《数值分析》第八章

数值积分与微分

包承龙

YMSC

2019 年 12 月 12 日

目录

1. 数值积分的基本概念
2. Newton-Cotes 公式
3. 复合求积公式
4. Gauss 求积公式
5. Romberg 求积算法
6. 奇异积分
7. 数值微分

目录

1. 数值积分的基本概念
2. Newton-Cotes 公式
3. 复合求积公式
4. Gauss 求积公式
5. Romberg 求积算法
6. 奇异积分
7. 数值微分

数值积分的基本概念

Newton-Leibniz 公式:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) \tag{1}$$

其中 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的一个原函数. 更一般地，我们希望计算

$$\int_a^b \rho(x)f(x)dx \tag{2}$$

这里 $\rho(x)$ 为权函数. 通常我们并不了解 $f(x)$ 的精确表达式，甚至并不知道 $f(x)$ 在所有点上的函数值，而只了解其在部分点上的值. 因而希望利用公式

$$\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{3}$$

来近似求解积分值.

数值积分的基本概念

在公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4}$$

中，$\{x_k\} \subset [a, b]$ 称为求积节点，A_k 称为求积系数，

$$E_n(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{5}$$

称为求积公式 (4) 的差.

若 $E_n(x^m) = 0$, 对 $m = 0, 1, \cdots, M$ 都成立，则称求积公式 (4) 至少具有 M 次代数精度. 若还有 $E_n(x^{M+1}) \neq 0$，则称求积公式 (4) 的代数精度就是 M.

数值积分的基本概念——插值型求积公式

插值型求积公式利用 $f(x)$ 在节点 $\{x_k\}$ 上的插值函数 $l_k(x)$ 来构造，即

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, l_k(x) \qquad l_k(x) = \prod_{k\neq j=0}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \tag{6}$$

记插值误差为 $R_n(x) = f(x) - L_n(x)$，则

$$\begin{aligned}\int_a^b \rho(x) f(x) dx &= \int_a^b \rho(x) L_n(x) dx + \int_a^b \rho(x) R_n(x) dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx + \int_a^b \rho(x) R_n(x) dx\end{aligned} \tag{7}$$

数值积分的基本概念——插值型求积公式

如果令 $A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx (0 \leqslant k \leqslant n)$，$E_n(f) = \int_a^b \rho(x) R_n(x) dx$，则

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + E_n(f) \tag{8}$$

该公式被称为插值型求积公式. 这里的求积系数 A_k 仅依赖于求积节点而与 $f(x)$ 无关.

利用 *Taylor* 余项公式可以证明，插值型求积公式的代数精度至少为 n；反过来，如果求积公式 (4) 的代数精度至少为 n，则它必然是插值型的.

目录

1 数值积分的基本概念

2 Newton-Cotes 公式

3 复合求积公式

4 Gauss 求积公式

5 Romberg 求积算法

6 奇异积分

7 数值微分

Newton-Cotes 公式

最简单的插值型求积公式为等距节点得到的公式，称之为 Newton-Cotes 公式. 将区间 $[a, b]$ 等分：

$$h = \frac{b-a}{n} \qquad x_j = a + jh, \quad j = 0, \cdots, n \tag{9}$$

得到插值函数

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, l_k(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \prod_{j \neq k} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \tag{10}$$

作坐标变换 $x = a + th$，即 $h = (b-a)/n$，可以得到

$$\begin{aligned} \int_a^b L_n(x)dx &= \sum_{k=0}^{n} f_k \int_a^b l_k(x) {\color{red}dx} \\ &\overset{x=a+th}{=} \sum_{k=0}^{n} \int_0^n f_k \left(\prod_{j \neq k} \frac{t-j}{k-j} \right) {\color{red}hdt} \equiv (b-a) \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f_k \end{aligned} \tag{11}$$

Newton-Cotes 公式

这里求积系数

$$c_k^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{j\neq k} \frac{t-j}{k-j}dt = \frac{1}{n}\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j\neq k}(t-j)dt \tag{12}$$

因此，称

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f(x_k) \tag{13}$$

为 n 阶 Newton-Cotes 公式，$c_k^{(n)}(k=0,\cdots,n)$ 称为 n 阶 Cotes 系数.

这里 $c_k^{(n)}$ 与 f，a，b 无关，只与 n，k 有关，且有

$$\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} = 1 \tag{14}$$

Newton-Cotes 公式——常用公式

- $n = 1$ 时，称为梯形公式

$$I(f) \approx I_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] \tag{15}$$

- $n = 2$ 时，称为 Simpson 公式

$$I(f) \approx I_2(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \tag{16}$$

Newton-Cotes 公式

代数精度

n 阶 Newton-Cotes 型求积公式的代数精度至少为 n. 当 $n = 2m$ 为偶数时，其代数精度为 $n + 1 = 2m + 1$.

因此使用偶数阶的 Newton-Cotes 公式效果会更好.

另外，可以证明当 $n \leqslant 7$ 时，$C_k^{(n)} > 0$，因此此时 Newton-Cotes 公式是稳定的；当 $n \geqslant 8$ 时，求积系统的数值有正有负，相互抵消会求实有效数字的位数. 由此，Newton-Cotes 求积公式不宜采用 $n \geqslant 8$ 的情况.

目录

1. 数值积分的基本概念
2. Newton-Cotes 公式
3. 复合求积公式
4. Gauss 求积公式
5. Romberg 求积算法
6. 奇异积分
7. 数值微分

复合求积公式

由于高阶 ($n \geqslant 8$) 的 Newton-Cotes 公式在数值上是不稳定的，我们希望将一整个积分区间分成若干个子区间，再在米格子区间上采用低阶求积公式. 该方法被称为**复合求积公式**.

如将区间 $[a, b]$ 分成 n 个小区间 $x_j = a + jh, j = 0, \cdots, n, h = \frac{b-a}{n}$. 然后在每个小区间上使用梯形公式，即

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} \frac{h}{2} [f(x_{j-1}) + f(x_j)] \\ &= \frac{h}{2} \left[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) \right] \equiv T_n \end{aligned} \tag{17}$$

此公式被称为复合梯形公式.

复合求积公式——Simpson 公式

同样地，如在每个小区间上使用 Simpson 公式就得到复合 Simpson 公式

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \frac{h}{6} \sum_{i=1}^{n} \left[f_{i-1} + 4f_{i-\frac{1}{2}} + f_i \right] + E_n(f) \equiv S_n + E_n(f) \tag{18}$$

这里

$$S_n = \frac{h}{6} \left[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + 4\sum_{j=1}^{n} f\left(x_{j-\frac{1}{2}}\right) \right] \equiv \frac{1}{3} T_n + \frac{2}{3} H_n \tag{19}$$

复合 Simpson 公式可以达到四阶收敛精度.

复合求积公式——带导数值的求积公式

有时候如果知道被积函数 f 的导数信息，那么我们也可以利用其 Hermite 插值多项式来推导求积公式. 知 f 在 $[a,b]$ 上的三次 Hermite 插值为

$$H_3(x) = f(a)\alpha_1(x) + f(b)\alpha_2(x) + f'(a)\beta_1(x) + f'(b)\beta_2(x) \tag{20}$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha_1(x) &= \left(1+2\frac{x-a}{b-a}\right)\left(\frac{b-x}{b-a}\right)^2, \quad \beta_1(x) = (x-a)\left(\frac{b-x}{b-a}\right)^2 \\ \alpha_2(x) &= \left(1+2\frac{x-b}{a-b}\right)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2, \quad \beta_2(x) = (x-b)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2 \end{aligned} \tag{21}$$

复合求积公式——带导数值的求积公式

若用 Hermite 插值代替 f 并进行积分，则

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b H_3(x)dx + E(f) \\ &= \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] + \frac{(b-a)^2}{12}\left[f'(a)-f'(b)\right] + E(f)\end{aligned} \tag{22}$$

其中

$$E(f) = \int_a^b f[a,a,b,b,x](x-a)^2(x-b)^2dx = \frac{(b-a)^5}{720}f^{(4)}(\eta) \tag{23}$$

与复合梯形公式 (17) 相比，其仅仅多出一项 $(b-a)^2/12$，因此也被称为“端点修正”的复合梯形公式，相较于复合梯形公式 (17) 能够显著提高精度.

目录

1. 数值积分的基本概念
2. Newton-Cotes 公式
3. 复合求积公式
4. Gauss 求积公式
5. Romberg 求积算法
6. 奇异积分
7. 数值微分

Gauss 求积公式

在求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{24}$$

中，若选取等距节点，就得到了 Newton-Cotes 型求积公式及其相对应的复合公式. 而若能够更灵活地选取节点的位置，就能得到效果更好的格式.

定理

插值型求积公式 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 具有 $2n+1$ 次代数精度的充分必要条件是：求积节点 $x_0, \cdots, x_n$ 的是 $[a, b]$ 上权函数为 ρ 的 $n+1$ 次正交多项式 $\omega_{n+1}(x)$ 的零点. 即对于任意 n 次多项式 p_n，都有 $\langle p_n, \omega_{n+1} \rangle = 0$.

Gauss 求积公式

如果求积公式

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{25}$$

的代数精度达到 $2n+1$，则称其为 Gauss 型求积公式.

而显然，当 f 取 $2n+2$ 次多项式 $\omega_{n+1}^2(x)$ 时，其连续形式

$$I(f) = \int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx > 0 \tag{26}$$

而离散形式

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k \omega_{n+1}^2(x_k) = 0 \tag{27}$$

因而 Gauss 型求积公式的代数精度就是 $2n+1$.

Gauss 求积公式——稳定性及收敛性分析

可以证明以下定理:

定理

Gauss 求积公式的求积系数 A_k 恒大于零.

推论

Gauss 求积公式总是稳定的.

及

收敛性定理

对 $\forall f \in C[a, b]$, Gauss 型求积公式式 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$, 总有 $\lim_{n\to+\infty} I_n(f) \to I(f)$

Gauss-Legendre 求积公式

若 $[a,b]=[-1,1]$，$\rho\equiv 1$，$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left[\left(x^2-1\right)^n\right]$，$x_0,\cdots,x_n$ 为 P_{n+1} 的零点，则求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+E_n(f) \tag{28}$$

被称为 Gauss-Legendre 求积公式. 可以算出

$$A_k=-\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}}\frac{\sigma_{n+1}}{P_{n+2}\left(x_k\right)P'_{n+1}\left(x_k\right)}=\frac{2}{n+1}\frac{1}{P_n\left(x_k\right)P'_{n+1}\left(x_k\right)} \tag{29}$$

其余项为

$$E_n(f)==\frac{2^{2n+3}\left[(n+1)!\right]^4}{(2n+3)\left[(2n+2)!\right]^3}f^{(2n+2)}(\eta) \tag{30}$$

Gauss-Tchebychev 求积公式

若 $[a, b] = [-1, 1]$，$\rho(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$，$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$，$\{x_k = \cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\}$ 为 T_{n+1} 的零点，则求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + E_n(f) \tag{31}$$

被称为 Gauss-Tchebychev 求积公式. 可以算出

$$A_k = -\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}} \frac{\sigma_{n+1}}{T_{n+2}(x_k)\, T'_{n+1}(x_k)} = \frac{\pi}{n+1} \tag{32}$$

其余项为

$$E_n(f) == \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi) \tag{33}$$

目录

1. 数值积分的基本概念
2. Newton-Cotes 公式
3. 复合求积公式
4. Gauss 求积公式
5. Romberg 求积算法
6. 奇异积分
7. 数值微分

Romberg 求积算法

将 Richardson 外推思想用于前面介绍过的等距网格的复化求积公式即得到 Romberg 求积算法.

Richardson 外推

设 $\phi(x)$ 在 $h \to 0$ 时收敛到 $\phi(0) \equiv \phi^\star$，其余项可以写成

$$\varphi^* - \varphi(h) = \sum_{k=1}^{+\infty} a_k h^{p_k} \qquad 0 < p_1 < P_2 < \cdots \tag{34}$$

这里 P_k，a_k 与 h 无关，并设 $a_k \neq 0$，$\forall k$. 取 $q \in (0,1)$，重新定定义序列

$$\varphi_1(h) = \varphi(h) \qquad \varphi_{m+1}(h) = \frac{\varphi_m(qh) - q^{p_m}\varphi_m(h)}{1 - q^{p_m}} \qquad m = 1, 2, \cdots \tag{35}$$

Romberg 求积算法——Richardson 外推

Richardson 外推 2

则 $\{\phi_m(h)\}$ 以更快速度收敛到 $\phi^\star$

$$\varphi^* - \varphi_{m+1}(h) = \sum_{k=1}^{+\infty} a_{m+k}^{(m+1)} h^{p_{m+k}} \tag{36}$$

这里 $a_{m+k}^{(m+1)}$ 与 h 无关.

Romberg 求积算法

Romberg 求积算法

- 重复利用梯形公式 $h_j = 2^{-j}(b-a)$ 减半加密网络

$$
\begin{aligned}
T_1^{(0)} &= T_{2^0} = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\
T_1^{(1)} &= T_{2^1} = \frac{1}{2}\left[T_1^{(0)} + h_0 f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right] \\
T_1^{(k)} &= T_{2^k} = \frac{1}{2}\left[T_1^{(k-1)} + h_{k-1}H_{k-1}\right]
\end{aligned}
\tag{37}
$$

这里 $H_j = \sum_{l=1}^{2^j} f\left(a + \left(l - \frac{1}{2}\right) h_j\right)$.

- 之后利用 Richardson 外推的思想加速

$$
T_{j+1}^{k-1} = \frac{4^j T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{4^j - 1} \qquad j = 1, 2, \cdots, \qquad 1, 2, \cdots \tag{38}
$$

目录

1 数值积分的基本概念
2 Newton-Cotes 公式
3 复合求积公式
4 Gauss 求积公式
5 Romberg 求积算法
6 奇异积分
7 数值微分

奇异积分

对于连续函数可以使用上述数值方法进行处理，但实际中的被积函数并不光滑，可能是分片连续的，甚至可能是简短的、具有奇点的. 对于奇异积分常有以下几种方法:

- **区间截断**
  若 f 在 $x = 0$ 处无界，对积分 $\int_0^1 f(x)dx$，当 $|\int_0^\delta f(x)dx| < \epsilon$ 时，可用 $\int_\delta^1 f(x)dx$ 代替 $I(f)$ 进行积分.
- **变量替换**
  若 $f \in C[0,1]$，$n \geqslant 2$，对积分 $\int_0^1 x^{-1/n} f(x)dx$，令 $x = t^n$ 来消除奇性，即

$$I(f) = \int_0^1 t^{-1} f(t^n)\, nt^{n-1} dt = n \int_0^1 t^{n-2} f(t^n)\, dt \tag{39}$$

奇异积分

- **Kontorovitch 奇点分离法**
  通过对被积函数做等价奇性积分来分离奇性，如

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} + \int_0^1 \frac{\cos x - 1}{\sqrt{x}} dx = 2 + \int_0^1 \frac{\cos x - 1}{\sqrt{x}} dx \quad (40)$$

  经过变换后的积分已经丧失了奇性，可以正常利用数值积分公式进行计算.

目录

1 数值积分的基本概念

2 Newton-Cotes 公式

3 复合求积公式

4 Gauss 求积公式

5 Romberg 求积算法

6 奇异积分

7 数值微分

数值微分

对于导数的近似值，可以利用公式

$$f'(x_0) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = f'(x_0) + \mathcal{O}(h) \quad (41)$$

近似计算. 这里如果想要更准确地逼近 $f'(x)$，可以使 $|h|$ 尽可能的小；但考虑到舍入误差的影响，并不是 $|h|$ 越小越好.

数值微分

由此可以考虑用插值函数的的微分近似 f 的微分. 对于 Lagrange 插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, l_k(x) \qquad l_k(x) = \prod_{j\neq k} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \tag{42}$$

可以近似

$$f'(x) \approx L_n'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, l_k'(x) \tag{43}$$

其误差为

$$\begin{aligned} f'(x) - L_n'(x) = (R_n(x))' &= (f[x, x_0, \cdots, x_n]\, \omega_{n+1}(x))' \\ &= f[x, x, x_0, \cdots, x_n]\, \omega_{n+1}(x) + f[x, x_0, \cdots, x_n]\, \omega_{n+1}'(x) \end{aligned} \tag{44}$$

数值微分

由于等距节点的高次插值是不稳定的，因此应该使用分段低次插值来提高精度.

- 两点公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_0}{h} \qquad f'(x_1) \approx \frac{f_1 - f_0}{h} \tag{45}$$

其中前者为向前差分公式，后者为向后差分公式. 两点公式的精度为 $\mathcal{O}(h)$.

- 三点公式

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h} \quad f'(x_1) \approx \frac{f_2 - f_0}{2h} \quad f'(x_2) \approx \frac{3f_2 - 4f_1 + f_0}{2h} \tag{46}$$

三点公式的精度为 $\mathcal{O}(h^2)$.

数值微分——Richardson 外推

也可以把 Richardson 外推法用于数值微分中. 由

$$G(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots \tag{47}$$

故若令 $q = 1/2$，$p_k = 2k$，则取 $G_0(h) = G(h)$，则有

$$G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}(h/2) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1} = f'(x) + \mathcal{O}\left(h^{2(m+1)}\right) \qquad m = 1, 2, \cdots \tag{48}$$