$

复化 Simpson 公式

$$\begin{aligned} S_n(f) &= \frac{h}{3} \left(f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(a+(2k+1)h) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + f(b) \right) \\ R_{S_n} &= -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b) \end{aligned} \tag{5.7}$$

例 5.2.2. *(用复化梯形公式和复化 Simpson 公式的余项计算需要的节点数)*

定义 5.2.2. *(p 阶收敛)*

- 复化梯形公式 *2* 阶收敛, 复化 *Simpson* 公式 *4* 阶收敛.

定义 5.2.3. *(黎曼可积)*

定理 5.2.2. *(复化梯形公式与复化 Simpson 公式黎曼可积)*

5.3 Gauss 求积公式

定义 5.3.1. *(Gauss 求积公式)* $n+1$ 个互异节点, $n+1$ 个求积系数, $2n+1$ 代数精度

5.3.1 Gauss 点与正交多项式零点的关系

定理 5.3.1. *(Gauss 点的充要条件)*

引理 5.3.1. *((a,b) 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点就是 Gauss 点)*

例 5.3.1. *(求使公式为 Gauss 求积公式的节点与系数)*

- 构造 $\{\varphi_j(x)\}$, 用正交性求待定系数 *(*$\int_0^1 \sqrt{1-x}(x+a)$ 怎么算? 换元*)*
- 用 $\{\varphi_j(x)\}$ 的零点求节点
- 用 $f(x)=1, x$ 求 *Gauss* 求积公式的待定系数

5.3.2 常用的 Gauss 型求积公式

5.3.2.1 Gauss-Legendre 公式

Gauss-Legendre 公式

$$\int_{-1}^{1} f(x) \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{5.8}$$

Table 5.1: Gauss-Legendre 公式的求积节点和求积系数

n	点数	x_k	A_k
1	2	$\pm 1/\sqrt{3}$	1.0
2	3	$\pm 1/\sqrt{3/5}, 0$	$5/9, 8/9$
3	4	$\pm 0.861136, \pm 0.339981$	$0.347855, 0.652145$
4	5	$\pm 0.906180, \pm 0.538469$	$0.236927, 0.478629, 0.568889$

例 5.3.2. *(构造 Gauss-Legendre 公式)*

- 变量替换 $x = (a+b)/2 + (b-a)t/2$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{b-a}{2}\int_{-1}^1 f(\frac{(a+b)}{2} + \frac{b-a}{2}t)dt \\ &\approx \frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^n A_k f(\frac{(a+b)}{2} + \frac{b-a}{2}t_k) \end{aligned} \tag{5.9}$$

复化 Gauss-Legendre 求积公式

- I 型

$$\int_b^a f(x)dx \approx \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_{k+\frac{1}{2}} - \frac{h}{2\sqrt{3}}) + f(x_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2\sqrt{3}})] \tag{5.10}$$

- II 型

例 5.3.3. *(用 3 段 4 点复化梯形公式, 2 段 5 点复化 Simpson 公式, 4 点 Gauss-Legendre 公式和 2 段 Gauss-Legendre I 型求积公式计算)*

5.3.2.2 Gauss-Chebyshev 求积公式

(求积公式与相应的零点)

5.3.3 Gauss 公式的余项

定理 5.3.2. *(Gauss 求积公式的余项)*

定理 5.3.3. *(求积公式数值稳定的定义)*

定理 5.3.4. *(Gauss 求积公式数值稳定)*

定理 5.3.5. *(Gauss 求积公式收敛)*

5.3.4 Gauss 求积公式的数值稳定性和收敛性

5.4 数值微分

- 对于一阶导数
  - 一次差商或线性插值: h 精度
  - 中心差商或二次插值: h^2 精度
  - 三次样条: h^3 精度
  - 隐式差分: h^4 精度
- 对于二阶导数
  - 二次中心差商或二次插值: h^2 精度
  - 三次样条: h^2 精度
  - 隐式差分: h^4 精度

5.4.1 Taylor 展开法

- 向前差商, 向后差商, 中心差商
- 求解各节点上一阶与二阶导数近似值的隐式方法

$$\begin{aligned} G_1 m &= f_1 \\ G_2 M &= f_2 \end{aligned} \tag{5.11}$$

5.4.2 插值型求导公式

- 插值型求导公式, 余项
- 三点公式, 五点公式

5.4.3 三次样条求导

三次样条插值函数 $S(x)$

5.5 外推技巧和自适应技术

5.5.1 外推原理

$$F_1(h) = \frac{2F(h/2) - F(h)}{2 - 1} = F(0) + b_2 h^2 + b_3 h^3 + \cdots \tag{5.12}$$

Richaegson 外推法

$$
\begin{aligned}
F(h) - F(0) &= a_p h^p + O(h^s), s > p \\
F_1(h) &= \frac{q^p F(h/q) - F(h)}{q^p - 1}
\end{aligned}
\tag{5.13}
$$

定理 5.5.1.

5.5.2 数值微分的外推算法

例 5.5.1. *(中心差商的外推)*

$$
\begin{aligned}
G(x,h) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\
G_1(h) &= G(x_n, h) \\
G_{k+1}(h) &= \frac{4^k G_k(h/2) - G_k(h)}{4^k - 1}
\end{aligned}
\tag{5.14}
$$

5.5.3 数值积分的 Romberg 算法

例 5.5.2. *(Romberg 算法)*

$$
\begin{cases}
T_1^{(0)} & = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] \\
T_1^{(l)} & = \frac{1}{2}[T_1^{(l-1)} + \frac{b-a}{2^{l-1}} \sum_{i=1}^{2^{l-1}} f(a + (2i-1)\frac{b-a}{2^l})] \\
T_{m+1}^{(k-1)} & = \frac{4^m T_m^{(k)} - T_m^{(k-1)}}{4^m - 1}
\end{cases}
\tag{5.15}
$$

5.5.4 自动变步长 Simpson 方法和自适应 Simpson 方法

- 自动变步长 Simpson 方法
- 自适应 Simpson 方法

5.6 应用例题

例 5.6.1.