数值积分与数值微分

内容提要

5.1 问题的提出
5.2 插值型求积公式
5.3 复合求积公式
5.4 龙贝格（Romberg)求积公式
5.5 高斯求积公式
5.6 数值微分

5.1 问题的提出

牛顿—莱布尼兹（*Newton-Leibniz* ）公式:

求解一元函数定积分问题

- 若函数$f(x)$在区间［a, b］上连续且其原函数为$F(x)$,则

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

- 虽然在理论上或在解决实际问题中都起了很大的作用，但它并不能完全解决定积分的计算问题。

5.1 问题的提出

定积分的计算（牛顿—莱布尼兹公式）的三种局限情况:

(1)被积函数$f(x)$的原函数$F(x)$不易找到。

- ✓ 例如

$$\frac{\sin x}{x}, \frac{1}{\ln x}, e^{-x^2}$$

(2)被积函数$f(x)$没有具体的解析表达式。

- ✓ 其函数关系由表格或图形表示,无法求出原函数。

5.1 问题的提出

(3)尽管$f(x)$的原函数能表示成有限形式但其表达式相当复杂。

- ✓ 例如定积分 $\int_a^b \frac{dx}{1+x^4}$ 的被积函数的原函数比较复杂

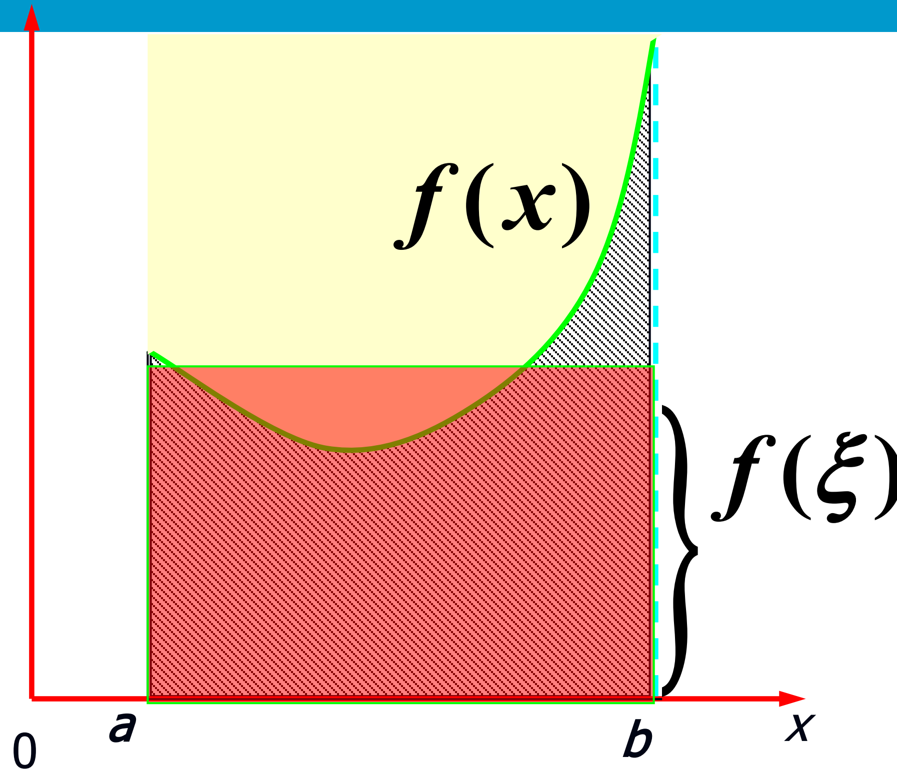
$$I=\int_0^1 \frac{1}{1+x^4}dx=\frac{1}{4\sqrt{2}}\left[\ln\frac{x^2+\sqrt{2}x+1}{x^2-\sqrt{2}x+1}+2arctg\frac{\sqrt{2}x}{1-x^2}\right]_0^1=0.866972\cdots$$

几种精确度不高的积分方法

积分中值定理

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

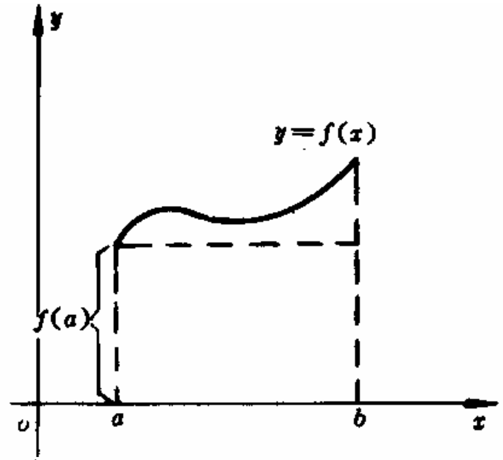
$$\xi \in (a,b)$$

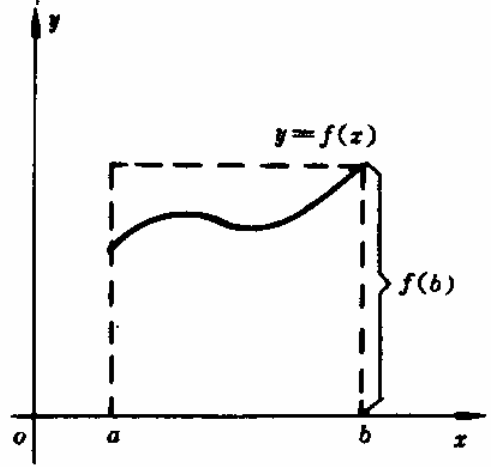


$f(\xi)$是被积函数$f(x)$在积分区间上的平均值

一般很难得到，一般用 近似方法代替。

左矩形公式、右矩形公式





左矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(a)$$

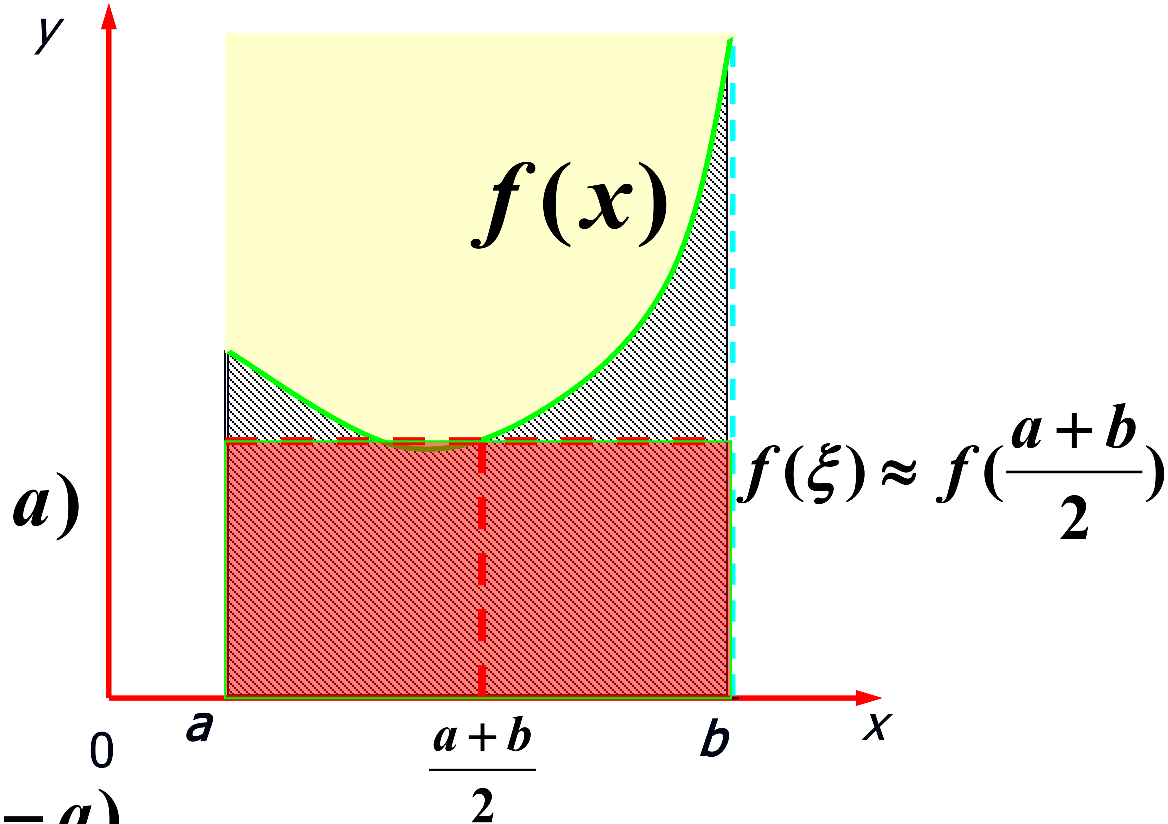
右矩形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(b)$$

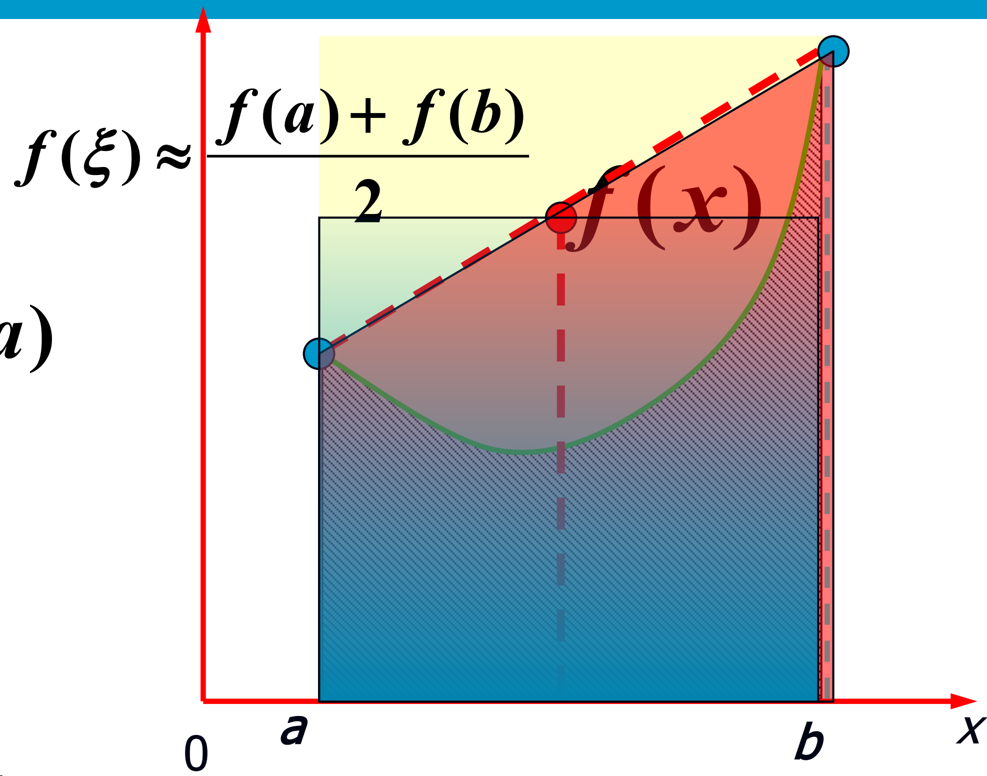
中矩公式

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

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



梯形公式



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

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

以上几种方法都精确度不够高！

5.2 插值型求积公式

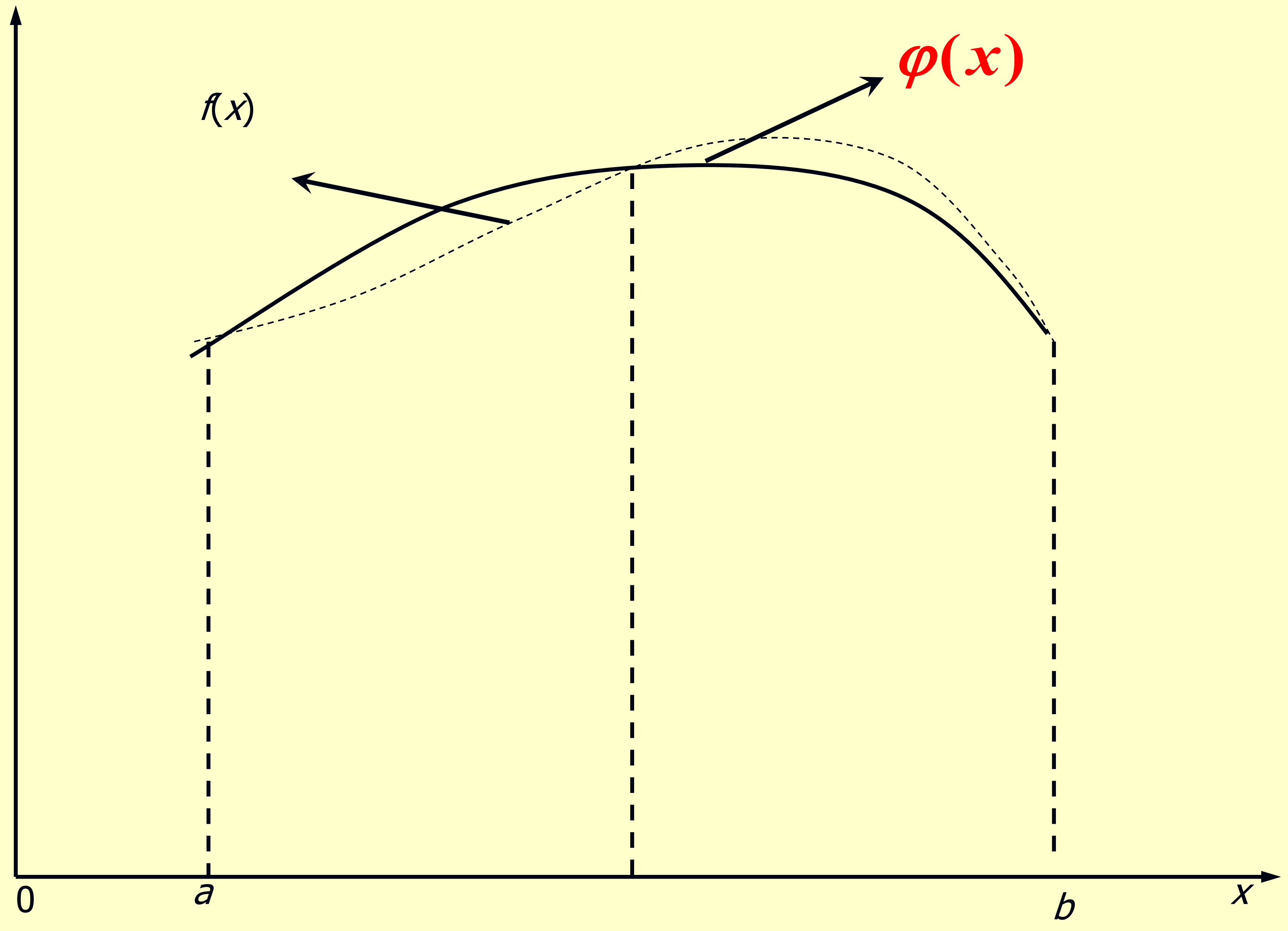
建立数值积分公式最基本的思想是选取一个既简单又有足够精度的函数$\varphi(x)$,用$\varphi(x)$代替被积函数$f(x)$,于是有

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \varphi(x)dx$$

现用第4章介绍的插值多项式$P_n(x)$来代替被积函数$f(x)$,即有

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

$$P_n(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots+a_nx^n$$



φ(x)
f(x)
0
a
b
x

5.2 插值型求积公式

在积分区间$[a, b]$上取一组节点

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$$

作$f(x)$的n次插值多项式

$$f(x) \approx L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$$

所以

- 与$f(x)$无关
- 仅与积分区间和积分点有关

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b L_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \int_a^b l_i(x)dx\, f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

5.2 插值型求积公式

定义**数值积分**如下：是**离散点**上的**函数值**的**线性组合**

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

积分系数

- 与$f(x)$无关
- 积分区间和积分点有关

两个问题：

1、系数 a_i 如何选取？

2、节点 x_i 如何选取？

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

取基点为等距，即

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$$

$$h = \frac{b-a}{n} = x_{k+1} - x_k, k = 0,1,2\ldots,n-1$$

$$x_i = x_0 + ih, i = 0,1,2\ldots,n$$

利用拉格朗日差值多项式

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

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

其中

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \left(\prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right) y_i$$

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x), \xi \in (a,b)$$

这里 $y_i = f(x_i)$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

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

$$= \sum_{i=0}^{n} [\int_a^b \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} \frac{x-x_k}{x_i-x_k} dx] y_i + \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi) w_{n+1}(x) dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n} a_i y_i + R_n(f)$$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

$$a_i = \int_a^b \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} dx$$

由 节点 决定，
与 $f(x)$ 无关。

$$R_n(f) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi) w_{n+1}(x) dx$$

牛顿—科特斯求积公式的余项

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i y_i$$

牛顿—科特斯求积公式

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

$x-x_k=(x_0+sh)-(x_0+kh)=(s-k)h$

$x_i-x_k=(x_0+ih)-(x_0+kh)=(i-k)h$

$\frac{dx}{ds}=\frac{d(x_0+sh)}{ds}=h=\frac{b-a}{n}$

节点等距分布:

令 $x=x_0+sh, 0\le s\le n$

$$a_i=\int_a^b\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}dx=\frac{b-a}{n}\int_0^n\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\frac{s-k}{i-k}ds=(b-a)c_i^{(n)}$$

Cotes系数 $c_i^{(n)}$

$$c_i^{(n)}=\frac{1}{n}\int_0^n\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}\frac{s-k}{i-k}ds$$

$$=\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(s-k)ds$$

$C_i^{(n)}$系数是不依赖于积分区间$[a,b]$以及被积函数$f(x)$的常数，只要给出差值点数n，就可以求出柯特斯系数。

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

当n=1时，

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (s-1)ds = -(\frac{1}{2}s^2 - s)\,|_0^1 = 0.5$$

$$C_1^{(1)} = \int_0^1 s ds = \frac{1}{2}s^2\,|_0^1 = 0.5$$

可算得得到梯形公式

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

$$c_i^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} \frac{s-k}{i-k} ds = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} (s-k)ds$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i y_i \qquad a_i = (b-a)c_i^{(n)}$$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

当n=2时，可得

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

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

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

得到辛普生公式

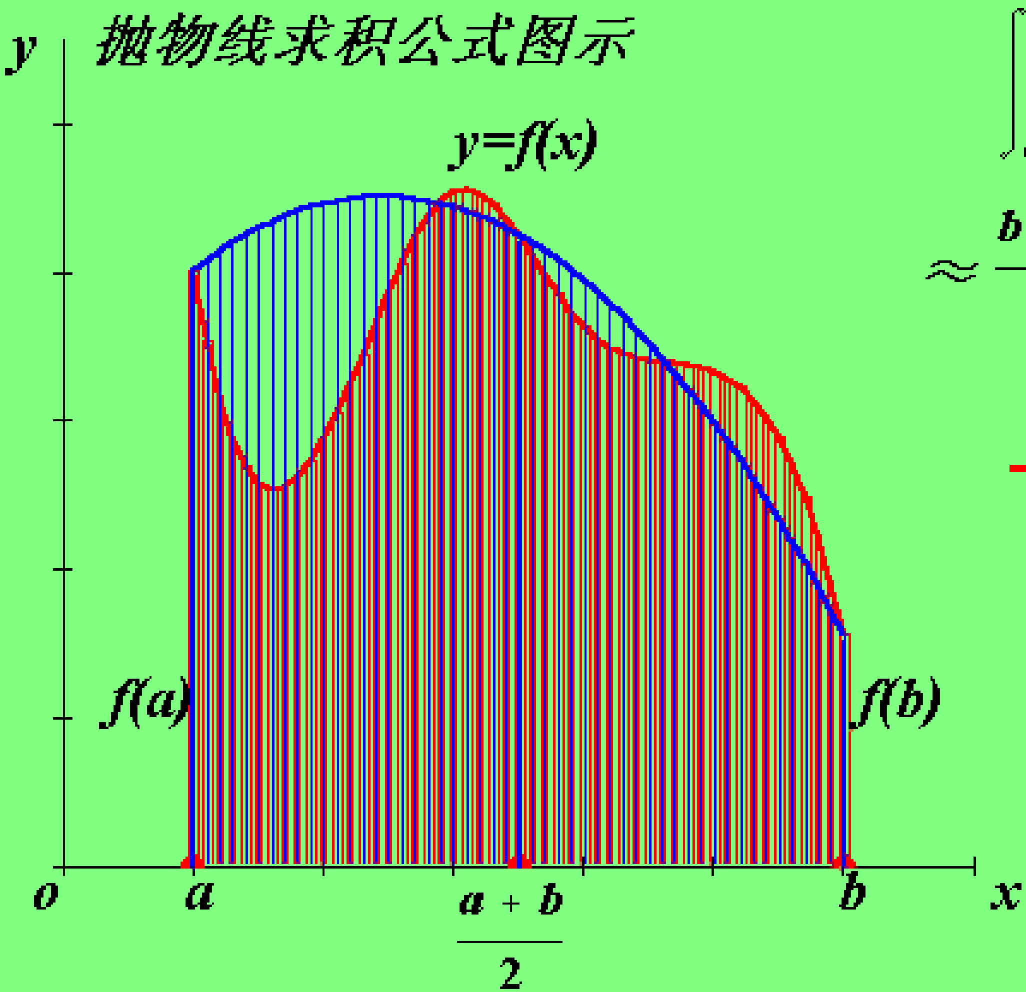
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

$$c_i^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} \frac{s-k}{i-k} ds = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} (s-k)ds$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i y_i \qquad a_i = (b-a)c_i^{(n)}$$

5.2 插值型求积公式
– 牛顿-柯特斯公式

辛普生公式



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

被积函数 $f(x)$

插值基点 $a,\ (a+b)/2,\ b$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

当n=3时，可得

$$C_0^{(3)} = -\frac{1}{18}\int_0^3 (s-1)(s-2)(s-3)ds = \frac{1}{8}$$

$$C_1^{(3)} = \frac{1}{6}\int_0^3 s(s-2)(s-3)ds = \frac{3}{8}$$

$$C_2^{(3)} = -\frac{1}{6}\int_0^3 s(s-1)(s-3)ds = \frac{3}{8}$$

$$C_3^{(3)} = \frac{1}{18}\int_0^3 s(s-1)(s-2)ds = \frac{1}{8}$$

得到数值积分公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{8}[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)]$$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

类似地可分别求出n=4,5,…时的柯特斯系数,从而建立相应的求积公式。具体结果下表。

n	$C_i^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$,	$\frac{1}{2}$	梯形公式系数						
2	$\frac{1}{6}$,	$\frac{4}{6}$,	$\frac{1}{6}$	辛普生公式系数 或 抛物线公式系数					
3	$\frac{1}{8}$,	$\frac{3}{8}$,	$\frac{3}{8}$,	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$,	$\frac{16}{45}$,	$\frac{2}{15}$,	$\frac{16}{45}$,	$\frac{7}{90}$	柯特斯公式系数			
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,	357 7,	132 3,	298 9,	132 3,	357 7,	750}	
8	$\frac{1}{28350}$	{989,	588 8,	−928	104 96,	−454 0,	104 96	−928,	588 8, 989}
⋮	⋮								

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

柯特斯系数表

n	$C_k^{(n)}$ $k=0,\ldots,n$									
1	1	1								/2
2	1	4	1							/6
3	1	3	3	1						/8
4	7	32	12	32	7					/90
5	19	75	50	50	75	19				/288
6	41	216	27	572	27	216	41			/840
7	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751		/17280
8	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989	/28350

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

从表中可以看出,

- 当n≤7时,柯特斯系数为正;
- 从n≥8开始,柯特斯系数有正有负。
- 因此,当n≥8时,误差有可能传播扩大,牛顿—柯特斯求积公式不宜采用。

柯特斯系数$C^{(n)}_i$仅与n和i有关,与被积函数f(x)无关,且满足

$$\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = 1$$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

例1 试分别用梯形公式和抛物线公式计算积分

$$\int_{0.5}^{1} \sqrt{x}\,dx$$

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

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

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

例1 试分别用梯形公式和抛物线公式计算积分

解利用梯形公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{2}\left(\sqrt{0.5}+1\right) \approx 0.4267767$$

原积分的准确值

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx = \frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\Big|_{0.5}^{1} = 0.43096441$$

利用辛普生公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{6}\left(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+1\right) \approx 0.43093403$$

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

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

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

误差估计：牛顿—柯特斯求积公式的余项为

$$R_n(f)=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi)w_{n+1}(x)dx$$

易知,牛顿—柯特斯求积公式对任何不高于n次的多项式是准确成立的。这是因为

$$f^{(n+1)}(\xi)\ \equiv\ 0$$

故

$$R_n(f)\equiv 0$$

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

代数精度的概念是：假如（3.1）式的求积公式对 $f(x)=1$，x，x^2，…，x^m恒精确成立，而当$f(x)=x^{m+1}$时就不精确成立，我们就称公式（3.1）的代数精度为m。

梯形公式和辛普生公式的代数精度是？

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

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

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

5.2 插值型求积公式 – 牛顿-柯特斯公式

定理1 (梯形公式的误差)设f(x)在区间［a, b］上具有连续的二阶导数,则梯形求积公式的误差为

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

定理2 (辛普生公式的误差)：设f(x)在［a, b］上有连续的四阶导数,则辛普生公式的误差为

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

定理3 (柯特斯公式的误差)：设f(x)在［a, b］上有连续的六阶导数,则柯特斯公式的误差为

$$R_4(f) = -\frac{8}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^7 f^{(6)}(\eta), \eta \in (a,b)$$

5.3 复合求积公式

高次插值有**Runge** 现象，故采用分段低次插值

$\Rightarrow$ 分段低次合成的 *Newton-Cotes* 复合求积公式。

5.3 复合求积公式-梯形

在每一个子区间［x_i，x_{i+1}］上使用梯形公式。
复合梯形公式对于定积分

$$\int_a^b f(x) = F(b) - F(a)$$

将积分区间［a, b］分成n个相等的子区间［x_i，x_{i+1}］,这里步长

$$h = \frac{b-a}{n} = x_{i+1} - x_i, i = 0,1,\ldots,n-1$$

5.3 复合求积公式-梯形

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12}f''(\xi_i), \xi_i \in (x_i, x_{i+1})$$

相加后得

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

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

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

5.3 复合求积公式-梯形

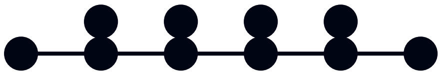
若f″(x)在［a,b］上连续,由连续函数的介值定理,存在某一ξ∈(a,b)使得

$$\frac{\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i)}{n} = f''(\xi)$$

5.3 复合求积公式-梯形

于是得到复合梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] = T_n$$

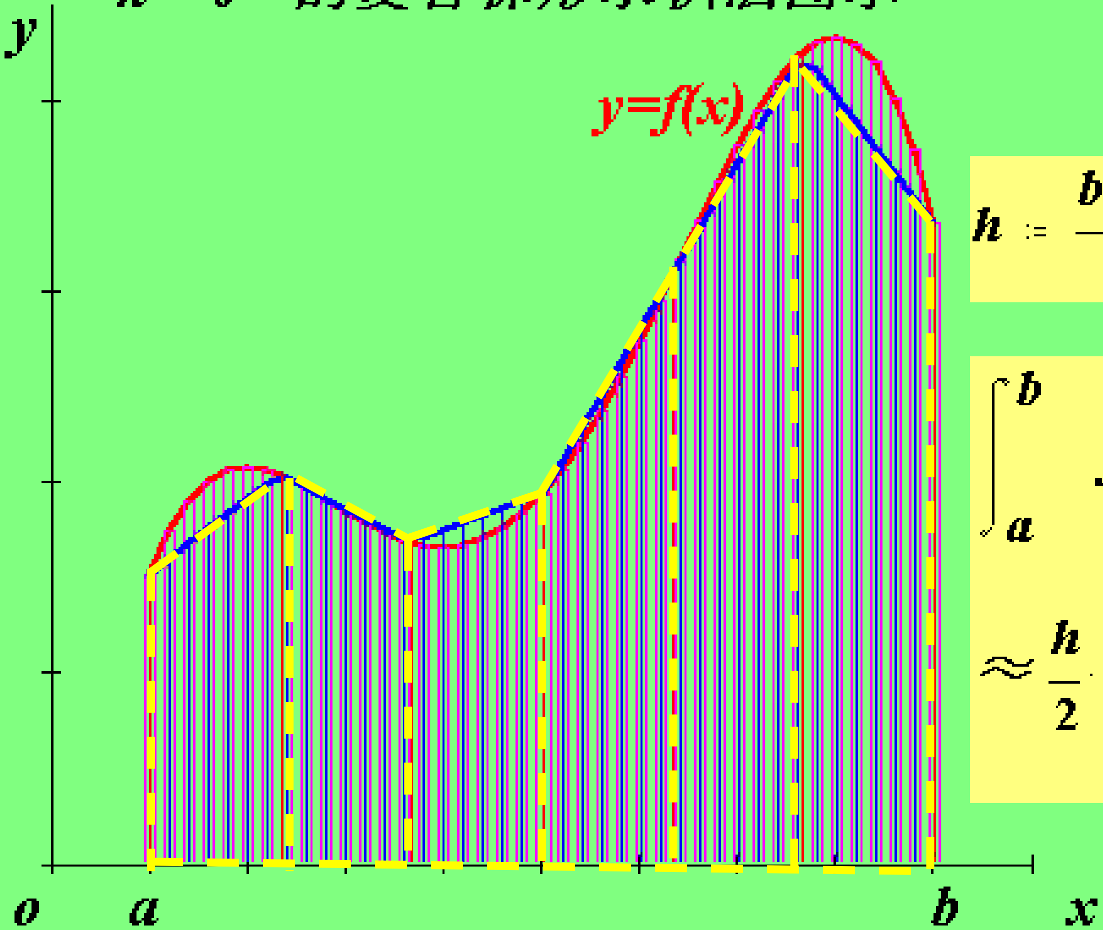


其余项为

$$R_1^{(n)}(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi)$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_i)\right] \qquad \frac{\sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i)}{n} = f''(\xi) \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

$n = 6$ 的复合梯形求积法图示



$$h := \frac{b-a}{n}$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\cdot\left(f(x_0) + f(x_n) + 2\cdot\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$

wzz

5.3 复合求积公式-梯形

例2 若用复合梯形公式计算积分

$$\int_0^1 e^x dx$$

问积分区间要等分多少才能保证有五位有效数字

$$R_1^{(n)}(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi)$$

5.3 复合求积公式-梯形

例2 若用复合梯形公式计算积分

$$\int_0^1 e^x dx$$

问积分区间要等分多少才能保证有五位有效数字

解由余项公式

$$R_1^{(n)}(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi)$$

$$f(x) = f'(x) = f''(x) = e^x$$

$$b - a = 1$$

$$|f''(x)| < e$$

$$\left|R_1^{(n)}(f)\right| \le \frac{e}{12n^2}$$

5.3 复合求积公式-梯形

由于原积分的准确值具有一位整数,因此要使近似积分值有五位有效数字,只需取n满足

$$\frac{e}{12n^2} \le \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$6n^2 \ge e \times 10^4$$

$$\lg 6 + 2\lg n \ge 4 + \lg e$$

$$\lg n \ge \frac{4 + \lg e - \lg 6}{2} \approx 1.8266$$

$n \ge 67.081$

所以 n 至少为68

5.3 复合求积公式-梯形

例3 根据给出的函数

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

的数据表,用复合梯形公式计算

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}$$

5.3 复合求积公式-梯形

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}$$

x_k	0.000	0.125	0.250	0.375	0.500
$f(x_k)$	1	0.997 397 84	0.989 615 84	0.976 726 75	0.958 851 08

x_k	0.625	0.750	0.875	1.000
$f(x_k)$	0.936 155 63	0.908 851 68	0.877 192 57	0.841 470 98

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)]$$

5.3 复合求积公式

解:用复合梯形公式

$$T_8=\frac{1}{8}\times\frac{1}{2}\left[f(0)+2f\left(\frac{1}{8}\right)+2f\left(\frac{1}{4}\right)+2f\left(\frac{3}{8}\right)+2f\left(\frac{1}{2}\right)+2f\left(\frac{5}{8}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)+2f\left(\frac{7}{8}\right)+f(1)\right]$$

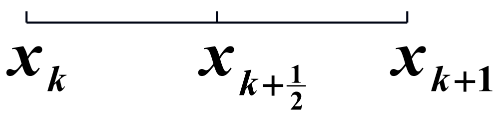
=0.9456905

而I的准确值为0.946 083 1…,可见复合梯形公式还不够精确。

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)]$$

5.3 复合求积公式-Simpson 公式

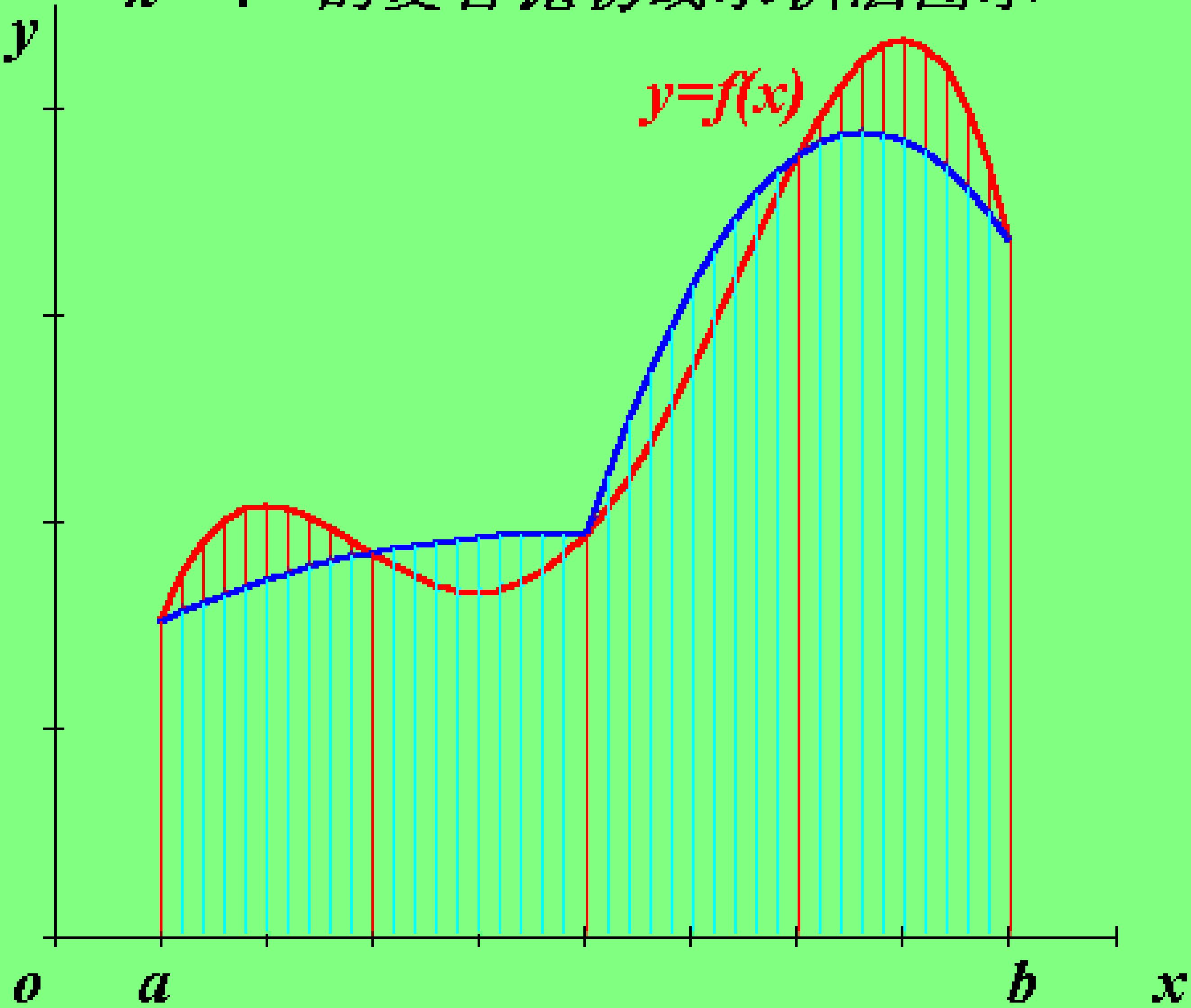
$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})\right]$$



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

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

$n=4$ 的复合抛物线求积法图示



5.3 复合求积公式-柯特斯公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{90}[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$$

$$+32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 14\sum_{k=0}^{n-2} f(x_{k+1}) + 7f(b)]$$

$$= C_n$$

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

误差估计：

复合梯形公式余项：$R[f]=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),\ \ \xi\in(a,b)$

复合抛物线公式余项： $R[f]=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi)$

复合柯特斯公式余项：

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

例：计算 $\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$

运算量基本相同

解：$T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1) \right]$ 其中 $x_k = \frac{k}{8}$

= 3.138988494

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

= 3.141592502

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] = T_n$$

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

Q: 给定精度 ε，如何取 n？

例如：要求 $|I - T_n| < \varepsilon$ ，如何判断 $n =$ ？

$$R[f] = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi) = ?\ -\frac{h^2}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

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

$$f(x) = \frac{4}{1+x^2}$$

$$R[f] = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)\right] = -\frac{h^2}{12}(b-a)\frac{\sum_{k=1}^{n} f''(\xi_k)}{n}$$

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

上例 $\ldots) - f'(0)| = \frac{h^2}{6} < 10^{-6}$

➡

通常 … 2^k

上例中$2^k \geq 409 \Rightarrow k = 9$ 时，

可用来判断迭代是否停止。

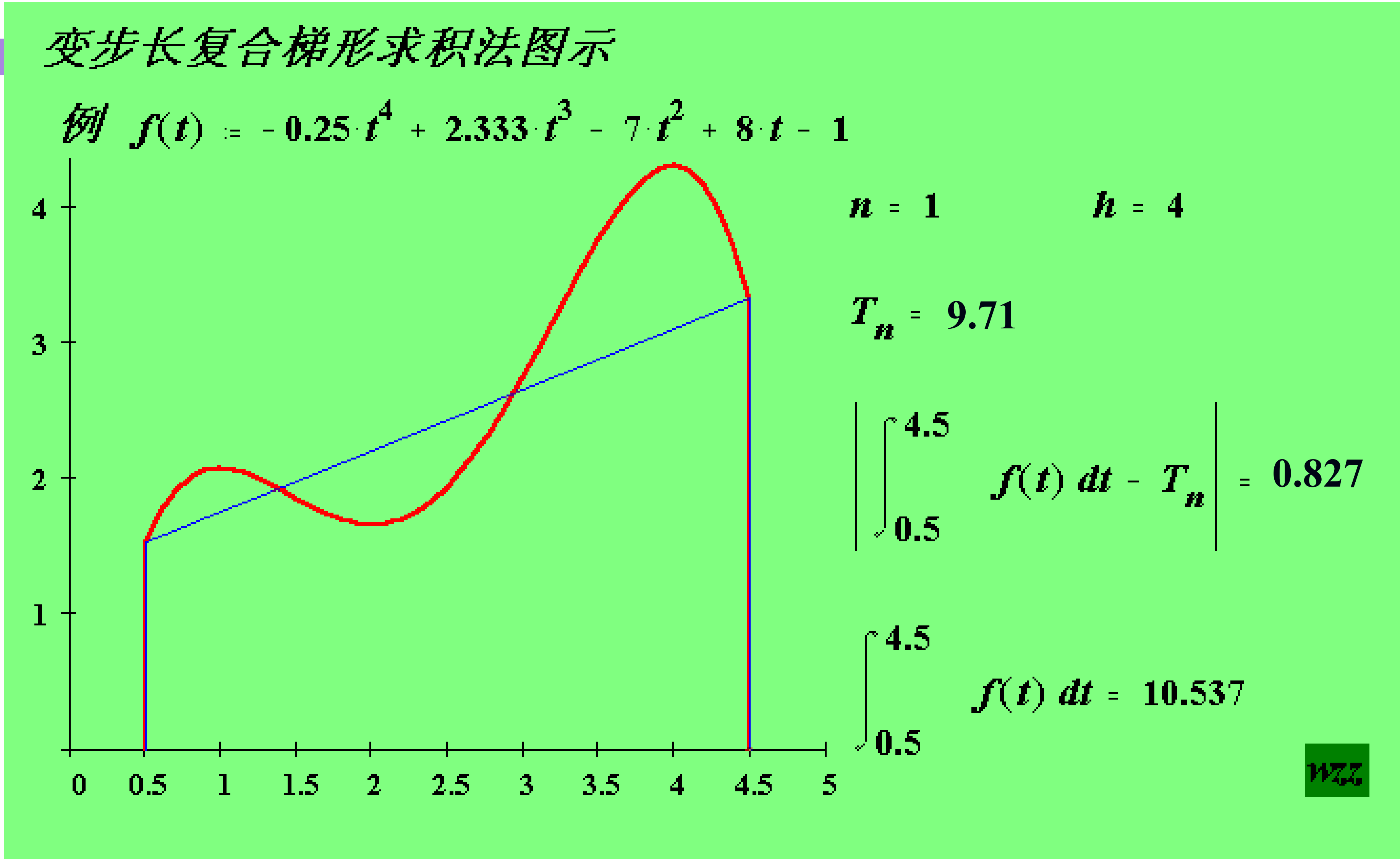
$S_4 = 3.141592502$

注意到区间再次对分时 $R_{2n}[f] \approx -\frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]\left[\frac{\ }{2}\right]^2 \approx \frac{1}{4}R_n[f]$

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

事后误差估计法

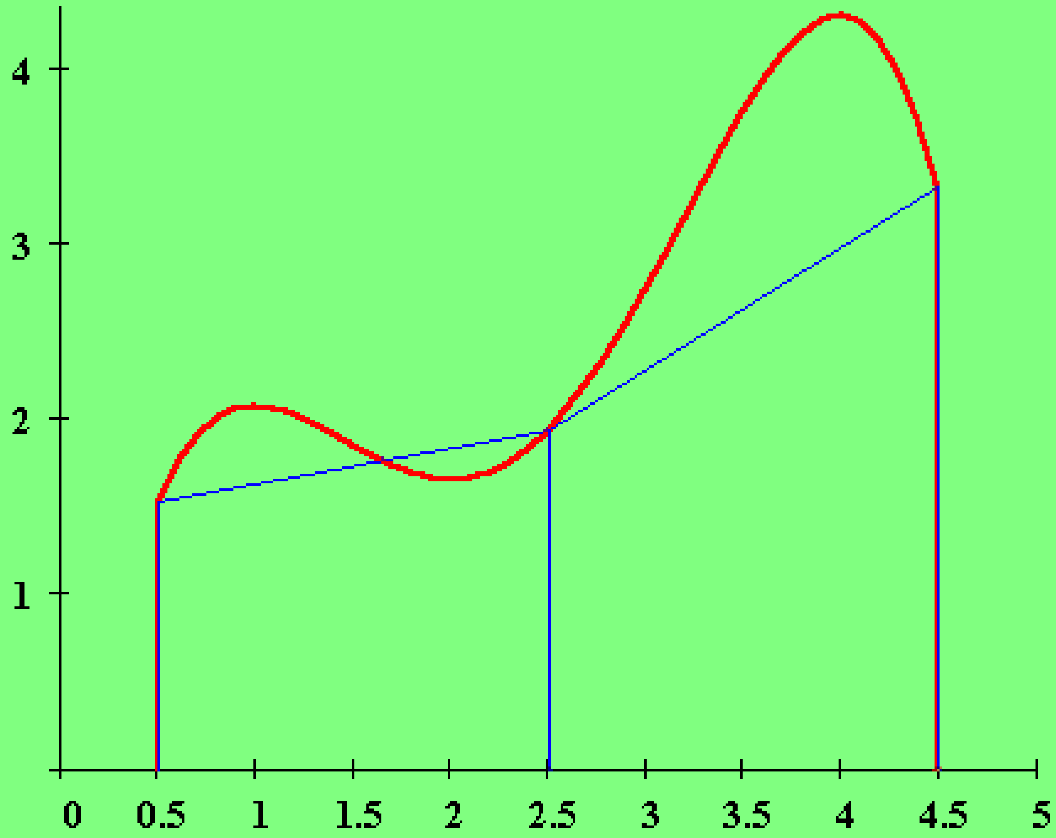
变步长梯形求积法


变步长复合梯形求积法图示
例 $f(t) := -0.25\cdot t^4 + 2.333\cdot t^3 - 7\cdot t^2 + 8\cdot t - 1$
$n = 1$
$h = 4$
$T_n = 9.71$
$\left| \int_{0.5}^{4.5} f(t)\,dt - T_n \right| = 0.827$
$\int_{0.5}^{4.5} f(t)\,dt = 10.537$
1 2 3 4
0 0.5 1 1.5 2 2.5 3 3.5 4 4.5 5
wzz

变步长梯形求积法

变步长复合梯形求积法图示

例 $f(t) := -0.25\cdot t^4 + 2.333\cdot t^3 - 7\cdot t^2 + 8\cdot t - 1$



$n = 2$ $h = 2$

$T_n = 8.73$

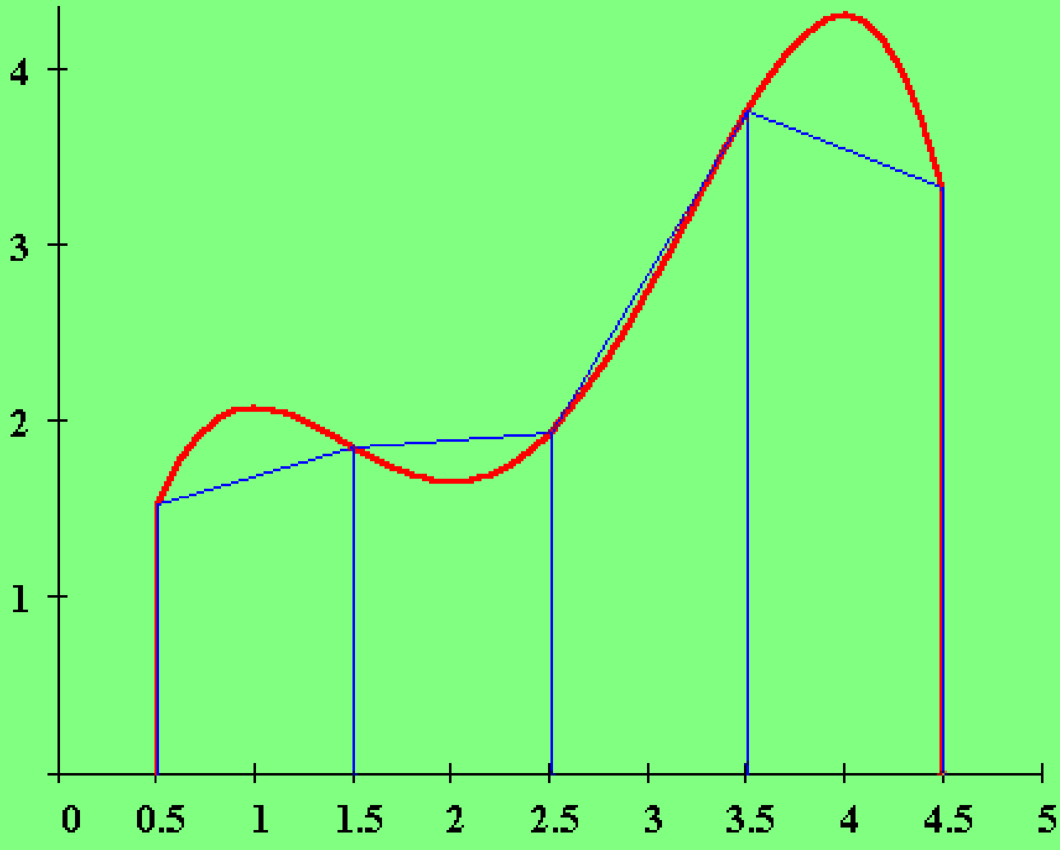
$$\left|\int_{0.5}^{4.5} f(t)\,dt - T_n\right| = 1.80667$$

$$\int_{0.5}^{4.5} f(t)\,dt = 10.537$$

变步长梯形求积法

变步长复合梯形求积法图示

例 $f(t) := -0.25\cdot t^4 + 2.333\cdot t^3 - 7\cdot t^2 + 8\cdot t - 1$



$n = 4 \qquad h = 1$

$T_n = 9.985$

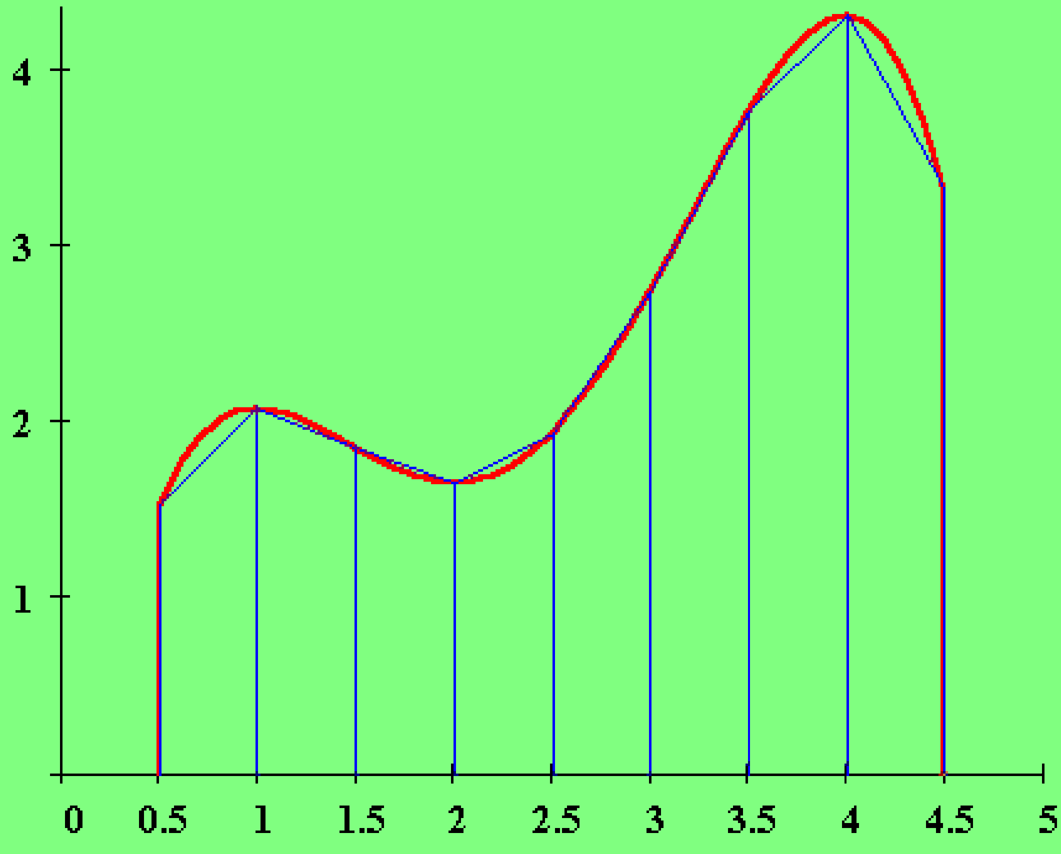
$$\left| \int_{0.5}^{4.5} f(t)\, dt - T_n \right| = 0.55167$$

$$\int_{0.5}^{4.5} f(t)\, dt = 10.537$$

变步长梯形求积法

变步长复合梯形求积法图示

例 $f(t) := -0.25 \cdot t^4 + 2.333 \cdot t^3 - 7 \cdot t^2 + 8 \cdot t - 1$



$n = 8$ $\qquad h = 0.5$

$T_n = 10.393$

$$\left| \int_{0.5}^{4.5} f(t)\, dt - T_n \right| = 0.14417$$

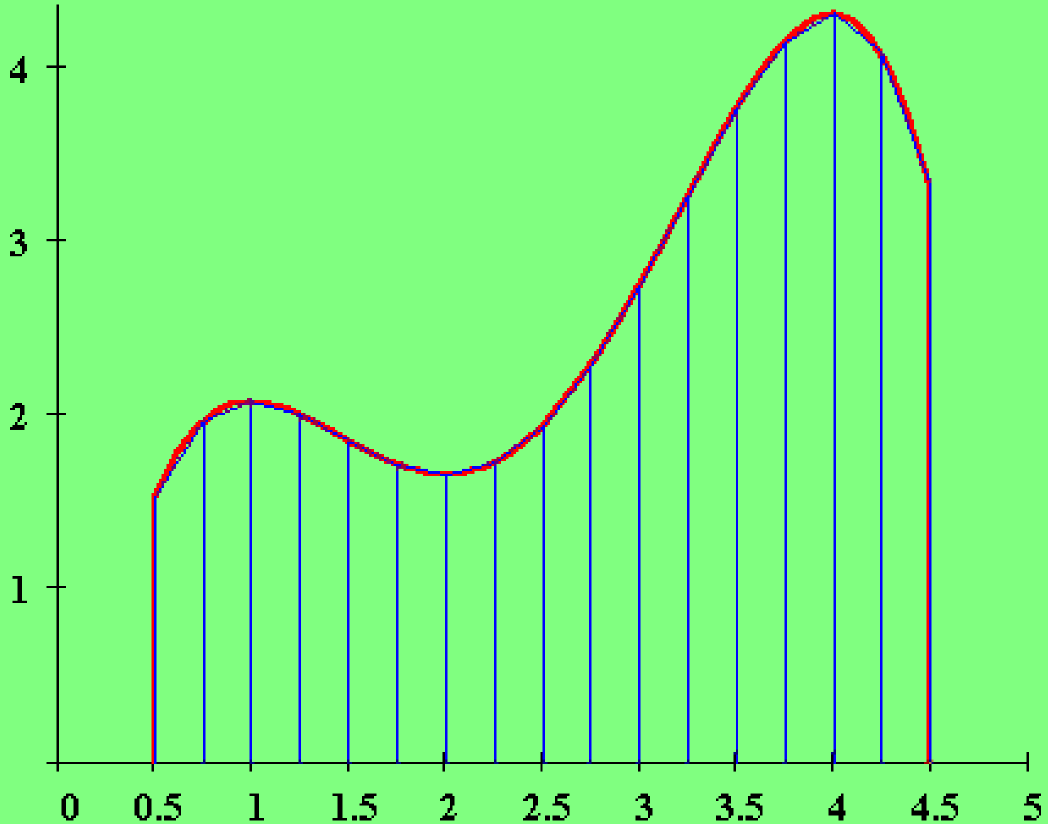
$$\int_{0.5}^{4.5} f(t)\, dt = 10.537$$

wzz

变步长梯形求积法

变步长复合梯形求积法图示

例 $f(t) := -0.25 \cdot t^4 + 2.333 \cdot t^3 - 7 \cdot t^2 + 8 \cdot t - 1$



$n = 16 \qquad h = 0.25$

$T_n = 10.5$

$$\left| \int_{0.5}^{4.5} f(t)\, dt - T_n \right| = 0.03643$$

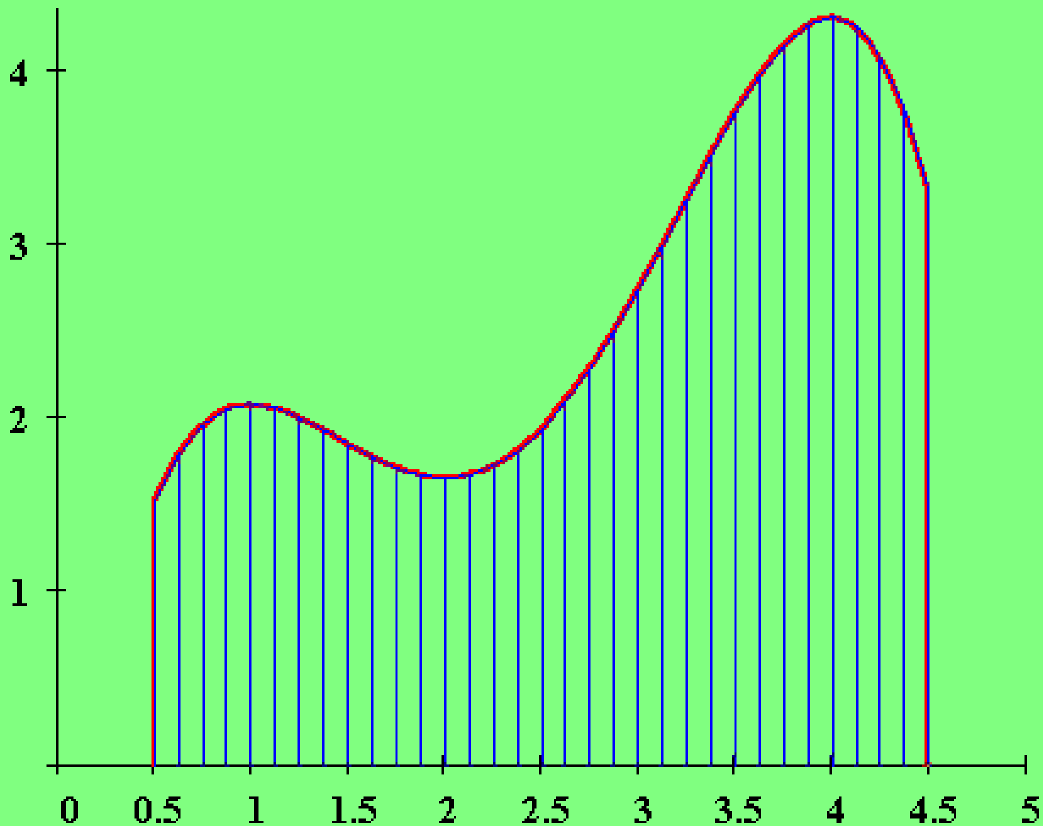
$$\int_{0.5}^{4.5} f(t)\, dt = 10.537$$

wzz

变步长梯形求积法

变步长复合梯形求积法图示

例 $f(t) := -0.25\cdot t^4 + 2.333\cdot t^3 - 7\cdot t^2 + 8\cdot t - 1$



$n = 32 \qquad h = 0.125$

$T_n = 10.528$

$$\left| \int_{0.5}^{4.5} f(t)\,dt - T_n \right| = 0.00913$$

$$\int_{0.5}^{4.5} f(t)\,dt = 10.537$$

wzz

变步长梯形求积法步骤：

1）利用梯形公式计算积分，即取$n=1, h=b-a$，

则$T_1=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$；

2)将积分区间二等分一次，由原来的n等分变成$2n$等分），利用梯形公式计算T_{2n}；

预先设定精度的三倍！！

3)若$|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$（ε预先设定的精度），则终止计算，并$I\approx T_{2n}$，否则重复（2）。

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

梯形求积法的递推化

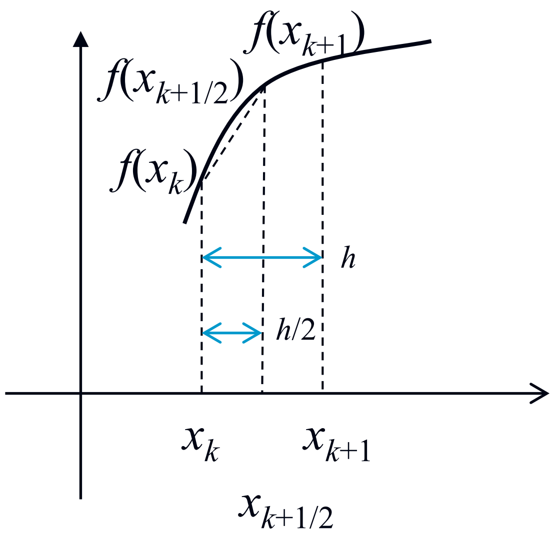
变步长梯形求积法的第二步中，T_{2n}直接利用梯形公式计算会导致节点处的函数值的重复计算，这是因为将求积区间再二等分一次，每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$只增加了一个分点$x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$

利用梯形公式有：

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

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

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



变步长梯形求积法的第二步中，

利用梯形公式计算T_{2n}只需要计算$f(x_{k+\frac{1}{2}})$即可。

5.4 龙贝格(Romberg)积分方法

我们已经知道,当被积函数f(x)在区间［a,b］上连续时,要使得复合梯形公式比较精确地代替积分

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

可将分点(即基点)加密,也就是将区间［a,b］细分,然后利用复合梯形公式求积。

梯形法的递推化

实际计算中，由于要事先给出一个合适的步长往往很困难，所以我们往往采用变步长的计算方案，即在步长逐步分半的过程中，反复利用复化求积公式进行计算，直到所求得的积分值满足精度要求为止。设表示复化梯形求得的积分值，其下标是等分数，由此则有递推公式其中

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

其中

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

梯形法的加速

由复化梯形公式的截断误差公式可得，

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

$$I(f)-T_{2n}(f)=-\frac{(b-a)}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta)$$ **2n**等分区间

$$\frac{I-T_{2n}}{I-T_n}\approx\frac{1}{4}$$

梯形法的加速

由此可知，

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

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

这样导出的加速公式是辛普生公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] \quad = T_n$$

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

龙贝格算法

我们可以在步长逐步分半过程中将粗糙的积分值逐步加工为精度较高的积分值 S_n, C_n, R_n :

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

$$C_n = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2 - 1} \qquad C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$$

$$R_n = \frac{4^3 C_{2n} - C_n}{4^3 - 1} \qquad R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n$$

将收敛缓慢的梯形值序列加工成收敛迅速的积分值序列 S_n, C_n, R_n，这种加速方法称为龙贝格算法。

一般有：$\dfrac{4T_{2n}-T_n}{4-1}=S_n$ $\qquad \dfrac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}=C_n$ $\qquad \dfrac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}=R_n$

Romberg 序列

➢ **Romberg** 算法:

① T_1	$<\varepsilon$?		
② T_2	③ S_1	$<\varepsilon$?	
④ T_4	⑤ S_2	⑥ C_1	$<\varepsilon$?
⑦ T_8	⑧ S_4	⑨ C_2	⑩ R_1
			$<\varepsilon$?

… … … … … …

龙贝格算法例题

例4用Romberg公式计算积分(计算过程中保留小数点后五位)

$$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] = T_n$$

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

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

$$\frac{4^2 S_{2n}-S_n}{4^2-1}=C_n$$

$$\frac{4^3 C_{2n}-C_n}{4^3-1}=R_n$$

龙贝格算法例题

例4用Romberg公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$$

解：按Romberg公式的求积步骤进行计算，结果如下：

(1)这里 $f(x)=\dfrac{4}{1+x^2}, a=0, b=1, f(0)=4, f(1)=2$

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

(2)计算 $f(\dfrac{1}{2})=\dfrac{16}{5}, T_2=\dfrac{1}{2}[T_1+f(\dfrac{1}{2})]=3.1,$

$$S_1=\frac{4}{3}T_2-\frac{1}{3}T_1=3.13333$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)]$$

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

龙贝格算法例题(续1)

(1) 计算 $f(\frac{1}{4})$ 及 $f(\frac{3}{4})$ 然后由公式算出

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})] = 3.13118$$

$$S2 = \frac{4T_4 - T_2}{3} = 3.14157$$

$$C_1 = \frac{16S_2 - S_1}{15} = 3.14212$$

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

龙贝格算法例题(续2）

$$f(\frac{1}{8}), f(\frac{3}{8}), f(\frac{5}{8}), f(\frac{7}{8}),$$

并由公式(3. 3)和逐次分半加速公式，算出

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

$$S_4 = \frac{4}{4-1}T_8 - \frac{1}{4-1}T_4 = 3.14159$$

$$C_2 = \frac{4^2}{4^2-1}S_4 - \frac{1}{4^2-1}S_2 = 3.14159$$

$$R_1 = \frac{4^3}{4^3-1}C_2 - \frac{1}{4^3-1}C_1 = 3.14158$$

龙贝格算法例题(续3)

把区间再分半，重复步骤(4)，可算出结果：

$$T_{16}=3.14094, S_8=3.14159,$$

$$C_4=3.14159, R_2=3.14159$$

- 至此得 $|R_1-R_2|\leqslant 0.00001$ ，因为计算只用小数点后五位，故精确度只要求到0.00001因此积分

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx = 3.14159$$

5.6 数值微分

1. 当函数$f(x)$以离散点列给出时，要求我们给出导数值，
2. 函数$f(x)$过于复杂

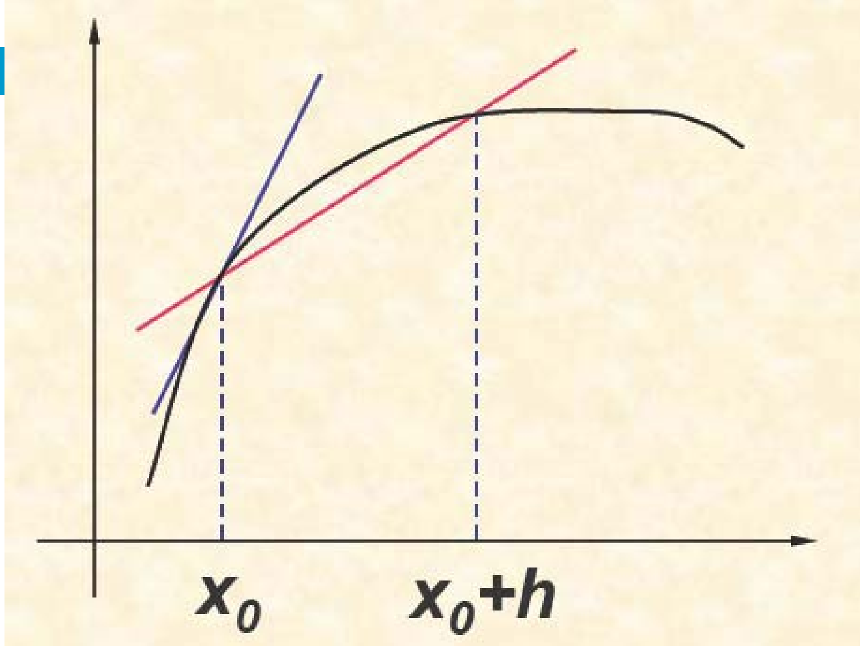
这两种情况都要求我们用数值的方法求函数的导数值

微积分中，关于导数的定义如下：

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

自然而又简单的方法就是，取极限的近似值，即差商

5.6 数值微分



向前差商

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

由Taylor展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(\xi), x_0 \le \xi \le x_0+h$$

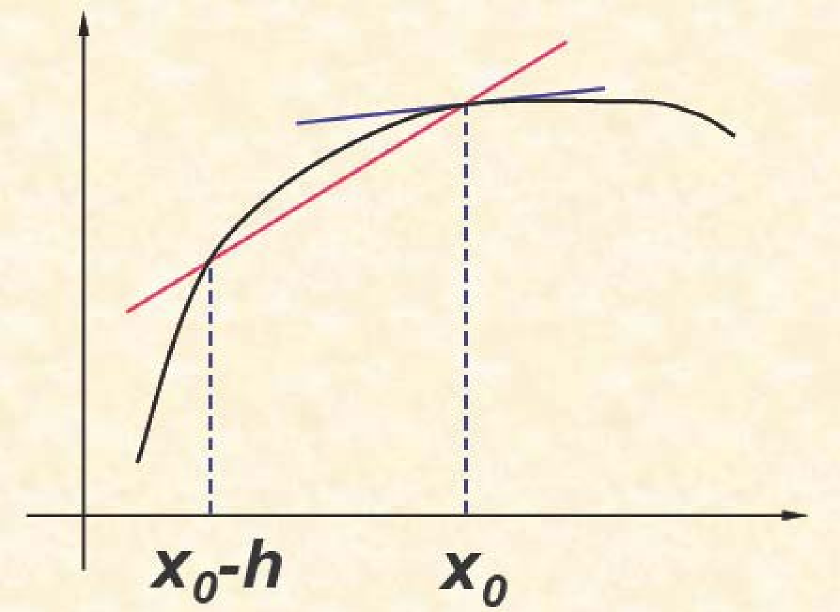
因此，有误差

$$R(x)=f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}=-\frac{h}{2!}f''(\xi)=O(h)$$

5.6 数值微分

向后差商

$$f'(x) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$



由Taylor展开

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2!} f''(\xi), x_0 \le \xi \le x_0 + h$$

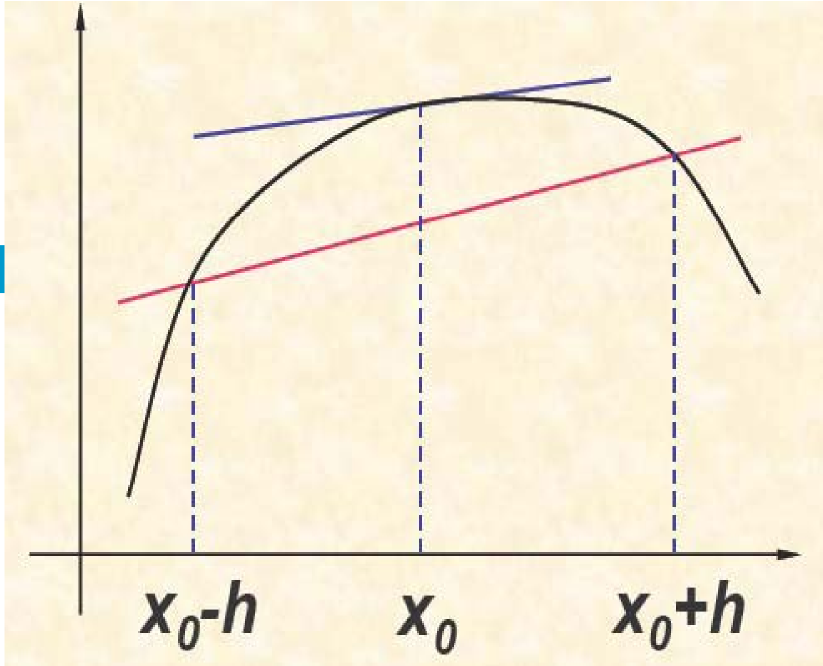
因此，有误差

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{h}{2!} f''(\xi) = O(h)$$

5.6 数值微分

中心差商

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$



由Taylor展开

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)+\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1), x_0 \le \xi_1 \le x_0+h$$

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

因此，有误差 $R(x)=f'(x_0)-\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$

$$=\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)]=\frac{h^2}{6}f'''(\xi)=O(h^2)$$

5.6 数值微分

插值型数值微分

插值是建立逼近函数的手段，用以研究原函数的性质。因此，可以用插值函数的导数近似为原函数的导数插值型数值微分

$$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$$

误差

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

$$R_n^{(K)}(x) = \frac{d^k}{dx^k}\left[\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)\right]$$

5.6 数值微分

例: 给定点列 $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0,1,2}$ 且, $x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = h$ 求

$$f'(x_2), f'(x_1), f'(x_0)$$

解:

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f(x_2)$$

$$L_2'(x) = \frac{(x-x_1+x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0+x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0+x-x_1)}{2h^2} f(x_2)$$

5.6 数值微分

$$f'(x_0) \approx L_2'(x_0) = \frac{1}{2h}(-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

$$f'(x_1) \approx L_2'(x_1) = \frac{1}{2h}(-f(x_0) + f(x_2)) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

$$f'(x_2) \approx L_2'(x_2) = \frac{1}{2h}(f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

$$f''(x_0) \approx L_2''(x_0) = \frac{1}{h^2}(f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)) + [-hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\xi_2)]$$

$$f''(x_1) \approx L_1''(x_2) = \frac{1}{h^2}(f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)) - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

$$f''(x_2) \approx L_2''(x_2) = \frac{1}{h^2}(f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)) + [hf'''(\xi_1) - \frac{h^2}{6} f^{(4)}(\xi_2)]$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f(x_2)$$

$$L_2'(x) = \frac{(x-x_1+x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0+x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0+x-x_1)}{2h^2} f(x_2)$$