第四章　数值积分与数值微分

多重积分与数值微分

朱升峰

数学科学学院

华东师范大学

2026 年 5 月

二重积分

$$\iint_{\Omega} f(x,y)\,dA$$

基本思想：先化累次积分，然后数值积分

对于矩形区域 $\Omega=\{(x,y)|a\leqslant x\leqslant b,\ c\leqslant y\leqslant d\}$，可将它写成累次积分

$$\iint_{\Omega} f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\int_a^b\left(\int_c^d f(x,y)\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x=\int_c^d\left(\int_a^b f(x,y)\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}y$$

梯形公式

$$\begin{aligned} I &= \int_c^d \int_a^b f(x,y)\,dxdy \\ &\approx \int_c^d \frac{b-a}{2}[f(a,y)+f(b,y)]\,dy \\ &\approx \frac{(b-a)(d-c)}{4}[f(a,c)+f(b,c)+f(a,d)+f(b,d)] \end{aligned}$$

Gauss 求积公式

先将区域 Ω 变换为区域 $\bar{\Omega} = \{(u, v) \mid -1 \leq u, v \leq 1\}$

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}u$$

$$y = \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2}v$$

$$I = \iint_{\Omega} f(x, y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{b-a}{2}\frac{d-c}{2}\iint_{\Omega} g(u, v)\mathrm{d}u\mathrm{d}v$$

$$g(u, v) = f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}u, \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2}v\right)$$

Gauss 求积公式:

$$I \approx \sum_{j=0}^{n}\sum_{i=0}^{n} A_i A_j g(u_i, v_j)$$

- Gauss 点: u_i, v_j
- Gauss 系数: A_i, A_j

例：计算二重积分

$$\iint_D e^{-xy}dxdy$$

(1) 若区域 $D=\{0\leq x\leq 1, 0\leq y\leq 1\}$，用 Gauss 求积公式 $n=2$

解：先将区域 $D=\{0\leq x\leq 1, 0\leq y\leq 1\}$ 变换为区域 $\bar{D}=\{(u,v)\mid -1\leq u,v\leq 1\}$, 其中 $u=2x-1, v=2y-1$, 等价于

$$x=\frac{1}{2}(u+1), y=\frac{1}{2}(v+1),$$

查表知 Gauss 点和 Gauss 系数：

$$u_0=v_0=-0.774595662,\quad u_1=v_1=0,\quad u_2=v_2=0.774596662,$$

$$A_0=A_2=\frac{5}{9},\quad A_1=\frac{8}{9}$$

$$I=\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}e^{-\frac{1}{4}(u+1)(v+1)}dudv\approx\sum_{i=0}^{2}\sum_{j=0}^{2}A_iA_je^{-\frac{1}{4}(u_i+1)(v_j+1)}$$

复合求积公式

为提高计算精度，在计算累次积分时，可使用

- 复合梯形公式
- 复合 Simpson 公式
- 复合 Gauss 求积公式

数值微分：插值型求导公式

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

$y = P_n(x)$：Lagrange 插值多项式；$f(x) \approx P_n(x)$

$$f'(x) \approx P'_n(x)$$

插值型求导公式的余项

$$f'(x) - P'_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \left(\prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \right)' + \frac{1}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \left(f^{(n+1)}(\xi_x) \right)'$$

节点处的余项

$$f'(x_i) - P'_n(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} (x_i - x_j)$$

以下仅考虑节点处的导数值。

两点公式

设已给出两个节点 x_0, x_1 上的函数值 $f(x_0), f(x_1)$, 线性插值公式

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1).$$

记 $x_1 - x_0 = h$

$$P_1'(x) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right],$$

有下列求导公式:

$$P_1'(x_0) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right];$$

$$P_1'(x_1) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right].$$

由余项公式得

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right] - \frac{h}{2} f''(\xi);$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right] + \frac{h}{2} f''(\xi)$$

三点公式（等距）

设已给出三个等距节点 $x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$ 上的函数值 $f(x_0), f(x_1), f(x_2)$，二次插值公式

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

令 $x = x_0 + th$，上式可表示为

$$P_2(x(t)) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$

则

$$\begin{aligned}\frac{dP_2}{dx} &= \frac{dP_2}{dt}\frac{dt}{dx} \\ &= \frac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)\right]\end{aligned}$$

$$P_2'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right]$$
$$P_2'(x_1) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right]$$
$$P_2'(x_2) = \frac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right].$$

带余项的三点求导公式

$$\begin{cases} f'(x_0) = \dfrac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right] + \dfrac{h^2}{3}f'''(\xi_0) \\ f'(x_1) = \dfrac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right] - \dfrac{h^2}{6}f'''(\xi_1); \\ f'(x_2) = \dfrac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right] + \dfrac{h^2}{3}f'''(\xi_2) \end{cases}$$

高阶导数的近似

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x), \quad k = 2, 3, \cdots$$

$$P_2''(x_1) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)\right]$$

二阶导数的近似

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)\right] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}\left[f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)\right]$$

三次样条求导

给定节点以及节点函数值，利用三次样条函数 $S(x)$ 直接得到

$$\|f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x)\|_\infty \leqslant C_k \|f^4\|_\infty h^{4-k}, \quad k = 0, 1, 2$$

$$f^{(k)}(x) \approx S^{(k)}(x), \quad k = 0, 1, 2.$$

$$f'(x_k) \approx S'(x_k) = -\frac{h_k}{3} M_k - \frac{h_k}{6} M_{h+1} + f[x_k, x_{k+1}],$$
$$f''(x_k) = M_k.$$

$$\|f' - S'\|_\infty \leqslant \frac{1}{24} \left\|f^{(0)}\right\|_\infty h^3,$$
$$\|f'' - S''\|_\infty \leqslant \frac{3}{8} f^{(4)} \|\omega h^2.$$

数值微分外推算法

$$
\begin{cases}
f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \dfrac{1}{2!}h^2 f''(x) + \dfrac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \dfrac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) + \cdots \\
f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \dfrac{1}{2!}h^2 f''(x) - \dfrac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \dfrac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) - \cdots
\end{cases}
$$

中点公式计算

$$
G_0(h) \triangleq \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] = f'(x) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \alpha_3 h^6 +
$$

$$
G_1(h) \triangleq \frac{4G_0(h/2) - G_0(h)}{3} = f'(x) + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots
$$

从而

$$
G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}\left(\frac{h}{2}\right) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}, \quad m = 1, 2, \cdots
$$

一般地，

$$
f'(x) - G_m(h) = O(h^{2(m+1)})
$$