数值积分和数值微分

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

由微积分学基本定理,当f(x)在[a,b]上连续时,存在原函数F(x),

由Newton-Leibnits公式 $I = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$

有时,用上面的方法计算定积分有困难.

1.不易求f(x)的原函数F(x)　　e.g. $\frac{\sin x}{x}, \frac{1}{\ln x}, e^{-x^2}$

2.f(x)的原函数表达式很复杂**(**计算量大**)**　e.g. $\int_a^b \frac{1}{1+x^4}dx$

3.f(x)用列表给出**(**观测所得数据表**)**

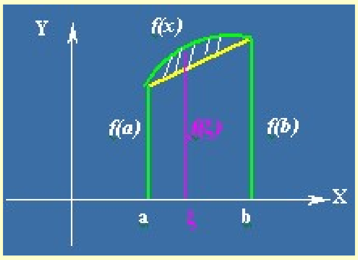
所以,讨论数值积分,即用数值方法计算定积分的近似值.

机械求积

对于 $I=\int_a^b f(x)dx$,若f(x)>0时,则I对应于曲边梯形的面积。

当f(x)在[a,b]上连续,由积分中值定理。

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



I是以b-a为底,高为f(ξ)的矩形的面积。
f(ξ)称为[a,b]上的平均高度。

1. 梯形公式 取 $f(\xi)\approx\dfrac{f(a)+f(b)}{2}$

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

2. 中矩形公式

取 $f(\xi)\approx f(\dfrac{a+b}{2})\qquad \int_a^b f(x)dx\approx(b-a)f(\dfrac{a+b}{2})$

3. Simpson公式

取 $f(\xi)\approx\dfrac{1}{6}[f(a)+4f(\dfrac{a+b}{2})+f(b)]$

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

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

机械求积公式:

在[a,b]中有n+1个互异的节点$x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$.

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \ldots + A_n f(x_n) \qquad (3.1)$$

称上式为机械求积公式,其中$x_0 \sim x_n$为求积节点,
$A_i(i=0,1,\ldots,n)$为求积系数(权).

注:1. 求积系数A_k仅与节点x_i的选取有关,而不依赖于被积函数f(x)的具体形式.

2.通过机械求积,把求积分值转化为求函数值,避免了Newton-Leibnits求原函数的困难.

3. 机械求积是求定积分的近似方法.

$R_n(f) = I - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 求积公式(3.1)的截断误差或余项.

Chapter 3
Numerical integration
and differentiation

代数精度

对于机械求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

$$R_n(f) = I - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

定义 若上述公式对所有次数不超过m的多项式$P_m(x)$都精确成立,即$R_n(P_m)=0$,而对某一个m+1次多项式$P_{m+1}(x)$近似成立,即$R_n(P_{m+1})\neq 0$.则称机械求积公式具有**m次代数精度**.

梯形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$ 的代数精度为1.

HUST

判断代数精度的方法

当$f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$时,求积公式精确成立,

而$f(x)= x^{m+1}$时公式近似成立,⇔求积公式的代数精度为m次.

证明: 必要性显然.下证充分性

∵ 对任意次数低/等于m的多项式$P_m(x)=a_0+a_1x+ a_2x^2+\ldots+ a_mx^m$,

由于求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$对于 $f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$时精确成立

$$\therefore \int_a^b 1dx = \sum_{k\neq 0}^{n} A_k, \quad \int_a^b xdx = \sum_{k\neq 0}^{n} A_k x_k, \quad \ldots, \int_a^b x^m dx = \sum_{k\neq 0}^{n} A_k x_k^m$$

$$\int_a^b P_m(x)dx = a_0\int_a^b dx + a_1\int_a^b xdx + \ldots + a_m\int_a^b x^m dx = a_0\sum_{k=0}^{n} A_k + a_1\sum_{k=0}^{n} A_k x_k + \ldots + a_m\sum_{k=0}^{n} A_k x_k^m$$

$$= \sum_{k=0}^{n} A_k (a_0 + a_1 x_k + \ldots + a_m x_k^m) = \sum_{k=0}^{n} A_k P_m(x_k)$$

∴求积公式对$P_m(x)$精确成立. 但对m+1次多项式,公式近似成立

(R≠0), 由定义知该公式的代数精度是m次。

例 验证梯形公式的代数精度为1.

解: 梯形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

令$f(x)=1$ 左$=\int_a^b 1dx = b-a$, 右$=\frac{b-a}{2}[1+1]=b-a$, 左=右

公式对 $f(x)=1$精确成立.

令$f(x)=x$ $\int_a^b xdx = \frac{b^2-a^2}{2}$, 右 $= \frac{b-a}{2}[a+b] = \frac{b^2-a^2}{2}$, 左 = 右

公式对 $f(x)=x$精确成立

令$f(x)=x^2$ 左 $= \int_a^b x^2 dx = \frac{b^3-a^3}{3}$, 右 $= \frac{b-a}{2}[a^2+b^2] \neq$ 左

公式对 $f(x)=x^2$不再精确成立

∴ 梯形公式代数精度为1.

例 Simpson公式的代数精度为3

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

求积公式的构造方法一

例 设有求积公式 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$

试确定系数 A_0,A_1,A_2,使这个公式具有最高的代数精度.

分析:要确定公式中3个待定常数A_0,A_1,A_2,

可令公式对$1,x,x^2$都精确成立.

解:令$f(x)= 1, x, x^2$公式都精确成立,则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 2 \\ -A_0 + A_2 = 0 \\ A_0 + A_2 = \dfrac{2}{3} \end{cases}$$

解得$A_0=1/3,A_1=4/3,A_2=1/3$

$\therefore$该求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(-1) + 4f(0) + f(1)]$$

易验证:$f(x)= x^3$时,求积公式也精确成立

而$f(x)= x^4$ 时 $\int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5} \neq \frac{2}{3} = \frac{1}{3}[(-1)^4 + 4\times 0 + 1^4]$

$\therefore$该求积公式具有3次代数精度,它是[-1,1]上的Simpson公式.

一般,对于n+1给节点上的机械求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

若使其代数精度至少为n,则可确定A_k,构造出求积公式.

只需令上式对$f(x)=1, x, x^2,\ldots, x^n$ 都精确成立,则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 + \ldots + A_n = b - a \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \ldots + A_n x_n = \dfrac{b^2 - a^2}{2} \\ \quad\ldots \qquad\qquad \ldots \\ A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \ldots + A_n x_n^n = \dfrac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1} \end{cases} \qquad (3.4)$$

上面是关于$A_0, A_1, A_2,\ldots,A_n$的线性方程组,

其系数行列式为范德蒙行列式,其值非零,

可求得唯一解.

Review

机械求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

$$R_n(f) = I - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

定义 若上述公式对所有次数不超过m的多项式$P_m(x)$都精确成立，即$R_n(P_m)=0$,而对某一个m+1次多项式$P_{m+1}(x)$近似成立，即$R_n(P_{m+1})\neq 0$.则称机械求积公式具有**m次代数精度**.

定理 对上述机械求积公式，代数精度为m次的充分必要条件是：当$f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$时,求积公式精确成立，而$f(x)= x^{m+1}$时公式近似成立。

求积公式的构造方法二——插值法

Problem 已知给定的一组节点$a\le x_0<x_1<x_2<\ldots<x_n\le b$

及函数值 $f(x_0),f(x_1),f(x_2),\ldots,f(x_n)$

构造：求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

思想：构造f(x)在n+1个插值节点上的Lagrange插值多项式

$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)$，其中Lagrange插值基函数 $l_k(x) = \prod_{j=0,j\neq k}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}$

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

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

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

(*)式为所求的求积公式.(称为插值型求积公式)

求积系数 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

考虑：插值型求积公式(*)的代数精度是多少？

1. ∵任意次数≤n的多项式f(x),其n次Lagrange插值多项式

$$P_n(x)= f(x)$$

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

∴插值型求积公式对f(x)精确成立，其至少具有n次代数精度。

2. 反之,假设 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 至少具有n次代数精度，

∴ 求积公式对任意次数≤n的多项式精确成立。

又在$x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 上的Lagrange插值基函数$l_k(x)$为n次多项式，

$$\therefore \quad \int_a^b l_k(x)dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j) \quad 而 \quad l_k(x_j) = \delta_{kj} \begin{cases} 1 & k=j \\ 0 & k \neq j \end{cases}$$

$$\therefore \quad \int_a^b l_k(x)dx = A_k$$

∴该求积公式就是(*),为插值型的.

综合1,2 有:

Th3.2 求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

至少具有n次代数精度的充要条件是：它是插值型的.

小结：已知f(x)的函数表
x_i互异,$x_i \in [a,b]$

x	x_0	x_1	…	x_n
y	$f(x_0)$	$f(x_1)$	…	$f(x_n)$

构造其求积公式，有两种方法:

1. 解线性方程组, 求A_k
2. 利用插值型公式

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

Newton-Cotes求积公式

下面介绍一种特殊的插值型求积公式:等距节点的求积公式.

对于[a,b]中的n+1个互异节点$x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$.

可构造插值型求积公式: $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ n次代数精度.

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}dx$$

现在取$x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 为[a,b]的n等分点.

即 $x_k = a+kh\ (k=0,1,\ldots,n),\ h=\frac{b-a}{n}=x_k-x_{k-1}$ ，则

$$A_k = \int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}dx \overset{x=a+th}{=\!=\!=\!=} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{(t-j)}{(k-j)}hdt$$

$$= \int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{k(k-1)\cdots(k-k+1)(k-k-1)\cdots(k-n)}hdt$$

Chapter 3
Numerical integration
and differentiation

Newton-Cotes求积公式

$$A_k = \frac{(-1)^{n-k}h}{k!(n-k)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)dt$$

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

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

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

称 $I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k)$ 为n阶Newton–Cotes公式.

注: Newton–Cotes公式为等距节点、插值型求积公式。

Cotes系数

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

注：Cotes系数不仅与函数f(x)无关，而且与积分区间[a, b]无关。

例：n=1时，$C_0^{(1)} = \frac{(-1)^1}{0!\ 1!}\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2}$　　$C_1^{(1)} = \frac{(-1)^0}{1!\ 0!}\int_0^1 (t-0)dt = \frac{1}{2}$

例：n=3时，

$$C_0^{(3)} = \frac{(-1)^3}{0!\ 3!\cdot 3}\int_0^3 (t-1)(t-2)(t-3)dt = \frac{1}{8} \qquad C_1^{(3)} = \frac{(-1)^3}{1!\ 2!\cdot 3}\int_0^3 (t-0)(t-2)(t-3)dt = \frac{3}{8}$$

$$C_2^{(3)} = \frac{(-1)^3}{2!\ 1!\cdot 3}\int_0^3 (t-0)(t-1)(t-3)dt = \frac{3}{8} \qquad C_3^{(3)} = \frac{(-1)^3}{3!\ 0!\cdot 3}\int_0^3 (t-0)(t-1)(t-2)dt = \frac{1}{8}$$

当n=0,1.2,...8时，Cotes系数见书本上Cotes系数表。

Cotes系数

n	$C_0(n)$	$C_1(n)$	$C_2(n)$	$C_3(n)$	$C_4(n)$	$C_5(n)$	$C_6(n)$	$C_7(n)$	$C_8(n)$
1	1/2	1/2							
2	1/6	2/3	1/6						
3	1/8	3/8	3/8	1/8					
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90				
5	19/288	25/96	25/144	25/144	25/96	19/288			
6	41/840	9/35	9/280	34/105	9/280	9/35	41/840		
7	751/17280	3577/17280	1323/17280	2989/17280	2989/17280	1323/17280	3577/17280	751/17280	
8	989/28350	5888/28350	−928/28350	10496/28350	−4540/28350	10496/28350	−928/28350	5888/28350	989/28350

Cotes系数的性质

性质**1.** Cotes系数的和等于1，即 $\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$

证明：设f(x)=1，则使用**n**次多项式插值时：$f(x)=P_n(x)=1$.

$$\therefore \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b 1dx = b-a$$

$$而\int_a^b p_n(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k) = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}$$

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

性质**2.** Cotes系数具有对称性，即$C_k(n)=C_{n-k}(n)$,k=0,1,…,n.

性质**3.** 对n≤7时，$C_k(n)$都是正数，n≥8时不成立。

低阶Newton–Cotes公式

n=1时，$I_1 = (b-a)[\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)] = \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)]$

此即梯形公式，即 $T = I_1 = \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)]$

n=2时，

$$I_2 = (b-a)[\frac{1}{6}f(a)+\frac{2}{3}f(\frac{a+b}{2})+\frac{1}{6}f(b)] = \frac{1}{6}(b-a)[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$

此即Simpson公式 $S = I_2 = \frac{1}{6}(b-a)[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$

n=4时，4阶Newton–Cotes公式称为Cotes公式。

$$C = I_4 = \frac{1}{90}(b-a)[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$$

注：梯形公式由线性插值推导而得。

Simpson公式由抛物插值推导而得。

Cotes公式由4次插值推导而得。

Review

Th3.2 求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

至少具有n次代数精度的充要条件是：它是插值型的。

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

n阶Newton–Cotes公式：

$$I_n = \int_a^b p_n(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k)$$

Newton–Cotes公式为等距节点、插值型求积公式，余项为：

$$R = I - I_n = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_n(x)dx$$

低阶Newton–Cotes公式的截断误差或余项

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

$\therefore R = I - I_n = \int_a^b [f(x) - P_n(x)]dx$ 为Newton-Cotes公式的余项 。

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

$$\therefore R = I - I_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)dx$$

其中 $x_k=x_0+kh \quad (k=0,1,\ldots,n) \quad x_0=a$

对以上积分进行变量代换$x=x_0+th$，并使用积分定理，有

低阶Newton–Cotes公式的截断误差或余项

了解:

Th: 若f(x)在[a,b]有连续的n+2阶导数,则Newton-Cotes公式余项为

$$R=\begin{cases}\dfrac{h^{n+2}\cdot f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt & n\text{ 是奇}\\[2ex] \dfrac{h^{n+3}\cdot f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n (t-\frac{n}{2})t(t-1)\cdots(t-n)dt & n\text{ 是偶}\end{cases}\quad \text{其中}\quad h=\frac{b-a}{n}\quad \xi\in[a,b]$$

显然: n阶Newton-Cotes公式至少有n次代数精度(因该公式为插值型);

而当n为偶数时,可证明若$f(x)=x^{n+1}$时, $R=0$,它至少有n+1次代数精度.

积分中值定理: 若f(x)在[a, b]上连续, g(x)是在[a, b]上保号的可积函数, 则存在ξ∈(a,b)使: $\int_a^b f(x)g(x)dx=f(\xi)\int_a^b g(x)dx$

梯形公式的余项(n=1) $R_T=I-T=\int_a^b \frac{f^{(2)}(\xi_x)}{2!}(x-a)(x-b)dx$

$$\because\begin{cases}\text{若 } f^{(2)}(x)\in C[a,b]\\ (x-a)(x-b)\le 0 \qquad x\in[a,b]\end{cases}$$

$$\therefore\ \exists\xi\in(a,b)\qquad R_T=\frac{f^{(2)}(\xi)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

$$R_T=-\frac{f^{(2)}(\xi)}{12}(b-a)^3=O(b-a)^3\quad \xi\in(a,b)$$

注: 此结论可由余项定理直接得到

Simpson公式的余项

直接由定理得Simpson公式(n=2)的余项

$$R_S = I - S = \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_0^2 (t-1)t(t-1)(t-2)dt = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

$$R_S = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) = O(b-a)^5$$

分析：Simpson公式是由a，b及其中点c进行抛物插值得到的，其代数精度是3，为证明以上余项公式，构造f(x)的3次插值多项式$H_3(x)$，即考虑如下插值问题：

已知f(x)的函数表

$c = \frac{1}{2}(a+b)$

x	a	c	b ...
y	f(a)	f(c)	f(b)...
f′(x)		f′(c)	

求 f(x)的Hermite插值多项式$H_3(x)$,使

$H_3(a)=f(a)$, $H_3(b)=f(b)$, $H_3(c)=f(c)$, $H'_3(c)=f'(c)$.

Simpson公式的余项的证明

证明：$f(x)-H_3(x)$有根 a、b、c（二重），易知其插值余项

$$f(x)-H_3(x) = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)$$ ，η依赖于x,且 $\eta \in [a,b]$

又Simpson公式代数精度为3.

$$\therefore \int_a^b H_3(x)dx = \frac{b-a}{6}[H_3(a)+4H_3(c)+H_3(b)] = \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(c)+f(b)] = S$$

$$R_S = I - S = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b H_3(x)dx = \int_a^b [f(x)-H_3(x)]dx$$

$$\therefore R_S = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)dx$$ 根据积分中值定理

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b).$$

Cotes公式的余项(n=4，代数精度为5)

$$R_C = I - C = -\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\xi) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi) = O(b-a)^7, \quad \xi \in [a,b]$$

例.分别用梯形公式,Simpson公式,Cotes公式和n=8的Newton-Cotes公式计算 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$ $(=0.430964406)$

解:(1)利用梯形公式 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{2}(\sqrt{0.5}+\sqrt{1}) \approx 0.4267767$

(2)利用Simpson公式 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{6}(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+\sqrt{1}) \approx 0.4309403$

(3) 利用Cotes公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{90}(7\sqrt{0.5}+32\sqrt{\frac{5}{8}}+12\sqrt{\frac{6}{8}}+32\sqrt{\frac{7}{8}}+7\sqrt{1}) \approx 0.43096407$$

(4)利用n=8的Newton-Cotes公式计算

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1}{2\times 28350}[989(\sqrt{0.5}+\sqrt{1})+5888(\sqrt{\frac{9}{16}}+\sqrt{\frac{15}{16}})$$

$$-928(\sqrt{\frac{10}{16}}+\sqrt{\frac{14}{16}})+10496(\sqrt{\frac{11}{16}}+\sqrt{\frac{13}{16}})-4540\sqrt{\frac{12}{16}}]$$

$$\approx 0.430964406$$

n较大时,结果较精确

Newton-Cotes公式的算法数值稳定性

数值稳定性 指舍入误差在运算中的传播强度,
即舍入误差对计算结果的影响程度。

Def 3.2 设给定的算法在执行某一步时产生误差ε,
相继的n步运算后结果的误差为e_n,且若其仅由ε引起,

(1)如$|e_n|\approx Cn\varepsilon$,其中C是与n无关的常数,
则称误差的增长是线性级的。

(2)如$|e_n|\approx K^n\varepsilon$,其中K>1为常数,
则称误差的增长是指数级的。

注:误差线性级增长是可以控制的,这样的算法是数值稳定的,
其运算结果可靠。
误差指数级增长难于控制,这样的算法是数值不稳定的,
其运算结果不可靠。

Newton-Cotes公式的数值稳定性

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

若计算函数值$f(x_k)$有舍入误差$\varepsilon_k = \hat{f}_k - f(x_k)$ ，$k=0,1,2,\ldots,n$.

设计算C_k没有误差，计算过程的舍入误差也不考虑，

则由ε_k引起的计算结果的误差为:

$$e_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k \hat{f}_k - (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k) = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k \varepsilon_k$$

令 $\varepsilon = \max\limits_{0\le k\le n} |\varepsilon_k|$ 应用 $\sum_{k=0}^{n} C_k = 1$ ，则

$$|e_n| \le (b-a)\sum_{k=0}^{n} |C_k|\cdot|\varepsilon_k| \le (b-a)\cdot\varepsilon\cdot\sum_{k=0}^{n}|C_k|$$

（1）当$n\le 7$时，$C_k > 0 \Rightarrow |e_n| \le (b-a)\varepsilon$

此时e_n有界，舍入误差的增长受到控制， 公式是数值稳定的。

（2）当$n\geqslant 8$时，C_k有正有负，$\sum_{k=0}^{n}|C_k| > 1$ 且随n增大而增大，

$\therefore$ 此时Newton-Cotes公式不能保证数值稳定性。

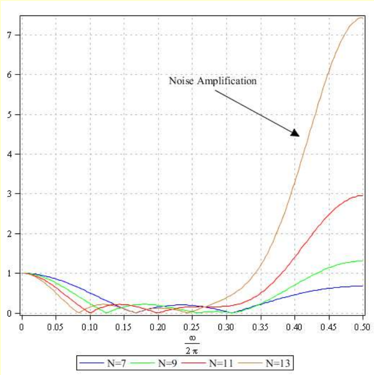
Newton-Cotes公式的数值稳定性

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

若计算函数值$f(x_k)$有舍入误差$\varepsilon_k = \hat{f}_k - f(x_k)$ ，$k=0,1,2,\ldots,n$.

则由ε_k引起的计算结果的误差为:

$$e_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k \hat{f}_k - (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k) = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k \varepsilon_k$$



小结

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

$$R = \begin{cases} \dfrac{h^{n+2}\cdot f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt & n\text{ 是奇} \\ \dfrac{h^{n+3}\cdot f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n (t-\frac{n}{2})t(t-1)\cdots(t-n)dt & n\text{ 是偶} \end{cases} \quad \text{其中 } h=\frac{b-a}{n} \quad \xi\in[a,b]$$

注: n越大，其Newton-Cotes公式I_n的截断误差越小，

那么是否n越大越好呢?

否! ① n大，计算量大，误差积累越严重。

② n≥8时，不能保证数值稳定性。

∴ 一般采用低阶的Newton-Cotes公式(T,S,C)。

HW:
作业三 #1~3

但使用T,S,C公式，又如何控制其截断误差R ?

HUST

复化求积法: 基于分段插值的插值型求积法

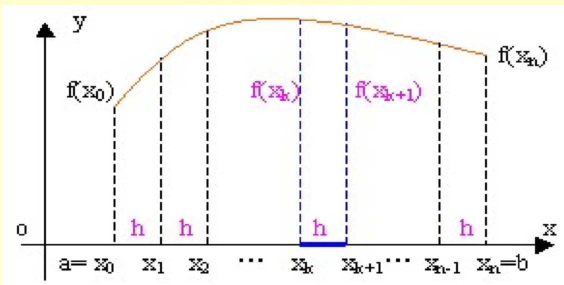
➢ 复化求积: 将积分区间划分成若干小区间,在每个小区间上构造相应的低阶求积公式,再把它们加起来作为整个区间的求积公式.----分段求积,然后求和. (积分对区间有可加性)

复化梯形公式

把[a,b] n等分,

分点$x_k=a+kh$,

$k=0\sim n$, $h=\dfrac{b-a}{n}$



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

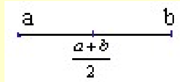
$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{x_{k+1}-x_k}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$

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

HUST

复化Simpson公式

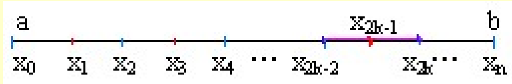
$$S = I_2 = \frac{1}{6}(b-a)[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$



➢构造复化Simpson公式时,应如何划分[a,b]?

必须将[a,b]偶数等分。

令n=2m， m为正整数



$h=\frac{b-a}{n}$ 对每个区间$[x_{2k-2}, x_{2k}]$应用Simpson公式。(k=1,2,…m)

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=1}^{m}\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx$$

$$\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx \approx \frac{1}{6}(x_{2k}-x_{2k-2})[f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})]$$

$$\therefore\ I \approx \frac{h}{3}\sum_{k=1}^{m}[f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})]$$

$$\therefore\ I \approx \frac{h}{3}[f(a)+4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k})+f(b)]=S_n$$

Chapter 3
Numerical Integration
and Differentiation

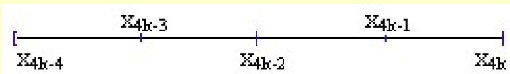
复化Cotes公式求积

➢ Cotes公式 (5点公式)

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

➢构造复化Cotes公式时,如何划分[a,b]?

n=4m， m为正整数



➢复化Cotes公式如何推导?

$$C_n=\frac{4h}{90}[7f(a)+32\sum_{k=1}^{m} f(x_{4k-3})+12\sum_{k=1}^{m} f(x_{4k-2})$$

$$+32\sum_{k=1}^{m} f(x_{4k-1})+14\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{4k})+7f(b)]$$

小结:（1）对数值求积进行区间分段处理是一种有效的手段,可以对许多公式进行复化处理.

（2）复化求积公式仍然是机械求积公式。

Review

机械求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

构造其求积公式，有两种方法：

1. 解线性方程组，求A_k
2. 利用插值型公式 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

机械求积公式至少具有n次代数精度的充要条件是：它是插值型的。

n阶Newton–Cotes公式 $I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k)$

$$R = \begin{cases} \dfrac{h^{n+2}\cdot f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt & n\text{ 是奇} \\ \dfrac{h^{n+3}\cdot f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_0^n (t-\frac{n}{2})t(t-1)\cdots(t-n)dt & n\text{ 是偶} \end{cases}$$

其中 $h = \dfrac{b-a}{n}$ $\xi \in [a,b]$

低阶Newton-Cotes公式数值稳定性好。

Review

机械求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ $R_n(f) = I - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

上述求积公式代数精度为m次⇔当$f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$时，求积公式精确成立，而$f(x)= x^{m+1}$时公式近似成立。

插值型求积公式 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

n阶Newton–Cotes公式 $I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k)$

$$R_T = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{12}(b-a)^3 = O(b-a)^3 \quad \xi \in (a,b)$$

$$R_S = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) = O(b-a)^5$$

$$R_C = I - C = O(b-a)^7$$

复化梯形公式 $T_n = \dfrac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)]$

复化求积公式的截断误差

T_n的积分余项

在每个小区间$[x_k,x_{k+1}]$上,梯形公式的积分余项为

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx-\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]=-\frac{1}{12}f''(\xi_k)h^3\ ,\quad \xi_k\in(x_k,x_{k+1})$$

$$I-T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\{\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx-\frac{h}{2}[(f(x_k)+f(x_{k+1})]\}=\sum_{k=0}^{n-1}[-\frac{1}{12}h^3f''(\xi_k)]$$

而由定积分的定义和Newton-Leibnitz公式可得

$$\sum_{k=0}^{n-1} hf''(\xi_k)\approx\int_a^b f''(x)dx=f'(b)-f'(a)$$

$$\Rightarrow I-T_n\approx-\frac{h^2}{12}[f'(b)-f'(a)]=O(h^2)$$

类似可得

$$I-S_n\approx-\frac{1}{180}h^4[f'''(b)-f'''(a)]=O(h^4)$$

$$I-C_n\approx-\frac{2}{945}h^6[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)]=O(h^6)$$

复化求积公式的截断误差(续)

$$I-T_n=\sum_{k=0}^{n-1}[\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx-\frac{h}{2}(f(x_k)+f(x_{k+1}))]=\sum_{k=0}^{n-1}[-\frac{1}{12}h^3f''(\xi_k)]$$

$$\therefore\ I-T_n=-\frac{n}{12}h^3\sum_{k=0}^{n-1}\frac{f''(\xi_k)}{n}$$

如果$f''(x)\in C[a,b]$，由连续函数的平均值定理

$$I-T_n=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)=O(h^2),\quad \xi\in(a,b)$$

类似可得

如果$f^{(4)}(x)\in C[a,b]$ $\quad I-S_n=-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\xi)$

如果$f^{(6)}(x)\in C[a,b]$ $\quad I-C_n=-\frac{2}{945}(b-a)h^6f^{(6)}(\xi)$

小结

名称	阶	符号	代数精度	余项
梯形公式	1	T, I_1	1	$I-T=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)=O(b-a)^3$
Simpson	2	S, I_2	3	$I-S=-\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\xi)=O(b-a)^5$
Cotes	4	C, I_4	5	$I-C=-\frac{2(b-a)}{945}(\frac{b-a}{12})^6 f^{(6)}(\xi)=O(b-a)^7$

代数精度+2

复化公式（具有收敛性）

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

$I-T_n \approx O(h^2)$

$I-S_n \approx O(h^4)$ $\qquad h=\frac{b-a}{n}$

$I-C_n \approx O(h^6)$

代数精度+1

例题

例:分别用3种复化求积公式计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx.$
要求误差不超过 $\varepsilon=\frac{1}{2}\times 10^{-6}$

n=?

解: $\because f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos tx\,dt$

$$f^{(k)}(x)=\frac{d^k}{dx^k}(\frac{\sin x}{x})=\int_0^1\frac{d^k}{dx^k}(\cos tx)dt=\int_0^1 t^k\cos(tx+\frac{k\pi}{2})dt$$

$$\therefore \max_{0\le x\le 1}|f^{(k)}(x)|\le\int_0^1\max_{0\le x\le 1}|t^k\cos(tx+\tfrac{k\pi}{2})|dt$$

$$\le\int_0^1 t^k dt=\frac{1}{k+1}$$

$$\therefore \max_{0\le x\le 1}|f^{(2)}(x)|\le\frac{1}{3},\quad \max_{0\le x\le 1}|f^{(4)}(x)|\le\frac{1}{5},\quad \max_{0\le x\le 1}|f^{(6)}(x)|\le\frac{1}{7}.$$

1. 用复化梯形公式

$$\because\ |I-T_n|=|-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)|\le\frac{1}{12}h^2\cdot\max_{0\le x\le 1}|f''(x)|\le\frac{h^2}{36}\qquad(\xi\in[0,1])$$

由 $\varepsilon=\frac{1}{2}\times 10^{-6}$ 得 $\frac{h^2}{36}<\frac{1}{2}\times 10^{-6}$, $h=\frac{1}{n}$. $\therefore n>\frac{1}{\sqrt{18\times 10^{-6}}}\approx 235.7$

$\therefore$ 取$n=236$, $h=\frac{1}{236}$.

$$I\approx T_{236}=\frac{1}{2\times 236}[1+2\sum_{k=1}^{235}\frac{\sin\frac{k}{236}}{\frac{k}{236}}+\sin 1]\approx 0.94608262.$$

2. 用复化Simpson公式

$\because\ |I-S_n|=|-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\xi)|,\ \xi\in[0,1]$ $\quad\therefore\ n>\frac{1}{\sqrt[4]{456\times 10^{-6}}}\approx 6.8$

$\le\frac{1}{900}h^4<\frac{1}{2}\times 10^{-6}$, $h=\frac{1}{n}$. 取 $n=8$ ($n\neq 7$?), $h=\frac{1}{8}$

$$I\approx S_8=\frac{1}{24}[1+4\sum_{k=1}^{4}\frac{8}{2k-1}\sin\frac{2k-1}{8}+2\sum_{k=1}^{3}\frac{8}{2k}\sin\frac{2k}{8}+\sin 1]\approx 0.94608331$$

3. 用复化Cotes公式

$\because |I-C_n|=|-\frac{2(b-a)}{945}h^6f^{(6)}(\xi)|$, $\xi\in[0,1]$ $\quad\therefore n>(\frac{4}{6615}\times 10^6)^{\frac{1}{6}}\approx 2.9$

$\le\frac{2}{6615}h^6<\frac{1}{2}\times 10^{-6}$, $h=\frac{1}{n}$. 取$n=4$, $h=0.25$

$$I\approx C_4=\frac{1}{90}[7+7\sin 1+32\times 4\sin\frac{1}{4}+12\times 2\sin\frac{1}{2}+\frac{32\times 4}{3}\sin\frac{3}{4}]\approx 0.946083004$$

事实上，I准确到小数点后7位的值是 I=0.9460831.

$\therefore$ $|I-T_{236}|=0.48\times 10^{-6}$, $|I-S_8|=0.21\times 10^{-6}$, $|I-C_4|=0.096\times 10^{-6}$,

$\therefore$ 按同样精度要求,用复化Cotes公式优于其他两种算法, 其计算量最小,精度最高.

因此预先确定步长时,宜选用复化Cotes公式,其计算效率高.

例. 若用复化梯形公式,复化Simpson公式计算 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$,要使精度达到 $\frac{1}{2}\times10^{-4}$, 问n各取多少?

解:

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

$$R_s=-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\eta)$$

$$\eta\in(a,b)$$

$$|f''(x)|=|-\tfrac{1}{4}x^{-\frac{3}{2}}|\le\tfrac{1}{4}(\tfrac{1}{2})^{-\frac{3}{2}}=\tfrac{\sqrt{2}}{2}<0.8$$

$$|f^{(4)}(x)|=|-\tfrac{15}{16}x^{-\frac{7}{2}}|\le\tfrac{15}{16}(\tfrac{1}{2})^{-\frac{7}{2}}=\tfrac{15\sqrt{2}}{2}<10.7$$

$$|R_T|\le\tfrac{1}{24}h^2\cdot0.8=\tfrac{1}{24}\times(\tfrac{0.5}{n})^2\cdot0.8\le\tfrac{1}{2}\times10^{-4}$$

$n>12.91$, $\therefore n=13$

$$|R_s|<\tfrac{\frac{1}{2}}{180}(\tfrac{\frac{1}{2}}{n})^4\max|f^{(4)}(x)|<\tfrac{1}{2}\times10^{-4},$$

$$n^4>\frac{10.7\times10^4}{16\times180}\approx37.153$$

$n>2.469$ $\therefore n=4$

用S_4计算,其分点为 $\frac{1}{2},\frac{5}{8},\frac{6}{8},\frac{7}{8},1,h=\frac{1}{8}$

$$S_4=\frac{h}{3}[f(\frac{1}{2})+4f(\frac{5}{8})+4f(\frac{7}{8})+2f(\frac{6}{8})+f(1)]$$

$$=\frac{1}{24}[\sqrt{\frac{1}{2}}+4\sqrt{\frac{5}{8}}+4\sqrt{\frac{7}{8}}+2\sqrt{\frac{6}{8}}+1]$$

$$=\frac{1}{24}[\sqrt{0.5}+\sqrt{10}+\sqrt{14}+\sqrt{3}+1]$$

$$=\frac{1}{24}[0.70711+3.16228+3.74166+1.73205+1]\approx0.4310$$

$$\int\sqrt{x}dx=\int\frac{\sqrt{x}}{\frac{1}{2}\cdot x^{-\frac{1}{2}}}d\sqrt{x}=\int2(\sqrt{x})^2d\sqrt{x}\overset{y=\sqrt{x}}{=\!=\!=}\int2y^2dy=\tfrac{2}{3}y^3+C=\tfrac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}+C$$

$$\therefore\int_{\frac{1}{2}}^{1}\sqrt{x}dx=\tfrac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\Big|_{\frac{1}{2}}^{1}=\tfrac{2}{3}[1-(\tfrac{1}{2})^{\frac{3}{2}}]=\tfrac{2}{3}-\tfrac{1}{3}\sqrt{\tfrac{1}{2}}\approx\tfrac{1}{3}(2-0.70711)\approx0.4310$$

Romberg求积算法

Problem：计算 $I=\int_a^b f(x)dx$ 使误差 $\varepsilon < 10^{-8}$

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k f(x_k) \qquad T_n=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)]$$

如用复化公式求积分，则必须事先确定n=? (h=?)。

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

$$I-S_n=O(h^4) \qquad I-C_n=O(h^6)$$

（1）h大，不精确

（2）h小，计算量大

而用误差公式确定h，有如下弊端：

（1）含f(x)高阶导数，估计 $|f^{(k)}(x)|$ 的最大值较困难。

（2）用此法估计的h很保守，偏小，增大了计算量。

实际上，可以让计算机自动选择数值积分的步长h。

即采用变步长求积公式。

变步长的梯形公式

变步长的思想：计算 $\int_a^b f(x)dx$ 的数值积分，先确定初始步长h，按某一复化公式求积，再将步长折半为h/2后，利用同一公式求积，反复进行，直到达到精度要求。

两个问题：（1）如何判断达到了精度要求（I未知，$I-T_n=?$）。

（2）步长折半前后的两次结果有何关系？

解1：误差的事后估计法.

$$h=\frac{b-a}{n}, \quad n\text{等分}[a,b], \quad I-T_n=O(h^2).$$

$$\frac{h}{2}=\frac{b-a}{2n}, \quad 2n\text{等分}[a,b], \quad I-T_{2n}=O(\frac{h}{2})^2.$$

$$\therefore \frac{I-T_{2n}}{I-T_n}=\frac{O(\frac{h}{2})^2}{O(h^2)}\approx\frac{1}{4} \qquad \therefore I-T_{2n}\approx\frac{1}{4}I-\frac{1}{4}T_n$$

$$\therefore \frac{3}{4}I-\frac{3}{4}T_{2n}\approx\frac{1}{4}T_{2n}-\frac{1}{4}T_n \Rightarrow I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

定理：若 $|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$，则 $|I-T_{2n}|<\varepsilon$

因此，对给定的误差限 ε，计算机自动选择步长如下：

Algorithm: Step1 h=b-a； k=2； 算T_1； T_2；

Step2 while($|T_2-T_1|\geq\varepsilon$) { k=2k； 算T_k；
$T_1=T_2$； $T_2=T_k$； }

Step3 $I\approx T_2$.

解2：梯形公式的递推化.

(1) 先将[a,b]n等分，$h=\frac{b-a}{n}$，分点$x_k=a+kh$，k=0，1，…，n.

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

(2) 将步长减半,将每个小区间$[x_k, x_{k+1}]$二等分,其中点为

$x_{k+\frac{1}{2}}=a+(k+\frac{1}{2})h$，k=0,1,…，n-1.

这时[a,b]被分为2n个长度为 $\frac{h}{2}$ 的小区间.

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

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

$$\therefore T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})=\frac{1}{2}[T_n+h\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})]\quad\cdots\cdots\text{递推公式}$$

注：(1) 计算T_{2n}时，只需在T_n的基础上，再计算 n 个点 $x_{k+0.5}$(k=0,1,…,n-1)处f(x)的函数值.

(2) 将递推公式代入Algorithm,便可编制变步长梯形算法的程序.

例3.4 用变步长算法计算 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$,并要求误差 $\varepsilon<\frac{1}{2}\times 10^{-2}$.

解: (1)取h=1,n=1.

$$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=\frac{1}{2}(1+0.8414710)=0.9207355$$

(2) 将步长折半为 $\frac{1}{2}$,分点为 $0,\frac{1}{2},1$. 则

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f(\frac{1}{2})=\frac{1}{2}(0.9207355+0.958810)=0.9397933$$

而 $|T_2-T_1|=0.190578\times 10^{-1}>\frac{1}{2}\times 10^{-2}$

(3) 将步长折半为 $\frac{1}{4}$,分点为 $0,\frac{1}{4},\frac{1}{2},\frac{3}{4},1.$

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{\frac{1}{2}}{2}[f(\frac{1}{4})+f(\frac{3}{4})]=\frac{1}{2}\times 0.9397933+\frac{1}{4}(0.9896158+0.9088516)=0.9445135$$

其中 $|T_4-T_2|=0.0047203\times 10^{-2}<\frac{1}{2}\times 10^{-2}$ $\quad\therefore I\approx T_4=0.9445135$

Overview

名称	阶	符号	代数精度	余项
梯形公式	1	T,I_1	1	$I-T=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)=O(b-a)^3$
Simpson	2	S,I_2	3	$I-S=-\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\xi)=O(b-a)^5$
Cotes	4	C,I_4	5	$I-C=-\frac{2(b-a)}{945}(\frac{b-a}{12})^6 f^{(6)}(\xi)=O(b-a)^7$

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

$I-T_n\approx O(h^2)$

$I-S_n\approx O(h^4)$ $\quad h=\frac{b-a}{n}$

$I-C_n\approx O(h^6)$

$$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})=\frac{1}{2}[T_n+h\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})] \qquad I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

Romberg公式

用误差的事后估计法得到复化梯形公式的误差:

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

$\therefore$ T_{2n} 的误差约为 $\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$

若将此误差补偿给 T_{2n} ,可以得到更精确的结果.

$$\bar{T}=T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)\qquad \therefore I\approx\bar{T}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$$

这是积分I的一个更好的近似值,称为外推公式。

通过外推公式可以加快收敛。可以验证:$S_{2n}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$

上式的意义:复杂公式S_{2n}可以用T_n表示.

为便于后续描述，上式常表示为（等号左边的下标视为编号）:

$$S_n=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n\qquad(3.21)$$

类似 $\because I-S_n=O(h^4)$

$$\therefore\frac{I-S_{2n}}{I-S_n}=\frac{O(\frac{h}{2})^4}{O(h^4)}\approx\frac{1}{16}\qquad \therefore I-S_{2n}\approx\frac{1}{16}(I-S_n)$$

注: 步长折半后,误差是原来的 $\frac{1}{16}$! 可得误差事后估计式

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

从而,也有外推公式 $I\approx\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n$

易证 $C_{2n}=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n$

C_{2n}可由Simpson公式步长二分前后两值的线性组合表示，也记为

$$C_n=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n\qquad(3.22)$$

$$\because\ I - C_n = O(h^6)$$

$$\therefore\ \frac{I - C_{2n}}{I - C_n} = \frac{O(\frac{h}{2})^6}{O(h^6)} \approx \frac{1}{64}$$

可导出如下加速收敛的外推公式：Romberg公式.

$$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n \qquad (3.23)$$

注：（1）R_n是一种变步长梯形公式的外推公式,其收敛速度快。

（2）如何用Romberg公式计算 $I=\int_a^b f(x)dx$,并要求误差 $\varepsilon<\frac{1}{2}\times10^{-10}$ ？

Romberg算法:将T_n序列加工成Romberg序列R_n,从而加速收敛。

Overview

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

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

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

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

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

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n \qquad R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n$$

$$
\begin{array}{llll}
T_1 & & & \\
T_2 & S_1 & & \\
T_4 & S_2 & C_1 & \\
T_8 & S_4 & C_2 & R_1 \\
T_{16} & S_8 & C_4 & R_2 \\
T_{32} & S_{16} & C_8 & R_4 \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots
\end{array}
$$

if $|R_2-R_1|<\varepsilon$，则R_2即为所求

else 计算R_4, 判断$|R_4-R_2|<\varepsilon$? ……

Romberg算法　　注:可达到任意精度.

(1) 置k=0; 精度要求ε; h=b-a ; $T_1=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$;

(2) $h\Leftarrow\frac{h}{2}$; $k=k+1$;

$T_2=\frac{T_1}{2}+hf(a+h)$; $S_1=\frac{4}{3}T_2-\frac{1}{3}T_1$;

(3) $h\Leftarrow\frac{h}{2}$; $k=k+1$; $T_4=\frac{T_2}{2}+h[f(a+h)+f(a+3h)]$;

$S_2=\frac{4}{3}T_4-\frac{1}{3}T_2$; $C_1=\frac{16}{15}S_2-\frac{1}{15}S_1$;

(4) $h\Leftarrow\frac{h}{2}$; $k=k+1$; $T_8=\frac{1}{2}T_4+h\sum_{i=1}^{4}f(a+(2i-1)h)$;

$S_4=\frac{4}{3}T_8-\frac{1}{3}T_4$; $C_2=\frac{16}{15}S_4-\frac{1}{15}S_1$; $R_1=\frac{64}{63}C_2-\frac{1}{63}C_1$;

(5) $h\Leftarrow\frac{h}{2}$; $k=k+1$; $T_{2^k}=\frac{1}{2}T_{2^{k-1}}+h\sum_{i=1}^{2^{k-1}}f[(a+(2i-1)h)]$;

$S_{2^{k-1}}=\frac{4}{3}T_{2^k}-\frac{1}{3}T_{2^{k-1}}$; $C_{2^{k-2}}=\frac{16}{15}S_{2^{k-1}}-\frac{1}{15}S_{2^{k-2}}$; $R_{2^{k-3}}=\frac{64}{63}C_{2^{k-2}}-\frac{1}{63}C_{2^{k-3}}$;

(6) if $|R_{2^{k-3}}-R_{2^{k-4}}|<\varepsilon,\Rightarrow I\approx R_{2^{k-3}}$, stop

else goto <5>

例 用变步长计算$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx=\pi$,并要求误差 $\varepsilon<\frac{1}{2}\times 10^{-6}$.

解:

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

(2) $T_2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\times\frac{4}{1+0.5^2}=3.1,\quad S_1=\frac{4}{3}\times 3.1-\frac{1}{3}\times 3=3.1333333$

(3) $T_4=\frac{3.1}{2}+\frac{1}{4}[\frac{4}{1+0.25^2}+\frac{4}{1+0.75^2}]=3.1311765$

$S_2=\frac{4}{3}T_4-\frac{1}{3}T_2=3.1415686,\quad C_1=\frac{16}{15}S_2-\frac{1}{15}S_1=3.1421177$

(4) $T_8=\frac{T_4}{2}+\frac{1}{8}[\frac{4}{1+(\frac{1}{8})^2}+\frac{4}{1+(\frac{3}{8})^2}+\frac{4}{1+(\frac{5}{8})^2}+\frac{4}{1+(\frac{7}{8})^2}]$

$=3.1389885$

$S_4=\frac{4}{3}T_8-\frac{1}{3}T_4=3.1415925,\ C_2=\frac{16}{15}S_4-\frac{1}{15}S_1=3.1415941,$

$R_1=\frac{64}{63}C_2-\frac{1}{63}C_1=3.1415858$

(5) $T_{16}=\frac{T_8}{2}+\frac{1}{16}\sum_{i=1}^{8}[\frac{4}{1+(\frac{2i-1}{16})^2}]=3.1409416$

$S_8=3.1415927, C_4=3.1415927,$

$R_2=3.141592639$

(6) $\because |R_2-R_1|=0.6839\times 10^{-5}>\frac{1}{2}\times 10^{-6}\quad \therefore$ go on (5)

$T_{32}=3.1414299, S_{16}=3.1415926, C_8=3.1415926,$

$R_4=3.141592644$

(7) $\because |R_4-R_2|=0.05\times 10^{-7}<\frac{1}{2}\times 10^{-6}$

$\therefore I\approx R_4=3.141592644$

HW: 作业三 4~5

$\int_0^{0.8}\sqrt{x^3}dx\ ,\varepsilon=0.5\times 10^{-2}$

高斯型积分（了解）

牛顿—柯特斯型求积公式

(1)封闭型（区间$[a,b]$的两端点a,b均是求积节点）；

(2)求积节点等距。

受此限制，牛顿—柯特斯型求积公式的代数精度只能是n（n为奇数）或$n+1$（n为偶数）。

如果对求积节点也适当的选取,即在求积公式中不仅A_k而且x_k也加以选取,这就可增加自由度，从而可提高求积公式的代数精度。

高斯型积分

构造具有$2n+1$次代数精度的求积公式

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

将节点 $x_0 \dots x_n$ 以及系数 $A_0 \dots A_n$ 都作为待定系数。

令 $f(x)=1, x, x^2, \dots, x^{2n+1}$ 代入可求解，得到的公式具有 $2n+1$ 次代数精度。

这样的节点称为Gauss 点，公式称为Gauss 型求积公式。

例: $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$

其中，x_0, x_1 固定在-1，1，A_0, A_1可以适当选取，只有两个自由度，得到的是梯形公式，其代数精确度只有1。

如对求积节点也适当选取，则有四个自由度，可得到如下公式：

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

这个积分公式的代数精确度为3，是高斯型求积公式，

上面的求积节点 $\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$ 称为高斯点。

定义 如果$n+1$个求积节点的求积公式的代数精度为$2n+1$，则这$n+1$个求积节点称为高斯点。

数值微分

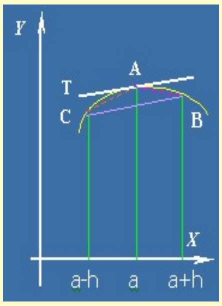
由微积分的知识 $f'(a) = \lim_{h\to 0}\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ (*)

而实际应用中，通常**f(x)**会出现：

（1）f(x)由函数表给出；（2）f(x)非常复杂，不便求导

以上的**f(x)**难于用(*)式求导，通常用近似的方法。---数值微分

一.差商法



向前差商 $f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h} = f[a, a+h]$ AB的斜率

向后差商 $f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h} = f[a-h, a]$ AC的斜率

将两式平均得：

中点法 $f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} = G(h)$ BC的斜率

由泰勒公式，中点公式的截断误差为：$f'(a) - G(h) \approx O(h^2)$

中点公式分析

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} \qquad f'(a)-G(h) \approx O(h^2)$$

注：（1）由截断误差，步长h越小，精度越高.

（2）但步长h越小，f(a+h)与f(a-h)越接近.

（3）由舍入误差分析,应避免相近的数相减，h不宜太小.

用二分步长及误差的事后估计法自动选择步长——变步长算法

中点公式误差事后估计及外推

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} \qquad f'(a)-G(h) \approx O(h^2)$$

记 $D_1 = G(h)$ ， $D_2 = G(\frac{h}{2})$

$$f'(a)-D_1 \approx O(h^2)\,,\; f'(a)-D_2 \approx O(\tfrac{h}{2})^2 \quad \Rightarrow \frac{f'(a)-D_2}{f'(a)-D_1} \approx \frac{1}{4}$$

$\Rightarrow f'(a)-D_2 \approx \frac{1}{3}(D_2-D_1)$ —— 事后误差估计法（$|D_2-D_1| \le \varepsilon$）

$$\therefore\; f'(a) \approx \tfrac{4}{3}D_2 - \tfrac{1}{3}D_1 = G_1$$

$G_1(h) = \frac{4}{3}G(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}G(h)$ 且 $f'(a) - G_1(h) \approx O(h^4)$

根据Richardson外推法还可进一步外推

$$G_2(h) = \tfrac{16}{15}G_1(\tfrac{h}{2}) - \tfrac{1}{15}G_1(h) \qquad G_3(h) = \tfrac{64}{63}G_1(\tfrac{h}{2}) - \tfrac{1}{63}G_1(h)$$

例1.用变步长中点法求e^x在x=1处的导数值。初始h=0.8,精度要求 ε =0.5× 10^{-4}.

分析: $f(x) = e^x$，则$f'(x)= e^x$，$f'(1)= e$

解: 由中点公式

$$f'(a) \approx G(h) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} \qquad \therefore f'(1) = e \approx \frac{1}{2h}(e^{1+h} - e^{1-h})$$

h	G(h)	|G(0.5h)-G(h)|
0.8	**3.01765**	**0.2263**
0.4	**2.79135**	**0.05491**
0.2	**2.73644**	**0.01363**
0.1	**2.72281**	
⋮	⋮	⋮

Chapter 3
Numerical integration
and differentiation

二. 插值求导

已知,f(x)函数表:

x	x_0	x_1	x_2	…	x_n
f(x)	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	…	$f(x_n)$

构造f(x)的 Lagrange插值公式$P_n(x)$.

$$f(x) \approx P_n(x) \quad 且 \quad f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\varpi(x)$$

于是,可构造如下插值型求导公式

$f^{(k)}(a) \approx P_n^{(k)}(a)$;　当 k=1,　$f'(a) \approx P_n'(a)$,

注: 即使f(x)与 $P_n(x)$相差不大,但可能它们的导数相差很大!

HUST

二. 插值求导余项（了解）

$$f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\varpi(x)$$

$$f'(a)-P_n'(a)=[f(x)-P_n(x)]'_{x=a}=[\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w(x)]'_{x=a}$$

$$f'(a)-P_n'(a)=\{[\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}]'w(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w'(x)\}_{x=a}$$

由于ξ是x的未知函数,上式无法估计.

若a为插值节点时,w(a)=0. $f'(a)-P_n'(a)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}w'(a)$

$f'(a)\approx P_n'(a)$，使:让a为插值节点；且用等距节点插值公式.

例. 三点公式 n=2,在$x_0,x_1=x_0+h$, $x_2=x_0+2h$进行二次插值,

$$P_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

令$x=x_0+th$ 则

$$P_2(x)=P_2(x_0+th)=\tfrac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0)-t(t-2)f(x_1)+\tfrac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$

对t求导 $P_2'(x_0+th)\cdot h=\tfrac{1}{2}(2t-3)f(x_0)-(2t-2)f(x_1)+\tfrac{1}{2}(2t-1)f(x_2)$

$$P_2'(x_0+th)=\tfrac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-4(t-1)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)]$$

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-4(t-1)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)]$$

将t=0,1,2代入,得

$$f'(x_0)\approx P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]$$

$$f'(x_1)\approx P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]$$

$$f'(x_2)\approx P_2'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]$$

截断误差分别为:

$$f'(x_0)-P_2'(x_0)=\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

$$f'(x_1)-P_2'(x_1)=-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$

$$f'(x_2)-P_2'(x_2)=\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

其中$\xi\in(x_0,x_2)$

例.已知$y=e^x$的函数表.

x	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y	12.1825	13.4637	14.8797	16.446	18.1741

试用三点数值微分公式计算2.7处的导数值.

分析:用中点公式 $f'(x_1)\approx P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)],\ x_1=2.7$

解: h=0.2时 $f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.2}(18.1741-12.1825)=14.979$

h=0.1时 $f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.1}(16.4446-13.4637)=14.9045$

$\because f'(x_1)-P_2'(x_1)=-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$ 其中$\xi\in(x_0,x_2)$

$\max|f'''(x)|=e^{2.9}<27$

$\Rightarrow|f'(2.7)-p_2'(2.7)|<0.045\quad(h=0.1)$

注: $f'(2.7)=14.87973\ldots$

小结

1.机械求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \ldots + A_n f(x_n)$

2.求积公式的代数精度

3.插值型求积公式： $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ **iff** 至少具有n次代数精度

4.Newton-Cotes求积公式： 等距节点的插值型求积公式

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

$T = I_1 = \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)]$ $R_T = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{12}(b-a)^3 = O(b-a)^3 \quad \xi \in (a,b)$

$S = I_2 = \frac{1}{6}(b-a)[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$ $R_S = O(b-a)^5$

5.复化求积公式 $T_n = \frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)]$

$I-T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b)-f'(a)]=O(h^2)$ $I-T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi), \xi \in (a,b)$

6.变步长的梯形公式与Romberg算法

7.插值型求导公式： 中点公式

HUST