第六章 数值积分与数值微分

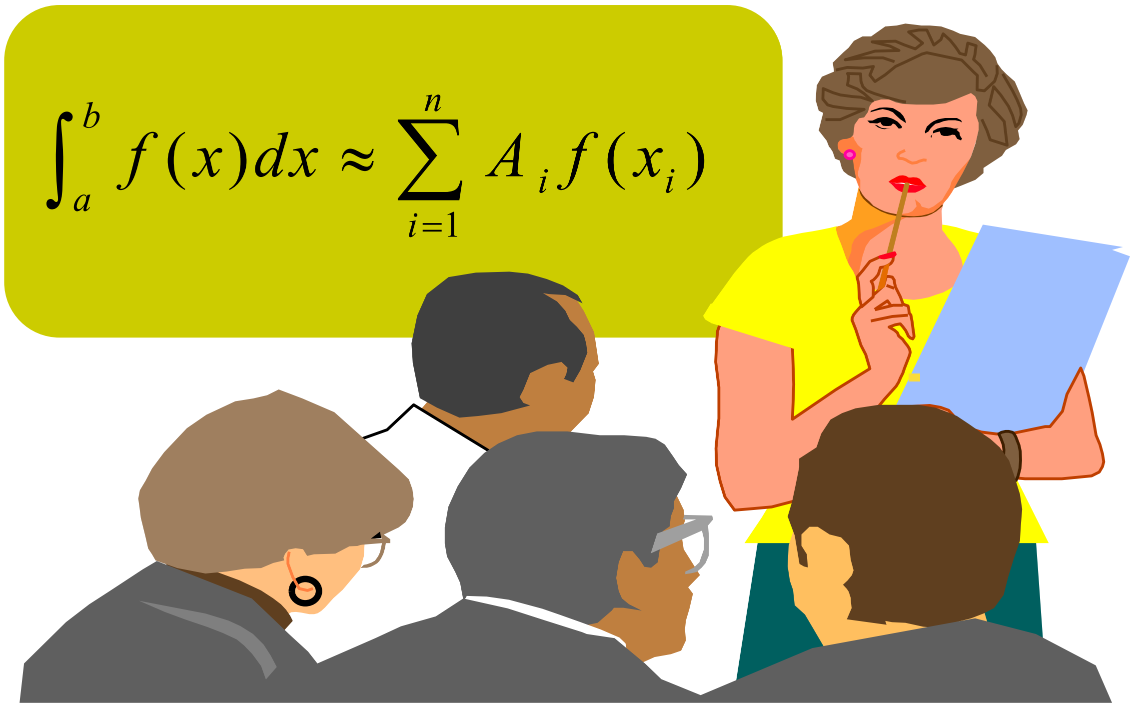
讲授：

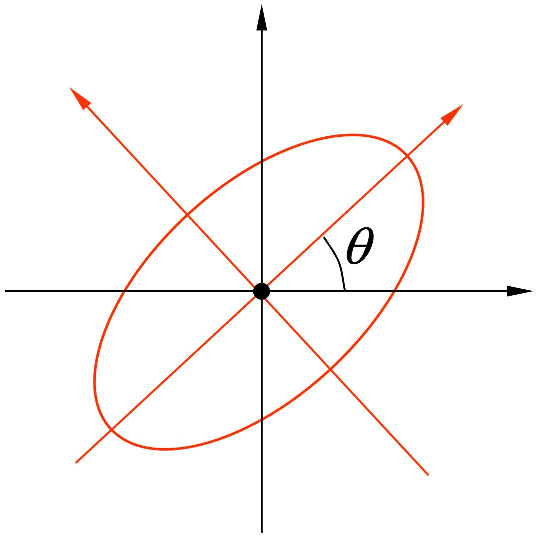
用计算机求定积分的方法和估计导数的方法；

重点论述：

插值型求积公式、**Newton-Cotes**求积公式、**Gauss**求积公式、复化求积公式、**Romberg**求积公式及对应的原理、构造、误差分析等以及数值微分。

§6.2 基本概念





人造地球卫星轨道可视为平面上的椭圆．我国的第一颗人造地球卫星近地点距离地球表面 439km，远地点距地球表面 2384km，地球半径为 6371km，求该卫星的轨道长度．

本问题可用椭圆参数方程

$$\begin{cases} x = a\cos t \\ y = b\sin t \end{cases} \qquad (0 \leqslant t \leqslant 2\pi, a, b > 0)$$

来描述人造地球卫星的轨道，式中 a,b 分别为椭圆的长短轴，该轨道的长度 L 就是如下参数方程弧长积分

$$L = 4\int_0^{\frac{\pi}{2}} (a^2\sin^2 t + b^2\cos^2 t)^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{d}t$$

但这个积分是椭圆积分，不能用解析方法计算．该问题归为怎样求不能用解析方法计算的定积分计算问题，本章专门讨论定积分的近似计算和计算机计算问题．

问题：

定积分计算有公式 $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$

但不能用公式的定积分要怎样计算呢? $\int_a^b e^{x^2} dx$

怎样把定积分在一定精度下借助计算机计算出来就是本章研究的内容。

此外，利用函数在若干个点处的函数值求该函数的导数近似值也是本章介绍的内容。

本章涉及的方法：

Newton-Cotes求积公式、Gauss求积公式、复化求积公式、Romberg求积公式等。

1、问题的描述

积分离散化处理过程：

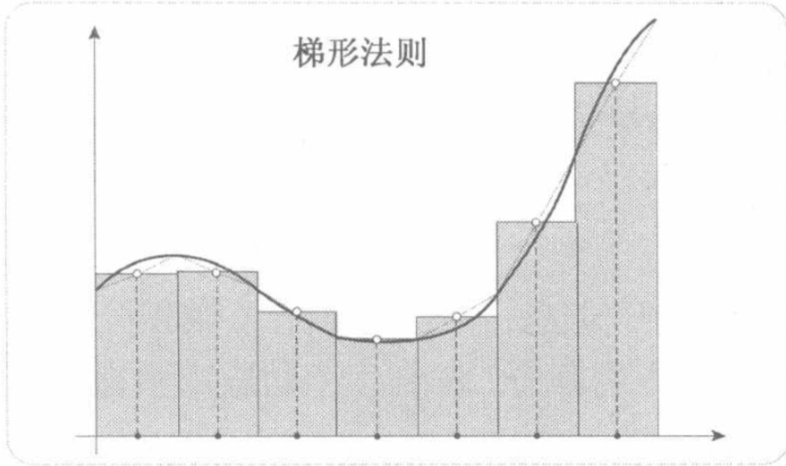
$$\because \int_a^b f(x)dx = \lim_{\lambda\to 0}\sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i$$

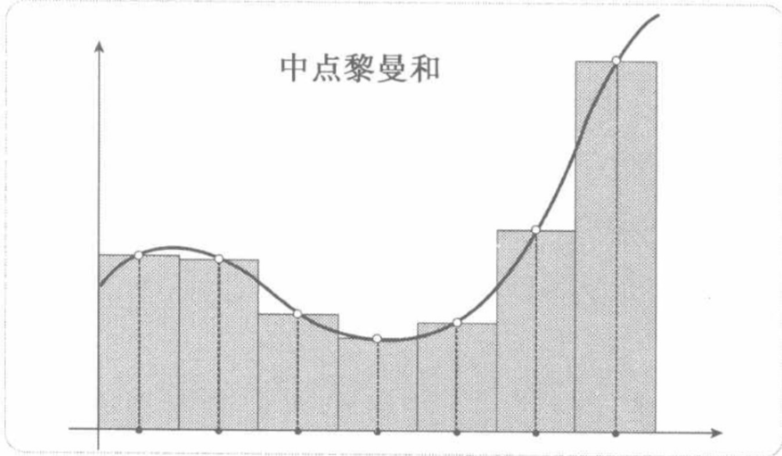
1）去掉极限号

2) 将其中的ξ_i取为x_i

3) 减少离散化的误差，做

$\Delta x_i \to A_i$(待定系数)





得到离散化形式：

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)}$$

1）求积公式： 若存在实数 $x_1,x_2,\cdots,x_n;A_1,A_2,\cdots,A_n,$

成立 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i), \quad \forall f(x) \in C[a,b]$ 称

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

求积节点

求积系数

为一个数值求积公式。

求积余项： $R(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$

求积公式与求积节点个数、求积节点 和求积系数有关，显然有很多不同的求积公式！

2）代数精度：

如何确定代数精度？

$$\forall P_m(x) \Rightarrow R(P_m)=0,\quad \text{但存在一个} P_{m+1}(x) \Rightarrow R(P_{m+1}) \neq 0$$

则称该求积公式的代数精度为m。这里

$$P_m(x)\text{是}m\text{次多项式，}\quad R(f)=\int_a^b f(x)dx-\sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

结论：

一个求积公式的代数精度越大，则该求积公式越好。

泰勒展式

确定代数精度的方法：

为什么可行？

依次选取 $f(x)=x^k \quad (k=0,1,\cdots)$

分别代入余项公式：

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\sum_{i=1}^{n}A_i f(x_i)$$

若对$k=0,1,2,\cdots$，首次出现$R(x^k)\neq 0$的k为m，

则对应的代数精度为 ***m-1***。

例 6.1 确定求积公式

$$\int_1^2 f(x)dx \approx \frac{1}{2}f(1)+\frac{1}{2}f(2)$$

的代数精度。

解： 取$f(x)=1 \Rightarrow R(1)=\int_1^2 1dx-\left(\frac{1}{2}\times 1+\frac{1}{2}\times 1\right)=0$

取$f(x)=x \Rightarrow R(x)=\int_1^2 xdx-\left(\frac{1}{2}\times 1+\frac{1}{2}\times 2\right)=\frac{3}{2}-\frac{3}{2}=0$

取$f(x)=x^2 \Rightarrow R(x^2)=\int_1^2 x^2dx-\left(\frac{1}{2}\times 1^2+\frac{1}{2}\times 2^2\right)=-\frac{1}{6}\neq 0$

故本题求积公式代数精度为1。

例 6.2 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx Af(-h) + Bf(0) + Cf(2h)$$

的参数A，B，C，使它具有尽可能高的代数精度，并指出相应的代数精度。

解：要先求出具体的求积公式，再判断代数精度。

依次取$f(x)=1,x,x^2$代入求积公式的两端，并令其相等

$$\Rightarrow \begin{cases} A+B+C=4h \\ A-2C=0 \\ A+4C=16h/3 \end{cases}$$

$$\Rightarrow A=\frac{16}{9}h, B=\frac{4h}{3}, C=\frac{8h}{9}$$

故所求的求积公式为

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx \frac{16h}{9} f(-h) + \frac{4h}{3} f(0) + \frac{8h}{9} f(2h)$$

为确定其代数精度，再取

$f(x) = x^3$ 代入检验

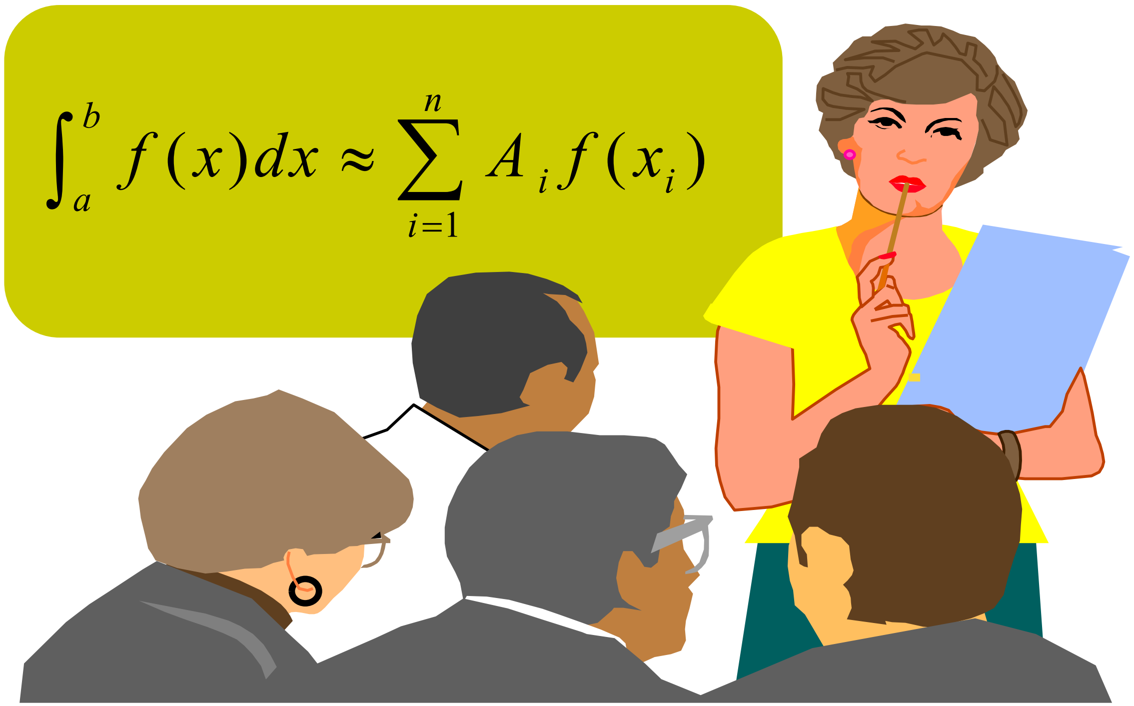
$$R(x^3) = -\frac{16}{3}h^4 \neq 0$$

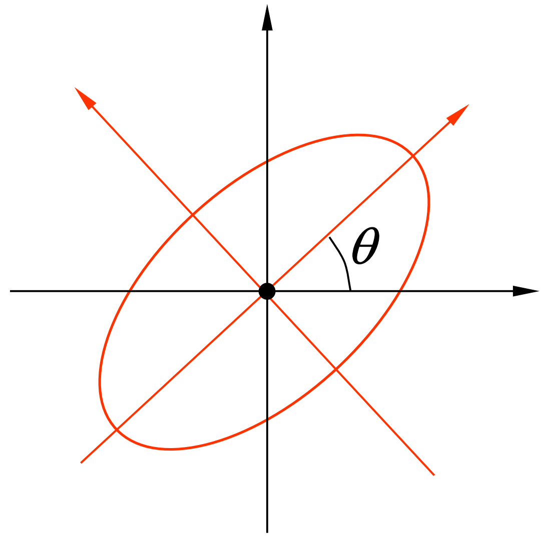
故所求的求积公式具有二阶代数精度。

第六章 数值积分与微分

§6.3 插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$





借助多项式插值函数来构造的求积公式称为插值型求积公式。

一般选用不同的插值公式就可以得到不同的插值型求积公式。

1） 基本思想

利用被积函数 的插值函数代替被积函数来构造求积公式。

2) 构造原理

考虑函数***y=f(x)***在***n***个求积节点上的函数值

$$y_k = f(x_k), k = 1, 2, \cdots, n$$

构造的一个n-1次Lagrange插值多项式 $L_{n-1}(x)$

$$L_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\ l_{in-1}(x),$$

$$l_{in-1}(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{n} \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right) \quad , \omega_n(x) = \prod_{k=1}^{n} (x - x_k)$$

$$\because f(x)=\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\ \ l_{in-1}(x)+\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x) \quad x\in[a,b]$$

$$\therefore \int_a^b f(x)dx=\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\int_a^b l_{in-1}(x)dx+\int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x)dx$$

令$A_i=\int_a^b l_{in-1}(x)dx \Rightarrow$

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)+\int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x)dx}$$

若舍去等式右端的积分项，得到

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)}$$

插值型求积公式:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i), \quad A_i = \int_a^b l_{in-1}(x)dx$$

$$\boxed{\text{关键:}\ A_i = \int_a^b l_{in-1}(x)dx,\ \ l_{in-1}(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{n} \left(\frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right)}$$

插值型求积公式的求积余项

$$\boxed{R(f) = \int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \omega_n(x)dx}$$

插值型求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$

的代数精度至少为n-1。

例1.已知 $x_0=\frac{1}{4},x_1=\frac{1}{2},x_2=\frac{3}{4}$

求这3点为求积节点在[0,1]上的插值型求积公式。

解：法1：3个点的3个插值多项式基函数为

$$l_{02}(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$l_{12}(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

$$l_{22}(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$A_k=\int_0^1 l_{k2}(x)dx,k=0,1,2$$

代入具体数值计算有:

$$A_0=\int_0^1\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx=\int_0^1\frac{\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)}dx=\frac{2}{3}$$

$$A_1=\int_0^1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx=\int_0^1\frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)}{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)}dx=-\frac{1}{3}$$

$$A_2=\int_0^1\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx=\int_0^1\frac{\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)}dx=\frac{2}{3}$$

故所求的插值型求积公式为

$$\int_0^1 f(x)dx\approx\frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right)-\frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right)+\frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right)$$

3） 分析

（1）结论

定理1：插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

的代数精度至少为n-1。

推论：插值型求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$

的求积系数之和为 *b-a*，即：

$$\boxed{\sum_{k=1}^{n} A_k = b-a}$$

考虑零次被积函数

$$\because R(f) = \int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x)dx$$

（2） Newton-Cotes求积公式

$$令 x_i = a + (i-1)h,\ h = \frac{b-a}{n-1},\ i = 1, 2, \cdots, n$$

可以得到[a,b]上的n个等距节点

$$令 x = a + th \Rightarrow x \in [a,b] \Rightarrow t \in [0, n-1]$$

$$A_i = \int_a^b \prod_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{n} \left(\frac{x-x_k}{x_i-x_k} \right) dx = \frac{b-a}{n-1} \int_0^{n-1} \left(\prod_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{n} \frac{t-k+1}{i-k} \right) dt$$

Cotes系数

$$记 C_i^{(n)} = \frac{1}{n-1} \int_0^{n-1} \left(\prod_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{n} \frac{t-k+1}{i-k} \right) dt \Rightarrow A_i = (b-a) C_i^{(n)}$$

通常称 $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{i=1}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$

为n点的Newton-Cotes公式。也称为等距节点求积公式。

$$\text{利用} C_i^{(n)} = \frac{1}{n-1}\int_0^{n-1}\left(\prod_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{n}\frac{t-k+1}{i-k}\right)dt$$

可以事先算出cotes系数，从而节省计算量

表 6-1 部分 Cotes 系数

n	$C_i^{(n)}$									
2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$								
3	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$							
4	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$						
5	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$					
6	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$				
7	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$			
8	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$		
9	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$-\frac{928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$-\frac{4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$-\frac{928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$	

和为 1

Cotes系数不全为正

常用的Newton-Cotes公式

梯形公式

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

*Simpson*公式或抛物线公式

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

(3）n点Newton-Cotes公式的代数精度

定理　n点Newton-Cotes公式的代数精度至少为n-1，节点个数n为奇数时，对应的Newton-Cotes求积公式的代数精度至少为n。

证明　考虑求积余项．由于是插值型求积公式，故有 $R(x^k)=0,k=0,1,\cdots,n-1$ 对 x^n 有

$$R(x^n)=\int_a^b \frac{(x^n)^{(n)}}{n!}\Big|_{x=\xi}\prod_{k=1}^{n}(x-x_k)\mathrm{d}x \overset{x=a+th}{=} h^{n+1}\int_0^{n-1}\prod_{k=1}^{n}(t-k+1)\mathrm{d}t$$

$$\overset{\substack{n=2l+1\\ s=t-l}}{=} h^{n+1}\int_{-l}^{l}\prod_{k=1}^{2l+1}(s+l-k+1)\mathrm{d}s$$

记

$$\varphi(s)=\prod_{k=1}^{2l+1}(s+l-k+1)\overset{m=l-k+1}{=}\prod_{m=-l}^{l}(s+m)$$

易知 $\varphi(-s)=-\varphi(s)$，故 $\varphi(s)$ 是奇函数，得

$$R(x^n)=h^{n+1}\int_{-l}^{l}\varphi(s)\mathrm{d}s=0$$

(4) 梯形公式与Simpson公式的余项

广义积分中值定理

$f(x), g(x) \in C[a,b]; g(x)$ 在 $[a,b]$ 上不变号，则有

$$\boxed{\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx \qquad \xi \in [a,b]}$$

I、梯形公式余项

$$\boxed{R_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta) \quad \eta \in [a,b]}$$

$$\because R_1(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx$$

$$= \frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta)$$

II、Simpson公式余项

$$\boxed{R_2(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta) \quad \eta \in [a,b]}$$

(5) Newton-Cotes公式的数值稳定性

积分时函数值不准确时 $\tilde{f}(x_k)=f(x_k)-\varepsilon_k$

$$\because \eta_n=(b-a)\sum_{i=1}^{n}C_i^{(n)}f(x_i)-(b-a)\sum_{i=1}^{n}C_i^{(n)}\tilde{f}(x_i)$$

$$=(b-a)\sum_{i=1}^{n}C_i^{(n)}\varepsilon_i$$

则有 $$|\eta_n|\le(b-a)\varepsilon\sum_{i=1}^{n}\left|C_i^{(n)}\right|,\ \varepsilon=\max_{1\le i\le n}|\varepsilon_i|$$

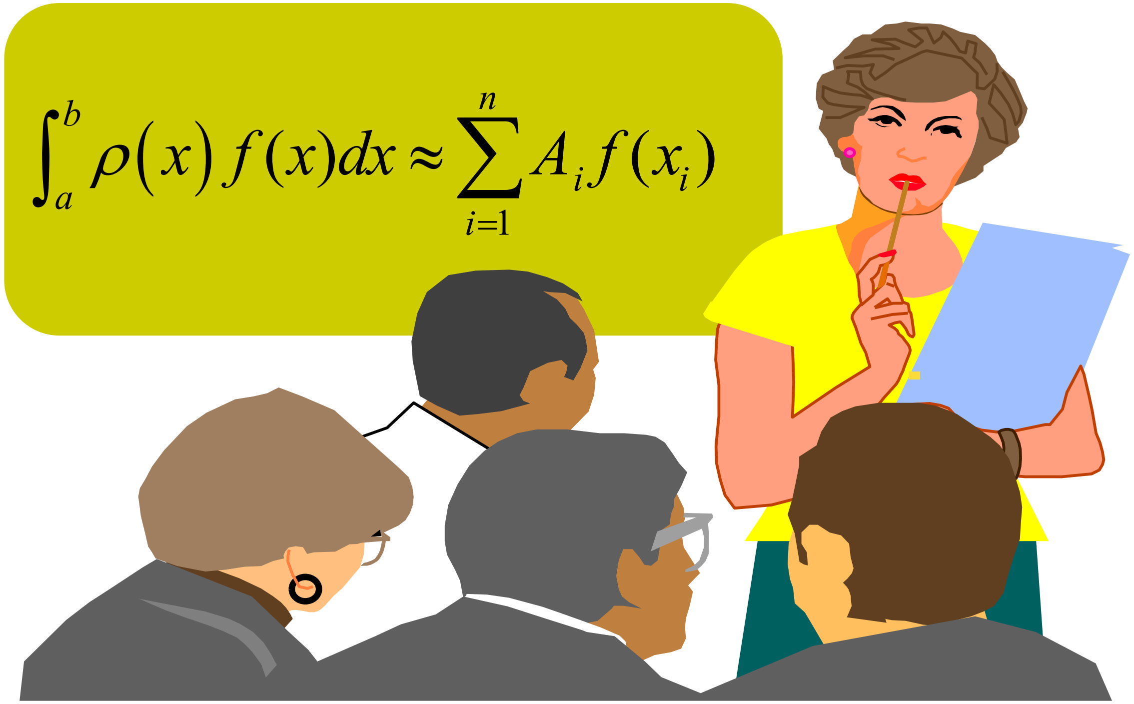
n<=8时，稳定，Cotes系数和为1

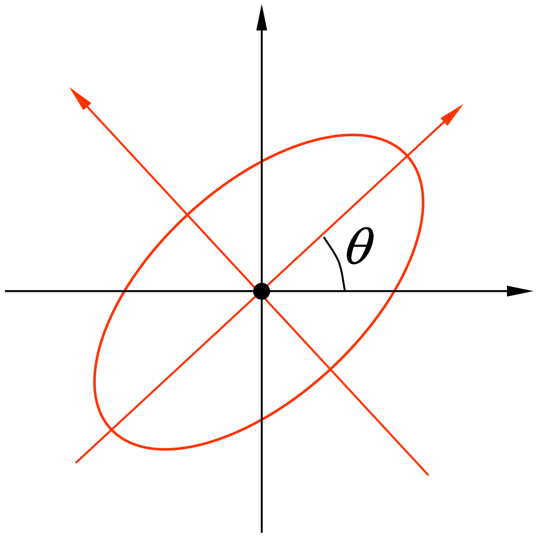
n>8时，不稳定，Cotes系数有正有负，绝对值和会增大；

（Runge 现象）

§6.4 Gauss求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$





问题：

*n*点的插值型求积公式的代数精度至少是*n-1*，那么，是否还能提高其代数精度呢?
若能，其代数精度最大能是多少?

1) 基本思想

在插值型求积公式中
利用求积节点的选取
构造具有最高代数精度的求积公式。

增加此自由度，进而进行研究

2) 构造原理

考虑一般的求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \qquad (*)$$

这里$\rho(x)$是权函数。权函数$\rho(x)$要非负

权函数$\rho(x)$ =1时就是前面的求积公式。

例 6.2 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx Af(-h) + Bf(0) + Cf(2h)$$

的参数A，B，C，使它具有尽可能高的代数精度，并指出相应的代数精度。

分析方程个数和未知量个数

定理:

求积公式(*)的代数精度最大为2n-1 。

证明

$$\text{设}x_1,x_2,\cdots,x_n\text{是}\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

的任意一组求积节点。

存在即可，所以找一个好算的

$$\boxed{\text{选取}f(x)=\omega_n^2(x),\text{这里}\omega_n(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}$$

代入求积公式，有余项

$$R(f)=\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)dx-\sum_{k=1}^{n}A_k\omega_n^2(x_k)=\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)dx>0$$

由定义得求积公式的代数精度不大于2n-1.?

为证明本定理，设f(x)是任意一个2n-1次多项式，由多项式除法有

$$f(x)=q(x)\omega_n(x)+r(x),\quad f(x_k)=r(x_k),k=1,2,\cdots,n$$

式中q(x),r(x)都是次数小于n 的多项式

$$\therefore \int_a^b \rho(x)f(x)dx=\int_a^b \rho(x)q(x)\omega_n(x)dx+\int_a^b \rho(x)r(x)dx$$

因为求积公式(*)是具有n个节点的插值型求积公式，故其代数精度至少为n-1，故有

$$\int_a^b \rho(x)r(x)dx=\sum_{k=1}^{n} A_k r(x_k)=\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

要$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$

$\Leftrightarrow \int_a^b \rho(x) q(x) \omega_n(x) dx = 0, \forall q(x)$是次数<n的多项式。

可以用q(x)的这种任意性，选择求积节点

$$\boxed{x_1, x_2, \cdots, x_n}$$

正交多项式理论可知上面的节点是存在唯一的，它们就是在$[a,b]$上关于权的n次正交多项式的零点。至此得出定理结论。

$$\boxed{\int_a^b \rho(x) q(x) \omega_n(x) dx = 0, \forall q(x)\text{是次数<n的多项式。}}$$

结论与概念:

定理：n 点插值型求积公式的代数精度至少是 n-1，至多为2n-1 。

定义：若n点的求积公式具有2n-1 次代数精度，则称该求积公式为**Gauss型求积公式**，对应的求积节点 和求积系数 分别称为**Gauss点**和**Gauss系数**。

Gauss型求积公式的求积余项用如下展开获得

$$f(x)=H_{2n-1}(x)+\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\omega_n^2(x) \quad \xi\in[a,b]$$

例：确定参数 x_1, x_2, A_1, A_2，使求积公式

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)dx \approx A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2)$$

具有最高代数精度。

解：　方法1

依次取 $f(x)=1, x, x^2, x^3$ 代入求积公式的两端，并令其相等：

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1 + A_2 = \pi \\ x_1 A_1 + x_2 A_2 = 0 \\ x_1^2 A_1 + x_2^2 A_2 = \pi/2 \\ x_1^3 A_1 + x_2^3 A_2 = 0 \end{cases} \qquad \Rightarrow x_1 = -\frac{\sqrt{2}}{2}, x_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

$$A_1 = \frac{\pi}{2}, A_2 = \frac{\pi}{2}$$

因为n=2的最高代数精度为3，故所求为：

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)dx \approx \frac{\pi}{2}f(-\frac{\sqrt{2}}{2})+\frac{\pi}{2}f(\frac{\sqrt{2}}{2})$$

解：方法2，用正交多项式方法

$$令\omega_2(x)=(x-x_1)(x-x_2)=x^2+ax+b$$

由正交性，有

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\omega_2(x)dx=0,\quad \int_{-1}^{1}\frac{x}{\sqrt{1-x^2}}\omega_2(x)dx=0$$

$$\therefore \int_{-1}^{1}\frac{x^2+ax+b}{\sqrt{1-x^2}}dx=\int_{-1}^{1}\frac{x^2+b}{\sqrt{1-x^2}}=0\Rightarrow b=-\frac{1}{2}$$

$$\int_{-1}^{1}\frac{x\left(x^2+ax+b\right)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\int_{-1}^{1}\frac{ax^2}{\sqrt{1-x^2}}=0\Rightarrow a=0$$

$$\Rightarrow x_1=-\frac{\sqrt{2}}{2},x_2=\frac{\sqrt{2}}{2}$$

注意到求积公式具有3次代数精度，求积公式

对$f(x)=1,x$，有

$$A_1+A_2=\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx=\pi$$

$$-\frac{\sqrt{2}}{2}A_1+\frac{\sqrt{2}}{2}A_2=\int_{-1}^{1}\frac{x}{\sqrt{1-x^2}}dx=0$$

$$\Rightarrow A_1=A_2=\frac{\pi}{2}$$

得到求积公式

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)dx\approx\frac{\pi}{2}f(-\frac{\sqrt{2}}{2})+\frac{\pi}{2}f(\frac{\sqrt{2}}{2})$$

它有3次代数精度，是Gauss求积公式.

3) Gauss型求积公式的数值稳定性

设$l_{in-1}(x)$ **是关于n个Gauss点的插值基函数**

取$f(x)=l_{in-1}^2(x)$，有

$$0<\int_a^b \rho(x)l_{in-1}^2(x)dx=\sum_{k=1}^{n}A_k l_{in-1}^2(x_k)=A_i \quad \forall i$$

结论：Gauss系数都是大于零的数。

$$取f(x)\equiv 1\Rightarrow \sum_{k=1}^{n}A_k=\int_a^b \rho(x)dx$$

类似Newton-Cotes稳定性处理方法，有舍入误差

$$\left|\eta_n\right| = \left|\sum_{k=1}^{n} A_k \varepsilon_k\right| \le \sum_{k=1}^{n} \left|A_k\right| \left|\varepsilon_k\right|$$

$$= \sum_{k=1}^{n} A_k \left|\varepsilon_k\right| \le \varepsilon \sum_{k=1}^{n} A_k = \varepsilon \int_a^b \rho(x)\, dx$$

所以Gauss型求积公式是稳定的。

Gauss公式中，不同的权函数 和不同积分区间，对应不同形式的Gauss公式。

常用的Gauss公式：

1、Gauss-Legendre求积公式

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

Legendre正交多项式

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}\left[\left(x^2-1\right)^n\right]$$

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

2、 Gauss-Chebyshev求积公式

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

Chebyshev正交多项式

$$\boxed{T_n(x) = \cos(n\arccos x)}$$

$$\boxed{x_k = \cos\frac{(2k-1)\pi}{2n}, A_k = \frac{\pi}{n}, k = 1, 2, \cdots, n}$$

3、Gauss-Laguerre求积公式

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)\, dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

Laguerre正交多项式

$$\bar{L}_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right)$$

4、Gauss-Hermite求积公式

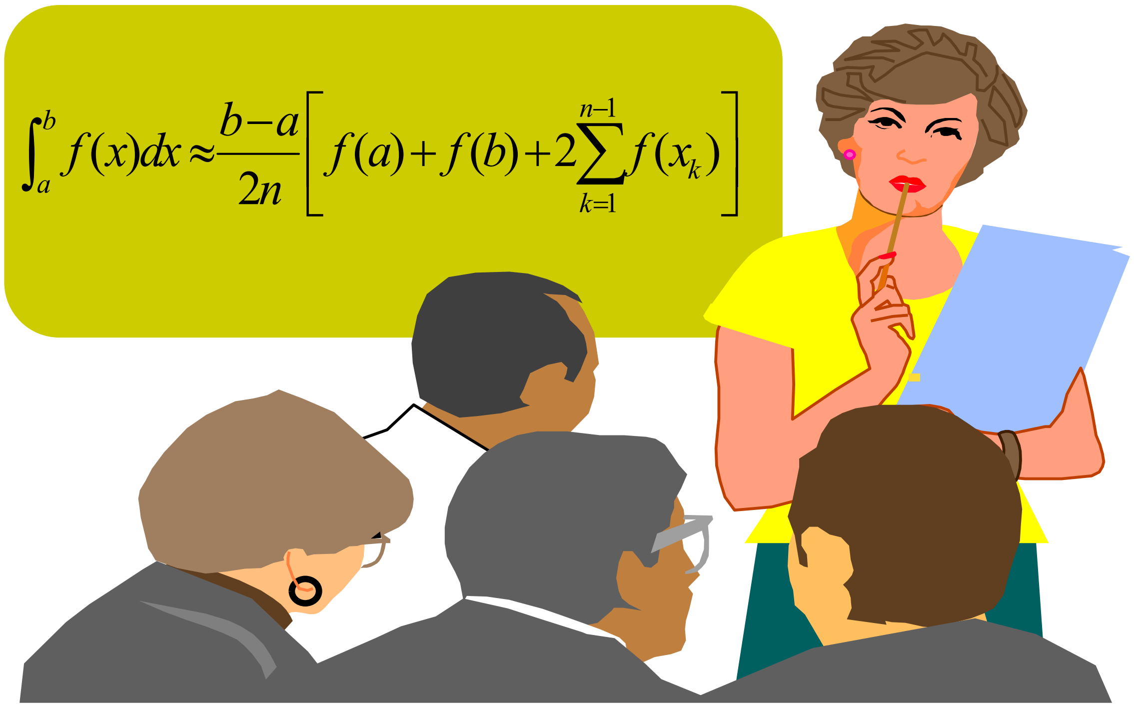
$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)\,dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

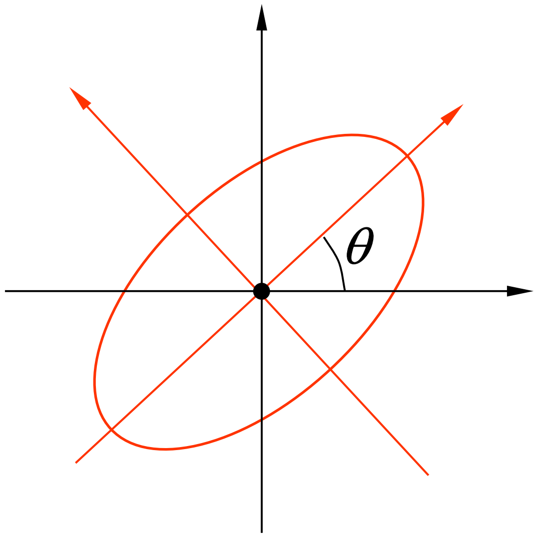
Hermite正交多项式

$$\boxed{H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)}$$

第六章 数值积分与微分

§6.5 复化求积公式





1） 基本思想

将求积区间[a,b]分成若干个小区间，然后在每个小区间上采用数值稳定的Newton-Cotes公式求小区间上的定积分，最后把所有小区间上的计算结果相加起来作为原定积分的近似值。

常用的复化求积公式有**复化梯形公式**和**复化Simpson公式**

2) 构造原理

(1) 复化梯形公式

取等距节点$x_i = a + ih,\ h = \dfrac{b-a}{n},\ i = 0,1,2,\cdots,n$

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

在每个小区间 上用梯形公式，有

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

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

复化梯形公式

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

（2）复化Simpson公式

取等距节点$x_i = a + ih, h = \dfrac{b-a}{n}, i = 0,1,2,\cdots,n$

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

在每个小区间 上用抛物线公式，有

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

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

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

复化Simpson公式

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

3）分析

$$f(\xi)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k) \Leftrightarrow nf(\xi)=\sum_{k=1}^{n} f(x_k)$$

(1）复化梯形公式的余项

令 $T_n=\frac{b-a}{2n}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right], R_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

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

$$=-\frac{h^3 n}{12}f''(\eta)=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta) \qquad \eta\in[\ a\ ,b\ ]$$

复化梯形余项公式

$$R(f,T_n)=\int_a^b f(x)dx-T_n=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta) \quad \eta\in[\ a\ ,b\ ]$$

*复化梯形公式误差估计：

设$\left|f''(x)\right| \le M_2$， $x \in [a,b]$

$$\Rightarrow \left|R(f,T_n)\right| \le \left|-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)\right| \le \frac{b-a}{12}h^2 M_2 \le \varepsilon,$$

ε为任意给定的计算精度要求。

$$\Rightarrow h \le \sqrt{\frac{12\varepsilon}{(b-a)M_2}} \quad ,n = \frac{b-a}{h}$$

给定ε,上面公式给出了满足精度要求的复化求积公式的 n.

(2) 复化Simpson公式的余项

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

$$\because R_2(f)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)=-\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta)$$

$$\Rightarrow R(f,S_n)=\int_a^b f(x)dx-S_n=\sum_{k=0}^{n-1}-\frac{1}{90}\left(\frac{h}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta_k)$$

$$=-\frac{n}{90}\left(\frac{h}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta)=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\quad ,\eta\in[\,a\,,b\,]$$

复化Simpson余项公式

$$\boxed{R(f,S_n)=\int_a^b f(x)dx-S_n=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\quad ,h=\frac{b-a}{n},\eta\in[\,a\,,b\,]}$$

*复化Simpson公式误差估计

: 设$\left|f^{(4)}(x)\right| \le M_4$, $x \in [a,b]$

$$\Rightarrow \left|R(f,S_n)\right| \le \left|-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\right| \le \frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 M_4 \le \varepsilon,$$

ε为任意给定的计算精度要求。

$$\Rightarrow h \le 2 \times \sqrt[4]{\frac{180\varepsilon}{(b-a)M_4}} \quad , n = \frac{b-a}{h}$$

给定ε,上面公式给出了满足精度要求的复化simpson公式的 n.

例:分别用复化梯形公式和复化Simpson公式计算定积分

$$I=\int_0^1 \frac{1}{1+x}dx$$

计算结果要求误差小于 ε =10-4

解：首先要确定复化求积公式的 n 值。

$$\text{本题} a=0, b=1, f(x)=\frac{1}{1+x}, h=\frac{1-0}{n}=\frac{1}{n}$$

1）确定复化梯形公式的n值

$$\because \left|R(f,T_n)\right| \le \frac{b-a}{12}h^2 M_2 \le \varepsilon, \left|f''(x)\right| \le M_2,\quad x\in[a,b]$$

$$f'(x)=-(1+x)^{-2}$$

$$f''(x)=2(1+x)^{-3} \qquad \Rightarrow \left|f''(x)\right|=\left|2(1+x)^{-3}\right| \le 2$$

$$\therefore \left|R\left(f,T_n\right)\right| \le \frac{b-a}{12}h^2M_2 = \frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 \times 2 = \frac{1}{6n^2} \le 10^{-4}$$

$$\Rightarrow n^2 \ge \frac{10^4}{6} \Rightarrow n \ge \frac{10^2}{\sqrt{6}} \approx 40.8 \Rightarrow \therefore n = 41$$

复化梯形公式为

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{82}\left[f(0)+f(1)+2\sum_{k=1}^{40} f(x_k)\right], x_k = kh = \frac{k}{41}$$

$$\therefore \int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{82}\left[f(0)+f(1)+2\sum_{k=1}^{40} f(\frac{k}{41})\right] \approx 0.69318$$

1）确定复化Simpson公式的 n 值

$$\because \left|R(f,S_n)\right| \le \frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 M_4 \le \varepsilon, \quad \left|f^{(4)}(x)\right| \le M_4$$

$$f'''(x) = -6(1+x)^{-4}, \quad \Rightarrow \left|f^{(4)}(x)\right| = \left|24(1+x)^{-5}\right| \le 24$$

$$f^{(4)}(x) = 24(1+x)^{-5}$$

$$\because \left|R(f,S_n)\right| \le \frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 M_4 = \frac{1-0}{180}\left(\frac{1}{2n}\right)^4 \times 24 = \frac{1}{120}h^4 \le 10^{-4}$$

$$\Rightarrow n^4 \ge \frac{10^4}{120} \Rightarrow n \ge \frac{10}{\sqrt[4]{120}} \approx 3.02 \Rightarrow \therefore n = 4$$

复化Simpson公式为

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{24}\left[f(0)+f(1)+4\sum_{k=0}^{3} f\left(\frac{k}{4}+\frac{1}{8}\right)+2\sum_{k=1}^{3} f(\frac{k}{4})\right]$$

这里$h=\frac{1}{n}=\frac{1}{4}, x_k=a+kh=\frac{k}{4},$

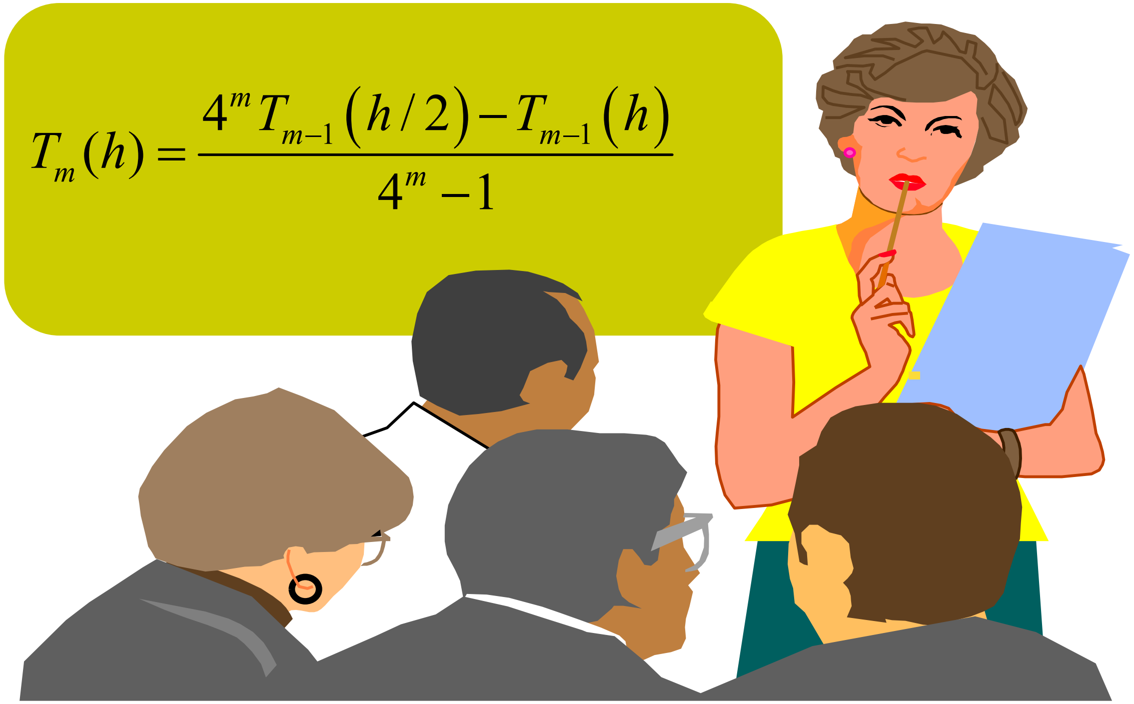
$$x_{k+\frac{1}{2}}=x_k+\frac{h}{2}=\frac{k}{4}+\frac{1}{2\times 4}=\frac{k}{4}+\frac{1}{8}$$

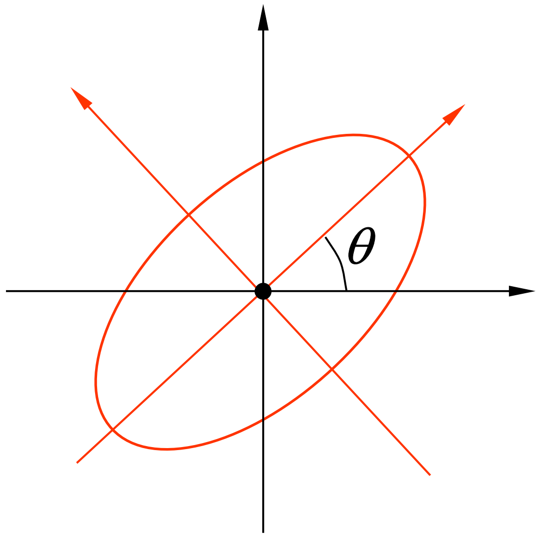
$$\therefore \int_0^1 f(x)dx \approx S_4 \approx 0.693155$$

本题准确解为 $\therefore \int_0^1 f(x)dx = \ln 2 = 0.69314\cdots$

第六章 数值积分与微分

§6.6 Romberg 求积方法





Romberg 求积方法是对复化梯形公式用加速技术得到的一种求积方法，它也称为**逐次分半加速收敛法**。

1） 基本思想

将Richardson 外推算法应用于复化梯形公式中，用产生的加速数列来求定积分值。

2) 构造原理

定理 设$F_0(h)\to F^*$,（$h\to 0$), 且有

$$\boxed{F^*-F_0(h)=\alpha_1 h^{p_1}+\alpha_2 h^{p_2}+\alpha_3 h^{p_3}+\cdots \qquad (1)}$$

式中$0<p_1<p_2<\cdots$; p_k,α_k是与h无关的非零常数。

若取$F_1(h)=\dfrac{F_0(qh)-q^{p_1}F_0(h)}{1-q^{p_1}}$, $0<q<1$, 则有

$$F_1(h)\to F^*$$

$$F^*-F_1(h)=\alpha_2^{(1)}h^{p_2}+\alpha_3^{(1)}h^{p_3}+\cdots \qquad (2)$$

式中$\alpha_k^{(1)}$是与h无关的非零常数.

证明 用qh替换式中函数变量的h，有

$$F^* - F_0(qh) = \alpha_1 (qh)^{p_1} + \alpha_2 (qh)^{p_2} + \cdots + \alpha_k (qh)^{p_k} + \cdots$$

$$= \alpha_1 q^{p_1} h^{p_1} + \alpha_2 q^{p_2} h^{p_2} + \cdots + \alpha_k q^{p_k} h^{p_k} + \cdots \quad (3)$$

做 $-q^{p_1} \times (1) + (3)$

$$\Rightarrow \left(1 - q^{p_1}\right) F^* - \left(F_0(qh) - q^{p_1} F_0(h)\right)$$

$$= \alpha_2 \left(q^{p_2} - q^{p_1}\right) h^{p_2} + \cdots + \alpha_k \left(q^{p_k} - q^{p_1}\right) h^{p_k} + \cdots$$

整理

$$\Rightarrow F^* - \frac{F_0(qh) - q^{p_1} F_0(h)}{1 - q^{p_1}} = \alpha_2 \frac{q^{p_2} - q^{p_1}}{1 - q^{p_1}} h^{p_2} + \cdots + \alpha_k \frac{q^{p_k} - q^{p_1}}{1 - q^{p_1}} h^{p_k} + \cdots$$

令$F_1(h) = \dfrac{F_0(qh) - q^{p_1} F_0(h)}{1 - q^{p_1}}$，$\alpha_k^{(1)} = \alpha_k \dfrac{q^{p_k} - q^{p_1}}{1 - q^{p_1}}$即可。

$$\because F_0(h)=O\left(h^{p_1}\right), F_1(h)=O\left(h^{p_2}\right) \Rightarrow F_1(h)\text{比}F_0(h)\text{更快收敛}$$

称用如上做加速的方法为Richardson 外推法。

显然这种外推可以不断做下去以获得逼近更快的函数，一般有

若成立 $$F^* - F_m(h) = \alpha_{m+1}^{(m)} h^{p_{m+1}} + \alpha_{m+2}^{(m)} h^{p_{m+2}} + \cdots$$

则取 $$F_{m+1}(h) = \frac{F_m(qh) - q^{p_m} F_m(h)}{1-q^{p_m}}, m = 0,1,2,\cdots$$

$$\Rightarrow F_{m+1}(h) = O\left(h^{p_{m+2}}\right)$$

构造:

$$\text{记} I=\int_a^b f(x)dx, \quad T_0(h)=T_n$$

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

$$\because I-T_0(h)=\alpha_1 h^2+\alpha_2 h^4+\alpha_3 h^6+\cdots, T_0(h)=O\left(h^2\right)$$

利用Richardson 外推法做加速

$$T_1(h)=\frac{T_0(qh)-q^2T_0(h)}{1-q^2}, \quad 0<q<1$$

$$\text{取} q=\frac{1}{2}\Rightarrow T_1(h)=\frac{4T_0(h/2)-T_0(h)}{4-1}, T_1(h)=O\left(h^4\right)$$

再做一次Richardson 加速，有

$$T_2(h)=\frac{4^2T_1\left(h/2\right)-T_1\left(h\right)}{4^2-1},T_2(h)=O\left(h^6\right)$$

一般，有经Richardson加速求定积分的序列为

$$T_0\left(h\right)=T_n,T_0(h)=O\left(h^2\right)$$

$$T_m(h)=\frac{4^mT_{m-1}\left(h/2\right)-T_{m-1}\left(h\right)}{4^m-1},m=1,2,\cdots,$$

$$T_m(h)=O\left(h^{2m+2}\right)$$

注意到 $T_0(h/2)=T_{2n} \Rightarrow T_1(h)=S_n=\dfrac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$

类似地可得 $T_2(h)=C_n=\dfrac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}, T_3(h)=R_n=\dfrac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1},\cdots$

梯形序列：

$$\{T_1,T_2,T_{2^2},\cdots,T_{2^k}\cdots\} \qquad T_n=\frac{b-a}{2n}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)\right]$$

Simpson序列：

$$\{S_1,S_2,S_{2^2},\cdots,S_{2^k}\cdots\},S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$$

Cotes序列：

$$\{C_1,C_2,C_{2^2},\cdots,C_{2^k}\cdots\},C_n=\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}$$

Romberg序列：

$$\{R_1,R_2,R_{2^2},\cdots,R_{2^k}\cdots\},R_n=\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$$

T_{2n}与T_n的计算公式：

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

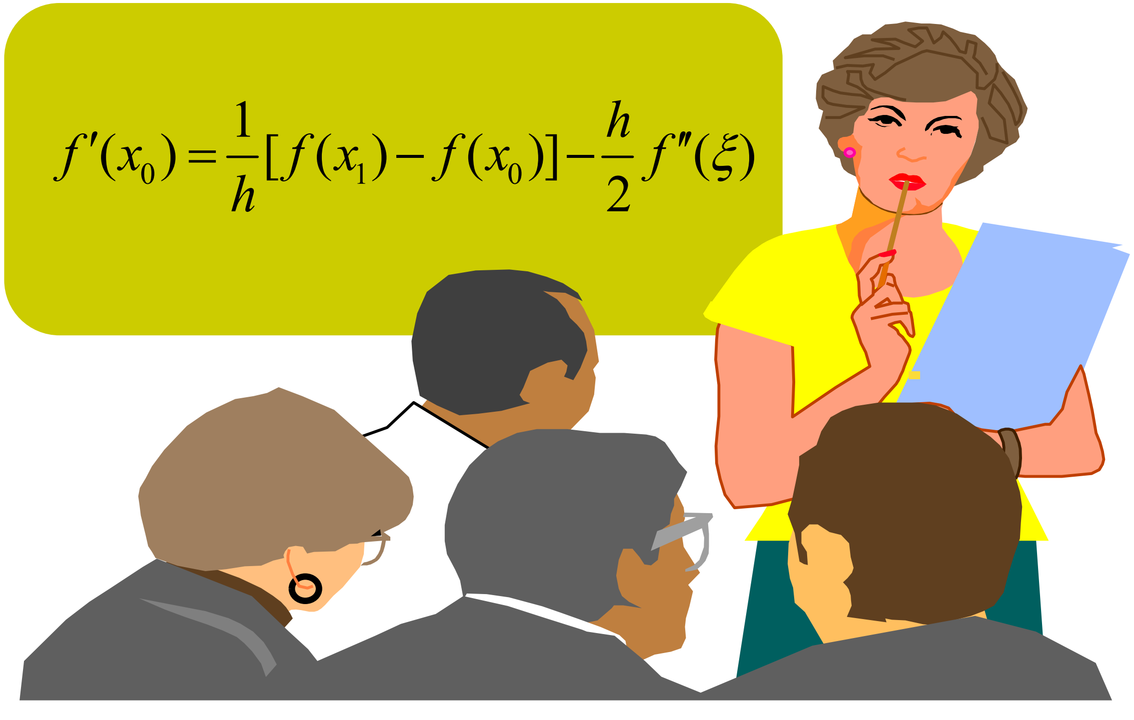
Romberg求积方法的计算过程：

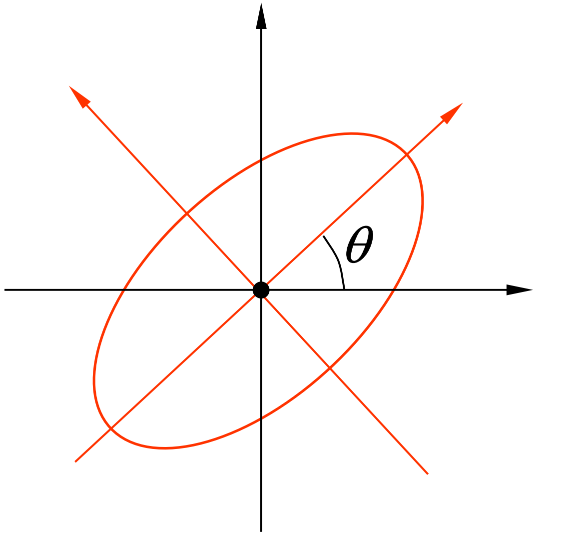
k	T_{2^k}	S_{2^k}	C_{2^k}	R_{2^k}
0	T_1	S_1	C_1	R_1
1	T_2	S_2	C_2	R_2
2	T_4	S_4	C_4	
3	T_8	S_8		
4	T_{16}			

$$\left|R_{2^{k+1}} - R_{2^k}\right| < \varepsilon$$

§6.7 数值微分

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





根据函数在若干个点处的函数值去求该函数的导数近似值称为数值微分，所求导数的近似值常称为数值导数。

1） 基本思想

用来自数据的插值函数获得该函数的导数。

2) 构造原理

（1）利用 次多项式插值函数求数值导数

$$\because R_m(x)=f^{(m)}(x)-P_n^{(m)}(x)$$

$$=\frac{d^m}{dx^m}\left[\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\right]\ (m=1,2,\cdots)$$

式中$P_n(x)$是f(x)的n次插值多项式.

特别有一阶数值导数的余项关系

$$R_1(x)=\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\cdot\frac{d\xi}{dx}\cdot\omega_{n+1}(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\cdot\omega'_{n+1}(x)$$

在节点处有

$$R_1(x_k)=f'(x_k)-P_n'(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\cdot\omega_{n+1}'(x_k)\quad k=0,1,\cdots,n$$

插值型求导公式多用于求在节点处的数值导数。

例如　给定两个点　$x_k, f(x_k)\quad (k=0,1)$

有　$$P_1(x)=L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)$$

有不带余项的数值微分公式：

$$P_1'(x_k)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}, k=0,1,\quad h=x_1-x_0$$

在节点处的余项为

$$R_1(x_k)=\frac{f''(\xi)}{2!}\omega_2'(x_k)=(2x_k-x_0-x_1)\frac{f''(\xi)}{2!},\xi\in\left(x_0,x_1\right)$$

得出带余项的两点数值微分公式：

前差公式 $f'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]-\frac{h}{2}f''(\xi)$

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

例：给定数表

x	0	1	5	21	27
y	1	2	4	8	10

用三点公式求 $f'(5), f''(5)$

解：选3个数据 $x_i = 1, 5, 21$ 作为插值节点，有

$$P_2(x) = \frac{(x-5)(x-21)}{(1-5)(1-21)} \times 2 + \frac{(x-1)(x-21)}{(5-1)(5-21)} \times 4 + \frac{(x-1)(x-5)}{(21-1)(21-5)} \times 8$$

$$= \frac{(x-5)(x-21)}{40} - \frac{(x-1)(x-21)}{16} + \frac{(x-1)(x-5)}{40}$$

$$\therefore f'(5) \approx P'(5) = 0.45, \quad f''(5) \approx P''(5) = -0.025$$

(2）利用三次样条插值函数求数值导数

三次样条插值函数S(x) 与被插函数f(x)有如下逼近关系：

$$a)\quad \|f-S\| \le \frac{5h^4}{384}\|f^{(4)}\|$$

$$b)\quad \|f'-S'\| \le \frac{h^3}{24}\|f^{(4)}\|$$

$$c)\quad \|f''-S''\| \le \frac{h^2}{8}\|f^{(4)}\|$$

$$h = \max_{0\le k\le n-1} h_k$$

$$h_k = x_{k+1} - x_k$$