第六讲 数值积分与数值微分

一、引言

数值求积的必要性

定积分的计算可用著名的牛顿-莱布尼兹公式来计算:

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

其中 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的原函数之一，可用不定积分求得.

问题

✓ 被积函数 $f(x)$ 是用函数表格提供;

✓ $f(x)$ 极为复杂，求不出原函数;

大量函数的原函数不容易或根本无法求出.

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \qquad \int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx \qquad H(x) = \frac{4Ir}{r^2 - x^2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{r}\right)^2 \sin^2\theta}\, d\theta$$

只能运用数值积分, 求积分近似值 .

数值积分的基本方法

思路 $\int_a^b f(x)dx$

就是在区间 [*a* , *b*] 内取 *n*+1 个点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$

利用被积函数 *f* (*x*) 在这 *n*+1 个点的函数值的某一种线性组合来近似作为待求的定积分.

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

其中，称 x_k为积分节点，称 A_k为求积系数。

思路

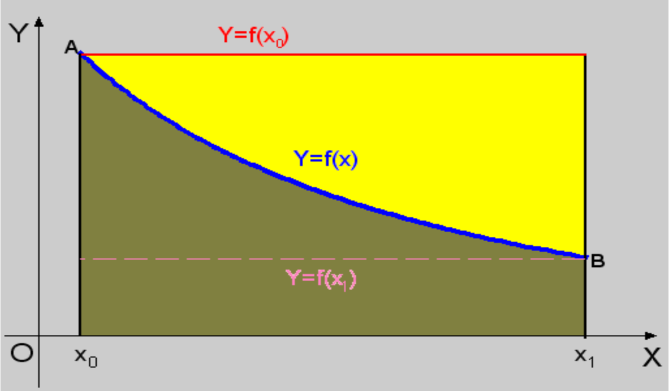
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

其中，x_k 称为积分节点，A_k称为求积系数。

因此，数值积分公式关键在于积分节点 x_k 的选取和积分系数 A_k的确定，其中 A_k 与被积函数 $f(x)$ 无关。称为机械求积公式。

简单算例

求积分 $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$



简单算例 求积分 $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$

解 此积分的几何意义相当于如图所示的曲边梯形的面积。

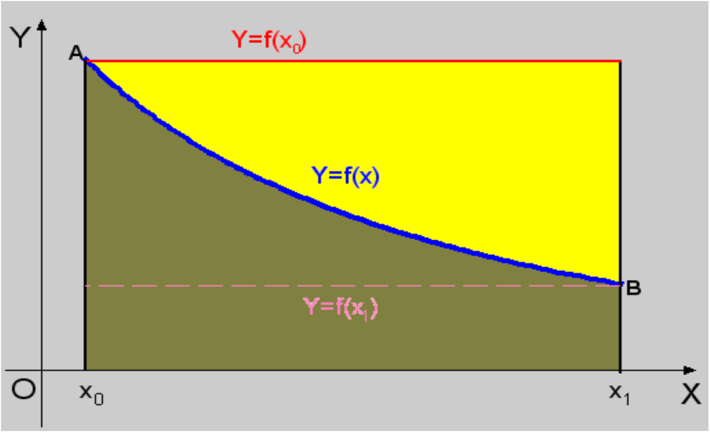
用 $f(x)$ 的零次多项式

$$y = L_0(x) = f(x_0) \quad \text{来近似代替} \quad f(x)$$

于是有

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f(x_0)dx$$

$$= f(x_0)(x_1 - x_0)$$



左矩公式

推广:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f(x_1)dx$$

$$= f(x_1)(x_1 - x_0)$$ $\boxed{\text{右矩公式}}$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right)dx$$

$$= f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right)(x_1 - x_0)$$ $\boxed{\text{中矩公式}}$

推广:

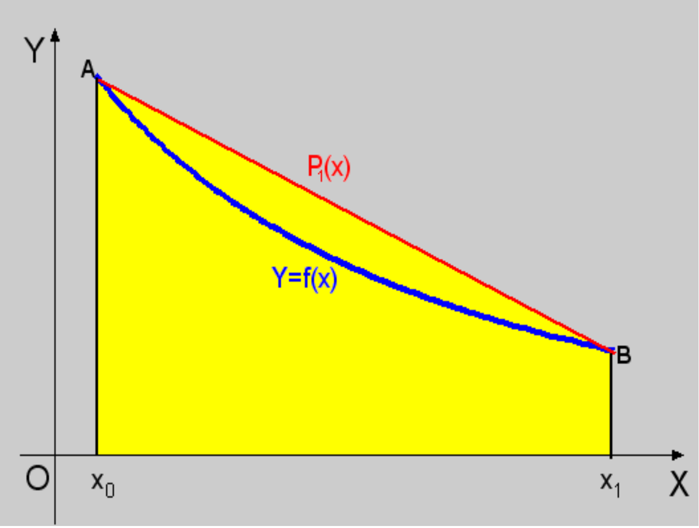
用 $f(x)$ 的一次多项式 $L_1(x)$ 来近似代替 $f(x)$，

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

于是，$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} L_1(x)dx$$

$$=\int_{x_0}^{x_1}\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)\right)dx$$

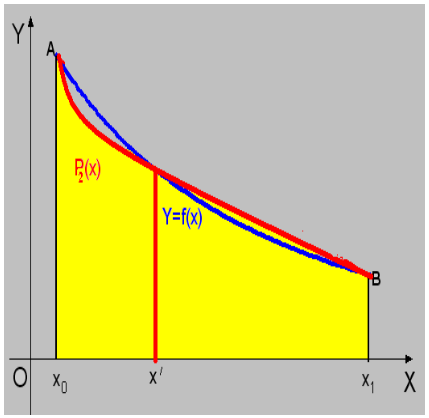
$$=\frac{1}{2}(x_1-x_0)\left[f(x_0)+f(x_1)\right]$$



梯形公式

推广:

用 $f(x)$ 的二次插值多项式， 来近似代替 $f(x)$



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

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

有 $$\int_{x_0}^{x_1}f(x)dx\approx\int_{x_0}^{x_1}L_2(x)dx$$

特别地：当 $x'=\frac{1}{2}(x_0+x_1)$,于是,

$$\int_{x_0}^{x_1}f(x)dx\approx\frac{(x_1-x_0)}{6}\left[f(x_0)+4f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)+f(x_1)\right]$$

Simpson公式

代数精度

为了使一个求积公式能对更多的积分具有较好的实际计算意义，就要求它对尽可能多的被积函数都准确地成立.

因此定义代数精度的概念:

定义 若积分 $\int_a^b f(x)dx$ 的数值积分公式

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

对于任意 $f(x)=x^i(i=0,1,\cdots,m)$ 多项式都精确成立，

但对 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立，

则称该数值积分公式具m 次代数精确度。

算例： 对于[*a*, *b*]上线性插值，如图所示有

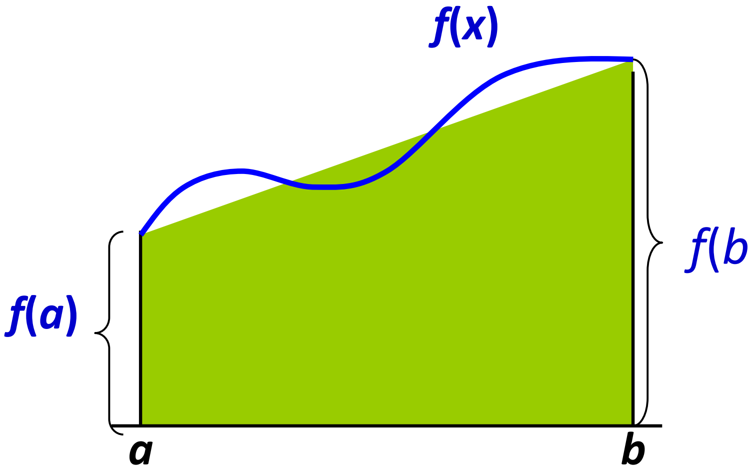
$$L_1(x)=\frac{x-b}{a-b}f(a)+\frac{x-a}{b-a}f(b)$$

➡ $$A_1=A_2=\frac{b-a}{2}$$

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

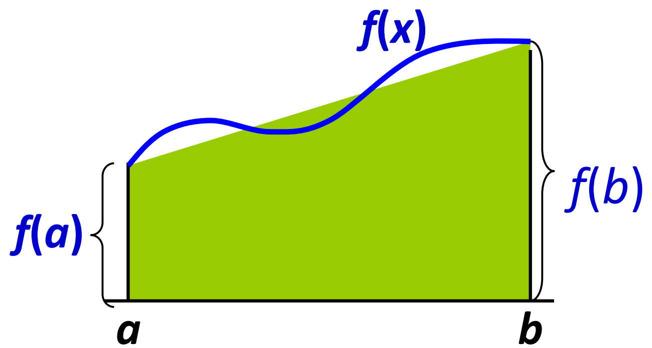
梯形公式

考察其代数精度。



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

解： 逐次检查公式是否精确成立



代入 $L_0 = 1$：

$$\int_a^b 1\,dx = b-a = \frac{b-a}{2}[1+1]$$

代入 $L_1 = x$：

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

代入 $L_2 = x^2$：

$$\int_a^b x^2 dx = \frac{b^3-a^3}{3} \neq \frac{b-a}{2}[a^2+b^2]$$

得代数精度 = 1

算例：

试确定下面积分公式中的参数使其代数精确度尽量高.

$$I = \int_0^h f(x)dx$$

$$\approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)] = I'$$

算例： 试确定下面积分公式中的参数使其代数精确度尽量高.

$$I=\int_0^h f(x)dx\approx\frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I'$$

解：

$$f(x)=x^0 \Rightarrow I=\int_0^h x^0 dx=h \qquad I_2=h$$

$$f(x)=x^1 \Rightarrow I=\int_0^h x^1 dx=\frac{h^2}{2} \qquad I_2=\frac{h^2}{2}$$

$$f(x)=x^2 \Rightarrow I=\int_0^h x^2 dx=\frac{h^3}{3}$$

$$I_2=\frac{h^3}{2}+ah^2[0-2h]=(\frac{1}{2}-2a)h^3$$

令 $I=I_2 \Rightarrow a=\frac{1}{12}$

$$I=\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I_2$$

$f(x)=x^3 \Rightarrow$

$$I=\int_0^h x^3 dx=\frac{h^4}{4} \qquad I_2=\frac{h^4}{2}+ah^2[0-3h^2]=\frac{h^4}{4}$$

$f(x)=x^4 \Rightarrow$

$$I=\int_0^h x^4 dx=\frac{h^5}{5} \qquad I_2=\frac{h^5}{2}+ah^2[0-4h^3]=\frac{h^5}{6}$$

因此 $\quad I(x^j)=I_2(x^j) \quad j=0,1,2,3$

$$I(x^4)\neq I_2(x^4)$$

由此得该积分公式具有 3 次代数精确度.

类似地，可以证明矩形公式具 0 次代数精度

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

可以证明 Simpson公式具 3 次代数精度.

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

插值求积法

近似计算 $I=\int_a^b f(x)dx$

思路　利用插值多项式 $P_n(x)\approx f(x)$, 则定积分容易计算。

利用插值多项式来构造数值求积公式, 具体步骤如下:

在 $[a, b]$ 上取 $a \le x_0 < x_1 <\ldots< x_n \le b$，做 f 的 n 次插值多项式 $L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$,

即得到

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

近似计算 $I=\int_a^b f(x)dx$

思路 利用插值多项式 $P_n(x)\approx f(x)$，则定积分容易计算。

利用插值多项式来构造数值求积公式, 具体步骤如下:

在 $[a, b]$ 上取 $a\le x_0<x_1<\ldots<x_n\le b$，做 f 的 n 次插值多项式 $L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$,

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

A_k

$$A_k=\int_a^b\prod_{k\neq j}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}dx$$

由节点决定，与 $f(x)$ 无关。

不同的插值方法有不同的基函数

插值求积法 - 余项

误差: $$R[f]=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$$

$$=\int_a^b [f(x)-L_n(x)]dx=\int_a^b R_n(x)dx$$

$$=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)\,dx$$

$$|R[f]|\le\int_a^b\left|\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)\right|dx$$

$$\le\frac{M}{(n+1)!}\int_a^b|\omega_{n+1}(x)|\,dx$$

$$if\ \max_{x\in[a,b]}\left|f^{(n+1)}(x)\right|=M$$

定理　$N+1$ 个节点的求积公式为插值型 $\Longleftrightarrow$ 该求积公式至少有 N 次代数精度.

定理 ***n*+1** 个节点的求积公式为插值型 $\Leftrightarrow$

该求积公式至少有 ***n*** 次代数精度.

证明 由插值余项定理得，插值型求积公式的余项为

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

式中 ξ 与变量 x有关, $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$.

按此余项公式，对于次数不超过 n 的多项式 $f(x)$，余项 $R[f]$ 等于零，求积公式至少具有 n次代数精度。

定理 $n+1$ 个节点的求积公式为插值型 $\Leftrightarrow$ 该求积公式至少有 n 次代数精度.

证明 反之，若求积公式至少具有 n次代数精度，则必定是插值型的。因为求积公式对 n 次多项式是精确成立的:

$$\int_a^b l_k(x)dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j) = A_k \qquad \blacksquare$$

例1.　　给定求积节点$x_0=1/4$, $x_1=3/4$,试推出计算积分$\int_0^1 f(x)\,dx$的插值型求积公式，并写出其截断误差.

解：因要求所构造的求积公式是插值型的，故其系数

$$A_0=\int_0^1 l_0(x)dx=\int_0^1 \frac{x-3/4}{x_0-x_1}dx=\int_0^1 -\frac{1}{2}(4x-3)dx=\frac{1}{2}$$

$$A_1=\int_0^1 l_1(x)dx=\int_0^1 \frac{x-1/4}{x_1-x_0}dx=\int_0^1 \frac{1}{2}(4x-1)dx=\frac{1}{2}$$

故求积公式为$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{2}[f(\frac{1}{4})+f(\frac{3}{4})]$

若$f''(x)$在[0, 1]上存在，则该求积公式的截断误差为

$$R(f)=\int_0^1 f(x)dx-\frac{1}{2}[f(\frac{1}{4})+f(\frac{3}{4})]=\int_0^1 f(x)dx-\int_0^1 p_1(x)dx$$

$=\int_0^1 \frac{1}{2}f''(\xi)(x-\frac{1}{4})(x-\frac{3}{4})dx, \xi\in(0,1)$,$p_1$是线性插值函数.

例2.　　已知$x_0=1/4$, $x_1=1/2$, $x_2=3/4$.则

(1)推导以x_0, x_1, x_2在$[0, 1]$上的插值型求积公式；

(2)指明求积公式所具有的代数精度；

(3)用所求公式计算$\int_0^1 x^2 dx$

解：过这3个点的插值多项式

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)$$

$$+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)=\sum_{k=0}^{2}l_k(x)f(x_k),$$

故$\int_0^1 f(x)dx \approx \int_0^1 p_2(x)dx=\sum_{k=0}^{2}A_k f(x_k)$

其中

$$A_0=\int_0^1 l_0(x)dx=\int_0^1\frac{(x-1/2)(x-3/4)}{(1/4-1/2)(1/4-3/4)}dx=2/3$$

$$A_1=\int_0^1 l_1(x)dx=\int_0^1\frac{(x-1/4)(x-3/4)}{(1/2-1/4)(1/2-3/4)}dx=-1/3$$

$$A_2=\int_0^1 l_2(x)dx=\int_0^1\frac{(x-1/4)(x-1/2)}{(3/4-1/4)(3/4-1/2)}dx=2/3$$

故所求的插值型求积公式为

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

(2) 上述求积公式是由二次插值函数积分而来，故至少具有2次代数精度。再将$f(x)=x^3, x^4$代人上述求积公式

$$\frac{1}{4}=\int_0^1 x^3dx=\frac{1}{3}[2(\frac{1}{4})^3-(\frac{1}{2})^3+2(\frac{3}{4})^3]$$

$$\frac{1}{5}=\int_0^1 x^4dx\neq\frac{1}{3}[2(\frac{1}{4})^4-(\frac{1}{2})^4+2(\frac{3}{4})^4]$$

故上述求积公式具有3次代数精确度.

（3） $$\int_0^1 x^2dx=\frac{1}{3}[2(\frac{1}{4})^2-(\frac{1}{2})^2+2(\frac{3}{4})^2]=\frac{1}{3}$$

由于该求积公式具有3次代数精度，从而$\frac{1}{3}$为

$\int_0^1 x^2dx$的精确值.

二、Newton-Cotes公式

Newton-Cotes数值求积公式

Newton-Cotes公式是指等距节点下使用Lagrange插值多项式建立的数值求积公式

设函数 $$f(x) \in C[a,b]$$

将积分区间[*a*, *b*]分割为*n*等份

各节点为 $$x_k = a + kh \quad , \quad k = 0,1,\cdots,n$$

$$h = \frac{b-a}{n}$$ 为步长

f(*x*)的 *Lagrange* 的插值多项式及余项分别为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x) \quad R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

其中 $l_k(x)=\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}$ $\xi\in[a,b]$ $\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$

而 $f(x)=L_n(x)+R_n(x)$

因此对于定积分 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$

有 $I(f)=\int_a^b f(x)dx=\int_a^b [L_n(x)+R_n(x)]dx$

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

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

其中 $$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx$$

令

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$ n阶Newton-Cotes求积公式

$$R(I_n)=\int_a^b R_n(x)dx$$ Newton-Cotes公式的余项(误差)

即有 $$I(f)=I_n(f)+R(I_n)$$ $$I(f)\approx I_n(f)$$

A_k计算:

$\boxed{\text{注意是等距节点}}$

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{0\le j\le n \\ j\ne k}} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx$$

假设 $x = a + th$ 由 $x \in [a,b]$ 可知 $t \in [0,n]$

$$A_k = \int_a^b \prod_{\substack{0\le j\le n \\ j\ne k}} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} dx = \int_0^n \left(\prod_{\substack{0\le j\le n \\ j\ne k}} \frac{(t-j)h}{(k-j)h} \right) \cdot h \cdot dt$$

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

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

$$A_k \triangleq (b-a)\cdot\boxed{C_k^{(n)}}$$

$C_k^{(n)}$为Cotes系数

所以Newton-Cotes公式化为

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

使用n次Lagrange插值多项式的Newton-Cotes公式至少具有n次代数精度,并且n为偶数时至少具有n+1次代数精度

柯特斯(*Cotes*)系数$C_k^{(n)}$可用上面的式子或查表获得。

n	$C_k^{(n)}$						
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$				
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$			
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$		
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

低阶Newton-Cotes公式及其余项

在Newton-Cotes公式中,n=1,2,4时的公式是最常用也最重要三个公式,称为低阶公式

1.梯形(trapezoid)公式及其余项

取$n=1$,有$x_0=a$, $x_1=b$, $h=b-a$

Cotes系数为

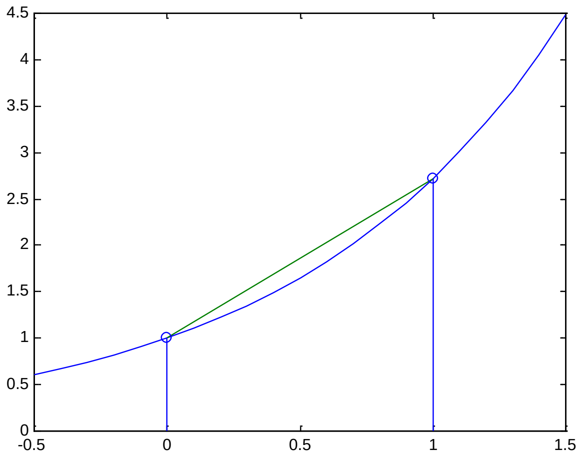
$$C_0^{(1)}=-\int_0^1(t-1)dt=\frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)}=\int_0^1 t\,dt=\frac{1}{2}$$

求积公式为

$$I_1(f) = (b-a)\sum_{k=0}^{1} C_k^{(1)} f(x_k)$$

$$= \frac{b-a}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$$



即 $$I_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

上式称为**梯形求积公式**, 也称**两点公式**，记为

$$T = I_1(f) = \frac{(b-a)}{2}[f(a) + f(b)]$$

梯形公式的余项为

$$R(T) = R(I_1) = \int_a^b R_1(x)dx$$

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$
$$=f[x,x_0,\ldots,x_n]\omega_{n+1}(x)$$

$$R(T)=\int_a^b f[x,a,b](x-a)(x-b)dx$$

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

积分第二中值定理

均差性质

$$=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx \qquad \eta\in[a,b]$$

$$=-\frac{f''(\eta)}{2}\frac{(b-a)^3}{6}=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

故 $|R(T)|\le\frac{(b-a)^3}{12}M_2 \qquad M_2=\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|$

梯形(trapezia)公式具有 **1** 次代数精度。

积分第二中值定理：

设在区间[*a*, *b*]上函数*f* (*x*)连续，而函数*φ*(*x*)可积且不变号，则在开区间(*a*, *b*)内至少存在一点ξ，使

$$\int_a^b f(x)\cdot\varphi(x)dx = f(\xi)\int_a^b \varphi(x)dx \quad \xi\in(a,b)$$

均差性质：

$$f[x,x_0,\ldots,x_n]\omega_{n+1}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

$$\Rightarrow f[x,x_0,\ldots,x_k]=\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}, \quad \xi\in(x_{\min},x_{\max})$$

2. Simpson公式及其余项

取$\boldsymbol{n=2}$,有$\boldsymbol{x_0=a\ ,\ x_1=\dfrac{b+a}{2}\ ,x_2=b\ ,h=\dfrac{b-a}{2}}$

Cotes系数为

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

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

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

求积公式为

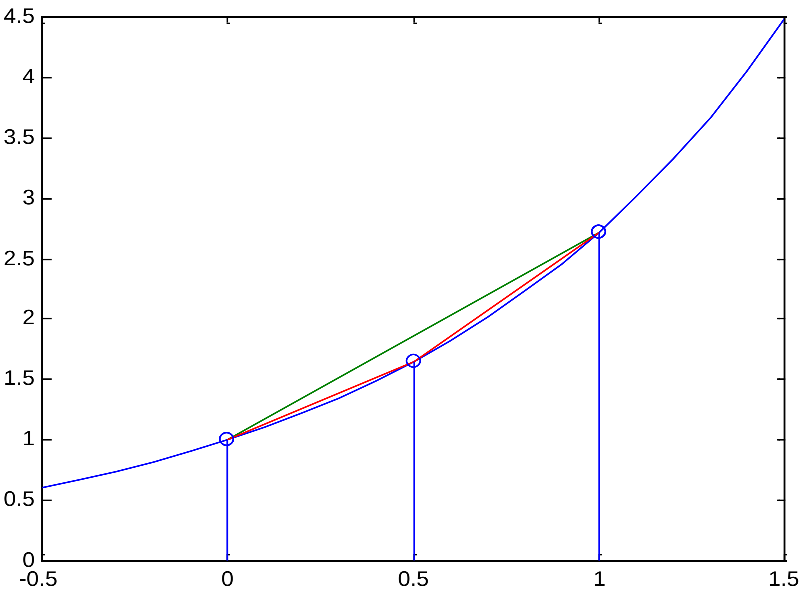
$$I_2=(b-a)\sum_{k=0}^{2}C_k^{(2)}f(x_k)$$

$$I_2(f) = (b-a)[\frac{1}{6}f(x_0)+\frac{4}{6}f(x_1)+\frac{1}{6}f(x_2)]$$

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

上式称为**Simpson求积公式**，也称**三点公式或抛物线公式**

记为 $S = I_2(f)$



Simpson公式的余项为

$$R(S) = R(I_2) = \int_a^b R_2(x)dx$$

$$= -\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\eta)$$

Simpson公式具有 3 次代数精度。

3. Cotes公式及其余项

取$n=4$,有 $x_k=a+kh\,,\,k=0,1,\cdots,4\,,\,h=\dfrac{b-a}{4}$

Cotes系数为

$$C_0^{(4)}=\frac{1}{4\cdot4!}\int_0^4(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)dt=\frac{7}{90}$$

$$C_1^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot3!}\int_0^4 t(t-2)(t-3)(t-4)dt=\frac{32}{90}$$

$$C_2^{(4)}=\frac{1}{4\cdot2!\cdot2!}\int_0^4 t(t-1)(t-3)(t-4)dt=\frac{12}{90}$$

$$C_3^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot3!}\int_0^4 t(t-1)(t-2)(t-4)dt=\frac{32}{90}$$

$$C_4^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot4!}\int_0^4 t(t-1)(t-2)(t-3)dt=\frac{7}{90}$$

求积公式为

$$I_4(f)=(b-a)\sum_{k=0}^{4}C_k^{(4)}f(x_k)$$

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

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

上式称为**Cotes求积公式**，也称**五点公式**　记为 $C=I_4(f)$

Cotes公式的余项为

$$R(C)=R(I_4)=\int_a^b R_4(x)dx=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

Cotes公式具有5次代数精度。

例. 分别用梯形公式、辛普生公式和柯特斯公式

计算积分$I = \int_{0.6}^{1} \frac{1}{1+x^2} dx$。

解：

由梯形公式得

$$I \approx T = \frac{1-0.6}{2}\left[\frac{1}{1+0.6^2} + \frac{1}{1+1^2}\right] = 0.2470588$$

由辛普生公式得

$$I \approx S = \frac{1-0.6}{6}\left[\frac{1}{1+0.6^2} + 4\frac{1}{1+0.8^2} + \frac{1}{1+1^2}\right] = 0.2449546$$

由柯特斯公式得

$$I \approx C = \frac{1-0.6}{90}\left[7\frac{1}{1+0.6^2}+32\frac{1}{1+0.7^2}+12\frac{1}{1+0.8^2}\right.$$

$$\left.+32\frac{1}{1+0.7^2}+7\frac{1}{1+1^2}\right]=0.2449787$$

事实上，积分的精确值

$$I=\int_{0.6}^{1}\frac{1}{1+x^2}dx = arctg\ \ x\Big|_{0.6}^{1} = 0.24497866...$$

比较可以看到：

柯特斯公式的结果最好，

具有七位有效数字；

辛普生公式次之，

计算结果具有四位有效数字；

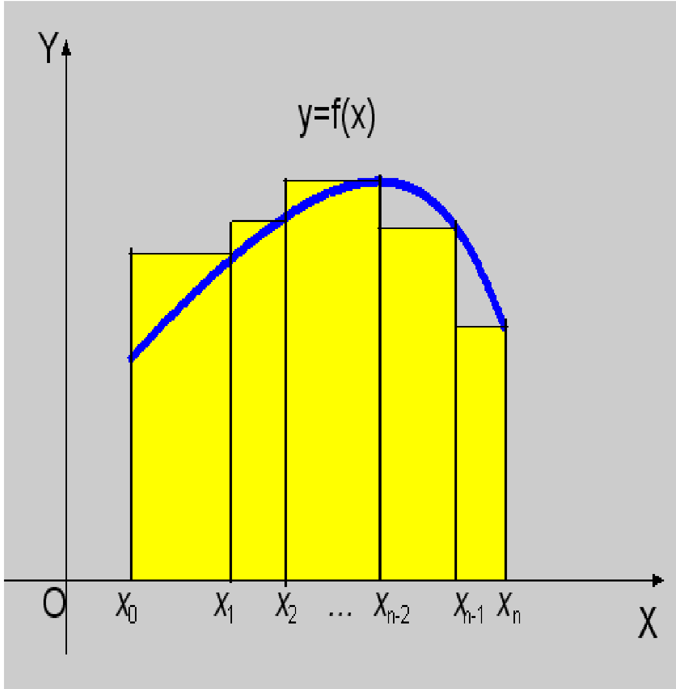
而梯形公式的结果只有两位有效数字。

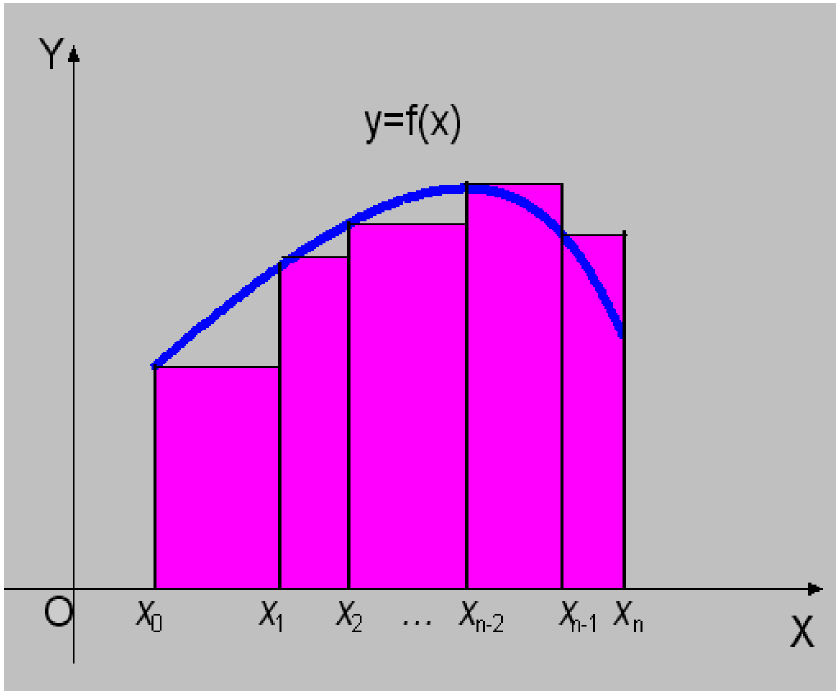
三、复化求积公式

复化求积公式

高次插值有**Runge** 现象，故采用分段低次插值

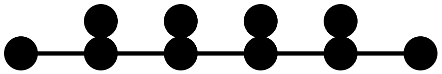
$\Rightarrow$ 分段低次合成的 ***Newton-Cotes*** 复化求积公式。





➢ 复化梯形公式： $h=\dfrac{b-a}{n}$， $x_k=a+k\,h \quad (k=0,\ldots,n)$

在每个 $[x_{k-1},x_k]$ 上用梯形公式：



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

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

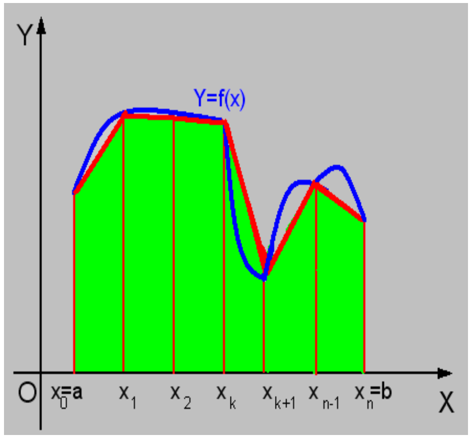
余项：

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

而 $\min\limits_{a\le x\le b} f''(x) \le \sum\limits_{k=0}^{n-1}\dfrac{f''(\xi_k)}{n} \le \max\limits_{a\le x\le b} f''(x)$

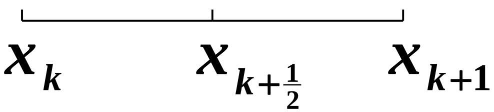
由介值定理知：$\exists\xi\in(a,b)$ 使 $f''(\xi)=\sum\limits_{k=0}^{n-1}\dfrac{f''(\xi_k)}{n}$

即有： $R[f]=-\dfrac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)$



➤ 复化 Simpson 公式： $h=\dfrac{b-a}{n},\ x_k=a+kh \quad (k=0,\dots,n)$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f(x_{k+\frac12})+f(x_{k+1})\right]$$



$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac12})+2\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1})+f(b)\right] = S_n$$

$$R[f] = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left(f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right)$$

注：为方便编程，可采用另一记法：令 $n'=2n$ 为偶数，

这时 $h'=\dfrac{b-a}{n'}=\dfrac{h}{2},\ x_k=a+kh'$，有

$$S_n=\frac{h'}{3}\left[f(a)+4\sum_{odd\ k} f(x_k)+2\sum_{even\ k} f(x_k)+f(b)\right]$$

例1: 分别利用复化梯形公式和复化Simpson公式计算积分：

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

积分的相对精确值为 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx \approx 0.94608309$

解：设 $x_i = ih \quad i=0,1,\cdots,8$ 　步长 h=1/8

运算量基本相同

$$T_8=\frac{h}{2}\left[f(0)+2f(x_1)+\cdots+2f(x_7)+f(1)\right]$$

=0.94569086

$$S_4=\frac{h}{3}\{f(0)+4[f(x_1)+f(x_3)+f(x_5)+f(x_7)]$$
$$+2[f(x_2)+f(x_4)+f(x_6)]+f(1)\}$$

=0.94608331

➢复化求积法的余项和收敛阶：

复化梯形（*Trapezoid*）公式的余项：

$$I - T_n = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{h^3}{12} f''(\xi_k)\right] = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi) \quad \xi \in (a,b)$$

复化辛甫生（*Simpson*）公式的余项：

$$I - S_n = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi_k)\right] = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) \quad \xi \in (a,b)$$

复化柯特斯（*Cotes*）公式的余项：

$$I - C_n = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{2h}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi_k)\right]$$

$$= -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi) \quad \xi \in (a,b)$$

先看复化梯形公式余项：

$$I - T_n = \sum_{k=1}^{n}[-\frac{h^3}{12} f''(\xi_k)] = -\frac{h^2}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

$$\Rightarrow \frac{I - T_n}{h^2} = -\frac{1}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

当n充分大, $h \to 0$ 时，

$$-\frac{1}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h] \to -\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx = -\frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]$$

即对复化的梯形公式有：$\frac{I - T_n}{h^2} \to -\frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]$

类似地，对于复化的辛甫生公式和柯特斯公式分别有：

$$\frac{I - S_n}{h^4} \to -\frac{1}{180\times 2^4}\left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right]$$

$$\frac{I - C_n}{h^6} \to -\frac{2}{945\times 4^6}\left[f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)\right]$$

定义

若一个积分公式的误差满足 $\lim\limits_{h\to 0}\dfrac{I-I_n}{h^p}=C<\infty$ 且 $C\neq 0$，则称该公式是 **p 阶收敛**的。

$$T_n \sim O(h^2),\ S_n \sim O(h^4),\ C_n \sim O(h^6)$$

而且，当 h 很小时，复化的梯形法、辛甫生法和柯特斯法分别有下列的误差估计式：

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

$$I-S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right]$$

$$I-C_n \approx -\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right]$$

当步长 h 折半时，$R(T)$, $R(S)$, $R(C)$ 分别减至原有误差的 **1/4,1/16,1/64**

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

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

$S_4 = \frac{1}{24}\left[f(0) + 4\sum_{\text{odd}} f(x_k) + 2\sum_{\text{even}} f(x_k) + f(1) \right]$ 其中 $x_k = \frac{k}{8}$

= 3.141592502

上例中若要求 $|I - T_n| < 10^{-6}$，则 $|R_n[f]| \approx \frac{h^2}{12}|f'(1) - f'(0)| = \frac{h^2}{6} < 10^{-6}$

$\Rightarrow h < 0.00244949$ 即：取 $n = 409$

通常采取将区间不断对分的方法，即取 $n = 2^k$

上例中$2^k \geq 409 \Rightarrow k = 9$ 时，$T_{512} = 3.141592018$

– 步长自动选取的步骤:

1. 取$n=1$, $h_1=b-a$,计算I_1

步长折半,取$n=2$, $h_2=\frac{1}{2}h_1$,计算I_2和$\Delta=\frac{1}{p}|I_2-I_1|$

不同的方法P
取不同的值

若$\Delta<\varepsilon$,停止计算,$I=I_2$,否则

2. 步长折半,取$n=4$, $h_4=\frac{1}{2}h_2$,计算I_4和$\Delta=\boxed{\frac{1}{p}}|I_4-I_2|$

若$\Delta<\varepsilon$,停止计算,$I=I_4$,否则

直到$\Delta<\varepsilon$,停止计算,$I=I_{2^k}$

有时也去掉
精度会更高

以上这种方法称为自适应求积法

– 以复合*Simpson*求积公式的特点为例

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

具有以下特点：

$s0 = f(a) + f(b)$的系数总是1

$s1 = f(x_k)$的和的系数总是2

$s2 = f(x_{k+\frac{1}{2}})$的和的系数总是4

旧节点

新节点

步长折半

例：利用递推公式 $T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{b-a}{2n}\sum_{k=1}^{n}f\left[a+(2k-1)\frac{b-a}{2n}\right]$

计算$\pi=\int_0^1\frac{4}{1+x^2}dx$的近似值，使误差不超过$10^{-6}$。

解：

n	T_n	n	T_n
1	3	32	3.14142989
2	3.1	64	3.14155196
4	3.13117647	128	3.14158248
8	3.13898849	256	3.14159011
16	3.14094161	512	3.14159202

因为$\left|T_{512}-T_{256}\right|<3\varepsilon'$，

故$T_{512}=3.14159202$为满足精度要求的近似解。

变步长求积公式及其加速收敛技巧

Q: 给定精度 ε，如何取 n？

实际计算中常采用变步长的计算方案，即在步长逐次分半（即步长二分）的过程中，反复利用复化求积公式计算，直至所求积分值满足精度要求为止。

➢ 复化梯形公式的递推化：

将求积区间[*a*, *b*]分成*n*等分，一共有 *n*+1 个分点，

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

将求积区间再二分一次，则分点增至 2*n*+1 个，

每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 二分后用复化梯形公式求的积分值为：

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

h=(*b*- *a*)/*n*代表二分前的步长。

将每个子区间上的积分值相加得：

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

比较T_n和T_{2n}得下列梯形递推公式：

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

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

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

直接用计算结果来估计误差的方法称为事后误差估计法

递推梯形公式加上一个控制精度,即可成为自动选取步长的复化梯形公式。

■例:用变步长复化梯形法计算

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

n	T_n	n	T_n
1	0.92073549240395	128	0.94608153854315
2	0.93979328480618	256	0.94608268741135
4	0.94451352166539	512	0.94608297462823
8	0.94569086358270	1024	0.94608304643245
16	0.94598502993439	2048	0.94608306438350
32	0.94605856096277	4096	0.94608306887126
64	0.94607694306006	精确值	0.94608307036718

龙贝格积分（外推加速公式）/* Romberg Integration */

由 $I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$ 可知： T_{2n} 的误差大致等于 $\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$

用这个误差值作为的 T_{2n} 一种补偿，可以期望所得到的

$$\overline{T}=T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$$ 可能是更好的结果。

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

已知对于 $\varepsilon=10^{-6}$ 须将区间对分 9 次，得到 $T_{512}=3.141592018$

而 $T_4=3.131176471$ $T_8=3.138988494$

的精度都很差（与准确值3.14159265比较）

由 $I\approx\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$ 来计算 I 效果是否好些？

$$\frac{4}{3}T_8-\frac{1}{3}T_4=3.141592502=S_4$$

再考察辛甫生法，由误差公式： $I - S_n \approx -\dfrac{1}{180}\left(\dfrac{h}{2}\right)^4\left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right]$

其截断误差大致与h^4成正比，因此：

$$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16} \Rightarrow I - S_{2n} \approx \frac{1}{16-1}(S_{2n} - S_n) \Rightarrow I \approx \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$$

不难直接验证： $\dfrac{16}{15}S_{2n} - \dfrac{1}{15}S_n = C_n$

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

- Romberg 算法：

① $T_1 = T_0^{(0)}$ $<\varepsilon$?

② $T_2 = T_0^{(1)}$ ③ $S_1 = T_1^{(0)}$ $<\varepsilon$?

④ $T_4 = T_0^{(2)}$ ⑤ $S_2 = T_1^{(1)}$ ⑥ $C_1 = T_2^{(0)}$ $<\varepsilon$?

⑦ $T_8 = T_0^{(3)}$ ⑧ $S_4 = T_1^{(2)}$ ⑨ $C_2 = T_2^{(1)}$ ⑩ $R_1 = T_3^{(0)}$

… … … … … …

上述加速过程还可继续下去，其理论依据是下面要介绍的 理查德森外推加速方法。

算例：用***Romberg***积分法求解定积分：

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

误差容限：**1.0e-6**　准确值：**π*=3.14159265358979**

T_1	3.000000000	0	0	0	0
T_2	3.100000000	3.133333333	0	0	0
T_4	3.131176471	3.141568628	3.142117647	0	0
T_8	3.138988495	3.141592503	3.141594094	3.141585784	0
T_{16}	3.140941612	3.141592651	3.141592661	3.141592638	3.14159266

Richardson逐次外推法加速法

(龙贝格算法一般化)

$$T_0^{(0)} = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$$T_0^{(k)} = \frac{1}{2}\left[T_0^{(k-1)} + \frac{b-a}{2^{k-1}}\sum_{i=0}^{2^{k-1}} f(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^k})\right], \qquad (k=1,2,\cdots)$$

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1} \qquad (m=1,2,\ldots,k;\quad k=1,2,\ldots)$$

停止准则: $|T_m^{(0)}-T_{m-1}^{(0)}|<\varepsilon$ (ε容许误差)

Richardson逐次外推法加速法计算格式

	T	S	C	R	
k	m=0	m=1	m=2	m=3	…
0	$T_0^{(0)}$	$T_1^{(0)}$	$T_2^{(0)}$	$T_3^{(0)}$	
1	$T_0^{(1)}$	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(1)}$		
2	$T_0^{(2)}$	$T_1^{(2)}$			
3	$T_0^{(3)}$				
误差	O(h^2)	O(h^4)	O(h^6)	O(h^8)	
系数	4,-1	4^2,-1	4^3,-1	4^4,-1	

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}$$

(m=1,2,$\cdots$,k； k=1,2,$\cdots$)

$|T_m^{(0)}-T_{m-1}^{(0)}|<\varepsilon$,停止

四、高斯(Gauss)型求积公式

- 问题
  - n次插值构造的插值求积公式至少有n次代数精确度.
  - 那么, 最高能达多少次, 又如何达到.

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

以f(x)=*1, x, x^2,..., x^m*代入，令左右相等，考察

最高的m是多少. 这里x_k, A_k待定。有方程组：

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + \cdots + A_n = \mu_0 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \cdots + A_n x_n = \mu_1 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 + \cdots + A_n x_n^2 = \mu_2 \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ A_0 x_0^m + A_1 x_1^m + \cdots + A_n x_n^m = \mu_m \end{cases} \quad (*4)$$

其中:

$$\mu_k = \int_a^b x^k dx,$$

$$k = 0,1,\cdots m$$

这里有2n+2个待定系数, 可以对应2n+2个方程. ∴ m=2n+1

$\therefore$ 选取适当的节点 $x_k \quad (k=0,1,\cdots n)$

可以使上述求积公式具有2n+1次代数精度，这种高精度的求积公式称为**高斯 (Gauss) 公式**，高斯公式的节点 $x_k \quad (k=0,1,\cdots n)$称为**高斯点**。

例：构造区间(-1,1)上的2点Gauss求积公式:

解：n=1, 2n+1=3, 求积公式具有3次代数精度

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

设$f(x)=1$, $\quad 2=\int_{-1}^{1} 1dx = A_0 + A_1$

设$f(x)=x$, $\quad 0=\int_{-1}^{1} xdx = A_0 x_0 + A_1 x_1$

设$f(x)=x^2$, $\quad \frac{2}{3}=\int_{-1}^{1} x^2 dx = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2$

设$f(x)=x^3$, $\quad 0=\int_{-1}^{1} x^3 dx = A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3$

解之:

$$x_0, x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$A_0 = A_1 = 1$$

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

高斯点的基本特性

尽管高斯点的确定原则上可以化为代数问题，但是由于所归结的方程组(*4)是非线性的，求解困难。所以我们要由高斯点的特性解决高斯公式的构造问题。

设 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$ 是求积公式 $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$ 中的节点，令 $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

定理4 节点 x_k (k=0,1, ... , n)是高斯点的充要条件是$\omega(x)$与一切次数 $\le n$ 的多项式$P(x)$正交，即成立:

$$\int_a^b P(x)\omega(x)dx=0$$

证明 必要性： 设$\{x_k\}$是Gauss点，则求积公式是Gauss公式，代数精度为2n+1。

令P(x)是次数不超过n的任意多项式，则P(x)ω(x)次数不超过2n+1，求积公式精确成立。即：

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

因为$\omega(x_k)=0$，所以上式右端为0，从而P(x)与ω(x)正交。

充分性：设ω(x)与次数不超过n的任意多项式P(x)正交, 即：

$$\int_a^b P(x)\omega(x)dx = 0$$

任取次数不超过2n+1的多项式f(x)，用ω(x)除以f(x)，得

$$f(x) = p(x)\omega(x) + q(x)$$

其中$p(x)$是商式，$q(x)$为余式，均不超过n次。

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p(x)\omega(x)dx + \int_a^b q(x)dx = \int_a^b q(x)dx \quad (**)$$

因为求积公式 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 是插值型的，至少有n次代数精度，而 $q(x)$ 不超过n次，所以，

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

由 $f(x) = p(x)\omega(x) + q(x)$ 及 $\omega(x_k) = 0$ 得 $f(x_k) = q(x_k)$.

因此，$\int_a^b q(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$，由（**）得：

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

即，求积公式对一切不超过2n+1次多项式均准确成立，所以$\{x_k\}$是Gauss点。

(-1,1) 的Legendre 正交多项式: $\{P_k(x)\}$ k=0,1,2,...

取n+1次Legendre正交多项式$P_{n+1}(x)$, 可以证明

定理: $P_{n+1}(x)$与任意不超过n次的多项式P(x)正交.

实际上, 上述P(x)可以表示为1~n次Legendre多项式

$P_1(x)$, $P_2(x)$, ..., $P_n(x)$的线性组合, $P(x)=\sum_{i=0}^{n} k_i \cdot P_i(x)$

而$P_{n+1}(x)$与$P_1(x)$, $P_2(x)$, ..., $P_n(x)$正交,

$$\therefore \ (P(x),\ P_{n+1}(x)) = (\sum_{k=0}^{n} c_k P_k(x),\ P_{n+1}(x)) = \sum_{k=0}^{n} c_k (P_k(x),\ P_{n+1}(x)) = 0$$

即, $P_{n+1}(x)$与任意不超过n次的多项式P(x)正交.

$\therefore$ Legendre多项式$P_{n+1}(x)$的零点$x_0, x_1, \ldots, x_n$为Gauss点

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

取(-1,1)区间上的n+1次Legendre正交多项式的零点(x_k可以查表得到)为Gauss点,代入方程组(*4),只需求解关于A_0, A_1, ... , A_n 的线性方程组 (A_k也可以查表得到). 从而可以构造区间 (-1,1) 上的Gauss求积公式.

Gauss-Legendre求积公式

取$\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ 为n+1次Legendre多项式的零点.

便有: $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

余项: $R(f) = \dfrac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3} \cdot f^{(2n+2)}(\xi), \quad |\xi| < 1$

n	x_k	A_k	R(f)
1	± 0.5773502692	1	$\frac{1}{135} f^{(4)}(\eta)$
2	± 0.7745966692	0.555555…	$\frac{1}{15750} f^{(6)}(\eta)$
	0	0.888888…	

n	x_k	A_k	R(f)
3	$\pm$ 0.8611363116	0.3478548451	$2.879\times10^{-7}\cdot f^{(8)}(\eta)$
	$\pm$ 0.3399810436	0.6521451549	
4	$\pm$0.9061798459	0.2369268851	$8.079\times10^{-10}\cdot f^{(10)}(\eta)$
	$\pm$0.5384693101	0.4786286705	
	0	0.5688888889	
5	$\pm$0.9324695142	0.1713244924	$1.541\times10^{-12}\cdot f^{(12)}(\eta)$
	$\pm$0.6612093865	0.3607615730	
	$\pm$0.2386191861	0.4679139346	

一般区间［a,b］的积分

由变换 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$， 将(a,b)化为 [-1,1]

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

再关于t的函数用[-1,1]上Gauss积分公式.

例：用Gauss-Legendre求积公式 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

计算 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$

解：$a=0, b=1, f(x)=\frac{\sin x}{x}$， 令：$g(t) = f(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}) = 2\frac{\sin\frac{t+1}{2}}{t+1}$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} g(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^{n} A_k g(x_k)$$

n	I_n	$\vert I_n - I\vert$
1	0.94604113690	$4.19335 \cdot 10^{-5}$
2	0.94608313408	$6.37113 \cdot 10^{-8}$
3	0.94608307031	$5.81822 \cdot 10^{-11}$
4	0.946083070372	$4.59288 \cdot 10^{-12}$

精确值： 0.94608307036718...

带权的Gauss公式

需要讨论$\int_a^b \rho(x) f(x)dx$，$\rho(x) \geq 0$为权函数.

建立形如 $\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的积分公式. 主要有:

1) $(a, b) = (-1, 1)$, $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, 建立$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

称为Gauss-Chebyshev求积公式

2) $(a, b) = (0, +\infty)$, $\rho(x) = e^{-x}$, 建立$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

称为Gauss-Laguerre求积公式

3) $(a, b) = (-\infty, +\infty)$, $\rho(x) = e^{-x^2}$, 建立$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

称为Gauss-Hermite求积公式

Gauss-Chebyshev求积公式

(-1,1)　ρ= $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

取{ x_k } 为n+1次Chebyshev多项式的零点.

$$x_k = \cos(\frac{2k+1}{2n+2}\pi)\text{，}\ A_k = \frac{\pi}{n+1} \quad (k=0,1,\ldots,n)$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \cdot f(x)dx \approx \frac{\pi}{n+1}\sum_{k=0}^{n} f\left(\cos(\frac{2k+1}{2n+2}\pi)\right)$$

余项:　$R(f) = \frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi),\ |\xi| < 1$

Gauss-Laguerre求积公式

$(0, +\infty)$, $\rho=e^{-x}$

取$\{x_k\}(k=0,1,\ldots,n)$ 为n+1次Laguerre多项式

$$L_{n+1}(x)=\mathrm{e}^{x}\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}x^{n+1}}(x^{n+1}\mathrm{e}^{-x})$$ 的零点.

得到: $\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-x}f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$

$$R(f)=\frac{[(n+1)!]^2}{(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\xi),\quad \xi>0$$

x_k (Laguerre多项式的零点), A_k均可查表:

Gauss-Laguerre求积公式 x_k与A_k

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
0	1	1		4.5366202969	0.0388879085
1	0.5857864376	0.8535533906		9.3950709123	0.0005392947
	3.4142135624	0.1464466094	4	0.2635603197	0.5217556106
2	0.4157745568	0.7110930099		1.4134030591	0.3986668111
	2.2942803603	0.2785177336		3.5964257710	0.0759424497
	6.2899450829	0.0103892565		7.0858100059	0.0036117587
3	0.3225476896	0.6031541043		12.6408008443	0.0000233700
	1.7457611012	0.3574186924			

例. 用n=3的Guass-Laguerre求积公式计算

$$\int_0^{+\infty} e^{-x}\cos x dx$$ 并与准确值比较.

解: $\int_0^{+\infty} e^{-x}\cos x dx = 0.5$ 为精确值.

$$n=3,\quad \int_0^{+\infty} e^{-x}\cos x dx = \sum_{k=0}^{3} A_k \cos x_k .$$

$\{x_k\}$, $\{A_k\}$ 如下:

$x_0 := 0.32254769$ $A_0 := 0.60315410$

$x_1 := 1.74576110$ $A_1 := 0.35741869$

$x_2 := 4.53662030$ $A_2 := 0.038887909$

$x_3 := 9.39507091$ $A_3 := 0.0005392947$

计算: $I = \sum_{k=0}^{3} A_k \cdot \cos x_k$ I=0.5024937

构造含权积分公式

对一般的$\rho(x)$，构造 $\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的积分公式.

例. 构造 $\int_{-1}^{1}(1+x^2) f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$ 的Gauss型求积公式.

解. n=1, 代数精度=3, 令其对 $f(x)=1, x, x^2, x^3$ 精确成立.

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \int_{-1}^{1}(1+x^2)\cdot 1dx = 8/3 \\ A_0x_0 + A_1x_1 = \int_{-1}^{1}(1+x^2)xdx = 0 \\ A_0x_0^2 + A_1x_1^2 = \int_{-1}^{1}(1+x^2)x^2dx = 16/15 \\ A_0x_0^3 + A_1x_1^3 = \int_{-1}^{1}(1+x^2)x^3dx = 0 \end{cases}$$

解得：$x_0 = -\sqrt{\frac{2}{5}},\ x_1 = \sqrt{\frac{2}{5}}$

$A_0 = \frac{4}{3},\quad A_1 = \frac{4}{3}$

$$\therefore \int_{-1}^{1}(1+x^2) f(x)dx \approx \frac{4}{3} f(-\sqrt{\frac{2}{5}}) + \frac{4}{3} f(\sqrt{\frac{2}{5}})$$

五、数值微分

- 问题: 已知*f(x)*的函数表:

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

求*f(x)*的导数, 称为数值微分.

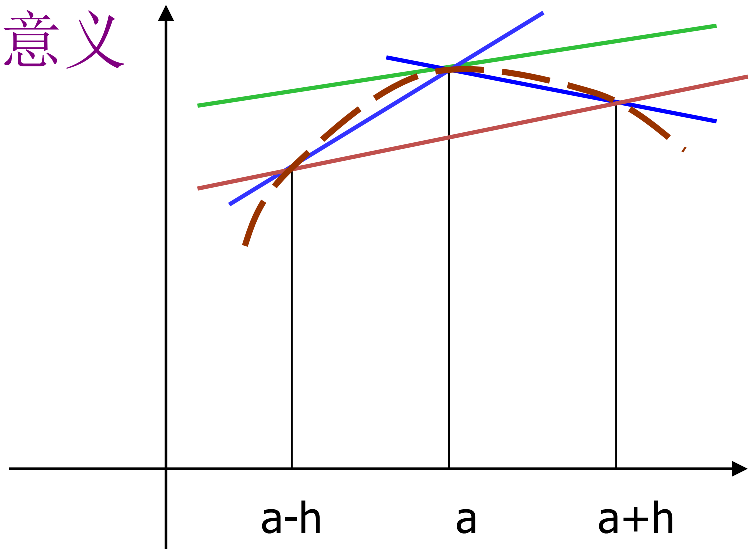
由定义，导数 $f'(a)$ 是差商 $\dfrac{f(a+h)-f(a)}{h}$ 当 $h\to 0$ 时的极限. 于是可用差商作为导数的近似获得一种简单的数值微分方法。如果所用的差商分别为向前、向后以及中心差商，那么我们就可分别建立如下的三种数值公式:

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

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

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

几何意义



插值型的求导公式

已知函数$f(x)$ 在节点 x_k $(k=0,1,\cdots,n)$ 的函数值，作n次插值多项式 $P_n(x)$，并取 $P_n'(x)$的值作为 $f'(x)$ 的近似值，这样建立的数值公式称为

插值型求导公式： $f'(x) \approx P_n'(x)$

注意, 即使$f(x)$ 与$P_n(x)$ 相差不多, 但 $f'(x)$与$P_n'(x)$ 仍可能相差很大. 一般, 我们只用它求节点 x_k 处的导数值, 可使误差较小.

原因:

$$R_I = |f'(x) - P_n'(x)| = R'(x) = \left(\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) \right)'$$

$$= \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \omega_{n+1}'(x) + \frac{f^{(n+1)'}(\xi_x)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x)$$

在节点 x_k 处, $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) = 0$

因此,误差 R_I 只有一项, 因而误差较小.

几个低阶插值型的求导公式

n=1, 两点公式　　已知: x_0, x_1, $f(x_0)$, $f(x_1)$

设 $x_1 - x_0 = h$

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

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

$$\therefore f'(x_0) \approx \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$ (向前差商)

$$f'(x_1) \approx \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$ (向后差商)

n=2, 三点公式 已知: x_0, x_1, x_2, $f(x_0)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$

设 $x_k = x_0 + kh \quad (k=0,1,2)$

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

$$P'_2(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)]$$

$$\therefore f'(x_0)\overset{t=o}{\approx}P'_2(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]$$

$$f'(x_1)\overset{t=1}{\approx}P'_2(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]$$

误差为: $O(h^2)$

$$f'(x_2)\overset{t=2}{\approx}P'_2(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]$$

n=4, 五点公式 已知: $x_0, \ldots, x_4$, $f(x_0), \ldots, f(x_4)$

- 作4次插值多项式$P_4(x)$, 求$P_4'(x)$将$x_0, \ldots, x_4$

  分别代入, 得五点公式:

$$\therefore f'(x_0) \approx P_4'(x_0) = \frac{1}{12h}[-25f(x_0) + 48f(x_1) - 36f(x_2) + 16f(x_3) - 3f(x_4)]$$

$$f'(x_1) \approx P_4'(x_1) = \quad \cdots\cdots$$

二阶导数

n=4, 五点公式　已知: $x_0, \ldots, x_4$, $f(x_0), \ldots, f(x_4)$

作4次插值多项式$P_4(x)$,求 $P_4''(x)$, 将$x_0, \ldots, x_4$分别代入:

$$\therefore f''(x_0) \approx P_4''(x_0) = \frac{1}{12h^2}[35f(x_0) - 104f(x_1) + 114f(x_2) - 56f(x_3) + 11f(x_4)]$$

$$f''(x_1) \approx P_4''(x_1) = \quad \cdots\cdots$$

第四章 习题

P103. 第1大题第（3）小题；第2大题第（1）小题用复合公式；

P104. 第7题改成：

7.若用复化梯形公式计算积分$I=\int_0^1 e^x dx$,问区间[0,1]应分成多少等分才能使截断误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-5}$？若改用复化辛普森公式，要达到同样精度区间[0,1]应分多少等分？

P104. 第11、第12题（误差仅求x=1.0处）