CH6 数值积分与数值微分

§1 数值积分有关的基本概念

§2 牛顿---柯特斯公式

§3 龙贝格求积法

§4 高斯求积公式

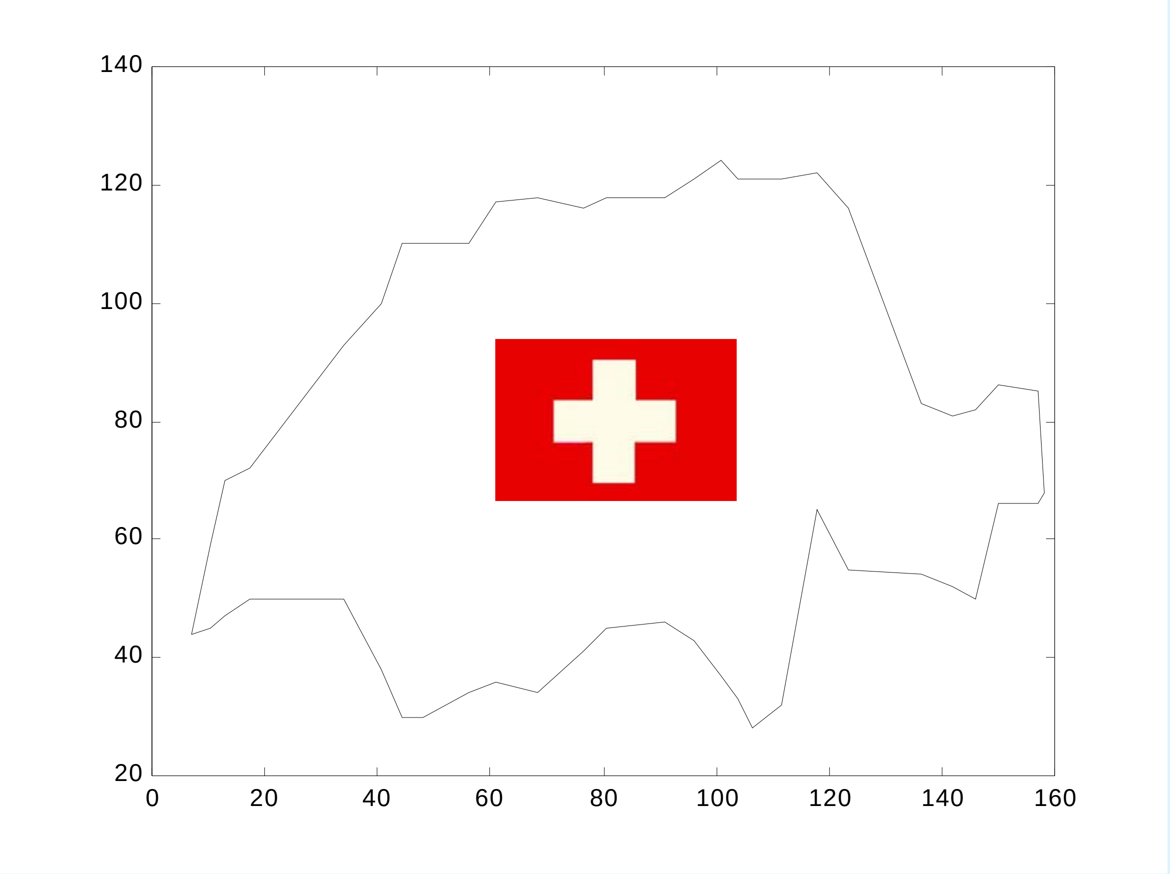
§5 数值微分

一个实际问题

为了计算瑞士国土的面积,首先对地图作了如下测量:以西向东方向为*x*轴,由南向北方向为*y*轴,选择方便的原点,并将从最西边界到最东边界在*x*轴上的区间适当地划分为若干段,在每个分点的*y*方向测出南边界点和北边界点的*y*坐标,数据如表(单位*mm*):

x	7.0	10.5	13.0	17.5	34.0	40.5	44.5	48.0	56.0
y1	44	45	47	50	50	38	30	30	34
y2	44	59	70	72	93	100	110	110	110
x	61.0	68.5	76.5	80.5	91.0	96.0	101.0	104.0	106.5
y1	36	34	41	45	46	43	37	33	28
y2	117	118	116	118	118	121	124	121	121
x	111.5	118.0	123.5	136.5	142.0	146.0	150.0	157.0	158.0
y1	32	65	55	54	52	50	66	66	68
y2	121	122	116	83	81	82	86	85	68

瑞士地图的外形如图(比例尺18mm:40km)



试由测量数据计算瑞士国土的近似面积,并与其精确值41288平方公里比较

§1 数值积分的基本概念

一、数值积分的必要性

对于积分 $$I(f)=\int_a^b f(x)dx$$

如果知道$f(x)$的原函数$F(x)$,则由$Newton-Leibniz$公式有

$$\int_a^b f(x)dx=F(x)\Big|_a^b=F(b)-F(a)$$

但是在工程技术和科学研究中,常会见到以下现象:

(1) $f(x)$的解析式根本不存在,只给出了$f(x)$的一些数值

(2) $f(x)$的原函数$F(x)$求不出来,如$F(x)$不是初等函数

例如 $\int \frac{x}{\sin x} dx \quad , \quad \int \frac{1}{\ln x} dx$

(3) $f(x)$的表达式结构复杂,求原函数较困难

例如 $$\int_0^x \frac{1}{1+t^4} dt = \frac{1}{4\sqrt{2}} \log \frac{x^2+\sqrt{2}x+1}{x^2-\sqrt{2}x+1}$$

$$+\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(arctg \frac{x}{\sqrt{2}-x} + arctg \frac{x}{\sqrt{2}+x}\right)$$

二 基本思想

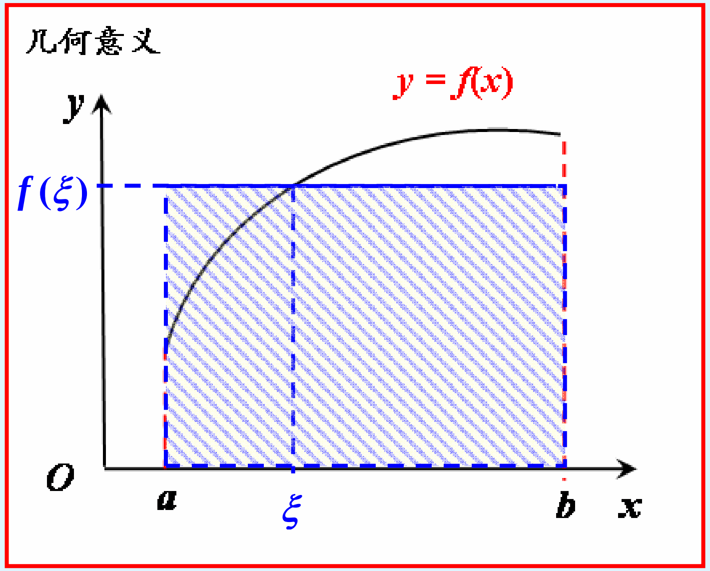
设$f(x)\in C[a,b]$，则由积分中值定理

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx$$
$$=(b-a)f(\xi) \quad \xi\in[a,b]$$

即：曲边梯形的面积等于

底为$b-a$,高为$f(\xi)$的矩形面积

$f(\xi)$--曲边梯形在$[a,b]$的平均高度。



1. 梯形公式

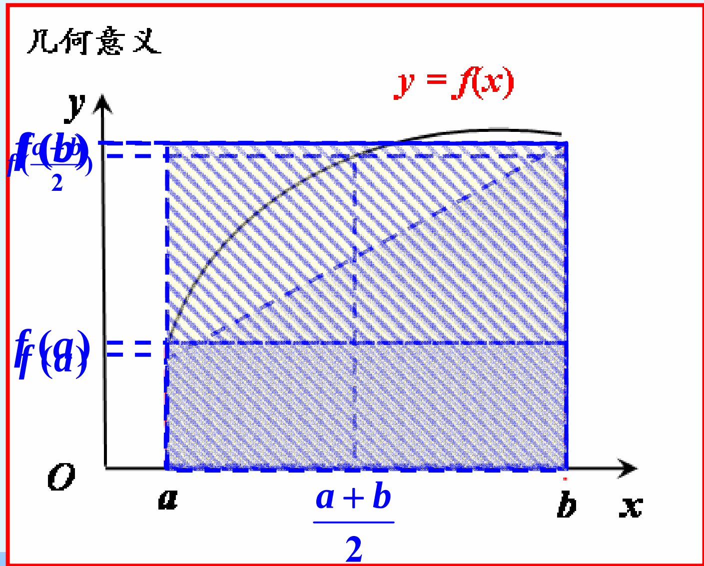
$$I(f)=\int_a^b f(x)dx \approx \frac{[f(a)+f(b)]}{2}(b-a)$$

2. 矩形公式

中：$I=\int_a^b f(x)dx \approx f(\frac{a+b}{2})(b-a)$

左：$I=\int_a^b f(x)dx \approx f(a)(b-a)$

右：$I=\int_a^b f(x)dx \approx f(b)(b-a)$



3 推广

$$\because I(f)=\int_a^b f(x)dx=\lim_{\lambda\to 0}\sum_{k=0}^{n} f(\xi_k)\Delta x_k，\text{其中}\lambda=\max_{0\le k\le n}\Delta x_k, \xi_k\in[x_{k-1},x_k].$$

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

其中, x_k：求积节点；

A_k：求积系数，仅与$\{x_k\}$有关，与$f(x)$无关。

求积余项：$R_n=I(f)-I_n=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$ 方法误差

如，求$I(f)=\int_0^1\frac{1}{1+x^2}dx$的近似值。

方法1：$I(f)=\int_0^1\frac{1}{1+x^2}dx\approx\frac{f(0)+f(1)}{2}=0.75$

方法2：$I(f)=\int_0^1\frac{1}{1+x^2}dx\approx\frac{f(0)+4f(0.5)+f(1)}{6}=0.78333...$

精确值：$I(f)=\int_0^1\frac{1}{1+x^2}dx=\arctan x\Big|_0^1=\frac{\pi}{4}=0.78539815...$

三、代数精度

如何衡量一个求积公式的好坏？

1. 定义：若某个求积公式对所有次数≤m的多项式都精确成立，而至少对一个m+1次多项式不精确成立，则称该公式具有m次代数精度。

2. 定理1：一个求积公式具有m次代数精度的充分必要条件是该公式对$x^k\ (k=0,1,\cdots,m)$精确成立，而对x^{m+1}不精确成立。

例1 验证矩形公式

$$I \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$ 的代数精度为多少？

解： 1) $f(x)=1$: 左 $= \int_a^b 1dx = b-a =$ 右

2) $f(x)=x$: 左 $= \int_a^b x dx = \frac{1}{2}(b^2-a^2)$

右 $=(b-a)\frac{a+b}{2}$ $\boxed{左=右}$

3) $f(x)=x^2$: 左 $= \int_a^b x^2 dx = \frac{1}{3}(b^3-a^3)$

右 $=(b-a)\left(\frac{a+b}{2}\right)^2$ $\boxed{左\neq右}$

所以代数精度为1。

例2　试确定系数，使

$I \approx A_1 f(a) + A_2 f(b)$的代数精度尽量高。

解：令公式分别对$f(x)=1, x$时精确成立，则有

$$\begin{cases} b-a = A_1 + A_2 \\ \frac{1}{2}(b^2-a^2) = A_1 a + A_2 b \end{cases}$$

解之得：　$A_1 = A_2 = \frac{1}{2}(b-a)$

此公式为 $I \approx \frac{1}{2}(b-a)(f(a)+f(b))$

所以至少具有1次代数精度。

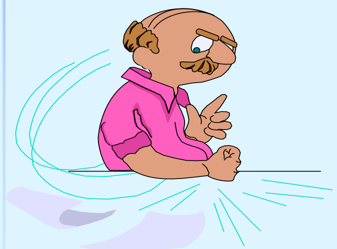
例3　试确定积分公式

$$I=\int_{-1}^{1}f(x)\approx A_1f(x_1)+A_2f(x_2)$$

中的参数A_1,A_2,x_1,x_2，使其代数精度尽量高，并求代数精度。

问题：该公式的代数精度最高可达多少？

思考



提示：　1　有几个待定参数？

　　　　2　可列几个方程？

答案：$A_1=A_2=1,\ \ x_1=-x_2=\dfrac{\sqrt{3}}{3};$

代数精度$n=3.$

备注：使代数精度达到最高的数值求积公式，

称为Gauss公式(§4中介绍).

推广：有n个节点的求积公式，精度最高可达多少？

三、插值型求积公式

在积分区间$[a,b]$上取一组节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$

且已知 $f(x_i)$,则可求$f(x)$的n次插值多项式

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

不同的插值方法有不同的基函数

$l_k(x)(k = 0,1,\cdots,n)$为插值基函数

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)dx$$

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

若计 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ ，则

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

称之为插值型求积公式。

求积余项为

$$R_n = I - I_n = \int_a^b [f(x) - P_n(x)]dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)dx$$

定理2：具有n+1个节点的数值求积公式

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

是插值型求积公式的充分必要条件为该公式至少具有n次代数精度。

例4 已知 $x_0=1/4, x_1=1/2, x_2=3/4$

(1)推导以这三个点为求积节点在[0,1]上的插值型求积公式；

(2) 指明求积公式所具有的代数精度；

(3) 用所求公式计算 $\int_0^1 x^2dx$

例4. 试确定下面积分公式中的参数使其代数精确度尽量高.

$$I(f)=\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I_1(f)$$

解:

1) $\boldsymbol{f(x)=1}$ $\qquad I=\int_0^h x^0 dx = h \qquad I_1 = h \qquad$ 左=右

2) $\boldsymbol{f(x)=x^1}$ $\qquad I=\int_0^h x^1 dx = \frac{h^2}{2} \qquad I_1=\frac{h^2}{2} \qquad$ 左=右

3) $\boldsymbol{f(x)=x^2}$

$$I=\int_0^h x^2 dx = \frac{h^3}{3} \qquad I_1=\frac{h^3}{2}+ah^2[0-2h]=(\frac{1}{2}-2a)h^3$$

令$I=I_1$ $\qquad a=\frac{1}{12}$

4) $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^3$ $\quad I=\int_0^h x^3dx=\dfrac{h^4}{4}$

$$I_1=\frac{h^4}{2}+ah^2[0-3h^2]=\frac{h^4}{4}$$

$\boxed{左=右}$

5) $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^4$ $\quad I=\int_0^h x^4dx=\dfrac{h^5}{5}$

$$I_1=\frac{h^5}{2}+ah^2[0-4h^3]=\frac{h^5}{6}$$

$\boxed{左\neq右}$

所以该积分公式具有**3**次代数精确度

§2 Newton-Cotes公式

一 Newton-Cotes公式

求积节点等距分布的插值型求积公式.

考虑插值型求积公式

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx$$

$$=\int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)dx =\sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)dx\cdot f(x_k)\right)$$

其中：$P_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$为$f(x)$的Lagrange插值多项式，

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx$$

下面考虑插值节点等距时A_k的计算：

将$[a,b]$ n等分，步长$h=\dfrac{b-a}{n}$，节点$x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,\mathrm{n})$，则

$$A_k=\int_a^b\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx\ \overset{\boxed{\text{换元}}}{\underset{x=a+th}{=\!=\!=}}\ \int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{(a+th)-(a+jh)}{(a+kh)-(a+jh)}d(a+th)$$

$$=\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{(t-j)h}{(k-j)h}\cdot hdt=h\int_0^n\frac{\prod\limits_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)}{k(k-1)(k-2)\cdots(k-k+1)\cdot(k-k-1)\cdots(k-n)}dt$$

$$=h\int_0^n\frac{\prod\limits_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)}{k!\cdot(-1)^{n-k}(k-n)!}dt=h\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{k!\cdot(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\j\neq k}}(t-j)dt$$

$$=(b-a)\cdot\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!\cdot(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\j\neq k}}(t-j)dt=(b-a)\cdot C_k^{(n)}$$

其中$C_k^{(n)}=\dfrac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!\cdot(n-k)!}\displaystyle\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\j\neq k}}(t-j)dt$，称为Cotes系数.

$$C_k^{(n)}=\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!\cdot(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}}(t-j)dt$$

∴ n阶Newton-Cotes公式为

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

注：$C_k^{(n)}$与$f(x)$和积分区间均无关！

❑ 几个低阶Newton-Cotes公式

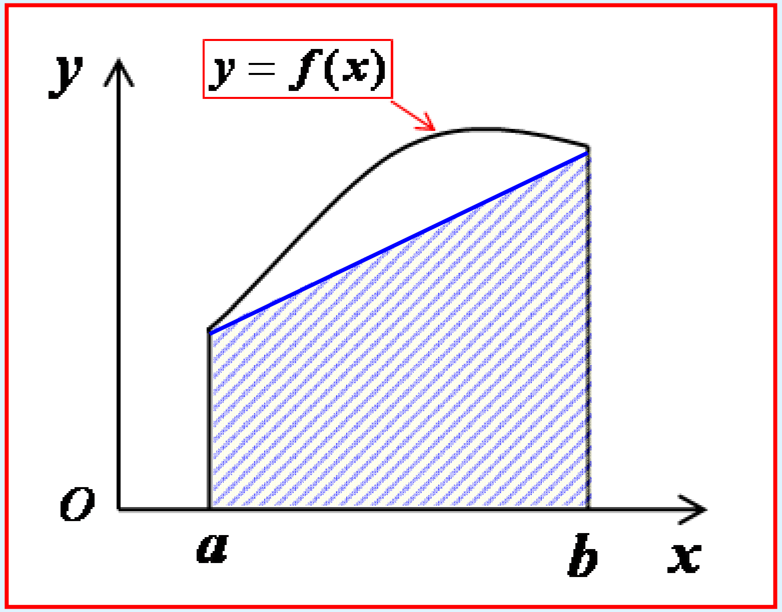
1、$n=1$时　积分区间一等分

$$C_0^{(1)}=-\int_0^1(t-1)dt=\frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)}=\int_0^1 tdt=\frac{1}{2}$$

$$\therefore I=\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$$

--梯形公式



$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k! \cdot (n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{0 \le j \le n \\ j \ne k}} (t-j)dt$$

2、$n=2$时　积分区间2等分

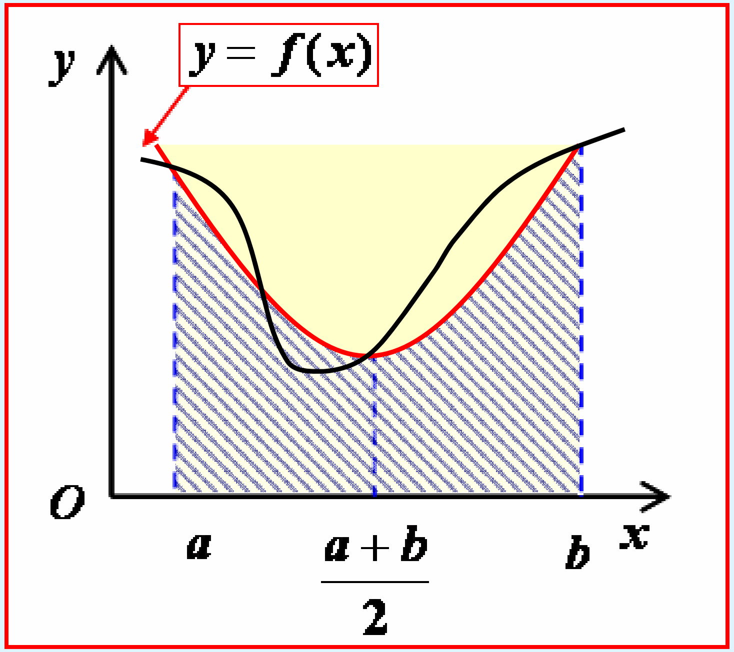
$$C_0^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)} = -\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt = \frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt = \frac{1}{6}$$

$$\therefore I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

--Simpson公式



3、同理可得$n=4$时：

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

--Cotes公式

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4))$$

n	$C_k^{(n)} = A \times B_k \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$	
	A	B_k
1	1/2	1 1
2	1/6	1 4 1
3	1/8	1 3 3 1
4	1/90	7 32 12 32 7
5	1/288	19 75 50 50 75 19
6	1/840	41 216 27 272 27 216 41
7	1/17280	751 3577 1323 2989 2989 1323 3577 751
8	1/28350	989 5888 -928 10496 -4540 10496 -928 5888 989

Cotes系数表

二 代数精度【P135-Th3】

$$n\text{阶Newton}-\text{Cotes公式的代数精度为}m=\begin{cases}n+1, & \text{当}n\text{为偶数}\\ n\ , & \text{当}n\text{为奇数}\end{cases}.$$

注：梯形公式、Simpson公式和Cetos公式分别具有1、3、5次代数精度。

例1 【P135-例2】

分别用梯形公式、Simpson公式和Cetos公式计算积分$I=\int_{0.6}^{1}\frac{1}{1+x^2}dx$.

三 求积余项

1 梯形公式

$$R(T)=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx$$

$$=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

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

2 Simpson公式

$$R(S)=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$$

3 Cotes公式

$$R(C)=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

一般插值求积公式余项：

$$R_n=I-I_n$$

$$=\int_a^b [f(x)-P_n(x)]dx$$

$$=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)dx$$

积分中值定理：

设$f(x),g(x)\in C_{[a,b]}$且$g(x)$在$[a,b]$上不变号，则$\exists\xi\in[a,b]$，满足：

$$\int_a^b f(x)g(x)dx=f(\xi)\int_a^b g(x)dx$$

四 稳定性

1 Cotes系数的特点

$$\because I_n=(b-a)\cdot\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)\text{对}f(x)=1\text{精确成立}$$

$$\therefore \int_a^b 1dx=(b-a)\cdot\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}\Rightarrow\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}=1$$

由Cotes系数表，看到：

当$n\le 7$时，$C_k^{(n)}$全为“正数”；

当$n\ge 8$时，$C_k^{(n)}$中“有正有负”。

2 舍入误差

设$f(x_k)$为精确值,而$\tilde{f}(x_k)$为$f(x_k)$的近似值, 误差$\varepsilon_k = f(x_k) - \tilde{f}(x_k)$

由此引起的计算误差为:

$$\left|I_n - \tilde{I}_n\right| = \left|(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k) - (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} \tilde{f}(x_k)\right|$$

$$= (b-a)\left|\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}[f(x_k) - \tilde{f}(x_k)]\right| = (b-a)\left|\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}\varepsilon_k\right|$$

$$\le (b-a)\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right|\cdot\left|\varepsilon_k\right| \le (b-a)\varepsilon\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right| \qquad \text{其中}\ \varepsilon=\max\left\{\left|\varepsilon_k\right|\right\}.$$

$\therefore$ 当$n \le 7$时, $C_k^{(n)} > 0$,有 $\left|I_n - \tilde{I}_n\right| \le (b-a)\varepsilon$, 即误差没有放大，稳定。

当$n \ge 8$时，$C_k^{(n)} > 0 or < 0$,

性质:$\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$

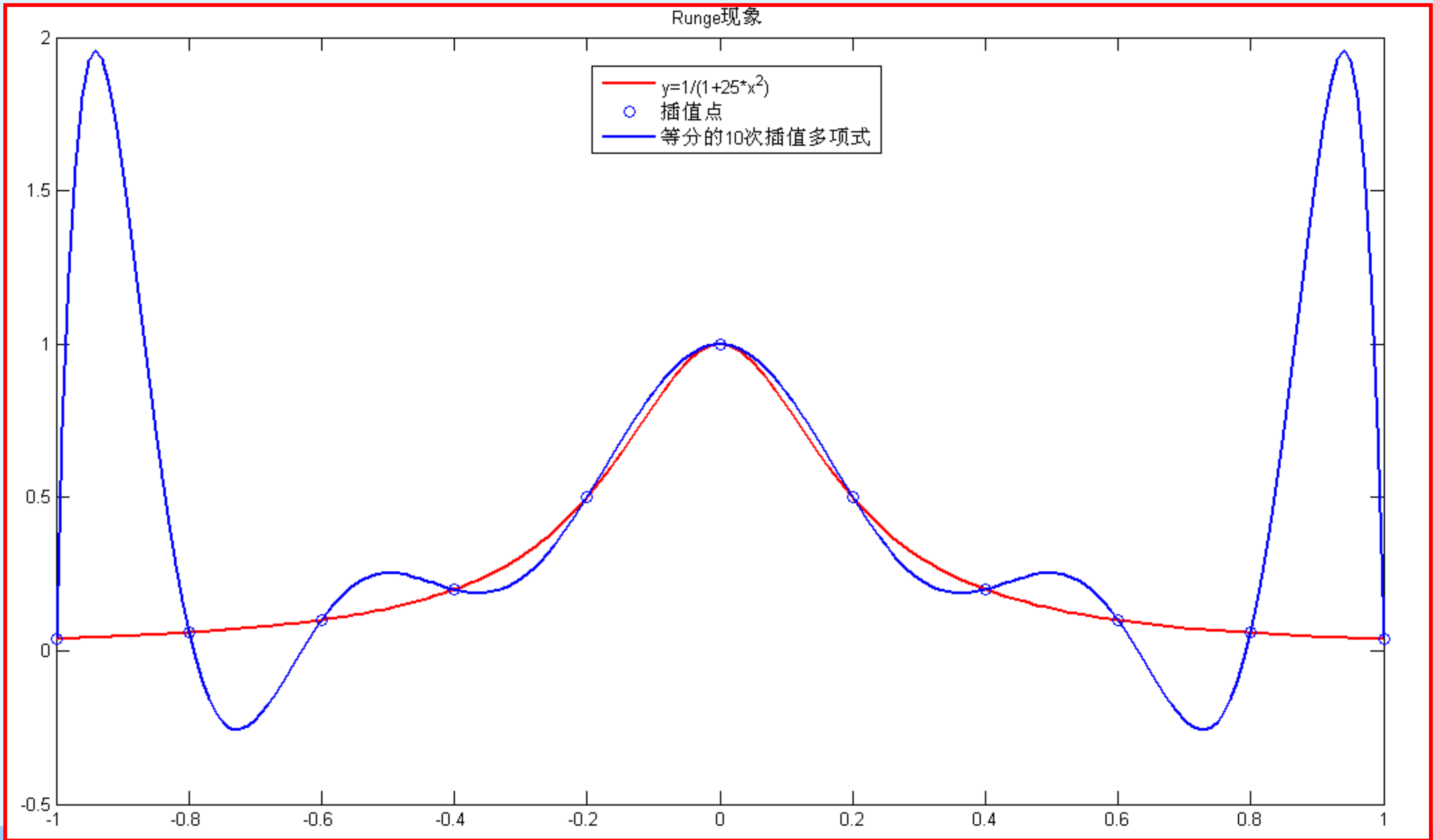
$$(b-a)\varepsilon\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right| \ge (b-a)\varepsilon\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = (b-a)\varepsilon$$

即误差可能被放大，不稳定。

收敛性　收敛性无保证，即 $\lim\limits_{n\to+\infty}\left|I-I_n\right| \xlongequal{\text{不一定}} 0$

即：高阶公式代数精度高，但效果不一定好！

如计算 $I=\int_{-1}^{1}\frac{1}{1+25x^2}dx$ 的近似值：



五 复化求积法 利用$f(x)$的低次分段插值多项式代替$f(x)$进行积分！

将积分区间$[a,b]$分割为n等份，各节点$x_k = a + kh \ (k = 0,1,\cdots,n), h = \dfrac{b-a}{n}$,则

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$$

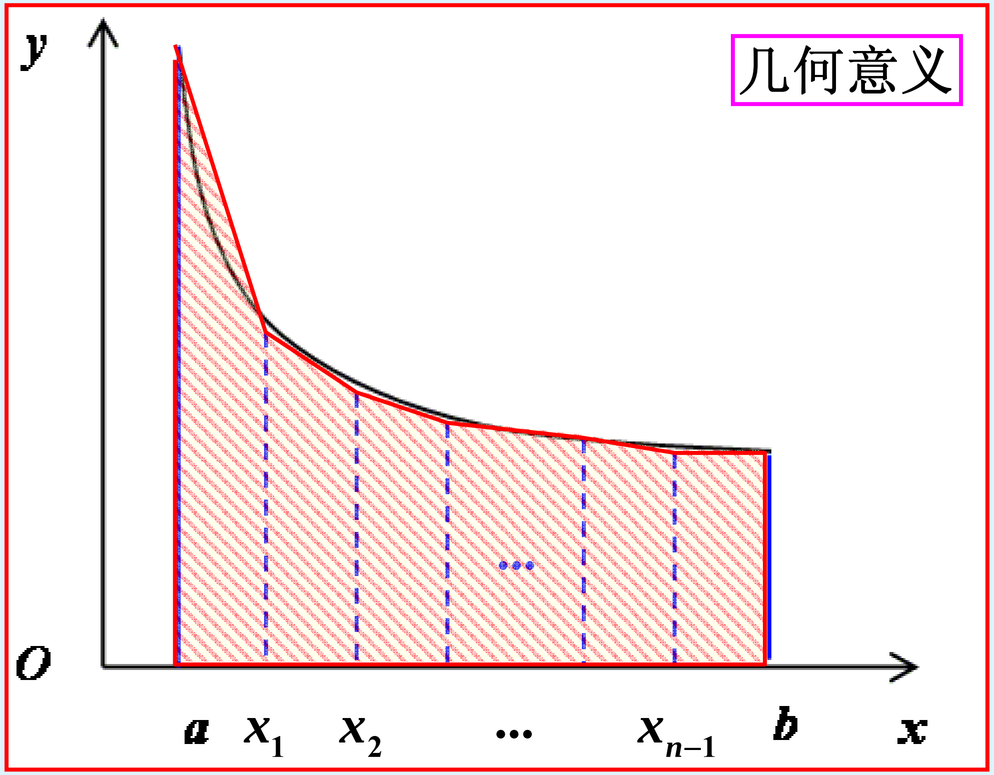
1 复化梯形公式

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$$

$$\approx \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

$$= \frac{b-a}{2n}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$$

$$= T_n$$



$$[x_k, x_{k+1}] \xlongequal{2等分} [x_k, x_{k+1/2}] \cup [x_{k+1/2}, x_{k+1}]$$

2 复化Simpson公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx S_n = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{6}\left[\boxed{f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})}\right]$$

$$= \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]$$

$$其中 x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}$$

3 复化Cotes公式

$$\boxed{x_{k+1/4} = x_k + \frac{1}{4}h}$$

$$C_n = \frac{b-a}{90n}\left[7f(a) + \sum_{k=0}^{n-1}[32f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12f(x_{k+\frac{2}{4}})\right.$$

$$\left. + 32f(x_{k+\frac{3}{4}})] + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)\right]$$

例1 已知$f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$的数据，用复化求积法求$I=\int_0^1 \dfrac{\sin x}{x}dx$的近似值。

复化梯形公式：$n=8, h=\dfrac{1}{8}$

$$T_8=\frac{1}{16}[f(0)+2\sum_{k=1}^{7} f(x_k)+f(1)]$$

$=0.94569086$ 精度最低

复化Simpson公式：$n=4, h=\dfrac{1}{4}$

$$S_4=\frac{1}{24}[f(0)+4\sum_{k=0}^{3} f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{3} f(x_k)+f(1)]$$

$=0.94608331$ 精度次高

复化Cotes公式：$n=2, h=\dfrac{1}{2}$

i	x_i	$f(x_i)$	T_8	S_4	C_2
0	0	1	x_0	x_0	x_0
1	0.125	0.99739787	x_1	$x_{0+1/2}$	$x_{0+1/4}$
2	0.25	0.98961584	x_2	x_1	$x_{0+1/2}$
3	0.375	0.97672674	x_3	$x_{1+1/2}$	$x_{0+3/4}$
4	0.5	0.95885108	x_4	x_2	x_1
5	0.625	0.93615564	x_5	$x_{2+1/2}$	$x_{1+1/4}$
6	0.75	0.90885168	x_6	x_3	$x_{1+1/2}$
7	0.875	0.87719257	x_7	$x_{3+1/2}$	$x_{1+3/4}$
8	1	0.84147098	x_8	x_4	x_2

$$C_2=\frac{1}{180}[7f(0)+\sum_{k=0}^{1}[32f(x_{k+\frac{1}{4}})+12f(x_{k+\frac{2}{4}})+32f(x_{k+\frac{3}{4}})]+14\sum_{k=1}^{1} f(x_k)+7f(1)]$$

$=0.94608307$ 精度最高

注：精确值$I=\int_0^1 \dfrac{\sin x}{x}dx=0.946083070367183\cdots$

4 复化求积公式余项

$[a,b]$上的求积余项	$[x_{k-1},x_k]$上的求积余项	复化公式的余项
$R(T)=-\frac{b-a}{12}(b-a)^2 f''(\eta)$	$R(T_k)=-\frac{h}{12}\cdot h^2\cdot f''(\eta_k)$	$R(T_n)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)$
$R(S)=-\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\eta)$	$R(S_k)=-\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_k)$	$R(S_n)=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$
$R(C)=-\frac{2(b-a)}{945}(\frac{b-a}{4})^6 f^{(6)}(\eta)$	$R(C_k)=-\frac{2h}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta_k)$	$R(C_n)=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$

以复化梯形公式为例证明：

$[a,b]$上的求积余项	$[x_{k-1},x_k]$上的求积余项	复化公式的余项
$R(T)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$	$R(T_k)=-\frac{h}{12}\cdot h^2\cdot f''(\eta_k)$	$R(T_n)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)$

设函数$f(x)\in C^2[a,b]$,则复化梯形公式求积余项为:

$$I-T_n=\int_a^b f(x)dx-T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)dx-\sum_{k=0}^{n-1}T_k=\sum_{k=0}^{n-1}\left(\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)dx-T_k\right)$$

$$=\sum_{k=0}^{n-1}R(T_k)=\sum_{k=0}^{n-1}\left(-\frac{h^3}{12}\cdot f''(\eta_k)\right)=-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=-\frac{h^2}{12}\cdot\frac{b-a}{n}\cdot\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)$$

$\because f''(x)$在$[a,b]$上连续

$\therefore f''(x)$在闭区间$[a,b]$内有最大、最小值m和M,即$m\le f''(x)\le M$.

$$\therefore n\cdot m\le\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)\le n\cdot M,\ m\le\sum_{k=0}^{n-1}\frac{f''(\eta_k)}{n}\le M$$

由连续函数的介值定理,$\exists\eta\in[a,b]$,使得 $\sum_{k=0}^{n-1}\frac{f''(\eta_k)}{n}=f''(\eta)$

$$\therefore I-T_n=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)$$

五 变步长复化求积法

❑复化求积公式存在的问题

复化求积法是提高精度的有效方法，但是由于$f(x)$表达式往往未知，在给定精度条件下，步长h难以确定！

- ✓ h太大，精度达不到；
- ✓ h太小，计算量大！

❑ 变步长复化求积法的基本思想

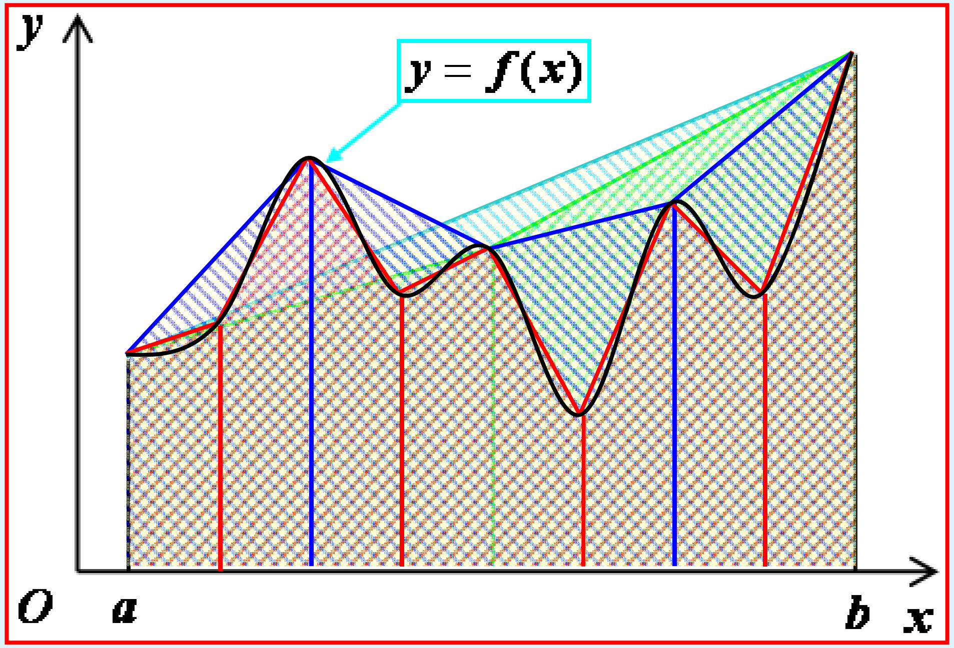
先选择一个较大的步长，对结果进行精度估计，若不满足精度则步长缩小一半，直到满足精度要求。

❑ 需要考虑的问题

- ✓ 如何判断结果的精度？
- ✓ 在h减半的情况下，如何节省计算量？

☝计算结果精度的如何判定？

$$\because R(T_n)=I-T_n=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)$$



$$\therefore \frac{I-T_n}{I-T_{2n}}=\frac{-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta_1)}{-\frac{(h/2)^2}{12}(b-a)f''(\eta_2)}\approx 4$$

$$\therefore I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

T_1，T_2，T_4，T_8，……

直至满足：？$|T_{2n}-T_n|\le\varepsilon$

含义：以T_{2n}作为I的近似值，误差大概为

$$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

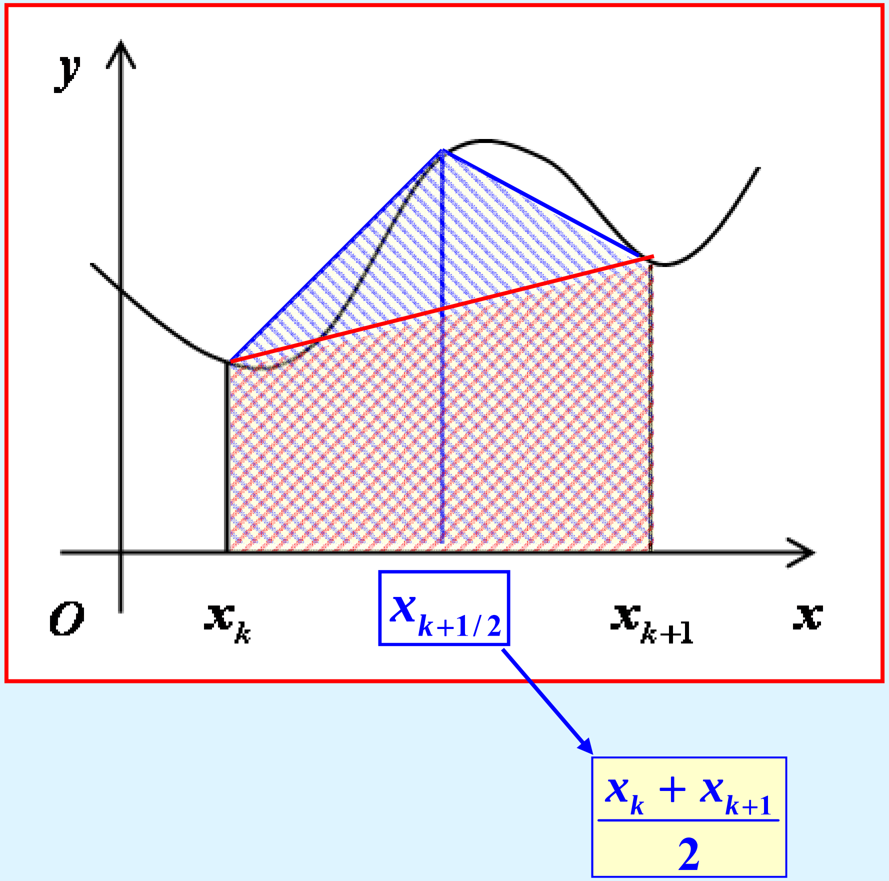
精度判定的条件："$|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$"or"$\frac{|T_{2n}-T_n|}{|T_{2n}|}<\varepsilon$"

✌步长h减半后，如何节省量？

n等分积分区间$[a,b]$时，在$[x_k, x_{k+1}]$上

$$T_n^{(k)} = \frac{h_n}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

$2n$等分积分区间$[a,b]$后，在$[x_k, x_{k+1}]$上



$$T_{2n}^{(k)} = \frac{h_n/2}{2}[f(x_k) + 2f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{h_n}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]\right] + \frac{h_n}{2} f(x_{k+1/2})$$

$$= \frac{1}{2} T_n^{(k)} + \frac{h_n}{2} f(x_{k+1/2})$$

$$T_{2n} = \sum_{k=0}^{n-1} T_{2n}^{(k)} = \sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{1}{2} T_n^{(k)} + \frac{h_n}{2} f(x_{k+1/2})\right) = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{n-1}\left(T_n^{(k)}\right) + \frac{h_n}{2}\sum_{k=0}^{n-1}\left(f(x_{k+1/2})\right)$$

$$= \frac{1}{2} T_n + \frac{h_n}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2})$$ 即：步长减半后，只需“加”算$f(x_{k+1/2})$。

§3 Romberg求积法

回顾

✓复化公式的求积余项

$$R(T_n) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)$$

$$R(S_n) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$$

$$R(C_n) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

✓复化梯形公式的事后误差估计

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$$

✓T_{2n}与T_n之间的关系

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h_n}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2})$$

□ T_n与S_n、S_n与C_n之间的关系

✓ $\because I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$ 即：$\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$可看成是$T_{2n}$的误差估计

$\therefore$若记$\bar{T} \triangleq T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$，则可以"期待"$\bar{T}$比$T_{2n}$有更好的精度

事实上，在$[x_k, x_{k+1}]$上有：

$$T_n^{(k)} = \frac{h_n}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

$$T_{2n}^{(k)} = \frac{h_n/2}{2}[f(x_k) + 2f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})]$$

$$S_n^{(k)} = \frac{h_n}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})]$$

显然满足：$S_n^{(k)} = T_{2n}^{(k)} + \frac{1}{3}(T_{2n}^{(k)} - T_n^{(k)}) = \frac{4}{3}T_{2n}^{(k)} - \frac{1}{3}T_n^{(k)}$

$\therefore$在$[a,b]$上利用复化的Simpson公式有：

$$S_n = \sum_{k=0}^{n-1} S_n^{(k)} = \sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{4}{3}T_{2n}^{(k)} - \frac{1}{3}T_n^{(k)}\right) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$

$$R(S_n) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$$

$$R(C_n) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

✓类似地：$\because \dfrac{I-S_n}{I-S_{2n}} = \dfrac{-\dfrac{b-a}{180}\left(\dfrac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_1)}{-\dfrac{b-a}{180}\left(\dfrac{h/2}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_2)} \approx 16$

$$\therefore I - S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n)$$

$\therefore$ 可以期待 $\overline{S}_{2n} \triangleq S_{2n} + \dfrac{1}{15}(S_{2n} - S_n)$ 具有更高精度

事实上，$C_n = S_{2n} + \dfrac{1}{15}(S_{2n} - S_n)$

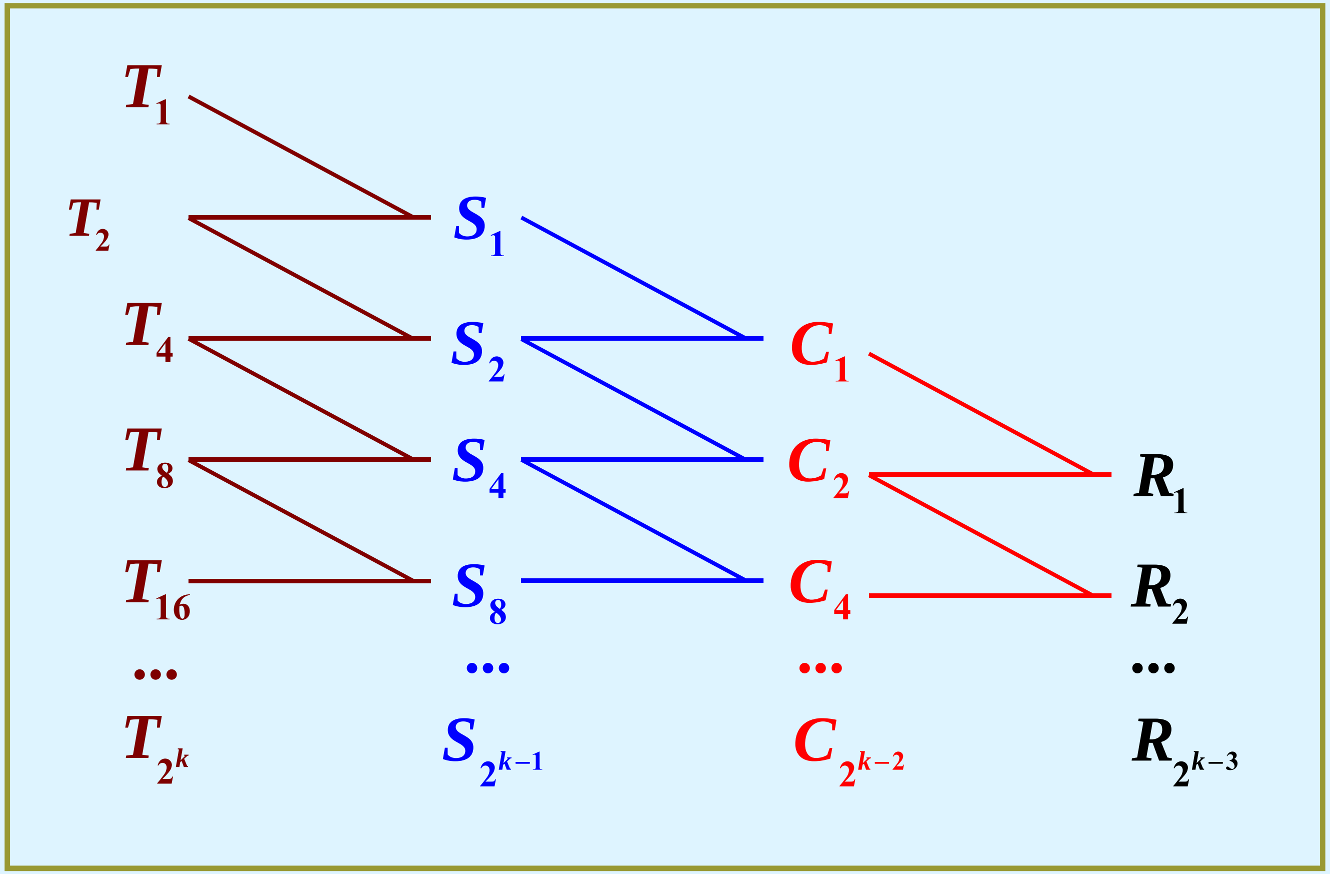
✓利用插值余项类似可得

$$\therefore I - C_{2n} \approx \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n)$$

若记：$R_n \triangleq C_{2n} + \dfrac{1}{63}(C_{2n} - C_n)$

则可以"期待" R_n 比 C_{2n} 精度更高，称为龙贝格公式。

❑Romberg公式计算过程



§4 Gauss公式

一、问题提出

插值型求积公式 $I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \qquad (*)$

代数精度至少为**n-1**,

问 (1)最高可达多少？
(2)如何构造这样的公式？

二、基本概念和结论

节点个数

1、只要适当选择求积节点，(*)精度最高可达2n-1.

2、具有最高精度的求积公式称为高斯公式，
此时求积节点x_k称为高斯点。

3、设 $f(x), g(x) \in C[a,b]$, 若 $\int_a^b f(x)g(x)dx = 0$,
称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 正交。

4、定理:
对插值型求积公式(*),节点 $x_k(k=1,2,\ldots,n)$ 为高斯点

$$\Leftrightarrow \int_a^b p(x)\omega(x)dx = 0, \text{其中 } \omega(x) = \prod_{k=1}^{n}(x - x_k), p(x)\text{指}$$

一切次 $\le n-1$ 的多项式。

由此得构造高斯公式的方法:

寻找[a,b]上与次数≤n-1的多项式正交的n次多项式,
且恰有n个互不相同的零点就是高斯点。

三、高斯---勒让德求积公式

求 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$ 高斯公式

1、勒让德多项式

(1)三项递推式

$$P_0(x)=1, P_1(x)=x,$$

$$P_{n+1}(x)=\frac{1}{n+1}[(2n+1)xP_n(x)-nP_{n-1}(x)]$$

(2)性质

① $$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx=\begin{cases} 0, & m\neq n \\ \dfrac{2}{2n+1}, & m=n \end{cases}$$

②$P_n(x)$在[-1,1]上与任意次数≤n-1的多项式正交。

③$P_n(x)$在[-1,1]上有n个互异零点。

2、几个常用的高斯公式

(1)一点高斯—勒让德公式：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 2f(0) \qquad (A_1 = 2, x_1 = 0)$$

(2)两点高斯—勒让德公式：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$$

$$\left(A_1 = A_2 = 1, x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

四、一般积分区间上的高斯求积公式

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2})dt$$

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

(1)一点高斯公式： $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(\frac{b+a}{2})$

(2)两点高斯公式：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(-\frac{b-a}{2\sqrt{3}} + \frac{b+a}{2}) + f(\frac{b-a}{2\sqrt{3}} + \frac{b+a}{2})]$$

例：用两点高斯公式求 $\int_{-5}^{1}\frac{1}{(x+2)^2+1}dx$ 的近似值。

解：$\int_{-5}^{1}\frac{1}{(x+2)^2+1}dx \overset{x=3t-2}{=\!=\!=\!=} 3\int_{-1}^{1}\frac{1}{9t^2+1}dt$

$$\approx 3\left[\frac{1}{9(-\frac{1}{\sqrt{3}})^2+1}+\frac{1}{9(\frac{1}{\sqrt{3}})^2+1}\right]=3\times\frac{2}{4}=\frac{3}{2}$$

例 2 用 Gauss-Legendre 公式求积分 $I=\int_{-1}^{1}\frac{\sin(x)}{x}dx$

解：（1）用三点 **Gauss** 公式，计算结果为 **g3= 1.892174997844**。将它除 **2** 得积分

$$I=\int_{0}^{1}\frac{\sin(x)}{x}dx\approx 0.946087498922$$

（2）用 **6** 点 **Gauss** 公式

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx G_6=0.4679139f(-0.2386192)+0.3607616f(-0.6612094)$$
$$+0.1713245f(-0.9324695)+0.1713245f(0.9324695)$$
$$+0.3607616f(0.6612094)+0.4679139f(0.2386192)$$

积分结果为 **g6= 1.892166133727** ，将它除 **2** 得积分：

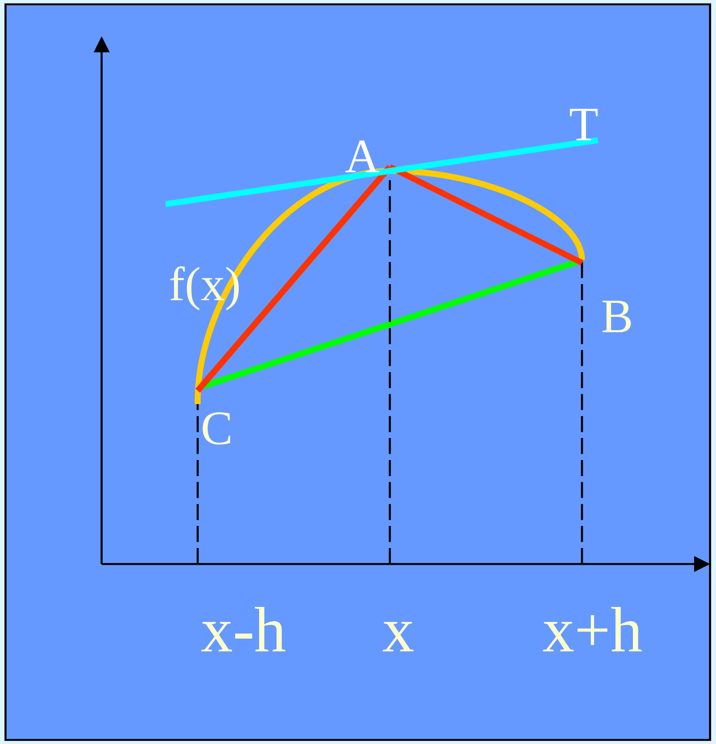
$$I=\int_{0}^{1}\frac{\sin(x)}{x}dx\approx 0.946083066863$$

这个数值只用了 **6** 个求积节点，达到 **8** 位有效数字；如用复化公式计算将要二分很多次，即使用 **Romberg** 方法也要二分 **4** 次，需要用 **17** 个求积节点。

§5 数 值 微 分

一、用差商近似代替导数

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= \lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \\
&= \lim_{h\to 0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h} \\
&= \lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}
\end{aligned}
$$



截断误差

1、向前差商： $f'(x) \approx \dfrac{f(x+h)-f(x)}{h}$ $\quad -\dfrac{h}{2} f''(\xi)$

2、向后差商： $f'(x) \approx \dfrac{f(x)-f(x-h)}{h}$ $\quad \dfrac{h}{2} f''(\eta)$

3、中心差商： $f'(x) \approx \dfrac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ $\quad -\dfrac{h}{6} f'''(\gamma)$

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{h^2}{2} f''(\xi)$$

二、插值型求导公式

设函数$f(x)$不一定给出,但知道$f(x)$在节点处的函数值

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

$$f(x_k) = y_k \ , \ k = 0,1,\cdots,n$$

则可构造插值多项式$P(x)$使得

$$f(x) \approx P_n(x) \quad f'(x) \approx P_n'(x) \quad f''(x) \approx P_n''(x)$$

其截断误差为

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

对上式两边求导,有

$$R_n'(x)=\frac{[f^{(n+1)}(\xi)]'}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x)$$

由于ξ与x有关,$[f^{(n+1)}(\xi)]'$将很难确定

但是当$x=x_k$时,$f'(x_k)$可以求出

$$R_n'(x_k)=\frac{[f^{(n+1)}(\xi)]'}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x_k)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$$

$$=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$$

$$=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(x_k-x_j)\qquad k=0,1,\cdots,n$$

$$f'(x_k) = P_n'(x_k) + E_n(x_k) \qquad \text{---------(1)}$$

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

$$E_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(x_k - x_j) \qquad \text{---------(2)}$$

(1)式称为插值型求导公式，(2)式为相应产生的误差

二、低阶插值型求导公式

1.两点公式

$n=1$时 $\quad f'(x_k)=P_1'(x_k)+R_1'(x_k) \quad k=0,1$

$$P_1(x)=y_0\frac{x-x_1}{x_0-x_1}+y_1\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

$$P_1'(x)=y_0\frac{1}{x_0-x_1}+y_1\frac{1}{x_1-x_0}$$

$$R_1'(x_k)=\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}(x_k-x_j) \quad k=0,1,j\neq k$$

若令$h=x_1-x_0$,则

$$f'(x_0) = P_1'(x_0) + R_1'(x_0)$$

$$= \frac{1}{h}(y_1 - y_0) - \frac{h}{2} f^{(2)}(\xi) \qquad \text{--------(3)}$$

$$f'(x_1) = P_1'(x_1) + R_1'(x_1)$$

$$= \frac{1}{h}(y_1 - y_0) + \frac{h}{2} f^{(2)}(\xi) \qquad \text{--------(4)}$$

(3)(4)式称为带余项的两点求导公式

即 $f'(x_0) \approx f'(x_1) \approx \dfrac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0))$

2.三点公式

$n=2$时 $\quad f'(x_k)=P_2'(x_k)+E_2(x_k) \quad k=0,1,2$

$$P_2(x)=y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$P_2'(x)=y_0\frac{(x-x_1)+(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)+(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}+y_2\frac{(x-x_0)+(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$E_2(x_k)=\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{2}(x_k-x_j)$$

若 x_0,x_1,x_2为等距节点，即$h=x_1-x_0=x_2-x_1$，则

$$P_2'(x_0) = f_0 \frac{-3h}{2h^2} + f_1 \frac{-2h}{-h^2} + f_2 \frac{-h}{2h^2} = \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2)$$

$$P_2'(x_1) = f_0 \frac{-h}{2h^2} + f_1 \frac{h-h}{-h^2} + f_2 \frac{h}{2h^2} = \frac{1}{2h}(-f_0 + f_2)$$

$$P_2'(x_2) = f_0 \frac{h}{2h^2} + f_1 \frac{2h}{-h^2} + f_2 \frac{3h}{2h^2} = \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2)$$

$$E_2(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) = \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi)$$

$$E_2(x_1) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) = -\frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi)$$

$$E_2(x_2) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi)$$

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3f_0+4f_1-f_2)+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi) \qquad \text{--------(5)}$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}(-f_0+f_2)-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi) \qquad \text{--------(6)}$$

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}(f_0-4f_1+3f_2)+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi) \qquad \text{--------(7)}$$

(5)(6)(7)式称为带余项的三点求导公式

其中(7)式又称为中点公式,其精度稍高

在分段求导公式中有着重要的地位

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

类似的给出二阶三点求导公式

$$f''(x_1) \approx P''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_1+h) - 2f(x_1) + f(x_1-h)]$$

$$R = \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

课后作业:

习题六(P157):

2, 3(1)(4)，4，5，6(1)(2)，8(1)