数值计算方法

第四章 数值积分与数值微分

刘春凤

2022 年 11 月 21 日

数值积分

- 引言
- 数值积分概述
- 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式
- 复化求积公式
- 龙贝格算法
- 高斯型求积公式

引言

- 若函数f(x)在区间[a,b]上连续且其原函数为F(x),则可用Newton-Leibniz公式

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

- 求定积分的值，Newton-Leibnitz公式无论在理论上还是在解决实际问题上都起了很大的作用，但它并不能完全解决定积分的问题。

- 积分学涉及的实际问题极为广泛，而且极其复杂，在实际计算中经常遇到以下三种情况：

引言

- (1) 被积函数f(x)并不一定能找到用初等函数的有限形式表示的原函数F(x), 例如

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \text{和} \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

- (2) 被积函数f(x)的原函数能用初等函数表示，但表达式太复杂，例如

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

被积函数f(x)并不复杂，但积分后其表达式却很复杂，积分后其原函数F(x)为:

$$F(x) = \frac{1}{4}x^2\sqrt{2x^2+3} + \frac{3}{16}x\sqrt{2x^2+3} - \frac{9}{16\sqrt{2}}\ln(\sqrt{2}x + x^2\sqrt{2x^2+3})$$

引言

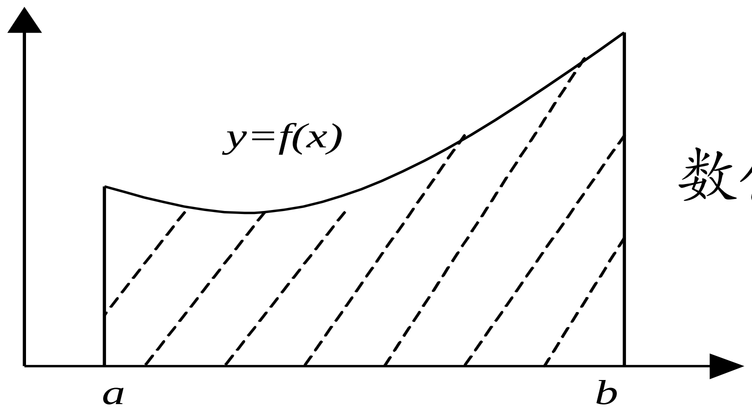
- (3) 被积函数f(x)没有具体的解析表达式，其函数关系由表格或图形表示
- 对于以上情况，要计算积分的准确值都十分困难。因此，通过原函数来计算积分有它的局限性，因而需要一种新的积分方法来解决Newton-Leibniz公式所不能或很难解决的积分问题。
- 用数值解法来建立积分的近似计算方法
  - 将积分区间细分，在每一个小区间内用简单函数替代复杂函数进行积分，这就是数值积分的思想
  - 用代数插值多项式去代替被积函数f(x)进行积分是本章所讨论的主要内容。

数值积分

- 引言
- 数值积分概述
- 牛顿-科特斯(Newton-Cotes)求积公式
- 复化求积公式
- 龙贝格算法
- 高斯型求积公式

数值积分的基本思想

- 积分值 $I=\int_a^b f(x)dx$ 在几何上可以解释为由x=a, x=b, y=0以及y=f(x)这四条边所围成的去边梯形面积。如图所示，这个面积之所以难计算，是因为它有一条曲边y=f(x).



数值积分的几何意义

- 建立数值积分公式的途径较多，其中最常用的有两种
  - 通过积分中值定理构建
  - 通过用简单函数逼近代替被积函数构建

数值积分的基本思想

- 通过积分中值定理建立数值积分公式
- 由积分中值定理可知，对于连续函数f(x)，在积分区间[a, b]内存在一点ξ, 使得

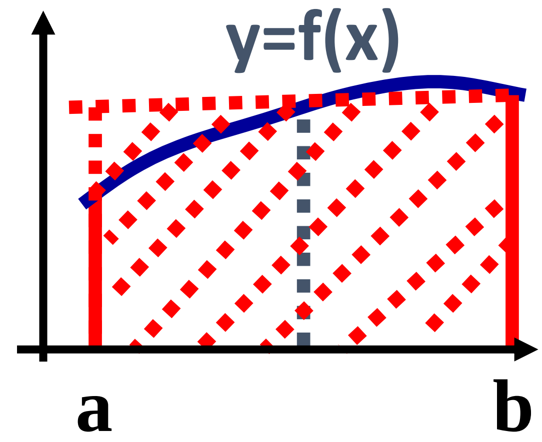
$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\xi) \qquad \xi \in [a,b]$$

- 即所求的曲边梯形的面积恰好等于底为(b-a)，高为$f(\xi)$的矩形面积。
- 但是，点ξ的具体位置一般是未知的，因而$f(\xi)$的值也是未知的，称$f(\xi)$为f(x)在区间[a, b]上的平均高度
- 只要对平均高度$f(\xi)$提供一种算法，相应地就获得一种数值求积方法

数值积分的基本思想

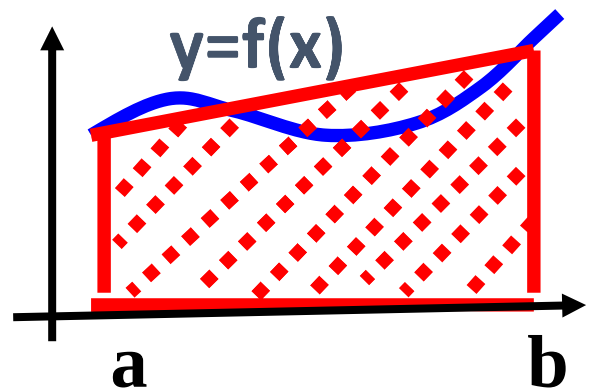
- 按上述思想，可构造求积分值的近似公式
- 例如：$f(\xi)$ 分别取 $f(\xi)\approx f(\frac{a+b}{2})$ 和 $f(\xi)\approx\frac{f(a)+f(b)}{2}$
  则分别得到中矩形公式和梯形公式。
- **中矩形公式：** 将f(a), f(b)的加权平均值 $\frac{1}{2}[f(a)+f(b)]$ 作为平均高度。

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



- **梯形公式：** 将[a, b]中点处函数值 $f(\frac{a+b}{2})$ 作为平均高度。

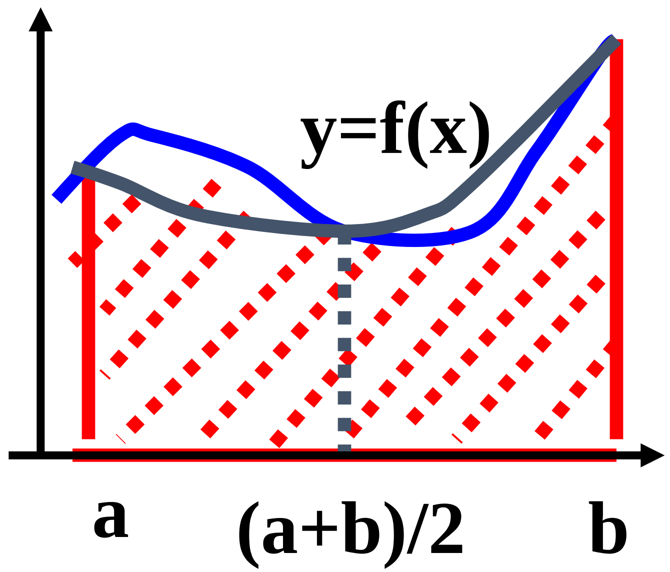
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)]$$



数值积分的基本思想

- Simpson(辛普森)公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$



- Simpson公式是以函数f(x)在a, b (a+b)/2这三点的函数值f(a), f(b), $f(\frac{a+b}{2})$ 的加权平均值

$$\frac{1}{6}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b))$$

作为平均高度$f(\xi)$ 的近似值而获得的数值积分方法。

数值积分的基本思想

- 用某个简单函数 $\varphi(x)$ 近似逼近f(x)
- 用 $\varphi(x)$ 代替原被积函数f(x),即 $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \varphi(x)dx$

  以此构造数值算法
- 从数值计算的角度考虑，函数 $\varphi(x)$ 应对f(x)有充分的逼近程度，并且容易计算其积分。
- 由于多项式能很好地逼近连续函数，且又容易计算积分，因此将 $\varphi(x)$ 选取为插值多项式，这样f(x)的积分就可以用其插值多项式的积分来近似代替。

插值求积公式

- 设已知f(x)在节点 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$ 有函数值 $f(x_k)$
  作n次拉格朗日插值多项式 $P(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$
- 式中 $$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}=\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}$$
- 这里 $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$
- 多项式P(x)易于求积，所以可取 $\int_a^b P(x)dx$ 作为 $\int_a^b f(x)dx$ 的近似值，即

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

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

插值求积公式

- 其中 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx$

  称为求积系数

- 定义: 求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.1)$$

其系数 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx$ 时，则称求积公式为插值求积公式。

插值求积公式

- 插值求积公式的余项
- 设插值求积公式的余项为$R(f)$，由插值余项定理得

$$R(f)=\int_a^b\left[f(x)-P(x)\right]dx=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx$$

其中 $\xi\in[a,b]$

- 当f(x)时次数不高于n的多项式时，有 $f^{(n+1)}(x)=0$

$R(f)=0$，求积公式能成为准确的等式。

- 由于闭区间[a, b]上的连续函数可用多项式逼近，所以一个求积公式能对多大次数的多项式f(x)成为准确等式，是衡量该公式的精确程度的重要指标。
- 为此给出以下定义：

插值求积公式

- 代数精度的定义
- 定义：设求积公式(4.1)对于一切次数小于等于m的多项式 $f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$ 或

$$f(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_mx^m$$

是准确的，而对于次数为m+1的多项式是不准确的，则称该求积公式具有m次代数精度（简称代数精度）

- 由定义可知，若求积公式(4.1) 的代数精度为n，则求积系数 A_k 应满足线性方程组：

插值求积公式

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \cdots + A_n x_n = \dfrac{b^2 - a^2}{2} \\ \cdots\cdots \\ A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \cdots + A_n x_n^n = \dfrac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1} \end{cases}$$

▶这是关于A_k 的线性方程组，其系数矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix}$$

是范得蒙矩阵，当 $x_k\,(k = 0,1,\cdots,n)$ 互异时非奇异，故 A_k 有唯一解。

插值求积公式

- 定理：n+1个节点的求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 为插值型求积公式的充要条件是公式至少具有n次代数精度。
- 证：必要性 设n+1个节点的求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 为插值型求积公式，求积系数为

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

又 $f(x)=P(x)+R(x)$，当f(x)为不高于n次的多项式时，f(x)=P(x), 其余项R(f)=0。因而这时求积公式至少具有n次代数精度。

- 充分性 若求积公式至少具有n次代数精度，则对n次多项式

插值求积公式

$$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\qquad (k=0,1,\cdots,n)$$

精确成立，即 $\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^{n}A_j l_k(x_j)$，而 $l_k(x_j)=\delta_{kj}=\begin{cases}1 & k=j\\ 0 & k\neq j\end{cases}$

- 取 $f(x)=l_k(x)$ 时，

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^{n}A_j l_k(x_j)$$

- 所以有 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx$，即求积公式为插值型求积公式。

插值求积公式

▶例1：设积分区间[a, b]为[0, 2]，取

$$f(x) = 1, x, x^2, x^3, x^4, e^x$$，时

分别用梯形和Simpson公式

$$\int_0^2 f(x)dx \approx f(0) + f(2)$$

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

计算其积分结果并与准确值进行比较

插值求积公式

- 解：梯形公式和Simpson公式的计算结果与准确值比较如下表所示

f(x)	1	x	x^2	x^3	x^4	e^x
准确值	2	2	2.67	4	6.40	6.389
梯形公式计算值	2	2	4	8	16	8.389
辛卜生公式计算值	2	2	2.67	4	6.67	6.421

- 从表中可以看出，当f(x)是 x^2, x^3, x^4 时，Simpson公式比梯形公式更精确。
- 一般来说，代数精度越高，求积公式越精确。梯形公式和中矩形公式具有1次代数精度，Simpson公式有3次代数精度。

插值求积公式

- 验证梯形公式只有1次代数精度
- 梯形公式： $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$
- 取f(x)=1时， $\int_a^b 1dx = b-a,\quad \frac{b-a}{2}(1+1) = b-a$ ，两端相等
- 取f(x)=x时，

  $\int_a^b xdx = \frac{1}{2}(b^2-a^2),\quad \frac{b-a}{2}(a+b) = \frac{1}{2}(b^2-a^2)$ ，两端相等
- 取f(x)=x^2时，

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

  两端不相等
- 因此，梯形公式只有1次代数精度。

插值求积公式

▶例2. 试确定一个至少具有2次代数精度的公式

$$\int_0^4 f(x)dx \approx Af(0)+Bf(1)+Cf(3)$$

▶解：要使公式具有2次代数精度，则对f(x)=1, x, x^2 求积公式准确成立，即得如下方程组：

$$\begin{cases} A+B+C=4 \\ B+3C=8 \\ B+9C=\dfrac{64}{3} \end{cases}$$

▶解得 $A=\dfrac{4}{9},\quad B=\dfrac{4}{3},\quad C=\dfrac{20}{9}$

▶因此，所求公式为：$\int_0^4 f(x)dx \approx \dfrac{1}{9}[4f(0)+12f(1)+20f(3)]$

插值求积公式

- 例3. 试确定求积系数A，B, C使

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx Af(-1) + Bf(0) + Cf(1)$$

具有最高的代数精度。

- 解： 分别取f(x)=1, x, x^2使求积公式准确成立，即得

如下方程组：
$$\begin{cases} A + B + C = 2 \\ -A \quad + C = 0 \\ A \quad + C = \dfrac{2}{3} \end{cases}$$

- 所得求积公式为：$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1)$
- 可验证该求积公式对于f(x)=1, x, x^2, x^3 都准确成立，对于f(x)=x^4不能准确成立，所以求积公式具有3次代数精度。

插值求积公式

- 由于n+1节点的插值求积公式至少具有n次代数精度，所以构造求积公式后应该验算所构造求积公式的代数精度，例如插值求积公式

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

- 有三个节点至少具有2次代数精度，是否具有3次代数精度呢?
- 将$f(x)=x^2$代入公式两端，左端和右端都等于$(b^4-a^4)/4$, 公式两端严格相等，
- 再将$f(x)=x^4$代入公式两端，两端不相等，
- 所以该求积公式具有3次代数精度。

插值求积公式

- 例4. 考察如下求积公式的代数精度

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{2}\left[f(-1)+2f(0)+f(1)\right]$$

- 解：可以验证，对于f(x)=1, x时，公式两端相等，

  再将f(x)=x^2代入公式，

- 左端= $\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{1}{3}x^3 \ \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3}$
- 右端= $\frac{1}{2}\left[f(-1)+2f(0)+f(1)\right]=\frac{1}{2}\left[1+1\right]=1$
- 左端不等于右端，所以求积公式具有1次代数精度
- 三个节点不一定具有2次代数精度，因为不是插值型的

插值求积公式

- 例5.给定求积公式$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{3}\left[2f\left(\frac{1}{4}\right)-f\left(\frac{1}{2}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)\right]$
  求证此求积公式是插值型求积公式
- 证明：设 $x_0=\frac{1}{4},x_1=\frac{1}{2},x_2=\frac{3}{4}$，则以这三点为插值节点的Lagrange多项式插值基函数为:

$$l_0(x)=\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)/\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)=8\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)$$

$$l_1(x)=\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)/\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)=-16\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)$$

$$l_2(x)=\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)/\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)=8\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)$$

插值求积公式

$$\int_0^1 l_0(x)dx = \int_0^1 8\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)dx = 8\int_0^1\left(x^2-\frac{5}{4}x+\frac{3}{8}\right)dx$$

$$=8\left(\frac{1}{3}-\frac{5}{4}\times\frac{1}{2}+\frac{3}{8}\right)=8\left(\frac{1}{3}-\frac{2}{8}\right)=\frac{8}{3}-2=\frac{2}{3}$$

$$\int_0^1 l_1(x)dx = \int_0^1 (-16)\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)dx = (-16)\int_0^1\left(x^2-x+\frac{3}{16}\right)dx$$

$$=(-16)\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2}+\frac{3}{16}\right)=(-16)\left(-\frac{1}{6}+\frac{3}{16}\right)=\frac{16}{6}-3=-\frac{1}{3}$$

$$\int_0^1 l_2(x)dx = \int_0^1 8\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)dx = 8\int_0^1\left(x^2-\frac{3}{4}x+\frac{1}{8}\right)dx$$

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

插值求积公式

- 插值型求积公式为：

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

- 由插值型求积公式的定义知，所给的求积公式是插值型求积公式。

插值求积公式

- 构造插值型求积公式有如下特点：
- (1)复杂函数f(x)的积分转化为计算多项式积分
- (2)求积系数A_k只与积分区间及节点x_k有关，而与被积函数f(x)无关，可以不管f(x)如何，预先算出A_k的值。
- n+1个节点的插值型求积公式至少具有n次代数精度。
- 求积系数之和 $\sum_{k=0}^{n} A_k = b-a$ ，可用此检验计算求积系数的正确性。

插值求积公式

▶例6. 证明当节点个数为n+1时，插值求积系数之和为

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b-a$$

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

当节点为$n+1$个时，插值求积公式有n次代数精度，对于$f(x)=x^n$，上式严格相等，所以取$f(x)=1$时，上式也严格相等，因此有

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

$$\therefore \sum_{k=0}^{n} A_k = b-a$$

即$A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b-a$

插值求积公式

- 例7. 对$\int_0^3 f(x)dx$ 构造一个至少具有3次代数精度的求积公式
- 解：3次代数精度需要4个节点，在[0, 3]上取0，1， 2，3四个节点构造求积公式

$$\int_0^3 f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + A_2 f(2) + A_3 f(3)$$

- 确定求积系数A_k (k=0, 1, 2, 3), 利用求积系数公式

$$A_0 = \int_0^3 \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)}dx = -\frac{1}{6}\int_0^3 (x^3 - 6x^2 + 11x - 6)dx = \frac{3}{8}$$

$$A_1 = \int_0^3 \frac{(x-0)(x-2)(x-3)}{(1-0)(1-2)(1-3)}dx = \frac{9}{8}, A_2 = \frac{9}{8}, A_3 = \frac{3}{8}$$

$$\therefore \int_0^3 f(x)dx \approx \frac{3}{8}[f(0) + 3f(1) + 3f(2) + f(3)]$$

求积公式的收敛性和稳定性

▶一般地，求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (1.3)$$

▶通常称为机械求积公式

插值型求积公式它的余项为

$$R[f]=\int_a^b [f(x)-L_n(x)]\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\mathrm{d}x. \quad (1.7)$$

▶收敛性：在求积公式(1.3)中，若

$$\lim_{\substack{n\to\infty\\ h\to 0}}\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x,$$

其中$h=\max\limits_{1\le i\le n}(x_i-x_{i-1})$,则称求积公式(1.3)是收敛的.

求积公式的收敛性和稳定性

- **稳定性**：若$\forall\varepsilon>0, \exists\delta>0$，只要$|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)|\le\delta\ (k=0,1,\ldots,n)$，就有

  $$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}(x_k)]\right|\le\varepsilon$$

  则求积公式(1.3)是稳定的.

- 若求积公式(1.3)中系数$A_k>0\ (0, 1, \cdots, n)$，则求积公式是稳定的。

  这是因为，当$\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|\le\delta\ (k=0,\cdots,n)$时，有

  $$|R_n|=\sum_{k=0}^{n}A_k\left|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)\right|\le\delta\sum_{k=0}^{n}A_k=(b-a)\delta.$$

数值积分

- 引言
- 数值积分概述
- 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式
- 复化求积公式
- 龙贝格算法
- 高斯型求积公式

牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

- 在插值求积公式中，当所取节点是等距时称为牛顿-柯特斯公式
- 将积分区间[a, b]划分为n等分，步长 $h=\dfrac{b-a}{n}$
- 求积节点为 $x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,n)$
- 为了计算求积系数A_k，由于 $x_k-x_i=(k-i)h$，所以

$$(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)=(-1)^{n-k}k!(n-k)!h^n$$

- 于是可得

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

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

$$=(b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\Big(\prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^{n}(t-i)\Big)dt$$

牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

- 引进记号

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

则 $A_k = (b-a)C_k^{(n)}$ （ k=0,1…,n ）

- 代入插值求积公式，有

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

- 该式为牛顿-柯特斯求积公式，$C_k^{(n)}$称为柯特斯系数

牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

- 容易验证 $\sum_{k=0}^{n} C_k = 1$

- 因为 $C_k = \dfrac{1}{b-a} A_k \qquad A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

所以 $$\sum_{k=0}^{n} C_k = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{b-a}\int_a^b l_k(x)dx$$

$$= \frac{1}{b-a}\int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x)dx = \frac{1}{b-a}\int_a^b 1dx = 1$$

- 显然，C_k不依赖于积分区间[a,b]以及被积函数f(x), 只要给出n，就可以算出柯特斯系数，譬如当n=1时，

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

牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

- 当n=2时，

$$C_0=\frac{(-1)^2}{2\cdot 0!\cdot 2!}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6}$$

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

$$C_2=\frac{(-1)^0}{2\cdot 2!\cdot 0!}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}$$

- 课本P104 表4-1给出了n=1~8时的柯特斯系数

n								
1	1/2	1/2						
2	1/6	4/6	1/6					
3	1/8	3/8	3/8	1/8				
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90			
5	…	…	…	…	…	…		

牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

- 当n=8时，出现了负系数，从而影响稳定性和收敛性，因此实用的只是低阶公式。
- 在牛顿-柯特斯求积公式中，当n=1, 2, 4时，分别对应梯形公式、Simpson公式和柯特斯公式
- 当n=1时，牛顿-柯特斯公式就是梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}(b-a)\left[f(a)+f(b)\right]$$

- 当n=2时，牛顿-柯特斯公式就是Simpson公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

- 当n=4时，称为柯特斯公式

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

牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

- 分别用梯形公式、Simpson公式和柯特斯公式计算定积分$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$ 的近似值（计算结果取5位有效数字）
- 解： 梯形公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{2}[f(0.5)+f(1)] = 0.25\times[0.70711+1] = 0.4267767 = 0.426777$$

- Simpson公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{6}[\sqrt{0.5}+4\times\sqrt{(0.5+1)/2}+\sqrt{1}] \quad =0.43093$$

- 柯特斯公式，系数为 $\frac{7}{90},\frac{32}{90},\frac{12}{90},\frac{32}{90},\frac{7}{90}$

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{90}[7\times\sqrt{0.5}+32\times\sqrt{0.625}+12\times\sqrt{0.75}+32\times\sqrt{0.875}+7\times\sqrt{1}]$$

$$=0.43096$$

积分的准确值为 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx = \frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\Big|_{0.5}^{1} = 0.43096441$

数值积分

- 引言
- 数值积分概述
- 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式
- 复化求积公式
- 龙贝格算法
- 高斯型求积公式

复化求积公式

- 由梯形、Simpson和柯特斯求积公式可知，随着求积节点数的增多，对应公式的精度也会相应提高。
- 但是由于$n \geqslant 8$时的牛顿-柯特斯求积公式开始出现负值的柯特斯系数。
- 当出现负系数时，可能导致舍入误差增大，且往往难以估计，因此不能用增加求积节点数的方法来提高计算精度。
- 在实际应用中，通常将积分区间分成若干个小区间，在每个小区间上采用低阶求积公式，然后把所有小区间上的计算结果加起来得到整个区间上的求积公式，这就是复化求积公式的基本思想
- 常用复化求积公式由复化梯形公式和复化Simpson公式

复化求积公式

- 复化梯形公式
- 将积分区间[a,b]划分为n等分，步长 $h=\dfrac{b-a}{n}$
- 求积节点为 $x_k = a+kh \qquad (k=0,1,\cdots,n)$
- 在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}] \qquad (k=0,1,\cdots,n-1)$ 上应用梯形公式 $\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$
- 求出积分值I_k，然后将它们累加求和，用 $\sum_{k=0}^{n-1} I_k$ 作为所求积分I的近似值。

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

$$=\frac{h}{2}[f(x_0)+2(f(x_1)+f(x_2)+\ldots+f(x_{n-1}))+f(x_n)]$$

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

复化求积公式

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

  该式称为复化梯形公式

- 复化梯形求积算法实现步骤:
  - 确定步长h=(b-a)/N （N 为等分数），T=0
  - 对k=1,2,⋯,N，计算T=T+f(a +kh)
  - T= h[f(a)+ 2T + f(b)]/2

复化求积公式

- 复化Simpson公式
- 将积分区间[a, b]划分为n等分，记子区间$\left[x_k, x_{k+1}\right]$的中点为$x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{1}{2}h$，在每个小区间上应用Simpson公式，则有

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

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

- 记：

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

- 称为复化Simpson公式

复化求积公式

- 复化Simpson公式计算步骤

① 确定步长$h=(b-a)/N$, $S1=f(a+h/2)$, $S2=0$

（N 为等分数）

② 对$k=1,2,\cdots,N-1$，计算

$$S1=S1+f(a+kh+h/2),\ S2=S2+f(a+kh)$$

③ $S=h[f(a)+4S1+2S2+f(b)]/6$

复化求积公式

▶例. 依次用n=8的复化梯形公式和n=4的复化Simpson公式计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$

▶解：首先算出所需个节点的函数值，当n=8时，

$$h=\frac{1}{8}=0.125$$

▶由复化梯形公式，可得如下计算公式：

$$\begin{aligned}T_8 &= \frac{1}{16}\left[f(0)+2f(0.125)+2f(0.25)+2f(0.375)+2f(0.5)\right.\\&\quad\left.+2f(0.625)+2f(0.75)+2f(0.875)+f(1)\right]\\&=0.9456909\end{aligned}$$

复化求积公式

- 由复化Simpson公式可得如下计算公式:

$$S_4 = \frac{1}{24}\left[f(0) + f(1) + 2(f(0.25) + f(0.5) + f(0.75)) \right.$$
$$\left. + 4(f(0.125) + f(0.375) + f(0.625) + f(0.875)) \right]$$
$$= 0.9460832$$

- 积分准确值I=0.9460831
- 两种方法都需要提供9个点上的函数值，计算量基本相同，然而精度却差别较大，同积分准确值比较，复化梯形公式只有两位有效数字，而复化Simpson公式却有六位有效数字。

变步长复化求积公式

- 复化求积方法对于提高精度行之有效，但复化公式的一个主要缺点在于要先估计出步长。
  - 若步长太大，则难以保证计算精度
  - 若步长太小，则计算量太大，并且积累误差也会增大
- 在实际计算中通常采用变步长的方法，即把步长逐次分半，直至达到某种精度为止。
- 变步长梯形公式
- 变步长复化求积法的基本思想是在求积过程中，通过对计算结果精度的不断估计，逐步改变步长（逐次分半)，直至满足精度要求为止。即按照给定的精度实现步长的自动选取。

变步长复化求积公式

- 将积分区间[a, b] n等分，即分成n个子区间，一共有n+1个节点，即x=a+kh, k=0,1,⋯，n，步长 $h=\frac{b-a}{n}$
- 对于某个子区间 $\left[x_k, x_{k+1}\right]$，利用梯形公式计算积分近似值有 $\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$
- 对整个区间[a, b]有

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

变步长复化求积公式

- 将子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 再二等分，取其中点 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$ 作新节点，此时区间数增加了一倍为2n，对某个子区间$[x_k, x_{k+1}]$，利用复化梯形公式计算其积分近似值

$$\frac{h}{4}\left[f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right]$$

- 对整个区间[a, b]有

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

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

- 比较 T_n 和 T_{2n} 有

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

称为变步长梯形公式

变步长复化求积公式

- 当把积分区间分成n等分，用复化梯形公式计算积分公式计算积分I的近似值T_n时，截断误差为：

$$R_n = I - T_n = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\xi_n)$$

- 若把区间再分半为2n等分，计算出定积分的近似值T_{2n}，则截断误差为

$$R_{2n} = I - T_{2n} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2 f''(\xi_{2n})$$

- 当 $f''(x)$ 再区间[a,b]上变化不大时，有 $f''(\xi_n) \approx f''(\xi_{2n})$

所以

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

变步长复化求积公式

- 当步长二分后，误差将减至 $\frac{1}{4}$ ，将上式移项整理，可得验后误差估计式

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \qquad (4.8)$$

- 因此，只要二等分前后两个积分值 T_n 和 T_{2n} 相当接近，就可以保证计算结果 T_{2n} 的误差很小，使 T_{2n} 接近于积分值I。

变步长复化求积公式

▶ 变步长梯形求积法的计算步骤

▶① 变步长梯形求积法。它是以梯形求积公式为基础，逐步减少步长，按如下递推公式求二分后的梯形值

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

其中T_n和T_{2n}分别代表二等分前后的积分值

▶② 如果$|T_{2n} - T_n| < \varepsilon$，(ε为给定的误差限）则$T_{2n}$作为积分的近似值，否则继续进行二等分，即

$$\frac{h}{2} \Rightarrow h, \qquad T_{2n} \Rightarrow T_n$$

▶转 ①再计算，直到满足所要求的精度为止，最终取二分后的积分值T_{2n}作为所求的结果

变步长复化求积公式

- 例. 用变步长梯形求积公式计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
- 解：先对整个区间[0, 1]用梯形公式，对于

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}, f(0)=1, f(1)=0.8410709$$

- 所以有

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

- 然后将区间二等分，由于 $f(\tfrac{1}{2})=0.9588510$ ，故有

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

- 进一步二分求积区间，并计算新分点上的函数值

$$f(\tfrac{1}{4})=0.9896158\,, f(\tfrac{3}{4})=0.9088516$$

变步长复化求积公式

- 有

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}\left[f(\tfrac{1}{4})+f(\tfrac{3}{4})\right]=0.9445135$$

- 这样不断二分下去，计算结果如P110列表所示。积分准确值为0.9460831，从表中可看出用变步长二分10次可得此结果。

数值积分

- ▶引言
- ▶数值积分概述
- ▶牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式
- ▶复化求积公式
- ▶龙贝格算法
- ▶高斯型求积公式

龙贝格算法

- 变步长求积法算法简单，但精度较差，收敛速度较慢
- 可以利用梯形法算法简单的优点，形成一个新的算法，这就是龙贝格求积公式。
- 龙贝格公式又称逐次分半加速法。
- 根据积分区间分成n等分和2n等分时的误差估计式

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

  所以积分值 T_{2n} 的误差大致等于 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$，如果用 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$ 对 T_{2n} 进行修正时，$\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$ 与 T_{2n} 之和比 T_{2n} 更接近积分值，所以可以将 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$ 看成是对 T_{2n} 误差的一种补偿，可得到更好的效果。

龙贝格算法

- 用梯形法二分前后两个积分值 T_n 和 T_{2n} 作线性组合，结果却得到复化Simpson公式计算得到的积分值 S_n
- 复化梯形公式:

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

- 变步长梯形公式:

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

- 代入$\bar{T}$ 表达式得 $\bar{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$

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

- 故$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (4.10)$

龙贝格算法

- 再考察Simpson法，其截断误差与h^4成正比，因此，如果将步长折半，则误差减至$\frac{1}{16}$，即有

$$\frac{I-S_{2n}}{I-S_n} \approx \frac{1}{16}$$

- 由此可得：$I \approx \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$

- 可以验证，上是右端的值等于C_n，就是说，用Simpson公式二等份前后的两个积分值S_n和S_{2n}作线性组合后，可得到柯特斯公式求得的积分值C_n，即有

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

龙贝格算法

- 用同样的方法，根据柯特斯公式的误差公式，可进一步导出龙贝格公式:
- $$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n \qquad (4.12)$$
- 可以通过变步长，将粗糙的梯形值T_n逐步加工成精度较高的Simpson值S_n、柯特斯值C_n和龙贝格值R_n
- 将收敛缓慢的梯形值序列T_n加工成收敛迅速的龙贝格值序列R_n，这种加速方法称为龙贝格算法（龙贝格公式）

龙贝格算法

▶龙贝格求积法计算步骤

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

② 按变步长梯形公式计算积分近似值

将区间逐次分半,令区间长度 $h = \frac{b-a}{2^k} \quad (k = 0,1,2,\cdots)$

计算

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

③ 按加速公式求加速值

梯形公式 $S_n = T_{2n} + \frac{T_{2n} - T_n}{3}$

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

龙贝格求积公式 $R_n = C_{2n} + \frac{C_{2n} - C_n}{63}$

龙贝格算法

④ 精度控制，直到相邻两次积分值

$$\left|R_{2n}-R_n\right|<\varepsilon$$

（其中 ε 为允许的误差限）则终止计算并取R_n

- 例题. 用龙贝格算法计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x$ 要求相邻两次龙贝格值的偏差不超过 10^{-5}
- 解： 由题意 $a=0, b=1, f(x)=\frac{4}{1+x^2}$

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

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

龙贝格算法

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}\left[f\left(\tfrac{1}{4}\right)+f\left(\tfrac{3}{4}\right)\right]=\frac{1}{2}\times 3.1+\frac{1}{4}(3.764+2.56)=3.13118$$

$$T_8=\frac{1}{2}T_4+\frac{1}{8}\left[f\left(\tfrac{1}{8}\right)+f\left(\tfrac{3}{8}\right)+f\left(\tfrac{5}{8}\right)+f\left(\tfrac{7}{8}\right)\right]=3.13899$$

$$T_{16}=\frac{1}{2}T_8+\frac{1}{16}\left[f\left(\tfrac{1}{16}\right)+f\left(\tfrac{3}{16}\right)+f\left(\tfrac{5}{16}\right)+f\left(\tfrac{7}{16}\right)+f\left(\tfrac{9}{16}\right)+f\left(\tfrac{11}{16}\right)+f\left(\tfrac{13}{16}\right)+f\left(\tfrac{15}{16}\right)\right]=3.14094$$

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

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

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

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

龙贝格算法

$$C_1=\frac{16}{15}S_2-\frac{1}{15}S_1=3.14212$$

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

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

$$R_1=\frac{64}{63}C_2-\frac{1}{63}C_1=3.14158$$

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

- 由于 $|R_2-R_1|\le 0.00001$ ，于是有

$$I=\int_0^1\frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x\approx 3.14159$$

数值积分

- 引言
- 数值积分概述
- 牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式
- 复化求积公式
- 龙贝格算法
- 高斯型求积公式

高斯(Gauss)型求积公式

- 高斯积分问题的提出
- 在建立牛顿-柯特斯公式时，为了简化计算，对插值公式中的节点限定为等分的节点，然后再定求积系数
- 这种方法虽然简单，但求积公式的精度受到限制
- 已经知道，过n+1个节点的插值型求积公式至少具有n次代数精度
- 问题是:
  - 是否存在具有最高代数精度的求积公式呢?
  - 若存在，最高代数精度等达到多少呢?

高斯(Gauss)型求积公式

▶例如：在构造形如$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$ 的两点公式时，如果限定求积节点 $x_0 = -1, x_1 = 1$，

那么所得插值求积公式

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

的代数精度仅为1。但是，如果对式中的系数 A_0, A_1 和x_0, x_1 节点都不加限制，那么就可适当选取 A_0, A_1 和 x_0, x_1，使所得公式的代数精度大于1.

▶事实上，若要使求积公式对函数 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 都准确成立，只要x_0, x_1 和 A_0, A_1 满足方程组

高斯(Gauss)型求积公式

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases}$$

- 解得: $A_0 = A_1 = 1 \quad x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3} \quad x_0 = \frac{\sqrt{3}}{3}$
- 因此，所得求积公式为:

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

- 该求积公式是具有3次代数精度的插值型求积公式。
- 只要适当选择求积节点，可使插值型求积公式的代数精度达到最高。

高斯(Gauss)型求积公式

- 对于，一般的插值求积公式

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

- 只要适当选取2n+2个待定参数x_k和 $A_k,(k=0,1,\cdots,n)$ 就可使它的代数精度达到2n+1次。
- 定义：若插值求积公式具有2n+1次代数精度，则称之为高斯求积公式，并称相应的求积节点为高斯点。
- n个节点的高斯求积公式具有最高不超过2n+1次的代数精度（可以证明）。

高斯(Gauss)型求积公式

- 高斯求积公式的构造
- 像构造两点高斯求积公式一样，对于插值型求积公式，分别取 $f(x)=1, x, \cdots, x^{2n+1}$，用待定系数法来确定$x_k$ 和 $A_k, (k=0,1,\cdots,n)$，从而构造n+1个点的高斯求积公式
- 但是，这种做法需要解一个包含2n+2个未知数的线性方程组，其计算两相当大。
- 较简单的做法是：

（1）先利用区间[a, b]上的n+1次正交多项式确定高斯点

（2）然后利用高斯点确定求积系数

$x_k \in [a,b]\ (k=0,1,\cdots,n)$ $A_k\ (k=0,1,\cdots,n)$

高斯(Gauss)型求积公式

- P122，表4-7给出当积分区间是[-1,1]时，2个点至5个点的高斯求积公式的节点、系数,其中

  $\xi \in [-1,1]$，需要时可以查用。

数值微分

- 中点方法
- 数值微分就是要用函数值的线性组合近似函数在某点的导数值。
- 由导数定义，差商近似倒数，得到数值微分公式

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

$$f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h},$$

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}. \quad \text{（中点公式）} \qquad (6.1)$$

数值微分

- 插值型求导公式
- 已知函数$y=f(x)$的节点上的函数值$y_i=(x_i)\ (i=0,1,\dots,n)$，建立插值多项式$P(x)$
- 取$f'(x)\approx P'(x)$, 统称为插值型求导公式
- 考虑在等距节点时，节点上的导数值
- 两点公式 $P_1(x)=\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)$,

$$P_1'(x)=\frac{1}{h}[-f(x_0)+f(x_1)],$$

$$P_1'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)],\ P_1'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)].$$

数值微分

▶三点公式

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

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

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

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

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

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

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

数值微分

▶利用数值积分求导

设$f(x)$充分光滑,$\varphi(x)=f'(x)$, $x_i=a+ih, i=0,1,\cdots,n, h=\dfrac{b-a}{n}$,

$$f(x_{i+1})=f(x_{i-1})+\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}\varphi(x)\mathrm{d}x,\qquad i=1,\cdots,n-1, \tag{6.8}$$

▶右边积分采用不同的数值积分计算，就得到不同的数值微分公式，例如，由

$$\varphi(x)=\varphi(x_i)+\varphi'(x_i)(x-x_i)+\frac{(x-x_i)^2}{2!}\varphi''(\zeta_i),\ \zeta_i\in(x_{i-1},x_{i+1}),$$

▶得到中矩形公式

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}\varphi(x)\mathrm{d}x=2h\varphi(x_i)+\frac{1}{3}h^3\varphi''(\xi_i),\quad \xi_i\in(x_{i-1},x_{i+1}).$$

▶代入(6.8),整理得到中点微分公式

$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-\frac{1}{6}h^3\varphi''(\xi_i).$$

数值微分

- 还可以通过其它方法求数值微分
- 利用三次样条求导
- 利用外推方法求数值微分
- ……

本章小节

- 本章介绍了积分的数值计算方法，其基本原理主要是逼近论，即设法构造某个简单函数P(x)近似表示f(x)，然后对P(x)求积或求导得到f(x)的积分。
- 基于插值原理，推导了数值积分的基本公式。
- 插值型求积公式介绍了牛顿—柯特斯公式和高斯公式两类。
- 前者取等距节点，算法简单而容易编制程序。但是，由于在$n \geqslant 8$时出现了负系数，从而影响稳定性和收敛性。因此实用的只是低阶公式。解决长区间与低阶公式的矛盾是使用复化求积公式。

本章小节

- 常用的数值积分法都是复化求积公式。
- 高斯公式不但具有最高代数精度，而且收敛性和稳定性都有保证，因此是高精度的求积公式。
- 高斯公式还可以通过选择恰当的权函数，用于计算奇异积分和广义积分，也可使一些复杂的积分计算简化。
- 高斯公式的主要缺点是节点与系数无规律。所以高阶高斯公式不便于上机使用。
- 实际应用中可以把低阶高斯公式进行复化。

本章小节

- 龙贝格算法是在区间逐次分半过程中，对用梯形法所获得的近似值进行多级“加工”，从而获得高精度的积分近似值的一种方法。它具有自动选取步长且精度高，计算量小的特点，便于在计算机上使用。是数值积分中较好的方法。
- 建立在代数精度概念上的待定系数法也是数值积分中的一般方法，按待定系数法确定的数值积分公式没有误差估计式，只能从代数精度出发，估计其精确程度。