第四章 数值积分与数值微分

朱升峰

华东师范大学 数学科学学院

2021 年 4 月

目录

数值积分概论

- 数值积分的基本思想
- 代数精度
- 插值型求积公式
- 求积公式的余项
- 收敛性
- 稳定性

数值积分的基本思想

目标：计算定积分

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

若找到原函数 $F(x)$, 则 Newton-Leibniz 公式：

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a)$$

- 实际中有些被积函数的原函数不能用初等函数表示, 如

$$f(x) = \frac{\sin x}{x}, \mathrm{e}^{-x^2}, \cdots,$$

- 即使能求原函数，有时计算困难，如 $f(x) = \frac{1}{1+x^6}$
- $f(x)$ 表达式未知，只有观测或数值计算给出的数据表

数值积分的应用非常广泛: 科学与工程，如解微分方程

积分中值定理：在积分区间 $[a, b]$ 内存在一点 ξ，使得

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)f(\xi)$$

点 ξ 未知，估算平均高度 $f(\xi)$，获得数值求积方法：
左矩形公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(a)$$

右矩形公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(b)$$

（中）矩形公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$L_1(x)$: 线性插值

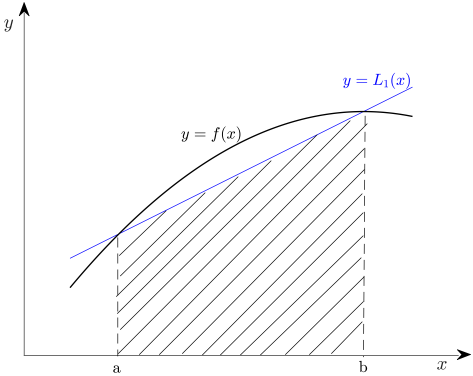

图: 梯形公式.

Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

$L_2(x)$: 二次插值

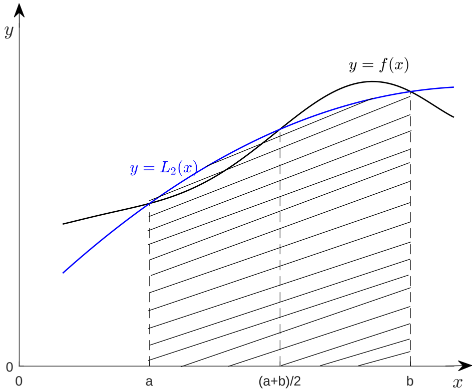

图: Simpson 公式.

机械求积公式

利用 $f(x)$ 的尽可能多的信息，来获得尽可能好的 $f(\xi)$ 的近似值
将积分求值问题归结为被积函数值计算的数值积分方法称为（机械）求积公式

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

- x_k: 求积节点

$$a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$$

- A_k: 求积系数，亦称“权”

注

- 无需求原函数，易于计算机实现
- 有些求积公式可能会包含导数等信息

代数精度

定义 1

如果某个求积公式对于次数不超过 m 的多项式均能精确地成立，但对于 $m+1$ 次多项式就不准确成立，则称该求积公式具有 m **次代数精度**。

代数精度的验证方法

1. 把 $f(x) = 1, x, \cdots, x^m$ 都代入求积公式，依次精确成立；
2. 把 $f(x) = x^{m+1}$ 代入，求积公式不精确成立。

梯形公式，左矩形公式，右矩形公式，（中）矩形公式的数值积分精度

- 左/右矩形公式：0 次代数精度
- 梯形公式和中矩形公式：1 次代数精度

代数精度

例：试确定 A_k, 使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度

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

解：欲使求积公式具有 m 次代数精度，依次将 $f(x) = 1, x, \cdots, x^m$ 代入求积公式，使其精确成立:

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=0}^{n} A_k = b - a \\ \sum\limits_{k=0}^{n} A_k x_k = \frac{1}{2}\left(b^2 - a^2\right), \\ \vdots \\ \sum\limits_{k=0}^{n} A_k x_k^m = \frac{1}{m+1}\left(b^{m+1} - a^{m+1}\right) \end{cases}$$

这是确定参数 x_k 和 A_k 的代数问题。

代数精度

- 如果 x_k 和 A_k 都不确定，则方程组是非线性的，求解困难（$n>1$）。
- 如果事先选定求积节点 x_k，取 $m=n$，求解线性方程组即可确定求积系数 (思考：为什么存在唯一解)

对 $n=0$

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0)$$

把 $f(x)=1,x$ 代入使精确成立知

$$\begin{cases} A_0 = b-a \\ A_0 x_0 = \frac{1}{2}\left(b^2-a^2\right) \end{cases}$$

$x_0=\frac{1}{2}(a+b)$，得中矩形公式。把 $f(x)=x^2$ 代入有

$$A_0 x_0^2 = (b-a)\left(\frac{a+b}{2}\right)^2 \neq \int_a^b x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}\left(b^3-a^3\right),$$

说明中矩形公式对 $f(x)=x^2$ 不精确成立，故代数精度为 1。

代数精度举例-机械求积公式

例：试确定系数 A_k, 使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度，并求出此求积公式的代数精度

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

解：将 $f(x) = 1, x, x^2$ 代入求积公式, 使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = (b-a)/1 = 2 \\ -A_0 + A_2 = 0 \\ A_0 + A_2 = \left(b^3 - a^3\right)/3 = 2/3 \end{cases}$$

解得 $A_0 = 1/3, A_1 = 4/3, A_2 = 1/3$。所以求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}[f(-1) + 4f(0) + f(1)]$$

将 $f(x) = x^3$ 代入可得公式左边 $=$ 右边 $=0$, 公式精确成立。将 $f(x) = x^4$ 代入可得：公式左边 $\neq$ 右边，公式不精确成立。所以此求积公式具有 3 次代数精度。

代数精度举例-非机械求积公式

例： 形如

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + B_0 f'(0)$$

的求积公式，试确定系数 A_0，A_1，B_0，使公式其有尽可能高的代数精确度。

解： 当 $f(x) = 1$ 时，得

$$A_0 + A_1 = \int_0^1 1 \ \mathrm{d}x = 1$$

当 $f(x) = x$ 时，得

$$A_1 + B_0 = \int_0^1 x \ \mathrm{d}x = \frac{1}{2};$$

当 $f(x) = x^2$ 时，得

$$A_1 = \int_0^1 x^2 \ \mathrm{d}x = \frac{1}{3}$$

解得 $A_1 = \frac{1}{3}, A_0 = \frac{2}{3}, B_0 = \frac{1}{6}$，于是有

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{2}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1) + \frac{1}{6} f'(0)$$

插值型求积公式

性质：任意具有 $m(\geq 0)$ 次代数精度的机械求积公式一定满足

$$\sum_{i=0}^{n} A_i = A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a$$

将 $f(x) = 1$ 代入求积公式, 使其精确成立即言。

用插值多项式代替 $f(x)$，得到的求积公式就是插值型求积公式

设求积节点为 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$，若 $f(x_i)$ 已知，则可构造 $f(x)$ 的 n 次插值多项式

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

其中 $l_k(x)$ 是 x_k 的插值基函数。

插值型求积公式

$L_n(x)$ 的原函数容易求出，取

$$I_n = \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x$$

作为

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

的近似值，这样的求积公式

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

称为插值型的，求积系数

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

$k = 0, 1, \cdots, n.$

余项

求积公式余项

$$R[f] := \int_a^b [f(x) - L_n(x)]\mathrm{d}x = \int_a^b R_n(x)\mathrm{d}x,$$

其中

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x),\ \ \omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

性质：插值型求积公式具有至少 n 次代数精度。

定理 2

下面的求积公式具有至少 n 次代数精度的充要条件是该公式是插值型的

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

求积公式的收敛性

定义 3

如果求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 满足

$$\lim_{h\to 0}\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)\,dx,$$

其中 $h = \max_{1\le i\le n}\Delta x_i$, 则称该求积公式是收敛的。

定义 4

对任意的 $\epsilon > 0$，若 $\exists\delta > 0$，只要 $|f(x_k) - \tilde{f}_k| \leqslant \delta\ (k = 0, 1, \cdots, n)$ 就有

$$|I_n(f) - I_n(\tilde{f})| = \left|\sum_{k=0}^{n} A_k[f(x_k) - \tilde{f}_k]\right| < \epsilon,$$

成立，则称求积公式是稳定的。

Newton-Cotes 公式

把区间 $[a,b]$ n 等分，步长 $h=(b-a)/n$，取等距节点 $x_k=a+kh$ 构造插值型求积公式

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

称为Newton-Cotes（牛顿-科特斯）公式，$C_k^{(n)}$ 称为Cotes 系数。
引进变换 $x=a+th$，则

$$C_k^{(n)}=\frac{1}{b-a}\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\frac{h}{b-a}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}\,\mathrm{d}t=\frac{1}{n}\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)\mathrm{d}t$$

定理 5

n 阶 *N-C* 公式至少有 n 次代数精度

N-C 公式

定理 6

当 n 为偶数时，*N-C* 公式至少有 $\boldsymbol{n}+1$ 次代数精度

证明：只要验证当 n 为偶数时，N-C 公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 的余项为 0. 由 $f^{(n+1)}(x)=(n+1)!$, 按余项公式从而

$$R[f]=\int_a^b\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\,\mathrm{d}x$$

做变换 $x=a+th$，有

$$R[f]=h^{n+2}\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)\mathrm{d}t$$

若 n 为偶数，则 $\frac{n}{2}$ 为整数，再令 $t=u-\frac{n}{2}$, 进一步有

$$R[f]=h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)\mathrm{d}u=h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=-n/2}^{n/2}(u-j)\mathrm{d}u$$

因被积函数是奇函数，$R[f]=0$，证毕。

N-C 公式

- 梯形公式 $n=1$

$$C_0^{(1)}=C_1^{(1)}=\frac{1}{2}$$

- Simpson 公式 $n=2$，也称抛物线公式

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{6},C_1^{(2)}=\frac{4}{6},C_2^{(2)}=\frac{1}{6}$$

$n=2$ 为偶数，代数精度至少为 3，事实上，取 $f(x)=x^4$，

$$\int_a^b x^4\mathrm{d}x=\frac{1}{5}(b^5-a^5)\neq\frac{b-a}{6}\left(b^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+a^4\right)$$

- Cotes 公式 $n=4$

$$C=\frac{b-a}{90}\left[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\right]$$

Cotes 系数

n	$C_i^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

- Cotes 系数可以查表获得
- Cotes 系数与被积函数 $f(x)$ 及积分区间 $[a, b]$ 无关
- 当 n 较大时，Runge 现象存在，求积公式不收敛
- 当 $n \geqslant 8$ 时，Cotes 系数出现负值，公式不稳定

定理 7

若 $f(x) \in C^2[a,b]$，则梯形公式的余项有误差估计

$$R[f] = \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\eta),\ \ \eta \in (a,b)$$

证明:

$$f(x) - P_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b), a < \xi < b$$

其中 ξ 是依赖于 x 的函数, 两边积分得

$$R(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

因 $f'(\xi)$ 在 $[a,b]$ 上连续，而 $(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上非正，由积分中值定理

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f'(\xi)(x-a)(x-b)\mathrm{d}x &= f'(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x,\ \ \eta\in(a,b) \\
&= -\frac{(b-a)^3}{6}f'(\eta), a<\eta<b
\end{aligned}
$$

因此，

$$
R(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f'(\eta),\ \ a<\eta<b.\ \Box
$$

定理 8

若 $f(x)\in C^2[a,b]$，则抛物线公式的余项有误差估计

$$
\begin{aligned}
R[f] &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right) \\
&= -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\ \ \eta\in(a,b)
\end{aligned}
$$

证明: 已知抛物线求积公式的代数精确度是 3, 构造三次插值多项式 $P_3(x)$ 满足

$$P_3(a)=f(a), P_3(b)=f(b),\ P_3\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{a+b}{2}\right), P_3'\left(\frac{a+b}{2}\right)=f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

由插值误差

$$f(x)-P_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b),\ \ a<\xi<b$$

两边从 a 到 b 积分, 得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\int_a^b P_3(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{4!}\int_0^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\mathrm{d}x$$

$P_3(x)$ 是三次多项式, 故对抛物线求积公式是精确成立的, 即

$$\begin{aligned}\int_a^b P_3(x)\mathrm{d}x&=\frac{b-a}{6}\left(P_3(a)+4P_3\left(\frac{a+b}{2}\right)+P_3(b)\right)\\&=\frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)\end{aligned}$$

$$R[f]=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\mathrm{d}x$$

根据假设, $f^{(4)}(\xi)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续, 而且当 $x\in[a,b]$ 时, $(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\leqslant 0$, 利用积分中值定理, 总存在一点 $\eta\in[a,b]$, 使

$$\begin{aligned}&\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx\\ =&f^{(4)}(\eta)\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx\\ =&-\frac{(b-a)^5}{120}f^{(4)}(\eta),\ \ a<\eta<b\end{aligned}$$

因此抛物线求积公式的截断误差是

$$R(f)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\ \ a<\eta<b\quad\square$$