第八讲 数值积分与数值微分

目录

https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/NA

8-3 Newton-Cotes 公式

8.3 Newton-Cotes 公式

定义 如果插值型求积公式 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 中的节点为等距节点, 即

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n,$$

则该求积公式就称为 **Newton-Cotes 公式**, 记为

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

其中 $C_k^{(n)}$ 称为 **Cotes 系数**, 其值为

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

Cotes 系数的两个简单性质

(1) $\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1;$

(2) $C_k^{(n)} = C_{n-k}^{(n)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$

8-3-1 常用的低次 Newton-Cotes 公式

- 当 $n=1$ 时, 可得 $C_0^{(1)}=C_1^{(1)}=\dfrac{1}{2}$, 此时的 Newton-Cotes 公式为

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

这就是**梯形公式**, 通常记作为 $T(f)$.

- 当 $n=2$ 时, 可得 $C_0^{(2)}=\dfrac{1}{6}$, $C_1^{(2)}=\dfrac{4}{6}$, $C_2^{(2)}=\dfrac{1}{6}$, 此时的 Newton-Cotes 公式为

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

这就是**抛物线公式**或 **Simpson 公式**, 通常记作为 $S(f)$.

当 $n=3$ 时, 可得 $C_0^{(3)}=\frac{1}{8}, C_1^{(3)}=\frac{3}{8}, C_2^{(3)}=\frac{3}{8}, C_3^{(3)}=\frac{1}{8}$, 此时的 Newton-Cotes 公式为

$$I_3(f)=\frac{b-a}{8}\big(f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)\big).$$

该公式称为 **Simpson 3/8 公式** 或 **Boole 公式** 或 **Milne 公式**.

当 $n=4$ 时, 可得 $C_0^{(4)}=\frac{7}{90}, C_1^{(4)}=\frac{32}{90}, C_2^{(4)}=\frac{12}{90}, C_3^{(4)}=\frac{32}{90}, C_4^{(4)}=\frac{7}{90}$, 此时

$$I_4(f)=\frac{b-a}{90}\big(7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\big).$$

该公式称为 **Cotes 公式**.

- 当 $n>7$ 时, Cotes 系数中会出现负数, 会导致算法的不稳定, 因此不考虑 $n>7$ 情形.
- 梯形公式和抛物线公式简单易用, 因此很受欢迎.

Newton-Cotes 公式的代数精度

定理 当 n 是奇数时, Newton-Cotes 公式至少具有 n 次代数精度. 当 n 是偶数时, Newton-Cotes 公式至少具有 $n+1$ 次代数精度. (板书)

证明概要. 由于 Newton-Cotes 公式是插值型的, 因此它至少具有 n 次代数精度.
当 n 是偶数时, 将 $f(x) = x^{n+1}$ 代入余项公式可得

$$R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x$$

做变量代换 $x = a + th$. 由于 $x_k = a + kh$, 所以 $R[f] = \int_a^b \omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x = h^{n+2}\int_0^n \prod_{k=0}^{n}(t-k)\,\mathrm{d}t$.

由于 n 是偶数, 再做变量代换 $t = n - s$, 可得

$$R[f] = h^{n+2}\int_n^0 (-1)^{n+2}\prod_{k=0}^{n}(s-(n-k))\,\mathrm{d}s = (-1)^{n+3}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}(s-i)\,\mathrm{d}s = -R[f].$$

所以 $R[f] = 0$, 故 Newton-Cotes 公式对 $f(x) = x^{n+1}$ 精确成立, 即具有 $n+1$ 次代数精度.

8-3-2 余项公式的推导

引理 设基于节点 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的插值型求积公式具有 m $(m \geq n)$ 次代数精度, 则对任意 $f(x) \in C[a,b]$, 有

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

其中 $p_m(x)$ 是 $f(x)$ 关于节点 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的 m 次插值多项式, 即 $p_m(x)$ 满足

$$p_m(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

(当 $m > n$ 时, 其它 $m - n$ 个插值条件可以任取, 如要求在某些节点的导数值相等)

证明概要. 由于求积公式具有 m 次代数精度, 即对 m 次多项式精确成立, 所以

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

上述结论也可以推广到包含导数的求积公式.

引理 设基于节点 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的求积公式为

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + \sum_{j \in \mathbb{Z}_1} B_j f'(x_j).$$

其中 $\mathbb{Z}_1 \subset \{0, 1, 2, \ldots, n\}$, 即可以只包含部分节点上的导数值. 若该公式具有 m $(m \geq n)$ 次代数精度, 则对任意 $f(x) \in C[a, b]$, 有

$$I_n(f) = \int_a^b p_m(x) \, \mathrm{d}x,$$

其中 $p_m(x)$ 是 $f(x)$ 关于节点 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 的 m 次 Hermite 插值多项式, 即 $p_m(x)$ 满足

$$\begin{cases} p_m(x_k) = f(x_k), & k = 0, 1, 2, \ldots, n \\ p_m'(x_j) = f'(x_j), & j \in \mathbb{Z}_1. \end{cases}$$

(注: 如果插值条件个数小于 $m+1$, 则其它插值条件可以任取)

注记

- 假设 $\mathbb{Z}_1$ 中的元素个数为 r ($r \le n+1$), 则一般总是有 $m \ge n+r$.
- 如果求积公式中包含二阶以上的导数 (如后面会提到的修正 Simpson 公式), 我们仍可以得到相类似的结论.

差商的连续性

引理 设 $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$, 函数 $f(x) \in C^1[a,b]$, 则差商

$$g(x) \triangleq f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

关于 x 在 $[a,b]$ 上连续. 这里 $g(x)$ 在节点 x_k 上的值是通过重节点差商来定义的. 进一步, 若 $f(x) \in C^2[a,b]$, 则有

$$g'(x) = f[x, x, x_0, x_1, \ldots, x_n],$$

且 $g'(x)$ 也关于 x 在 $[a,b]$ 上连续. (留作课外自习, 参见相关资料)

重节点情形

上述结论可以推广到重节点情形, 即允许节点 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 有重合的.

引理 设 $a = x_0 \le x_1 \le x_2 \le \cdots \le x_{n-1} \le x_n = b$, 函数 $f(x) \in C^{n+1}[a, b]$, 则差商

$$g(x) \triangleq f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

关于 x 在 $[a, b]$ 上连续. 进一步, 若 $f(x) \in C^{n+2}[a, b]$, 则有

$$g'(x) = f[x, x, x_0, x_1, \ldots, x_n],$$

且 $g'(x)$ 也关于 x 在 $[a, b]$ 上连续.

梯形公式的余项

定理 设 $f(x)\in C^2[a,b]$, 则梯形求积公式的余项为

$$R[f]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad \eta\in(a,b),$$

所以, 带余项的梯形公式可写为

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\frac{b-a}{2}\Big(f(a)+f(b)\Big)-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad \eta\in(a,b).$$

(板书)

注记

如果使用 Lagrange 插值余项公式, 则可得

$$R[f]=\int_a^b \frac{1}{2!}f''(\xi_x)(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x,\quad \xi_x\in(a,b).$$

易知 $(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 内不变号, 如果 $f''(\xi_x)$ 关于 x 连续, 则由积分中值定理可知, 存在 $\eta\in(a,b)$ 使得

$$R[f]=\frac{1}{2!}f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta).$$

需要指出的是, 这里要证明 $f''(\xi_x)$ 关于 x 连续. 事实上, 由 Lagrange 插值余项可知

$$f(x)-p_1(x)=\frac{1}{2!}f''(\xi_x)(x-a)(x-b),$$

即

$$f''(\xi_x)=\frac{2!(f(x)-p_1(x))}{(x-a)(x-b)}\triangleq g(x).$$

注记 (续)

如果 $f \in C^2[a,b]$, 则上式右端 (即 $g(x)$) 显然在除插值节点以外的所有点都连续.

应用 L'Hôpital 法则, 可以求得 $g(x)$ 在插值节点处的极限 (在两端点处为右极限或左极限)

而根据余项公式, 在插值节点处, $f''(\xi_x)$ 可以取任意值.

因此, 我们可以将 $g(x)$ 的极限设为 $f''(\xi_x)$ 在节点处的值, 这样 $f''(\xi_x)$ 就在整个区间连续.

以上结论可推广到一般情形, 即: 设 $f \in C^{n+1}[a,b]$, 可得 n 次多项式插值余项

$$f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n), \quad \xi_x \in [a,b],$$

通过定义 $f^{(n+1)}(\xi_x)$ 在插值节点处的值, 可使得 $f^{(n+1)}(\xi_x)$ 关于 x 是连续的.

Simpson 公式的余项

定理 设 $f(x) \in C^4[a,b]$, 则 Simpson 求积公式的余项为

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

所以, 带余项的 Simpson 公式可写为

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) - \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).$$

(板书)

✍ 我们也可以将 $H_3(x)$ 写成 Newton 插值形式, 即

$$H_3(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_1](x - x_0)(x - x_1) \\ + f[x_0, x_1, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)^2.$$

这可以看作是**重节点 Newton 插值**. 因此, 插值余项可表示为

$$R_3(x) = f[x, x_0, x_1, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2).$$

请读者自行验证.

计算求积公式余项小结 (三步曲)

(1) 计算求积公式的代数精度, 设为 m;

(2) 构造 m 次插值多项式, 写出插值条件和插值余项 (除导数部分外, 要确保不变号);

(3) 利用积分中值定理, 计算出求积公式的余项.

8-3-3 Newton-Cotes 公式余项一般形式

定理 当 n 是奇数时, 若 $f(x) \in C^{n+1}[a,b]$, 则 Newton-Cotes 公式的余项为

$$R[f] = \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \int_0^n t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t, \quad \eta \in (a,b).$$

当 n 是偶数时, 若 $f(x) \in C^{n+2}[a,b]$, 则 Newton-Cotes 公式的余项为

$$R[f] = \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!} \int_0^n t^2(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t, \quad \eta \in (a,b).$$

证明概要. 可参见: J. Stoer and R. Bulirsch, Introduction to Numerical Analysis, 3rd Edition, 2002.

8-3-4 一般求积公式余项 *

一般求积公式 (带导数信息)

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + \sum_{i_1\in\mathbb{Z}_1} A_{i_1} f'(x_{i_1}) + \sum_{i_2\in\mathbb{Z}_2} A_{i_2} f''(x_{i_1}) + \cdots + \sum_{i_r\in\mathbb{Z}_r} A_{i_r} f^{(r)}(x_{i_r}).$$

其中 $\mathbb{Z}_j \subset \{0, 1, 2, \ldots, n\}$, 即求积公式中可以包含全部或部分节点上的导数信息.

设上述求积公式的代数精度为 m, 若 $f(x) \in C^{m+1}[a, b]$, 则其余项可表示为

$$R[f] = \int_a^b f^{(m+1)}(t) K(t)\,\mathrm{d}t,$$

其中 $K(t)$ 称为 **Peano 核**, 具体表达式可参见

"Introduction to Numerical Analysis" (Stoer and Bulirsch, 3rd Edition, 2002).

余项公式

在大多数求积公式中, $K(t)$ 在 $[a,b]$ 内不变号. 此时, 根据积分中值定理, 存在 $\eta \in (a,b)$ 使得

$$R[f] = f^{(m+1)}(\eta) \int_a^b K(t)\,\mathrm{d}t.$$

✍ 需要注意的是, 余项公式并不是对所有求积公式都成立.

例 给出下面求积公式的余项

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

解 首先求出代数精度, 然后构造插值多项式 $p(x)$, 满足

$$p(0)=f(0),\quad p(1)=f(1),\quad p'(0)=f'(0),$$

写出插值余项 $R(x)$, 代入求积公式后, 利用积分中值定理给出求积公式的余项表达式. 具体过程请自行完成.

8-4 复合求积公式

8.4 复合求积公式

复合求积公式基本思想

将积分区间分割成若干小区间, 在每个小区间使用低次求积公式, 也称复化求积公式.

- 为简单起见, 通常等分积分区间.
- 两类常用的复合求积公式: 复合梯形公式和复合 Simpson 公式.

8-4-1 复合梯形公式

- 区间划分: 将 $[a,b]$ 划分为 n 等份, 即取节点

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

- 计算积分近似: 在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上采用梯形公式, 可得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}\big(f(x_k) + f(x_{k+1})\big) = h\left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right)$$

这就是**复合梯形公式** (Composite Trapezoidal rule), 通常记为 T_n, 即

$$T_n = h\left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right).$$

收敛性分析

设 $f(x) \in C^2[a,b]$, 则在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的余项为 $-\dfrac{h^3}{12}f''(\eta_k)$, 所以整体余项为

$$R_n[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_n = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k).$$

由于 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续, 且

$$\min_{a\le x\le b} f''(x) \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \le \max_{a\le x\le b} f''(x),$$

由介值定理可知, 存在 $\eta \in (a,b)$, 使得 $f''(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)$. 故

$$R_n[f] = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta) \ \to \mathbf{0}\ (n\to\infty)$$

因此 复合梯形公式是收敛的.

注记

- 复合梯形公式是稳定的 (系数都为正)
- 复合梯形公式看似精度不高, 但如果被积函数是以 $b-a$ 为周期的周期函数, 则其具有 n 阶三角多项式精度:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - h\sum_{k=0}^{n-1} f(a+kh) = \begin{cases} -(b-a), & \text{若 } m \neq 0 \text{ 被 } n \text{ 整除}, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$

其中 $f(x) = \exp\left(\dfrac{2\pi\mathbf{i}\,mx}{b-a}\right)$, $\mathbf{i}$ 表示虚部单位, $h = \dfrac{b-a}{n}$.

8-4-2 复合 Simpson 公式

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &\approx \frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\Big(f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})\Big)\\ &= \frac{h}{6}\left(f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})\right)\triangleq \boldsymbol{S_n}.\end{aligned}$$

收敛性: 设 $f(x)\in C^4[a,b]$, 则复合 Simpson 公式的余项为

$$R_n[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - S_n = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta).$$

因此 **复合 Simpson 公式是收敛的**.

稳定性: 复合 Simpson 公式是稳定的.

例 已知 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$ 的取值如下表, 试分别用复合梯形公式和复合 Simpson 公式计算 $\displaystyle\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x$ 的近似值, 并估计误差. (`Quad_Trap_Simpson.m`)

x	0	1/8	2/8	3/8	4/8	5/8	6/8	7/8	1
$f(x)$	1.0000	0.9974	0.9896	0.9767	0.9589	0.9362	0.9089	0.8772	0.8415

(板书)

8-5 带导数的求积公式 *

若知道被积函数在积分区间两个端点处的导数值, 则可用它们来提高求积公式的精度.

8.5 带导数的求积公式

潘建瑜 @MATH.ECNU

https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/NA

8-5-1 带导数的梯形公式

带余项的复合梯形求积公式:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = T_n - \frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k), \quad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}].$$

根据定积分的定义, 当 h 充分小时, 有: $h\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \approx \int_a^b f''(x)\,\mathrm{d}x = f'(b) - f'(a)$.

于是, 我们可以得到下面的求积公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx T_n - \frac{h^2}{12}\big(f'(b) - f'(a)\big)$$

$\rightarrow$ **带端点导数的复合梯形公式**

修正的梯形公式

当 $n = 1$ 时,

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}\Big(f(a)+f(b)\Big) - \frac{(b-a)^2}{12}\Big(f'(b)-f'(a)\Big)$$

这就是**修正的梯形公式** (Corrected Trapezoidal Rule). 可以验证, 求积公式的余项为

$$R[f] = \frac{(b-a)^5}{720} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).$$

✍ 梯形法的余项: $R[f] = -\dfrac{(b-a)^3}{12} f''(\eta)$

8-5-2 带导数的 Simpson 公式

相类似地, 我们可以给出带端点导数的复合 Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx S_n - \frac{h^4}{2880}\Big(f'''(b) - f'''(a)\Big)$$

当 $n=1$ 时,

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) - \frac{h^4}{2880}\Big(f'''(b) - f'''(a)\Big)$$

这就是**修正的 Simpson 公式** (Corrected Simpson's Rule).

✍ 提高算法精度: 将余项中的部分加入到求积公式中, 从而达到进一步降低误差的目的.

谢谢

THANK YOU