计算方法

Numerical Computational Methods

前言

说明写书的背景和目的，写书的章节分配。

背景：

1）大背景，就是计算机的广泛应用，要想运用好计算机解决实际问题，计算方法是必须要掌握的基本知识。

2）教育改革，教学技术提升，多媒体技术辅助教学的推广，使得教学学时越来越少。最早，计算机科学与技术专业，计算方法是 80 学时，后来压缩到 72 学时，到 64 学时，48 学时，现在是 32 学时。需要应对这样的一个变化。

教材要怎么转变才能适应这样的变化呢？需要学生进行大量的课外阅读。那就要以很详实的描述方式把很多需要学生阅读的内容给写出来。借助可视化方法来展示数学原理到计算方法的转变。

3）信息专业的学生，要不要有一个专门的教材？

如何说明，对于信息专业来讲，计算方法无处不在？借用信息专业本身课程中遇到的计算方法方面的应用有哪些呢？软件工程中的成本分析，管理方面的问题，

第五章 数值积分与数值微分

1. 引言

一、数值积分的必要性

首先回顾一下定积分的定义。设$f(x) \in C[a,b], a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$,

任取$\xi_i \in [x_i, x_{i+1}], i = 0,1,2,\cdots,n-1$。作$\sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\Delta x_i$，如果

$\lim\limits_{\lambda\to 0} \sum_{i=0}^{n-1} f(\xi_i)\Delta x_i$，$\lambda = max\{\Delta x_i\}$存在，则称$f(x)$可积，极限值称为函数$f(x)$

在区间$[a,b]$上的定积分，记为:$\int_a^b f(x)dx$，也称 Riemenn 积分。

本章主要解决的就是如$I = \int_a^b f(x)dx$形式的一元函数定积分的数值计算问题。

在微积分里，按 Newton-Leibniz 公式求定积分$I = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$，其中$F(x)$称为被积函数$f(x)$的原函数。要想使用 Newton-Leibniz 公式，要求被积函数$f(x)$的原函数$F(x)$有解析表达式；且$f(x)$的原函数$F(x)$为初等函数。但是这两个条件时常得不到满足，有时被积函数$f(x)$的原函数$F(x)$不能用初等函数表达，如：$sin(x^2)$，$cos(x^2)$，$\frac{sinx}{x}$，$\frac{1}{lnx}$，$\sqrt{1+x^3}$，e^{-x^2}，这样使得 Newton-Leibniz 公式不能用！

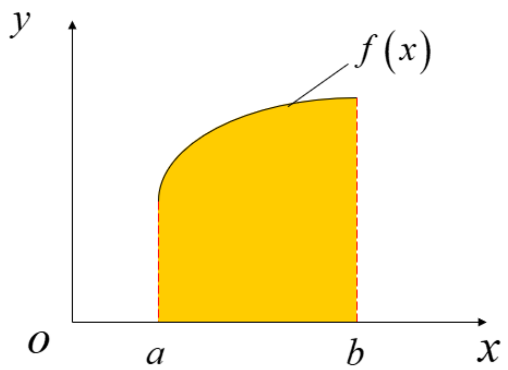
另外有些被积函数其原函数虽然可以用初等函数表示成有限形式，但表达式相当复杂，计算极不方便. 例如函数:$x^2\sqrt{2x^2+3}$并不复杂，但它的原函数却十分复杂:$\frac{1}{4}x^2\sqrt{2x^2+3} + \frac{3}{16}x^2\sqrt{2x^2+3} - \frac{9}{16\sqrt{2}}ln\left(\sqrt{2}x + \sqrt{2x^2+3}\right)$，使用 Newton-Leibniz 公式计算定积分计算代价大。更多时候，$f(x)$没有解析表达式，只有数表形式，也是无法使用 Newton-Leibniz 公式进行积分。上述实例均说明了通过原函数来计算积分有它的局限性，所以需要研发积分的数值方法。

二、数值积分的基本思想

1、定积分的几何意义

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

$f(x)$函数曲线下，$[a,b]$区间上曲边梯形的面积。



2、数值积分的理论依据

依据积分中值定理， 对于连续函数$f(x)$在$[a,b]$内存在一点ξ，使得：$I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\xi)$，称$f(\xi)$为$f(x)$在区间$[a,b]$上的平均高度。

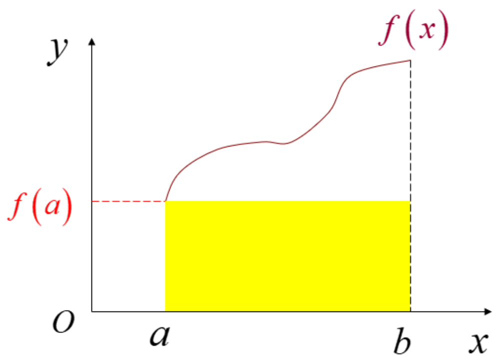
3、求积公式的构造

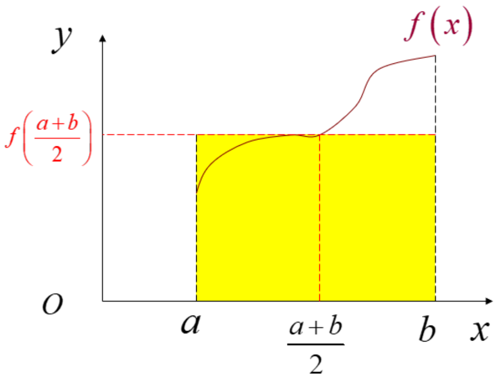
若简单选取区间端点或中点的函数值作为平均高度，根据选择的点不同，可得一点求积公式。

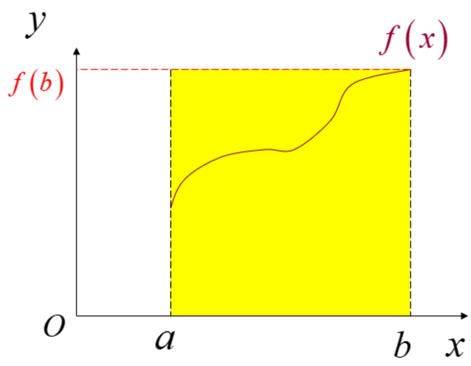
左矩形公式：$I \approx (b-a)f(a)$

右矩形公式：$I \approx (b-a)f(b)$

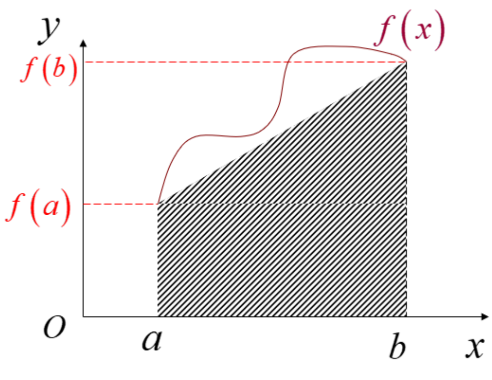
中矩形公式：$I \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$







若取a,b两点，并令$f(\xi) = \frac{f(a)+f(b)}{2}$，则可得梯形公式$I \approx \frac{(f(a)+f(b))}{2}(b-a)$，也称为两点求积公式。是连接两点直线下面的梯形的面积。



若取三点，$\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\frac{\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}}{2}$，并令$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\xi})=\frac{f(a)+4f(c)+f(b)}{6}$则可得 Simpson 公式$\boldsymbol{I}\approx\frac{(f(a)+4f(c)+f(b))}{6}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a})$，也称为三点求积公式。是由过三点的抛物线下的曲边梯形的面积。

一般地，取区间$[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$内$\boldsymbol{n}+\mathbf{1}$个点$\{\boldsymbol{x}_i\},(\boldsymbol{i}=\mathbf{0},\mathbf{1},\mathbf{2},\cdots,\boldsymbol{n})$处的高度$\{\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)\},(\boldsymbol{i}=\mathbf{0},\mathbf{1},\mathbf{2},\cdots,\boldsymbol{n})$

通过加权平均的方法近似地得出平均高度$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\xi})$。

这类求积方法称为机械求积: $\boldsymbol{I}=\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{i=0}^n\lambda_i f(x_i)$，或者写为：$\boldsymbol{I}=\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$，其中$\{\boldsymbol{x}_i\},(\boldsymbol{i}=\mathbf{0},\mathbf{1},\mathbf{2},\cdots,\boldsymbol{n})$称为求积节点，$\boldsymbol{A}_i,(\boldsymbol{i}=\mathbf{0},\mathbf{1},\mathbf{2},\cdots,\boldsymbol{n})$称为求积系数或伴随节点$\boldsymbol{x}_i$的权，它只与节点有关！

数值求积公式

$$I_n=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$$

求积公式余项

$$R(f)=I-I_n=\int_a^b f(x)dx-\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$$

$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{f})$是精确的定积分减掉机械求积公式结果，是使用近似的机械求积公式时的误差，所以是算法的截断误差，在数值积分中，也称为求积公式余项.

构造或确定一个求积公式，要解决的问题包括:

(i)确定求积系数$\boldsymbol{A}_i$和求积节点$(\boldsymbol{x}_i)$;

(ii)确定衡量求积公式好坏的标准;

(iii)求积公式的误差估计和收敛性分析。

解决求积系数，求积节点，衡量求积公式的准确度等都需要使用代数精度。

三、求积公式的代数精度

【定义 1】称求积公式$\boldsymbol{I}_n=\sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$具有$\boldsymbol{m}$次代数精度，如果它满足如下两个条件:

(i)　对所有次数$\leq \boldsymbol{m}$的多项式$\boldsymbol{P}_m(\boldsymbol{x})$，有：$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{P}_m)=\boldsymbol{I}(\boldsymbol{P}_m)-\boldsymbol{I}_n(\boldsymbol{P}_m)=\mathbf{0}$,

(ii)　存在$\boldsymbol{m}+\mathbf{1}$次多项式$\boldsymbol{P}_{m+1}(\boldsymbol{x})$，使得：$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{P}_{m+1})=\boldsymbol{I}(\boldsymbol{P}_{m+1})-\boldsymbol{I}_n(\boldsymbol{P}_{m+1})\neq\mathbf{0}$

显然，求积公式的代数精度越高，它就能使更多的被积函数$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$相对应的余项$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{f})$“很小”，从而具有更好的实际计算意义。

在进行实际的分析和判读中，两个条件，缺一不可，不仅要在小于等于 m 次的多项式上保证误差为零，还要在 m+1 次多项式上保证误差不为零；代数精度是利用误差定义的，精度越高，越高次数的多项式误差为零，使得越高次数的多项式进行利用求积公式计算数值积分，精度越高。

但是使用代数精度的定义来判断求积公式代数精度，要验证所有的小于等于 m 次的多项式，不仅麻烦，而且也不可能穷尽所有的低于 m 次的多项式。
事实上，上述定义中的条件(i)，(ii)等价于:

$$R\left(x^k\right)=I\left(x^k\right)-I_n\left(x^k\right)=0$$

$$R\left(x^{k+1}\right)=I\left(x^{k+1}\right)-I_n\left(x^{k+1}\right)\neq 0$$

为什么只要使求积公式对$f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$都准确成立?

$\int_a^b P_n(x)\,dx=a_0\int_a^b 1\,dx+a_1\int_a^b x\,dx+\cdots+a_n\int_a^b x^n\,dx=a_0\sum_{k=0}^n A_k+a_1\sum_{k=0}^n A_k x_k+\cdots+a_n\sum_{k=0}^n A_k\,x_k^n=\sum_{k=0}^n(a_0A_k+a_1A_kx_k+\cdots+a_nA_kx_k^n)=\sum_{k=0}^n A_k(a_0+a_1x_k+\cdots+a_nx_k^n)=\sum_{k=0}^n A_kP_n(x)$

因此，判断代数精度只需用最简多项式$x^k,k=0,1,2,\cdots$。也就是只要把小于等于 m 次的x^i依次验算，保证满足等式条件；而 m+1 次的x^i不满足条件就能得到代数精度的值。

例. 分析梯形公式与中矩形公式的代数精度为多少?
梯形公式

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

$k=0$时，$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b 1dx=b-a$

$\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{b-a}{2}[1+1]=b-a$，所以

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

$k=1$时，$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b xdx=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$

$\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{b-a}{2}[a+b]=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$，所以

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

$k=2$时，$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b x^2dx=\frac{1}{3}(b^3-a^3)$

$\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{b-a}{2}[a^2+b^2]\neq\frac{1}{3}(b^3-a^3)$，所以

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

所以梯形公式具有 1 次代数精度!

中矩形的代数精度？

【例】确定下列求积公式中的待定参数 A_{-1}， A_0， A_1，使其有尽可能高的代数精度，并指明求积公式所具有的代数精度。

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = A_{-1}f(-h) + A_0 f(0) + A_1 f(h)$$

解：令$f(x) = 1, x, x^2$, 分别代入上述求积公式，左右相等得：

$$A_{-1} + A_0 + A_1 = 2h$$
$$-h \times A_{-1} + 0 \times A_0 + h \times A_1 = 0$$
$$h^2 \times A_{-1} + 0 \times A_0 + h^2 \times A_1 = \frac{2}{3}h^3$$

解得：$A_{-1} = A_1 = \frac{1}{3}h$，$A_0 = \frac{4}{3}h$

所以，所求积分公式为:

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \frac{1}{3}hf(-h) + \frac{4}{3}hf(0) + \frac{1}{3}hf(h)$$

将$f(x) = x^3$代入，得左=右=0

将$f(x) = x^4$代入，得左≠右

所以，该求积公式具有 3 次代数精度。

【例】验证求积公式$I(f) = \int_a^b f(x)dx = I_3(f) + R(\sigma, f) = \frac{b-a}{6}\left\{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right\} + R(\sigma, f)$具有 3 次代数精度。

解： 当$f(x) = 1$时，$I(f) = \int_a^b f(x)dx = b - a$

而 $I_3(f) = \frac{b-a}{6}\left\{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right\} = \frac{b-a}{6}\{1 + 4 + 1\} = b - a$

有$R(\sigma, 1) = 0$

当$f(x) = x$时，$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b xdx = \frac{1}{2}(b^2 - a^2)$

$$I_3(f) = \frac{b-a}{6}\left\{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right\} = \frac{b-a}{6}\left\{a + 4\left(\frac{a+b}{2}\right) + b\right\}$$
$$= \frac{1}{2}(b^2 - a^2)$$

有$R(\sigma, f) = R(\sigma, x) = 0$

当$f(x) = x^2$，$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b x^2dx = \frac{1}{3}(b^3 - a^3)$

$$I_3(f) = \frac{b-a}{6}\left\{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right\} = \frac{b-a}{6}\left\{a^2 + 4\left(\frac{a+b}{2}\right)^2 + b^2\right\}$$
$$= \frac{1}{3}(b^3 - a^3)$$

有$R(\sigma,f)=R(\sigma,x^2)=0$

当$f(x)=x^3$，$I(f)=\int_a^b f(x)dx=\int_a^b x^3dx=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$

$$I_3(f)=\frac{b-a}{6}\left\{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right\}=\frac{b-a}{6}\left\{a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right\}$$

$$=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$$

有$R(\sigma,f)=R(\sigma,x^3)=0$

当$f(x)=x^4$，$I(f)=\int_a^b f(x)dx=\int_a^b x^4dx=\frac{1}{5}\left(b^5-a^5\right)$

$$I_3(f)=\frac{b-a}{6}\left\{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right\}=\frac{b-a}{6}\left\{a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4\right\}$$

$$\neq\frac{1}{5}\left(b^5-a^5\right)$$

有$R(\sigma,f)=R(\sigma,x^4)\neq 0$

故求积公式具有 3 次代数精确度。

所以，对于求积公式$I_n=\sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$

若要使求积公式至少具有m次代数精度，则不仅仅要使求积公式对$f(x)=1$，x，x^2，⋯，x^m都准确成立，

$$\begin{cases}\sum_{k=0}^n A_k=b-a\\ \sum_{k=0}^n A_kx_k=\frac{1}{2}(b^2-a^2)\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ \sum_{k=0}^n A_kx_k^m=\frac{1}{2}(b^{m+1}-a^{m+1})\end{cases}$$

还要使求积公式对$f(x)=x^{m+1}$ 不成立。

§2 插值型求积公式

一、定义

在积分区间$[a,b]$上，取$n+1$个节点x_i, $i=0,1,2,\cdots,n$，作$f(x)$的n次代数插值多项式（拉格朗日插值公式）：

$$L_n(x)=\sum_{j=0}^n l_j(x)f\left(x_j\right)$$

则有：$f(x)=L_n(x)+R_n(x)$，其中，$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$为插值余项。

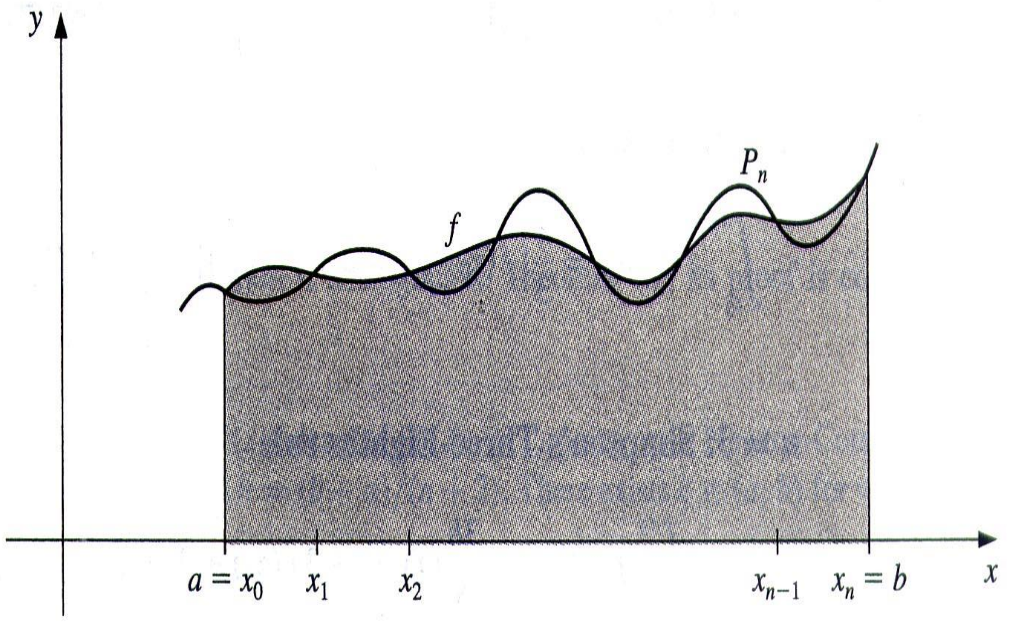
$\omega_{n+1}(x)=\prod_{k=0}^n(x-x_k)$

于是有：$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx = \int_a^b \sum_{j=0}^n l_j(x)f\left(x_j\right)dx + \int_a^b R_n(x)dx = \sum_{j=0}^n\left[\left(\int_a^b l_j(x)dx\right)f\left(x_j\right)\right] + \int_a^b R_n(x)dx$

取$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^n\left[f\left(x_j\right)\left(\int_a^b l_j(x)dx\right)\right]$，令$A_j = \int_a^b l_j(x)dx$

展开得到：求积系数$A_j = \int_a^b \prod_{i=0,i\neq j}^n \frac{(x-x_i)}{(x_j-x_i)}dx$，则$A_j$由插值节点决定的，与$f(x)$无关。

插值型求积公式：在积分区间$[a,b]$上有$n+1$个节点x_i，$i=0,1,2,\cdots,n$，形如$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n f(x_k)A_k = \sum_{k=0}^n f(x_k)\int_a^b l_k(x)\,dx$，即机械求积公式中$A_k$取为第$k$个 Lagrange 基函数在区间$[a,b]$上的积分，$A_k = \int_a^b l_k(x)\,dx = \int_a^b \prod_{i=0,i\neq k}^n \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)}dx$，称为插值型求积公式。



二、截断误差与代数精度

1、截断误差（求积余项）

$$R(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=0}^n A_j f\left(x_j\right) = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^n\left(x-x_j\right)dx$$

2、代数精度

定理：形如$\sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$的求积公式至少有$n$次代数精度 $\Leftrightarrow$ 该公式为插值型

（即：$A_k=\int_a^b l_k(x)\,dx$）

证明：充分性（插值型→有n次代数精度）

因为，$I_n=\sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$是插值型求积公式。则其截断误差为

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)=\int_a^b [f(x)-L_n(x)]dx$$

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

将$f(x)=1,x,x^2,\cdots$依次代入截断误差公式，得$R(x^n)=I-I_n=\int_a^b \frac{(x^n)^{(n+1)}}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\,dx$

所以，直到$f(x)=x^n$，均有$R(x^n)=0$，即$I=I_n$，求积公式准确成立，而当$f(x)=x^{n+1}$时，$R(x^{n+1})=I-I_n=\int_a^b \frac{(x^{n+1})^{(n+1)}}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\,dx=\int_a^b \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\,dx$

不能保证$R(x^{n+1})=0$。若该值为零，则可能取得更高次代数精度，否则取得 n 次代数精度。

所以，求积公式$\sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$至少具有$n$次代数精度。

必要性：（有n次代数精度→插值型）

因为$I_n=\sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$有$n$次代数精度，则知道当代入次数小于$n$次的多项式$I=I_n$，即$\int_a^b f(x)dx=\sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$

将$f(x)=l_k(x)$，$k<n$代数求积公式，有$\int_a^b l_k(x)dx=\sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j)$=$A_0 l_k(x_0)+A_1 l_k(x_1)+\cdots+A_n l_k(x_n)=A_k$，所以该求积公式是插值型求积公式。

推论：求积系数A_j满足: $\sum_{j=0}^{n} A_j=b-a$

取$f(x)=1$代入定理，直接推出推论结论。
在计算过程中，当节点是等距情况下，使用插值型求积公式，形式会更为简洁，计算更为简单。

§3　Newton-Cotes 求积公式（重点！）

一、Cotes 系数

取节点为等距分布：$x_i = a + ih, h = \frac{b-a}{n}, i = 0, 1, \cdots, n$，由此构造的插值型求积公式称为 Newton-Cotes 公式。

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx = \int_a^b \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j)\, dx = \sum_{j=0}^{n}\left[\left(\int_a^b l_j(x)dx\right) f(x_j)\right]$$

$$= \sum_{j=0}^{n}\left[\left(\int_a^b \prod_{i=0,i\neq j}^{n} \frac{(x-x_i)}{(x_j-x_i)} dx\right) f(x_j)\right] \overset{x=a+th}{\underset{x_i=a+ih}{=\!=\!=}} \sum_{j=0}^{n}\left[\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} \frac{(a+th-a-ih)}{(a+jh-a-ih)} d(a+th)\right) f(x_j)\right] = \sum_{j=0}^{n}\left[\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} \frac{(t-i)h}{(j-i)h} hd(t)\right) f(x_j)\right]$$

$$= h\sum_{j=0}^{n}\left[\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} \frac{(t-i)}{(j-i)} d(t)\right) f(x_j)\right]$$

$$= h\sum_{j=0}^{n}\left[\frac{1}{j(j-1)\cdots 1(-1)\cdots(j-n)}\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} (t-i)\, d(t)\right) f(x_j)\right]$$

$$= \frac{b-a}{n}\sum_{j=0}^{n}\left[\frac{(-1)^{n-j}}{j!\,(n-j)!}\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} (t-i)\, d(t)\right) f(x_j)\right]$$

$$= (b-a)\sum_{j=0}^{n}\left[\frac{(-1)^{n-j}}{nj!\,(n-j)!}\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} (t-i)\, d(t)\right) f(x_j)\right]$$

$$= (b-a)\sum_{j=0}^{n}\left[\frac{(-1)^{n-j}}{nj!\,(n-j)!}\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n} (t-i)\, d(t)\right)\right] f(x_j)$$

$$\overset{C_j^{(n)} = \frac{(-1)^{n-j}}{nj!\,(n-j)!}\left(\int_0^n \prod_{i=0,i\neq j}^{n}(t-i)\, d(t)\right)}{=\!=\!=\!=\!=\!=} (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j)$$

$$I_n = (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j)$$

二、Newton-Cotes 公式

1、定义

记$C_j^{(n)} = \frac{(-1)^{n-j}}{nj!(n-j)!}\int_0^n \left[\prod_{i=0,i\neq j}^{n}(t-i)\right]dt$，则$A_j = (b-a)C_j^{(n)}$，$j = 0, 1, 2, \cdots, n$。

此时的求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j)$称为 n 阶 Newton-Cotes 求积公式。

注意： 由式$C_j^{(n)}=\frac{(-1)^{n-j}}{nj!(n-j)!}\int_0^n[\prod_{i=0,i\neq j}^{n}(t-i)]dt$确定的 Cotes 系数只与$j$和$n$有关, 与$f(x)$ 和积分区间$[a,b]$无关，且满足：(1) $C_k^{(n)}=C_{n-k}^{(n)}$

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

Cotes 系数

$$C_j^{(n)}=\frac{(-1)^{n-j}}{nj!\,(n-j)!}\int_0^n\left[\prod_{i=0,i\neq j}^{n}(t-i)\right]dt$$

当$n=1$时，即$[a,b]$上取两个节点$x_0=a$，$x_1=b$

$$C_0^{(1)}=\frac{(-1)^{1-0}}{1\times 0!\times(1-0)!}\int_0^1\left[\prod_{i=0,i\neq 0}^{1}(t-i)\right]dt$$

$$=-\int_0^1(t-1)dt=\left(-\frac{1}{2}t^2+t\right)_0^1=\frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)}=\frac{(-1)^{1-1}}{1\times 1!\times(1-1)!}\int_0^1\left[\prod_{i=0,i\neq 1}^{1}(t-i)\right]dt=\int_0^1(t)dt=\left(\frac{1}{2}t^2-t\right)_0^1=\frac{1}{2}$$

由

$$I_n=(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}f(x_j)$$

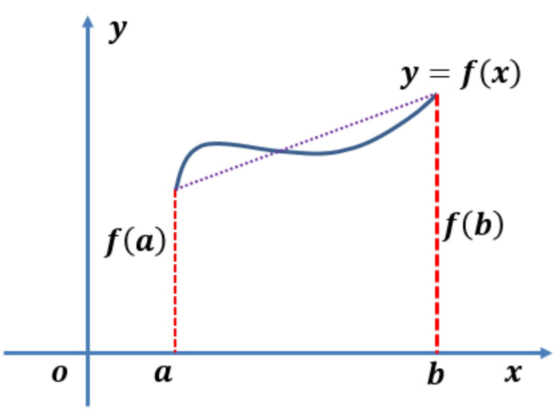
得求积公式为：

$$I_1=(b-a)\left(\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2}\right)=(b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)$$

称为梯形公式。通常记为：$T=(b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)$

$n=1$表示将$[a,b]$一等分，即取两个节点。

梯形公式的几何意义用梯形的面积近似地代替曲边梯形的面积



当$n=2$时，即$[a,b]$上取三个节点$x_0=a$，$x_1=\frac{a+b}{2}$，$x_2=b$

$$C_0^{(2)}=\frac{(-1)^{2-0}}{2\times 0!\times(2-0)!}\int_0^2\left[\prod_{i=0,i\neq 0}^{2}(t-i)\right]dt$$

$$=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{4}\left(\frac{1}{3}t^3-\frac{3}{2}t^2+2t\right)_0^2$$

$$=\frac{1}{4}\left(\frac{1}{3}2^3-\frac{3}{2}2^2+2\times 2\right)=\frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)}=\frac{(-1)^{2-1}}{2\times 1!\times(2-1)!}\int_0^2\left[\prod_{i=0,i\neq 1}^{2}(t-i)\right]dt$$

$$=\int_0^2 t(t-2)dt=-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{3}t^3-t^2\right)_0^2=\frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)}=\frac{(-1)^{2-2}}{2\times 2!\times(2-2)!}\int_0^2\left[\prod_{i=0,i\neq 2}^{2}(t-i)\right]dt$$

$$=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{4}\left(\frac{1}{3}t^3-\frac{1}{2}t^2\right)_0^2=\frac{1}{4}\left(\frac{1}{3}2^3-\frac{1}{2}2^2\right)=\frac{1}{6}$$

由

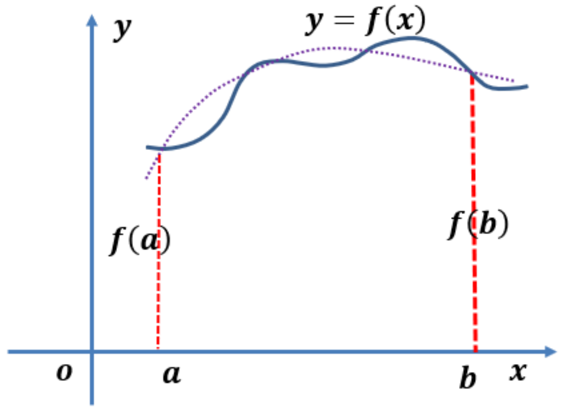
$$I_n=(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}f(x_j)$$

得求积公式为：

$$I_2=\frac{(b-a)}{6}\left(f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right)=\frac{(b-a)}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)$$

称为 Simpson 求积公式，也称为抛物线求积公式。通常记为：$I_2=S=\frac{(b-a)}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)$

Simpson 公式的几何意义用抛物线代替曲线 f(x)



当$n=3$时，即$[a,b]$上取四个节点　$x_i = a + ih$，$h = \frac{b-a}{3}$，$i = 0,1,2,3$

$$C_0^{(3)} = \frac{(-1)^{3-0}}{3\times 0!\times(3-0)!}\int_0^3\left[\prod_{i=0,i\neq 0}^{3}(t-i)\right]dt$$

$$= -\frac{1}{18}\int_0^3 (t-1)(t-2)(t-3)dt$$

$$= -\frac{1}{18}\left(\frac{1}{4}t^4 - 2t^3 + \frac{11}{2}t^2 - 6t\right)_0^3$$

$$= -\frac{1}{18}\left(\frac{1}{4}\times 3^4 - 2\times 3^3 + \frac{11}{2}\times 3^2 - 6\times 3\right) = \frac{1}{8}$$

$$C_1^{(3)} = \frac{(-1)^{3-1}}{3\times 1!\times(3-1)!}\int_0^3\left[\prod_{i=0,i\neq 1}^{3}(t-i)\right]dt$$

$$= \int_0^3 t(t-2)(t-3)dt = \frac{1}{6}\left(\frac{1}{4}t^4 - \frac{5}{3}t^3 + 3t^2\right)_0^3 = \frac{3}{8}$$

$$C_2^{(3)} = \frac{(-1)^{3-2}}{3\times 2!\times(3-2)!}\int_0^3\left[\prod_{i=0,i\neq 2}^{3}(t-i)\right]dt$$

$$= -\frac{1}{6}\int_0^3 t(t-1)(t-3)dt = -\frac{1}{6}\left(\frac{1}{4}t^4 - \frac{4}{3}t^3 + \frac{3}{2}t^2\right)_0^3$$

$$= -\frac{1}{6}\left(\frac{1}{4}3^4 - \frac{4}{3}3^3 + \frac{3}{2}3^2\right) = \frac{3}{8}$$

$$C_3^{(3)} = \frac{(-1)^{3-3}}{3 \times 3! \times (3-3)!} \int_0^3 \left[\prod_{i=0, i \neq 3}^{3} (t-i) \right] dt$$

$$= \frac{1}{18} \int_0^3 t(t-1)(t-2) dt = \frac{1}{18} \left(\frac{1}{4} t^4 - t^3 + t^2 \right)_0^3$$

$$= \frac{1}{18} \left(\frac{1}{4} 3^4 - 3^3 + 3^2 \right) = \frac{1}{8}$$

由

$$I_n = (b-a) \sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j)$$

得求积公式为：

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

同理，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，求积公式为：

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

称之为 Cotes 求积公式！所以$I_4 = C = \frac{(b-a)}{90} \big(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4) \big)$

类似地可求出$n = 5$，6，…时的 Cotes 系数，从而建立相应的求积公式。具体结果见下表。

n	$C_i^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$,	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$,	$\frac{4}{6}$,	$\frac{1}{6}$						
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	$\frac{1}{17280}$	{751,	3577,	1323,	2989,	1323,	3577,	750}	
8	$\frac{1}{28350}$	{989,	5888,	−928	10496,	−4540,	10496	−928,	5888, 989}
⋮	⋮								

当$n \le 7$时，柯特斯系数为正；从$n \ge 8$开始，柯特斯系数有正有负。
因此，当$n \ge 8$时，误差有可能传播扩大。Newton-Cotes 求积公式不宜采用。

【例】试分别用梯形公式和抛物线公式计算积分$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx$

解：梯形公式$I_1 = (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)$

所以：$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \approx (1-0.5)\left(\frac{\sqrt{0.5}+1}{2}\right) \approx 0.42677667$

抛物线公式：$I_2 = \frac{(b-a)}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$

所以：$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx = \frac{1-0.5}{6}\left(f(0.5) + 4f\left(\frac{0.5+1}{2}\right) + f(1)\right) = \frac{1-0.5}{6}\left(\sqrt[2]{0.5} + \right.$

$\left. 4\sqrt[2]{\frac{0.5+1}{2}} + \sqrt[2]{1}\right) \approx 0.08333(0.70711 + 4 \times 0.86603 + 1) \approx\approx 0.43093403$

原积分的准确值： $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx = \frac{2}{3}\left(x^{\frac{3}{2}}\right)_{0.5}^{1} \approx 0.43096441$

【例】写出$f(x)$在区间$[0,2]$上的梯形公式和 Simpson 公式，并计算x^3和e^x在该区间的积分值。
解：梯形公式和 Simpson 公式分别为：

梯形公式：$\int_0^2 f(x)\,dx = I_1 = (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right) = (2-0)\left(\frac{f(2)+f(0)}{2}\right)$

当$f(x) = x^3$时

$$\int_0^2 x^3\,dx = 2\times\left(\frac{f(2)+f(0)}{2}\right) = 8$$

当$f(x)=e^x$时

$$\int_0^2 e^x\,dx = 2\times\left(\frac{f(2)+f(0)}{2}\right) = e^2+1 = 8.389056099$$

Simpson 公式：$\int_0^2 f(x)\,dx = I_2 = \frac{(b-a)}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right) = \frac{(2-0)}{6}\big(f(0)+4f(1)+f(2)\big)$

当$f(x)=x^3$时

$$\int_0^2 x^3\,dx = \frac{1}{3}\big(f(0)+4f(1)+f(2)\big) = 4$$

当$f(x)=e^x$时

$$\int_0^2 e^x\,dx = \frac{1}{3}\big(f(0)+4f(1)+f(2)\big) = \frac{1}{3}(1+4e+e^2) = 6.420727804$$

分析梯形公式和 Simpson 公式的代数精度。

将$f(x)=x^n$，$n=0,1,2,\cdots$代入两个公式，结果如下表

$f(x)$	1	x	x^2	x^3	x^4	e^x
梯形公式	2	2	4	8	16	8.389
Simpson 公式	2	2	2.67	4	6.67	6.421
准确值	2	2	2.67	4	6.67	6.389

可见，梯形公式的代数精度为：$1\ (n=1)$

Simpson 的代数精度为：$3\ (n=2)$

cotes 公式的代数精度为：$5\ (n=4)$

2、截断误差

Newton-Cotes 公式的误差为：

$$R(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) = \int_a^b [f(x)-L_n(x)]dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\,dx \xlongequal[x_i=a+ih]{x=a+th} \frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)\prod_{j=0}^{n}(t-j)\,dt$$

$\xi \in (a,b)$，　与x有关！

3、代数精度

作为插值型求积公式，n阶 Newton-Cotes 公式至少具有n次代数精度，而实际的代数精度是否可以进一步提高呢？

【定理 3】当阶数n为偶数时，Newton-Cotes 公式至少具有$n+1$次代数精度。

证明：　只需验证当n为偶数时，Newton-Cotes 公式对$f(x)=x^{n+1}$的余项为零。

由于$f(x)=x^{n+1}$，所以$f^{(n+1)}(x)=(n+1)!$

即：

$$R(f)=\frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)\prod_{j=0}^{n}(t-j)\,dt=h^{n+2}\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)\,dt$$

引进变换$t=u+\frac{n}{2}$,　因为n为偶数，故$\frac{n}{2}$为整数，

于是有$R(f)=h^{n+2}\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)\,dt=h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)du$

因为被积函数$\varphi(u)=\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)$是奇函数，因此可断定$R(f)=0$　。

补充：$\varphi(-u)=\prod_{j=0}^{n}\left(-u+\frac{n}{2}-j\right)=\prod_{j=0}^{n}-\left(u-\frac{n}{2}+j\right)=-\prod_{j=0}^{n}\left(u-\frac{n}{2}+j\right)=-\varphi(u)$

$\prod_{j=0}^{n}\left(u-\frac{n}{2}+j\right)$跟$\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)$是顺序相反的奇数个$\left(u+\frac{n}{2}-j\right)$连乘。

实例验证：验证 Simpson 公式$(n=2)$具有 3 次代数精度。

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

$\int_a^b dx=b-a$　　　　$S=\frac{(b-a)}{6}(1+4+1)=b-a$

$\int_a^b xdx=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$　　$S=\frac{(b-a)}{6}\left(a+4\times\frac{a+b}{2}+b\right)=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$

$\int_a^b x^2dx=\frac{1}{3}(b^3-a^3)$　　$S=\frac{(b-a)}{6}\left(a^2+4\times\left(\frac{a+b}{2}\right)^2+b^2\right)=\frac{1}{3}(b^3-a^3)$

$\int_a^b x^3dx=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$　　$S=\frac{(b-a)}{6}\left(a^3+4\times\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right)=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$

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

Simpson 公式（$n=2$）具有三次代数精度！

4、 Newton-Cotes 公式的稳定性和收敛性

下面讨论舍入误差对计算结果产生的影响.

设用公式$I_n(f)=(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}f(x_j)$ 近似计算积分$I=\int_a^b f(x)dx$时， 其中计算函数值 $f(x_j)$有误差$\varepsilon_j,(j=0,1,2,\cdots,n)$，而计算$C_j^{(n)}$没有误差，中间计算过程中的舍入误差也不考虑， 则在$I_n(f)$的计算中，由ε_j引起的误差为:

$$e_n=(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}f(x_j)-(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}\left(f(x_j)+\varepsilon_j\right)=-(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}\varepsilon_j$$

令$\varepsilon=\max\limits_{0\le j\le n}|\varepsilon_j|$，则$|e_n|=\left|-(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}\varepsilon_j\right|\le\varepsilon(b-a)\sum_{j=0}^{n}\left|C_j^{(n)}\right|$

若$C_j^{(n)}$都是正数，则：$|e_n|\le\varepsilon(b-a)\sum_{j=0}^{n}\left|C_j^{(n)}\right|=\varepsilon(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j^{(n)}=\varepsilon(b-a)$

故e_n是有界的，即由ε_j引起的误差受到控制，不超过ε的$(b-a)$倍，保证了数值计算的稳定性。而当$n>7$时，$C_j^{(n)}$将出现负数，$\sum_{j=0}^{n}\left|C_j^{(n)}\right|$将随着$n$增大，因而不能保证数值稳定性。故高阶公式不宜采用，有实用价值的仅仅是几种低阶的求积公式。

三、几种低阶求积公式的余项

当$n=1$时，两个系数分别为$C_0^{(1)}=\frac{1}{2}$，$C_1^{(1)}=\frac{1}{2}$。求积公式为梯形公式

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

其代数精度为 1 阶。

截断误差为:

$R(f)=\int_a^b\frac{f^{(2)}(\xi_x)}{2!}(x-a)(x-b)dx\xlongequal{积分中值定理}\frac{f^{(2)}(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)dx=\frac{f^{(2)}(\eta)}{2}\times\left(\frac{1}{3}x^3-\frac{(a+b)}{2}x^2+abx\right)_a^b=\frac{f^{(2)}(\eta)}{2}\times\left(-\frac{1}{6}(b-a)^3\right)=-\frac{1}{12}h^3f^{(2)}(\eta)$，$\eta\in[a,b],h=\frac{b-a}{1}$

当$n=2$时，$[a,b]$上取三个节点$x_0=a$，$x_1=\frac{a+b}{2}$，$x_2=b$三个系数分别为$C_0^{(2)}=\frac{1}{6},C_1^{(2)}=\frac{4}{6},C_2^{(2)}=\frac{1}{6}$。求积公式为 Simpson 公式

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

其代数精度为 3 阶。
截断误差为：

$$R(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$$

$$=\int_a^b \frac{f^{(3)}(\xi_x)}{3!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)dx \overset{\text{积分中值定理}}{=\!=\!=} \frac{f^{(3)}(\eta)}{6}\int_a^b (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)dx$$

解得：$R(f)=-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\eta)$，$\eta\in[a,b], h=\frac{b-a}{3}$

当$n=4$时，即$[a,b]$上取五个节点　$x_i=a+ih$，$h=\frac{b-a}{3}$，$i=0,1,2,3,4$

个系数分别为$C_0^{(4)}=\frac{7}{90}, C_1^{(4)}=\frac{32}{90}, C_2^{(4)}=\frac{12}{90}, C_3^{(4)}=\frac{32}{90}$，$C_4^{(4)}=\frac{7}{90}$。求积公式为 Cotes 公式

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

其代数精度为 6 阶。

截断误差为：$R(f)=-\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\eta)$，$\eta\in[a,b], h=\frac{b-a}{4}$

§4 复化求积公式

由插值函数的知识知道，高次插值存在 Runge 现象，在插值计算中可采用分段低次插值来解决。有上一节的分析知道，高阶 Newton-Cotes 公式会出现数值不稳定，然而低阶 Newton-Cotes 公式有时又不能满足精度要求，怎么办？由定积分的几何含义，可将积分区间$[a,b]$分成若干小区间，在每个小区间上用低阶求积公式计算，然后求和。

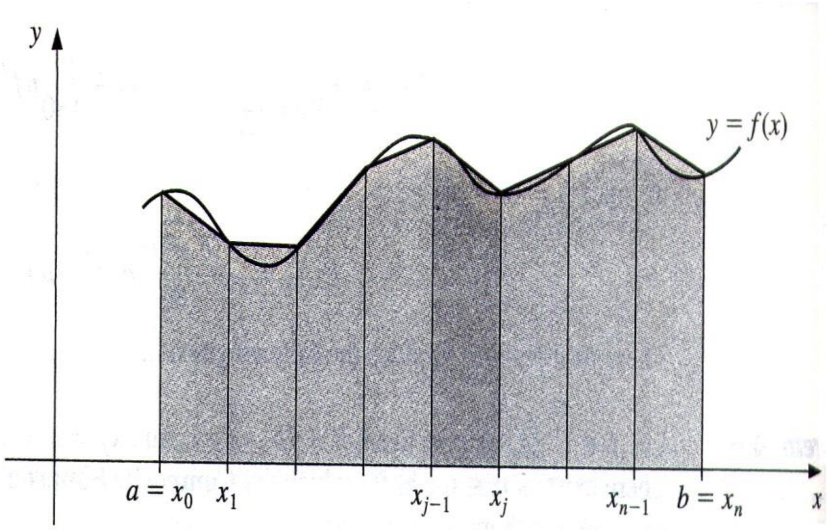
1.复化梯形公式

将积分区间$[a,b]$分成若n个小区间，$h=(b-a)/n$，$x_i=a+ih$，$i=0,1,2,\cdots,n$

在每个小区间$[x_i,x_{i+1}]$上用梯形公式：$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx\approx(x_{i+1}-x_i)\left(\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right)$，$i=0,1,2,\cdots,n-1$，得到$\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1}-x_i)\left(\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\right)=\frac{h}{2}\left(f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)$

简记为：$T_n=\frac{h}{2}\left(f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)$

复化梯形公式的几何意义如下图，将整个积分区间分割成小区间，在每个小区间上计算梯形公式近似小区间的积分，复化梯形公式就是用这些小区间上的梯形公式累加来近似$f(x)$下面的曲边梯形的面积。



2.复化 Simpson 公式

将积分区间$[a,b]$分成若n个小区间，$h=(b-a)/n$，$x_i=a+ih$，$i=0,1,2,\cdots,n$

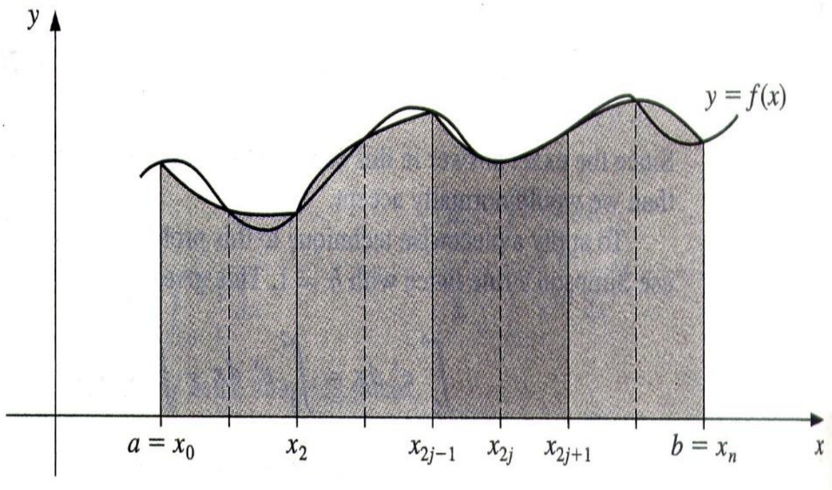
在每个小区间$[x_i,x_{i+1}]$上用 Simpson 公式：$\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(x)dx\approx\frac{h}{6}\left[f(x_i)+4f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+f(x_{i+1})\right]$

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

$$=\frac{h}{6}\left(f(a)+4\sum_{i=0}^{n-1}f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+2\sum_{i=0}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)$$

简记为：$S_n=\frac{h}{6}\left(f(a)+4\sum_{i=0}^{n-1}f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)$

复化 Simpson 公式的几何意义如下图，将整个积分区间分割成小区间，在每个小区间上计算 Simpson 公式近似小区间的积分，复化 Simpson 公式就是用这些小区间上的 Simpson 公式累加来近似$f(x)$下面的曲边梯形的面积。



3.复化 Cotes 公式

将积分区间$[a,b]$分成若n个小区间，$h=(b-a)/n$，$x_i=a+ih$，$i=0,1,2,\cdots,n$

在每个小区间$[x_i,x_{i+1}]$上用 Cotes 公式：$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{90}\left[7f(x_i)+32f\left(x_{i+\frac{1}{4}}\right)+12f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+32f\left(x_{i+\frac{3}{4}}\right)+7f(x_{i+1})\right]$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{90}\left[7f(x_i)+32f\left(x_{i+\frac{1}{4}}\right)+12f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+32f\left(x_{i+\frac{3}{4}}\right)+7f(x_{i+1})\right]$$

简记为：$C_n=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{90}\left[7f(x_i)+32f\left(x_{i+\frac{1}{4}}\right)+12f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+32f\left(x_{i+\frac{3}{4}}\right)+7f(x_{i+1})\right]$

【例】对于$f(x)=\frac{4}{1+x^2}$，利用数据表

x_k	0	1/8	1/4	3/8	1/2	5/8	3/4	7/8	1
$f(x_k)$	4	3.93846	3.76476	3.50685	3.2000	2.8764	2.5600	2.26549	2.000

及复化梯形公式和复化 Simpson 公式计算定积分$\int_0^1 f(x)dx$

解：(1) 应用复化梯形公式：$n=8$，$h=1/8$

$$T_8=\frac{h}{2}\left(f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)=\frac{(1/8)}{2}\left(f(0)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(1)\right)$$

$$=\frac{(1/8)}{2}\left(f(0)\right.$$

$$+2\left(f\left(\frac{1}{8}\right)+f\left(\frac{2}{8}\right)+f\left(\frac{3}{8}\right)+f\left(\frac{4}{8}\right)+f\left(\frac{5}{8}\right)+f\left(\frac{6}{8}\right)+f\left(\frac{7}{8}\right)\right)$$

$$\left.+f(1)\right)=3.138995$$

(2) 应用复化 Simpson 公式：$n=4$，$h=1/4$

$$S_4=\frac{h}{6}\left(f(a)+4\sum_{i=0}^{n-1}f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right)$$

$$=\frac{(1/4)}{6}\left(f(0)+4\sum_{i=0}^{n-1}f\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(1)\right)$$

$$=\frac{(1/4)}{6}\left(f(0)+4\left(f\left(\frac{1}{8}\right)+f\left(\frac{3}{8}\right)+f\left(\frac{5}{8}\right)+f\left(\frac{7}{8}\right)\right)\right.$$

$$\left.+2\left(f\left(\frac{2}{8}\right)+f\left(\frac{4}{8}\right)+f\left(\frac{6}{8}\right)\right)+f(1)\right)=3.1415967$$

而积分的精确解为：$I=\int_0^1 f(x)dx=\int_0^1\frac{4}{1+x^2}dx=(4arctgx)_0^1=\pi=3.14159$

所以，$T_8=3.13899$有 3 位有效数字，而$S_4=3.1415967$有 6 位有效数字。

二、复化求积公式的截断误差

【定义】p阶收敛：若一个积分公式的误差满足$\lim\limits_{h\to 0}\frac{R[f]}{h^p}=C<\infty$，且$C\neq 0$，则称该公式是$p$阶收敛的。

梯形公式的截断误差为：$R[f]=I-T=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$，

复化梯形公式的截断误差为：$R_n[f]=I-T_n=\sum_{i=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_i)\right]=$

$-\frac{h^2}{12}\sum_{i=0}^{n-1}[hf''(\eta_i)]\overset{介值定理}{=\!=\!=}-\frac{h^2}{12}\sum_{i=0}^{n-1}[hf''(\eta)]=-\frac{h^2}{12}f''(\eta)\sum_{i=0}^{n-1}[h]=$

$-\frac{h^2}{12}f''(\eta)(b-a)\approx-\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx=-\frac{h^2}{12}[f'(b)-f'(a)]=O(h^2)$

表示误差与 h^2 同阶！

(说明过程，有问题?)

Simpson 公式的截断误差：$R[f]=I-S=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$

复化 Simpson 公式的截断误差：$R_n[f]=I-S_n=-\frac{b-a}{2880}h^4f^{(4)}(\eta)\approx$

$-\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left(f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right)=O(h^4)$误差与 h^4同阶！

Cotes 公式的截断误差：$R[f]=I-C=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6f^{(6)}(\eta)$

复化 Cotes 公式的截断误差：$R_n[f]=I-C_n=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6f^{(6)}(\eta)\approx$

$-\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left(f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right)=O(h^6)$误差与 h^6同阶！

由此看出：当$n\to\infty$即：$h\to 0$ T_n, S_n, C_n都收敛于$\int_a^b f(x)dx$，而且收敛速度一个比一个快。显然，截断误差和 h 密切相关，只要让 h 足够小，就可以达到事先设定的精度要求！

【例】若用复化梯形公式计算积分$\int_0^1 e^x dx$，问积分区间要等分多少份才能保证误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-5}$。

解：复化梯形公式截断误差：$R_n[f]=-\frac{h^2}{12}f''(\eta)(b-a)$

因为：$h=\frac{b-a}{n}$，所以$R_n[f]=-\frac{\left(\frac{b-a}{n}\right)^2}{12}f''(\eta)(b-a)=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\eta)$

$f(x)=e^x$，所以 $f''(x)=e^x$；$b-a=1$

因为：$x\in[0,1]$，所以$|f''(x)|<e$；则$|R_n[f]|\le\frac{e}{12n^2}$

由题意可得：$|R_n[f]|\le\frac{e}{12n^2}<\frac{1}{2}\times 10^{-5}$

即：$6n^2\ge e\times 10^5$

得：$n\ge 212.85$

取：$n=213$

相应的复化梯形公式为：$T_{213}=\frac{1}{2\times 213}\left[f(0)+2\sum_{k=1}^{213-1}f(x_k)+f(1)\right]$，其中

$h=\frac{1}{213}$

思考：若用复化 Simpson 公式呢？

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

$R_n[f] = -\frac{b-a}{2880}\left(\frac{b-a}{n}\right)^4 f^{(4)}(\eta) = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\eta)$

$f^{(4)}(x) = e^x$ ，因为：$x \in [0,1]$，所以$\left|f^{(4)}(x)\right| < e$

$|R_n[f]| \le \frac{e}{2880n^4} < \frac{1}{2} \times 10^{-5}$

解得：$n \ge 3.706$
即：用复化 Simpson 公式，
只需取$n = 4$，就能达到这个精度！

P85-89

三、梯形法的递推化(变步长) （自动选取积分步长 ）
利用复化梯形公式、复化 Simpson 公式、复化 Cotes 公式等计算定积分时，如何选取步长 h?
步长太大，则计算精度难以保证；步长太小，则增加过多的额外计算量。
可以采用变步长方法。通常采取将区间不断对分的方法，即取 $n = 2^k$，反复使用复化求积公式，直到相邻两次计算结果之差的绝对值小于指定的精度为止。
基本思路如下：将积分区间逐次分半，比较前后两次的近似值。前后两次近似值的误差小于已知精度$|T_{2n} - T_n| < \varepsilon$，折半过程停止，最后的$T_{2n}$即为所求积分值。
下面以梯形公式为例，看算法的具体过程。

1、首先将区间$[a,b]$进行n等分，$h = \frac{b-a}{n}$:

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

2、再将区间$[a,b]$进行$n2$等分，即步长减半$h_1 = \frac{b-a}{2n} = \frac{h}{2}$，考察子区间

$[x_k, x_{k+1}]$。

每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$经过二分后只增加一个分点$x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$。再用复化梯形公式求得该子区间上的积分值$\frac{h_1}{2}\left[f(x_k) + 2f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + f(x_{k+1})\right]$， 其中

$f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) = f\left(x_k + \frac{h}{2}\right)$

将每个子区间上积分值相加得：

$$T_{2n}=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h_1}{2}\left[f(x_k)+2f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)+f(x_{k+1})\right]\overset{h_1=\frac{h}{2}}{=\!=\!=}\frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+2f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)\right.$$

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

因为:$T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$ ，则可导出T_{2n}与T_n的递推公式:，$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)$，其中，$h$为对分前的值。

3、终止条件：

由复化梯形公式的余项知：

T_n的截断误差为：$I-T_n=-\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2f''(\eta_1)$；$T_{2n}$的截断误差为：$I-T_{2n}=-\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2f''(\eta_2)$。当$f''(x)$变化不大时（多少是不大？），两式相除得$\frac{I-T_n}{I-T_{2n}}=\frac{-\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2f''(\eta_1)}{-\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2f''(\eta_2)}\approx 4$，解得：$I\approx\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$，即$I\approx T_{2n}+\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)$，$T_{2n}$的实际误差为：$I-T_{2n}\approx\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)$。得到误差控制条件为：$\left|\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)\right|<\varepsilon$，$\varepsilon$为预先设定的阈值。

上述条件满足，程序终止；否则，继续分半计算。

同理可得，对于复化 Simpson 公式，$f^{(4)}(x)$在$[a,b]$上变化不大时，有：$I\approx S_{2n}+\frac{1}{4^2-1}(S_{2n}-S_n)$。对于复化 Cotes 公式，$f^{(6)}(x)$在$[a,b]$上变化不大时，有：$I\approx C_{2n}+\frac{1}{4^3-1}(C_{2n}-C_n)$

【例】 用变步长梯形法根据下表计算积分值$I=\int_0^1\frac{sinx}{x}dx$

x_k	0.000	0.125	0.250	0.375	0.500	0.625	0.750	0.875	1.000
$f(x_k)$	1	0.997	0.989	0.977	0.959	0.936	0.909	0.877	0.841

解：先对整个区间使用梯形公式，得到T_1，

$f(x)=\frac{sinx}{x}$， $f(0)=1$，$f(1)=0.841$，$T_1=\frac{f(0)+f(1)}{2}=0.9205$

将区间$[0,1]$二分，　求出中点的函数值，$f(0.5)=\frac{sin(0.5)}{0.5}=0.959$，由递推公式$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)$，得$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right)=0.940$

将区间$\left[0,\frac{1}{2},1\right]$再 2 分，求出中点函数值$f(0.25)=\frac{sin(0.25)}{0.25}=0.989$，$f(0.75)=\frac{sin(0.75)}{0.75}=0.909$，则$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}\left(f\left(\frac{1}{4}\right)+f\left(\frac{3}{4}\right)\right)=\frac{1}{2}\times 0.940+\frac{1}{4}(0.989+0.909)=0.945$

不断二分下去，得下表：

k	T_n	k	T_n
0	0.9207355	5	0.9460769
1	0.9397933	6	0.9460815
2	0.9445135	7	0.9460827
3	0.9456909	8	0.9460830
4	0.9460596	9	0.9460831

积分$I=\int_0^1\frac{sinx}{x}dx$的准确值是 0.9460831，用变步长方法二分 9 次得到精确解。

§5　龙贝格（Romberg）积分法

1. Romberg 积分思想

由上节分析知，用复化梯形公式计算积分值I，T_{2n}的误差大约为：$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$。（基本思路：T_{2n}存在误差，并知道大概是$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$，现在就把这个误差给加上，做误差补偿）令$I\approx T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=\frac{4T_{2n}-T_n}{3}$。由复化梯形递推公式知: $T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)$，将$T_{2n}$带入上式：$I\approx T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=\frac{4T_{2n}-T_n}{3}=\frac{4\left(\frac{1}{2}T_n+\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)\right)-T_n}{3}=\frac{2T_n+4\times\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)-T_n}{3}=\frac{T_n+4\times\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)}{3}=\frac{T_n}{3}+\frac{2(b-a)}{3n}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)$

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

$$I \approx \frac{b-a}{6n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right]+\frac{2(b-a)}{3n}\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)$$

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

得梯形公式加速公式为：

$$S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{3}=\frac{4}{4-1}T_{2n}-\frac{1}{4-1}T_n$$

上述公式说明：利用复化梯形公式前后两次的积分近似值T_n和T_{2n}，按照上式作出的线性组合是具有更高精度的积分值。这就是龙贝格积分公式的基本思想。

【例】 计算$\int_0^1 \frac{sinx}{x}dx$。

由前面例子知：$T_2=0.9397933$， T_4=0.9445135，利用上面线性组合方式，取T_{2n}与T_n线性组合得：$T=\frac{4T_{2n}-T_n}{3}=0.9460849$，积分$\int_0^1 \frac{sinx}{x}dx$的准确值为0.9460831.

思考：为什么T_{2n}与T_n的线性组合会提高精度?是否具有普遍性？线性组合的公式是否起了质的变化？

总结：

梯形加速公式为：$S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{3}=\frac{4}{4-1}T_{2n}-\frac{1}{4-1}T_n$

同理可得：$I\approx S_{2n}+\frac{1}{4^2-1}(S_{2n}-S_n)=\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}$ ，Simpson 加速公式为：$C_n=\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}$

$I\approx C_{2n}+\frac{1}{4^3-1}(C_{2n}-C_n)=\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$ ，Cotes 加速公式为：$R_n=\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$

也称 Cotes 加速公式$R_n=\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$为龙贝格求积公式。

利用上面三个加速公式将变步长的梯形法得到的粗糙的积分近似值迅速加工成精度较高的积分近似值的求积方法称为龙贝格求积算法。

使用下面表格计算龙贝格积分。

T_1			
T_2	S_1		
T_4	S_2	C_1	
T_8	S_4	C_2	R_1
T_{16}	S_8	C_4	R_2

2. Romberg 求积法计算步骤

① 用梯形公式计算积分近似值$T_1=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

② 区间逐次分半$h=\frac{b-a}{2^k}$，$k=0,1,2,\cdots$，$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)$，$n=2^k$

③ 求加速值

梯形加速公式：　$S_n=T_{2n}+\frac{T_{2n}-T_n}{3}$

Simpson 加速公式：　$C_n=S_{2n}+\frac{S_{2n}-S_n}{15}$

Romberg 求积公式：　$R_n=C_{2n}+\frac{C_{2n}-C_n}{63}$

④ 精度控制，若$|R_{2n}-R_n|<\varepsilon$，则停止，取R_{2n}为积分近似值；否则重复②，③，④。

【例】用 Rromber 算法计算定积分$I=\int_0^1\frac{4}{1+x^2}dx$，要求相邻两次 Romber 值的偏差不超过$10^{-5}$。

解：由题意得：$a=0$，$b=1$，$f(x)=\frac{4}{1+x^2}$

$$T_1=\frac{1-0}{2}[f(0)+f(1)]=\frac{1}{2}[4+2]=3$$

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{2}\times 3+\frac{1}{2}\times\frac{16}{5}=3.1$$

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}\left[f\left(\frac{1}{4}\right)+f\left(\frac{3}{4}\right)\right]=\frac{1}{2}\times 3.1+\frac{1}{4}\times\left(\frac{64}{17}+\frac{64}{25}\right)=3.13118$$

$$T_8=\frac{1}{2}T_4+\frac{1}{8}\left[f\left(\frac{1}{8}\right)+f\left(\frac{3}{8}\right)+f\left(\frac{5}{8}\right)+f\left(\frac{7}{8}\right)\right]=\frac{1}{2}\times 3.13118+\frac{1}{8}\times\left(\frac{256}{65}+\frac{256}{73}+\frac{256}{89}+\frac{256}{113}\right)=3.13899$$

$$T_{16}=\frac{1}{2}T_8+\frac{1}{16}\left[f\left(\frac{1}{16}\right)+f\left(\frac{3}{16}\right)+f\left(\frac{5}{16}\right)+f\left(\frac{7}{16}\right)+f\left(\frac{9}{16}\right)+f\left(\frac{11}{16}\right)+f\left(\frac{13}{16}\right)+f\left(\frac{15}{16}\right)\right]$$
$$=\frac{1}{2}\times 3.13899+\frac{1}{16}\times\left(\frac{1024}{257}+\frac{1024}{265}+\frac{1024}{281}+\frac{1024}{305}+\frac{1024}{337}+\frac{1024}{377}+\frac{1024}{425}+\frac{1024}{481}\right)=3.14094$$

$$S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{3}$$

$$S_1=\frac{4T_2-T_1}{3}=\frac{4}{3}T_2-\frac{1}{3}T_1=\frac{4}{3}\times 3.1-\frac{1}{3}\times 3=3.1333$$

$S_2 = \frac{4T_4 - T_2}{3} = \frac{4}{3}T_4 - \frac{1}{3}T_2 = \frac{4}{3} \times 3.13118 - \frac{1}{3} \times 3.1 = 3.14157$

$S_4 = \frac{4T_8 - T_4}{3} = \frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4 = \frac{4}{3} \times 3.13899 - \frac{1}{3} \times 3.13118 = 3.14159$

$S_8 = \frac{4T_{16} - T_8}{3} = \frac{4}{3}T_{16} - \frac{1}{3}T_8 = \frac{4}{3} \times 3.14094 - \frac{1}{3} \times 3.13899 = 3.14159$

$C_n = S_{2n} + \frac{S_{2n} - S_n}{15}$

$C_1 = S_2 + \frac{S_2 - S_1}{15} = \frac{16}{15}S_2 - \frac{1}{15}S_1 = \frac{16}{15} \times 3.14157 - \frac{1}{15} \times 3.1333 = 3.14212$

$C_2 = S_4 + \frac{S_4 - S_2}{15} = \frac{16}{15}S_4 - \frac{1}{15}S_2 = \frac{16}{15} \times 3.14159 - \frac{1}{15} \times 3.14157 = 3.14159$

$C_4 = S_8 + \frac{S_8 - S_4}{15} = \frac{16}{15}S_8 - \frac{1}{15}S_4 = \frac{16}{15} \times 3.14159 - \frac{1}{15} \times 3.14159 = 3.14159$

$R_n = C_{2n} + \frac{C_{2n} - C_n}{63}$

$R_1 = C_2 + \frac{C_2 - C_1}{63} = \frac{64}{63}C_2 - \frac{1}{63}C_1 = \frac{64}{63} \times 3.14159 - \frac{1}{63} \times 3.14212 = 3.14158$

$R_2 = C_4 + \frac{C_4 - C_2}{63} = \frac{64}{63}C_4 - \frac{1}{63}C_2 = \frac{64}{63} \times 3.14159 - \frac{1}{63} \times 3.14159 = 3.14159$

因为：$|R_2 - R_1| \leq 0.00001$，所以：$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx \approx 3.14159$

§6 Gauss 求积公式

Newton-Cotes 公式采用等距节点作为求积节点，代数精度至少可达到n。那么，在节点个数一定的情况下，是否可以在$[a,b]$上自由选择节点的位置，使求积公式的精度提得更高 ？

【例】求形如 $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$的两点求积公式。

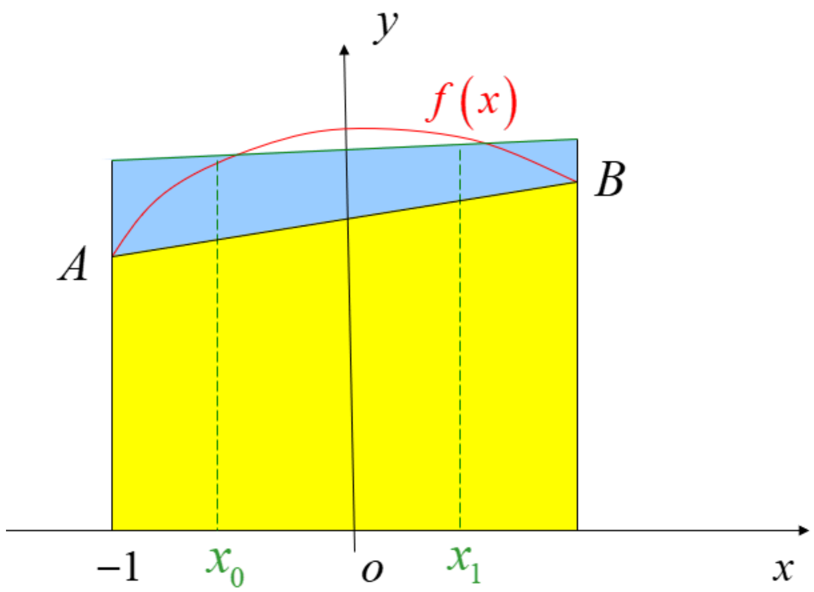
（1）用梯形公式（即以$x_0 = -1$，$x_1 = 1$为节点的插值型求积公式）立即可得。

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{x_1 - x_0}{2}[f(x_0) + f(x_1)] = f(x_0) + f(x_1)$$

只具有 1 次代数精度！

（2）若对求积公式中的四个待定系数A_0，A_1，x_0，x_1适当选取，使求积公式对$f(x) = 1, x, x^2, x^3$都准确成立，则需A_0，A_1，x_0，x_1满足如下方程组：

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = \frac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ A_0 {x_0}^2 + A_1 {x_1}^2 = \frac{1}{3}(b^3 - a^3) \\ A_0 {x_0}^3 + A_1 {x_1}^3 = \frac{1}{4}(b^4 - a^4) \end{cases}$$



一、高斯积分问题的提出

在前面建立牛顿-柯特斯公式时，为了简化计算，对插值型求积公式中的节点x_k先定位等分节点，然后再求系数A_k，这种方法虽然简单，但求积公式的精度受到限制。

【定理 7】形如$\int_a^b f(x)dx=\sum_{j=0}^{n}A_j f(x_j)$的插值型求积公式的代数精度最高不超过$2n+1$次。

找到一个$2n+2$次多项式，使得插值型求积公式不能精确成立即可！

问题：代数精度上界$2n+1$能达到吗？

如果适当选取 x_k，$(k=0,1,2,\cdots,n)$有可能使求积公式具有$2n+1$次代数精度，这类求积公式称为高斯(Gauss)求积公式。

【定义】 (p135)若一组节点$x_0,x_1,\cdots,x_n\in[a,b]$，使插值型求积公式$\int_a^b f(x)dx=\sum_{j=0}^{n}A_j f(x_j)$具有$2n+1$次代数精度，则称此组节点为高斯点，并称相应的求积公式为高斯求积公式。

高斯求积公式$\int_a^b f(x)dx=\sum_{j=0}^{n}A_j f(x_j)$含有$2n+2$个待定参数 A_j，x_j $(j=0,1,2,\cdots,n)$

【例】确定 A，B，C， α，使求积公式$\int_{-2}^{2} f(x)dx=Af(-\alpha)+Bf(0)+Cf(\alpha)$具有尽可能高的代数精度，并判断是否高斯型。

解：令$f(x)=1$代入得：$A+B+C=4$ ①

令$f(x)=x$代入得：$-\alpha A+\alpha C=0$ ②

令$f(x)=x^2$代入得：$\alpha^2A+\alpha^2C=\frac{16}{3}$ ③

令$f(x)=x^3$代入得：$-\alpha^3A+\alpha^3C=0$ ④与②线性相关

令$\boldsymbol{f(x)=x^4}$代入得：$\boldsymbol{\alpha^4A+\alpha^4C=\frac{64}{5}}$ ⑤

联立①②③⑤，得方程组

$$\begin{cases}\boldsymbol{A+B+C=4}\\ \boldsymbol{-\alpha A+\alpha C=0}\\ \boldsymbol{\alpha^2A+\alpha^2C=\frac{16}{3}}\\ \boldsymbol{\alpha^4A+\alpha^4C=\frac{64}{5}}\end{cases}$$

解之，得：$\boldsymbol{A=C=\frac{10}{9}}$，$\boldsymbol{B=\frac{16}{9}}$，$\boldsymbol{\alpha=\pm\sqrt{\frac{12}{5}}}$

令$\boldsymbol{f(x)=x^5}$代入$\boldsymbol{\int_{-2}^{2}f(x)dx=Af(-\alpha)+Bf(0)+Cf(\alpha)}$，得$\boldsymbol{-\alpha^5A+\alpha^5C=0}$

与④②线性相关，显然等式成立，

令$\boldsymbol{f(x)=x^5}$代入，等式不成立。

所以，该求积公式的代数精度为 5.

因为只有 3 个求积节点，即$\boldsymbol{n=2}$，达到$\boldsymbol{2n+1=5}$次代数精度，所以，该求积公式是高斯型求积公式。

P121-125

§7 数值微分

当函数是用表格形式给出时，要求某点导数的值，不能使用微分中各种微分公式，而只能用近似的方法——数值微分问题，对列表函数求导。

根据函数在若干个点处的函数值去求该函数的导数的近似值称为数值微分。

一、差商与数值微分

在微积分中，导数表示函数在某点上的瞬时变化率，它是平均变化率的极限；

在几何上可解释为曲线的斜率；

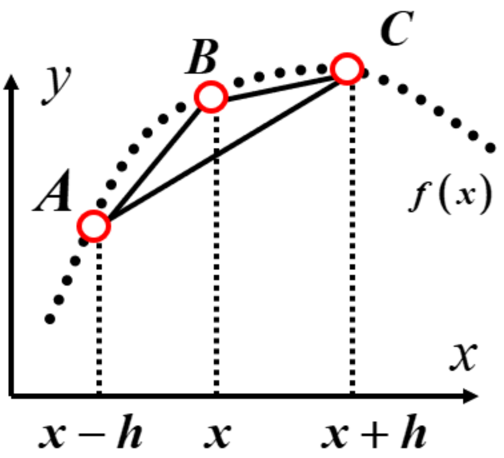
在物理上可解释为物体变化的速率。

下面是导数定义的三种形式：

$$f'(x)=\lim_{h\to0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

$$f'(x)=\lim_{h\to0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

$$f'(x)=\lim_{h\to0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$



向前差商

用向前差商（平均变化率）近似导数，即：$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$

其截断误差就是精确的导数和近似导数之间的误差，即$R(x) = f'(\boldsymbol{x_0}) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$

由泰勒展开：$\boldsymbol{f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi)}$，$\boldsymbol{x_0 \le \xi \le x_0 + h}$

转化得$\boldsymbol{f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2!}f''(\xi)}$

可知，向前差商的阶段误差是：$\boldsymbol{R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = -\frac{h}{2!}f''(\xi)}$。所以向前差商近似导数的截断误差是$\boldsymbol{O(h)}$。

向后差商

用向后差商近似导数，即：$f'(\boldsymbol{x_0}) \approx \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}$

与计算向前差商的方法类似，

利用泰勒展开式，可得向后差商的截断误差：　$\boldsymbol{R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h} = \frac{h}{2!}f''(\xi)}$。所以向后差商近似导数的截断误差是$\boldsymbol{O(h)}$。

中心差商

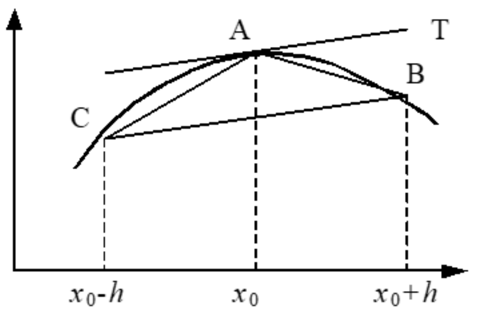
用中心差商（平均变化率）近似导数，即：$f'(\boldsymbol{x_0}) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$

由泰勒展开 $\boldsymbol{f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1)}$

$$\boldsymbol{f(x_0-h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!}f''(x_0) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2)}$$

得中心差商的截断误差：

$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} = -\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] = -\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$，$x_0 - h \le \xi \le x_0 + h$。所以中心差商近似导数的截断误差是$O(h^2)$。
从几何的角度上看，如图所示，上述三种导数的近似值分别表示弦线 AB，AC 和 BC 的斜率，将这三条通过 A 点的弦的斜率与切线 AT 的斜率进行比较后，可见弦 BC 的斜率更接近于切线 AT 的斜率$f'(x_0)$，因此从精度方面看，用中心差商近似代替导数值更可取。中心差商近似导数的方法称为为求$f'(x_0)$的中点方法。



二、利用插值多项式求数值导数
已知$n+1$个插值节点，先构造n次插值多项式$P_n(x)$，用$P_n(x)$）近似代替$f(x)$，用$P_n(x)$导数近似代替$f(x)$导数。根据插值多项式，知

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$

对其进行求导，得

$$f'(x) = P'_n(x) + R'_n(x)$$

其中：$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$，$R'_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x) + \frac{d}{dx}\left[\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\right]\omega_{n+1}(x)$

由于$f^{(n+1)}(\xi)$的表达式不能写出，对其求导数不能进行，所以$R'_n(x)$不能计算。但是在$x = x_i$，即在插值节点的位置上，$\omega_{n+1}(x) = 0$，能够得出$R'_n(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x_i)$。也就是在插值节点的误差是可以通过上式算出的。
若选用 Lagrange 插值公式，则得出

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x)$$

对其求导，得出

$$f'(x) = L'_n(x) + R'_n(x)$$

考虑到只能算出插值节点的截断误差，所以有

$$f'(x_i) = L'_n(x_i) + R'_n(x_i) = (x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x_i)$$

1. 两点公式

已知两个节点(x_0, y_0)， (x_1, y_1)，$x_1 = x_0 + h$。构造两个插值节点上的线性插值函数得一直线，x_0点和x_1点的导数也就是该直线的斜率。

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \times y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \times y_1 = \frac{xy_1 - x_0y_1 - xy_0 + x_1y_0}{x_1 - x_0}$$
$$= \frac{x(y_1 - y_0) + (x_1y_0 - x_0y_1)}{x_1 - x_0}$$
$$L_1'(x) = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{y_1 - y_0}{h}$$

该线性函数的导数，就是两个插值节点上的差商。

由此得数值微分的两点公式$f'(x_0) = f'(x_1) \approx \frac{y_1 - y_0}{h}$

两点公式的截断误差为

$$R_1'(x) = \frac{f^{(1+1)}(\xi)}{(1+1)!}\omega'_{1+1}(x) + \frac{d}{dx}\left[\frac{f^{(1+1)}(\xi)}{(1+1)!}\right]\omega_{1+1}(x)$$

$$= \frac{f^{(1+1)}(\xi)}{(1+1)!}[(x - x_0) + (x - x_1)]$$

$$+ \frac{d}{dx}\left[\frac{f^{(1+1)}(\xi)}{(1+1)!}\right][(x - x_0)(x - x_1)]$$

两点公式的在两个插值节点上的截断误差为

$$R_1'(x_0) = \frac{f^{(1+1)}(\xi)}{(1+1)!}\omega'_{1+1}(x_0) = \frac{1}{2}f''(\xi)[(x_0 - x_0) + (x_0 - x_1)] = -\frac{h}{2}f''(\xi_1)$$

$$R_1'(x_1) = \frac{f^{(1+1)}(\xi)}{(1+1)!}\omega'_{1+1}(x_1) = \frac{1}{2}f''(\xi)[(x_1 - x_0) + (x_1 - x_1)] = \frac{h}{2}f''(\xi_2)$$

2. 三点公式

已知三个节(x_0, y_0)， (x_1, y_1)，(x_2, y_2)， $x_1 = x_0 + h$，$x_2 = x_0 + 2h$

求每个节点的导数，先做过三个插值节点的二次插值多项式。

$$L_2(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2$$
$$= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \times y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \times y_1$$
$$+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \times y_2$$
$$= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{2h^2} \times y_0 - \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{h^2} \times y_1$$
$$+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2h^2} \times y_2$$

对其求导得：

$$L_2'(x)=\frac{(x-x_1)+(x-x_2)}{2h^2}\times y_0-\frac{(x-x_0)+(x-x_2)}{h^2}\times y_1+\frac{(x-x_0)+(x-x_1)}{2h^2}\times y_2$$

分别将x_0， x_1，x_2代入得三点公式：

$$f'(x_0)\approx L_2'(x_0)=\frac{-3y_0+4y_1-y_2}{2h}$$

$$f'(x_1)\approx L_2'(x_1)=\frac{y_2-y_0}{2h}$$

$$f'(x_2)\approx L_2'(x_2)=\frac{y_0-4y_1+3y_2}{2h}$$

每插值节点的截断误差：

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

【例】设$f(x)=ln(x)$，已知h值，用两点公式求$f'(1.8)$的值，并估计误差。

解：由两点公式$f'(x_0)=f'(x_1)\approx\frac{ln(x_0+h)-ln(x_0)}{h}=\frac{ln(1.8+h)-ln(1.8)}{h}$

误差：$R_1'(1.8)=-\frac{h}{2}f''(\xi)$

$$\left|R_1'(1.8)\right|=\left|\frac{h}{2}f''(\xi)\right|=\left|\frac{h}{2}\xi^{-2}\right|\le\frac{h}{2\times(1.8)^2}$$

h	1	0.1	0.01	0.001
$\left\|R_1'(1.8)\right\|$上限	0.015432	0.0015432	0.00015432	0.000015432

§8 实用工具

1. 使用@定义被积函数

匿名函数@

例 8.1 $\int_0^1\frac{1}{\sqrt{1+x^4}}dx$，f = @(x) 1./sqrt (1+x.^4)

例 8.2 $\int_0^\pi\frac{sinx}{x}dx$

```
Function f = sinc(r)
if x == 0
    f = 1;
else
    f = sin(x) ./ x;
end
f=@sinc
```

例 8.3 $\beta(z,w)=\int_0^1 t^{z-1}(1-t)^{w-1}\,dt$

f_beta = @(t,z,w) t.^(z-1).*(1-t).^(w-1);

含多个自变量：（第 1 个是主自变量，其他为参数）

2. 一维积分的命令

quad （自适应积分）

[q, fcnt] = quad(fun, a, b, tol, trace, p1, p2,...)

fun,

a, b, 是积分限

tol, 准确度控制：缺省值 10^{-6}

trace, 是否输出函数计算次数等. 0/非 0

p1, p2, 积分参数

例 8.4 $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{1+x^4}} dx$

```
>> Q = quad(f, 0, 1)
>> quad (@sinc, 0, pi)     %function defined by M-file
ans =
0.58949
>> [beta2_5, fcnt] = quad(f_beta, 0, 1, 1e-5, 0, 2, 5)
beta2_5 =
0.033333
fcnt=
17
```

3. 二重、三重积分

dblquad, quad2d, triplequad

4. 符号积分

定义符号变量：

sym(), syms,

符号积分：int

Simple：表达式化简

double

作业：

P142, 6

确定下列求积公式中的特定参数，使其代数精度尽量高，并指出所得公式具有的代数精度。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(-1) + 2f(x_1) + 3f(x_2)]$$

9. 用积分$\int_2^8 \frac{dx}{2x} = ln2$，计算$ln2$，使误差的绝对值不超过$\frac{1}{2} \times 10^{-5}$，估计使用复化梯形公式要取多少个节点？

补充：预备知识

1. 积分中值定理

如果$f(x) \in C[a,b]$，$g(x)$在$[a,b]$保号且可积，则存在$\xi \in [a,b]$，使得$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx$。特别地，如果$g(x) = 1$，则有

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