要求

1. 熟练掌握基本的数值积分公式-梯形求积公式、辛普生求积公式和柯特斯求积公式.
2. 掌握三种复化求积公式、变步长积分法、龙贝格积分法
3. 学会待定系数法, 了解高斯型求积公式
4. 熟练掌握插值型数值微分公式, 了解另外三种类型的数值微分法：待定系数法、外推求导法和利用三次样条插值函数的求导法

在科学研究和工程技术中常常需要计算函数$f(x)$的积分或导数.

$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 的近似计算问题。　　不能或者难以积分的问题

- 牛顿-莱布尼茨
- 被积函数$f(x)$是列表函数
- $f(x)$形式简单, 但$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 不能用有限形式表示

$$f(x)=\sqrt{1+x^3},\quad \frac{\sin x}{x},\quad \sin x^2,\quad \frac{1}{\ln x},\quad e^{-x^2}\dots$$

- $I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 有有限形式表示, 但大量数值计算

$$\int_{\sqrt{3}}^{x}\frac{dx}{1+x^4}=\frac{1}{4\sqrt{2}}\ln\frac{x^2+\sqrt{2}+1}{x^2-\sqrt{2}+1}+\frac{1}{2\sqrt{2}}[\arctan(\sqrt{2}+1)$$

$$+\arctan(\sqrt{2}-1)]|_{\sqrt{3}}^{x}$$

设$p(x)$是被积函数$f(x)$的比较简单、易于积分的近似表达式，$f(x) = p(x) + R(x)$ ，则

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b R(x)\,\mathrm{d}x,$$

取积分 $\int_a^b f(x) \approx \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x$. 则截断误差

$$R[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b R(x)\,\mathrm{d}x.$$

若记$I[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x, \quad Q[f] = \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x$,则

$$I[f] = Q[f] + R[f].$$

广义Peano定理`

矩形公式

对于积分$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$，由积分中值定理：$\exists\xi\in(a,b)$使得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=(b-a)f(\xi)$$

- 左矩形公式$I[f]=(b-a)f(a)$
- 中矩形公式$I[f]=(b-a)f(\frac{a+b}{2})$
- 右矩形公式$I[f]=(b-a)f(b)$

牛顿-柯特斯求积公式

被积函数$f(x)$的近似表达式取为拉格朗日插值多项式, 积分

$$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\approx\sum_{i=0}^{n}\Big(\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x\Big)f(x_i)=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)=Q[f],$$

其中$A_i=\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x$

$$=\int_a^b\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\,\mathrm{d}x.$$

$$R[f]=I[f]-Q[f]=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\,\mathrm{d}x.$$

x_i称为**求积节点**, A_i称为**求积系数**, $R[f]$称为**截断误差或积分余项**. 求积公式称为**插值型求积公式**. 当求积节点在区间$[a,b]$上等距分布时, 求积公式称为**牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式**

牛顿-柯特斯求积公式

令$h = \frac{b-a}{n}$, 取$x_i = a + ih\,(i = 0, 1, \cdots, n)$.

令$x = x_0 + th$, 则

$$x - x_i = x_0 + th - (x_0 + ih) = (t - i)h,$$

$$x_i - x_j = x_0 + ih - (x_0 + jh) = (i - j)h.$$

得

$$\boxed{\begin{aligned} A_i &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\,\mathrm{d}x \\ &\overset{x=x_0+th}{=} \frac{(-1)^{n-i}h}{i!\times(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt. \end{aligned}}$$

1) 梯形求积公式$(n=1)$

令 $x_0=a,\quad x_1=b,\quad h=b-a.$ 则

$$A_0=-h\int_0^1 (t-1)\,\mathrm{d}t=\frac{h}{2}=\frac{b-a}{2},$$
$$A_1=h\int_0^1 t\,\mathrm{d}t=\frac{h}{2}=\frac{b-a}{2}.$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\approx Q(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)].$$

利用广义积分中值定理，可得梯形求积公式的截断误差：

拉格朗日插值多项式的截断误差

$$R_1[f]=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x$$
$$=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

2) 辛普生(Simpson)求积公式$(n=2)$

令 $h=\dfrac{b-a}{2},\quad x_0=a,\quad x_1=a+h=\dfrac{a+b}{2},\quad x_2=b.$

得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f]=\frac{h}{3}\Big[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\Big]$$

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

辛普生求积公式的截断误差为

$$R_2[f]=-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\eta)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

3) 柯特斯(Cotes)求积公式$(n=4)$

令 $h=\dfrac{b-a}{4}$, $x_i=a+ih,\ i=0,1,\cdots,4,\quad x_0=a,\quad x_4=b.$

得 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx$

$$Q[f]=\tfrac{b-a}{90}\big[7f(a)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(b)\big].$$

~~辛普生~~求积公式的截断误差为

$$R_4[f]=-\frac{8}{945}h^7f^{(6)}(\eta)=-\frac{(b-a)^7}{1\,935\,360}f^{(6)}(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

复化求积公式

composite integration rules

把积分区间分成若干个（如n个）长度相等的子区间，即令

$$h = (b-a)/n, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

在每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上分别利用前述的三个基本求积公式，将所得结果相加，得到的求积公式称为**复化求积公式.**

1) 复化梯形求积公式

$$I[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{2}\left[f(x_{i-1}) + f(x_i)\right]$$

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

复化求积公式

复化梯形求积公式的截断误差

$$R_{T_n}[f] = I[f] - T_n = -\frac{h^3}{12}\left[f''(\eta_1) + f''(\eta_2) + \cdots + f''(\eta_n)\right],$$

其中$\eta_i \in [x_{i-1}, x_i]$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$.

由连续函数的介值定理知存在一点$\eta \in [a, b]$, 使

介值定理

$$f''(\eta) = \frac{f''(\eta_1) + f''(\eta_2) + \cdots + f''(\eta_n)}{n}.$$

注意到 $nh = b - a$, 则得复化梯形求积公式的截断误差

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

2) 复化辛普生求积公式

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &= \sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x\\ &\approx \sum_{i=1}^{n}\tfrac{x_i-x_{i-1}}{6}\big[f(x_{i-1})+4f(\tfrac{x_{i-1}+x_i}{2})+f(x_i)\big]\\ &= \tfrac{h}{6}\big[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+4\sum_{i=1}^{n}f(\tfrac{x_{i-1}+x_i}{2})+f(b)\big]=S_n.\end{aligned}$$

设$f^{(4)}(x)$在区间$[a,b]$上连续，得复化辛普生求积公式的截断误差

$$R_{S_n}[f]=-\frac{h^5}{2\,880}nf^{(4)}(\eta)=-\frac{b-a}{2\,880}h^4f^{(4)}(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

3) 复化柯特斯求积公式

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{90}\left[7f(x_{i-1}) + 32f(x_{i-1} + h/4)\right.\\ &\quad \left.+12f(x_{i-1} + h/2) + 32f(x_{i-1} + 3h/4) + 7f(x_i)\right]\\ &= \frac{h}{90}\left[7f(a) + 14\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 12\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i + h/2)\right.\\ &\quad \left.+32\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i + h/4) + 32\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i + 3h/4) + 7f(b)\right].\end{aligned}$$

设$f^{(6)}(x)$在区间$[a, b]$上连续，得复化柯特斯求积公式的截断误差

$$R_{C_n}[f] = -\frac{h^7}{1\,935\,360} n f^{(6)}(\eta) = -\frac{b-a}{1\,935\,360} h^6 f^{(6)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

例 6.1 利用复化梯形求积公式计算积分

$$I[f]=\int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x$$

使误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-3}$. 取相同的步长$h$, 用复化辛普生计算, 给出结果和截断误差限.

解 由$f(x)=\frac{sinx}{x}=\int_0^1 costx\,\mathrm{d}t$ 知

$$f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{d^k(costx)}{\mathrm{d}x^k}\,\mathrm{d}t=\int_0^1 t^k cos(tx+\frac{k\pi}{2})\,\mathrm{d}t.$$

$$\max_{0\le x\le 1}|f^{(k)}(x)|\le \int_0^1 t^k|cos(tx+\frac{k\pi}{2})|\,\mathrm{d}t\le \int_0^1 t^k\,\mathrm{d}t=\frac{1}{k+1}.$$

由复化梯形求积公式的截断误差知, 要求选取h满足

$$|R_{T_n}[f]|=\frac{1}{12}h^2|f''(\eta)|\le \frac{h^2}{12}\times\frac{1}{3}\le\frac{1}{2}\times 10^{-3}\Rightarrow h^2\le 18\times 10^{-3}.$$

取$h = \frac{1}{8} = 0.125$ 即满足要求. 而
$n = \frac{b-a}{n} = \frac{1}{h} = 8$. $x_i = 0.125 \times i, \ i = 0, 1, 2, \cdots, 8$.

$$I[f] \approx T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{i=1}^{7} f(\frac{i}{8}) + f(1)\right] = 0.945\,690\,9.$$

其中定义$f(0) = 1$.

取同样步长$h = 0.125$, 则$\frac{x_{i-1}+x_i}{2} = (i - \frac{1}{2})h = 0.125(i - 0.5)$,

$$I[f] \approx S_8 = \frac{1}{48}\left[f(0)+2\sum_{i=1}^{7} f(\frac{i}{8})+4\sum_{i=1}^{8} f(\frac{i}{8}-\frac{1}{16})+f(1)\right] = 0.946\,083\,3.$$

截断误差限

$$\left|R_{S_8}[f]\right| \leq \frac{1}{2\,880} \times \left(\frac{1}{8}\right)^4 \times \frac{1}{5} \approx 0.17 \times 10^{-7}.$$

变步长积分法

自适应

采用复化求积公式计算时，为使截断误差不超过ϵ，**需要估计被积函数高阶导数的最大值，从**而**确定把积分区间$[a,b]$分成等长子区间的个数n.** 但高阶导数最大值很难求得. 不过，由误差表达式可见，只要被积函数的高阶导数有界，则当$h \to 0$ 时，误差趋于零. 这说明可以采用逐步缩小步长h 的方法，以使积分的近似值满足精度要求，这就是变步长积分法.

对于区间$[a,b]$分成n个等长子区间的复化梯形求积公式，有

$$I[f] - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

将区间$[a,b]$分为$2n$等分，则有

$$I[f] - T_{2n} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta_1), \quad a \le \eta_1 \le b.$$

假定$f''(\eta) \approx f''(\eta_1)$. 将以上两式相除, 得

$$\frac{I[f] - T_n}{I[f] - T_{2n}} \approx 4.$$

由此可得 $I[f] \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n).$

故有 $|I[f] - T_{2n}| \approx \frac{1}{3}|T_{2n} - T_n|.$

若$\frac{1}{3}|T_{2n} - T_n| \le \epsilon$, 取$I[f] \approx T_{2n}$ 则大致满足精度要求. 实际计算时常用

$$|T_{2n} - T_n| \le \epsilon$$

作为判别计算终止的条件. 若满足, 则取$I[f] \approx T_{2n}$. 否则, 将区间再分半进行计算, 直至满足精度要求.

为减少计算量，在计算T_{2n}时可以利用T_n的结果.

$$T_n = \frac{h}{2}\Big[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\Big],$$

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n} f\Big(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\Big).$$

在实际计算时，取$n = 2^k$，则 $h = \frac{b-a}{2^k}$，

$$\frac{x_{i-1}+x_i}{2} = \frac{a+(i-1)h+a+ih}{2} = a+(2i-1)\frac{h}{2} = a+(2i-1)\frac{b-a}{2^{k+1}}.$$

开始计算时取 $T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$，迭代计算.

$$\boxed{T_{2^{k+1}} = \frac{1}{2}T_{2^k} + \frac{b-a}{2^{k+1}}\sum_{i=1}^{2^k} f\Big(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^{k+1}}\Big).}$$

若$|T_{2^{k+1}} - T_{2^k}| < \epsilon$，则取$I[f] \approx T_{2^{k+1}}$. 否则，继续计算直到满足$|T_{2^{k+1}} - T_{2^k}| \le \epsilon$为止.

对于复化梯形求积公式

$$I[f] \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n) = \bar{T}_{2n}.$$

对于复化辛普生求积公式有

$$I[f] - S_n = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta), \quad a \le \eta \le b,$$

$$I[f] - S_{2n} = -\frac{b-a}{2880} \left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_1), \quad a \le \eta_1 \le b.$$

假定$f^{(4)}(x)$在区间$[a, b]$上连续且变化不大，解得

$$I[f] \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n) = \bar{S}_{2n}.$$

同理对复化柯特斯求积公式有

$$I[f] \approx C_{2n} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2n} - C_n) = \bar{C}_{2n}.$$

龙贝格积分法

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

$$= \frac{1}{3}\Big\{4\big[\frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2})\big] - T_n\Big\}$$

$$= \frac{1}{3}\Big\{\frac{h}{2}\big[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\big] + 2h\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2})\Big\}$$

$$= \frac{h}{6}\big[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}) + f(b)\big] = S_n.$$

$$S_n = T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n).$$

同理可得

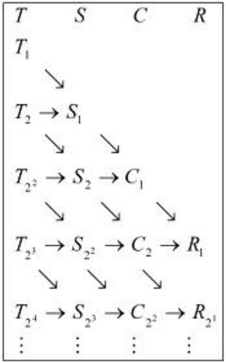
$$C_n = S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n).$$

龙贝格积分法

令

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

称为**龙贝格积分公式**. 其截断误差应是$ch^{10}f^{(10)}(\eta)$.



计算过程按图6.1所示的顺序进行.

若$|R_{2^{k+1}} - R_{2^k}| < \epsilon$,则取$I[f] \approx R_{2^{k+1}}$. 否则, 继续计算, 直到满足精度要求为止.

龙贝格积分法的计算公式如下：

$$T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)],$$

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

$$\begin{cases} S_{2^k} = T_{2^{k+1}} + \frac{1}{4-1}(T_{2^{k+1}} - T_{2^k}), \\ C_{2^k} = S_{2^{k+1}} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2^{k+1}} - S_{2^k}), \qquad k=0,1,2,\cdots \\ R_{2^k} = C_{2^{k+1}} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2^{k+1}} - C_{2^k}). \end{cases}$$

例 6.2 上机

数值积分的稳定性

设函数值$f(x_i)$的计算值为$\tilde{f}(x_i)$, 舍入误差限为ε, 即

$$|f(x_i)-\tilde{f}(x_i)|\le\varepsilon_i\le\varepsilon.$$

则数值积分的舍入误差

$$E=|\sum_{i=0}^{n}A_if(x_i)-\sum_{i=0}^{n}A_i\tilde{f}(x_i)|\le|\sum_{i=0}^{n}A_i|\varepsilon\ .$$

数值积分的稳定性

设函数值$f(x_i)$的计算值为$\tilde{f}(x_i)$, 舍入误差限为ε, 即

$$|f(x_i) - \tilde{f}(x_i)| \leq \varepsilon_i \leq \varepsilon.$$

则数值积分的舍入误差

$$E = |\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) - \sum_{i=0}^{n} A_i \tilde{f}(x_i)| \leq |\sum_{i=0}^{n} A_i| \varepsilon \ .$$

而

$$\sum_{i=0}^{n} A_i = \int_a^b \omega(x)\,\mathrm{d}x = \gamma_0.$$

若求积系数A_i全为正时, $|\sum_{i=0}^{n} A_i| = \sum_{i=0}^{n} A_i = \gamma_0$, 这时$E \leq \gamma_0\,\varepsilon$.
这说明此时, **积分计算值的舍入误差限不会超过计算函数值舍入误差限的**γ_0 **倍, 即舍入误差是可以控制的,** 故数值积分方法是稳定的.

数值积分的稳定性

$n=1,2,4$ 的牛顿-柯特斯公式和高斯型求积公式的求积系数全大于零. 所以, 梯形、辛普生、柯特斯和高斯型求积公式都是稳定的数值求积方法.

$n\geq 8$的牛顿-柯特斯求积公式中求积系数有正有负. 这时, 若每个$|\varepsilon_i|$都达到ε且与相应的A_i正好都同号（或异号）, 则

$$|\sum_{i=0}^{n} A_i\varepsilon_i| = \varepsilon\sum_{i=0}^{n}|A_i|$$

尽管$\sum_{i=0}^{n} A_i=\gamma_0$,但$\sum_{i=0}^{n}|A_i|$有可能很大,故不能保证数值稳定性.

这从另一个角度说明了不宜采用高次插值多项式的原因.

待定系数法

用数值积分法计算积分$I[f] = \int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x$, 有近似式$I[f] \approx Q[f]$, 我们希望求积公式对尽可能多的被积函数$f(x)$准确成立. 由插值型求积公式的误差估计式知, 对于次数不超过n的多项式$f(x)$, $f^{(n+1)}(x) = 0$, 则误差项$R[f] = 0$, $I[f] = Q[f]$.

Definition

（代数精度）设某一近似式(例如数值积分公式$I[f] \approx Q[f]$）的截断误差为$R[f]$，如果对任意不超过m次的多项式$f(x)$, 都有$R[f] = 0$；而当$f(x)$是$m+1$次多项式时$R[f] \neq 0$，则称该近似式的代数精度为m.

用数值积分法计算积分$I[f]=\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x$, 有近似式$I[f]\approx Q[f]$, 我们希望求积公式对尽可能多的被积函数$f(x)$准确成立. 由插值型求积公式的误差估计式知, 对于次数不超过n的多项式$f(x)$, $f^{(n+1)}(x)=0$, 则误差项$R[f]=0$, $I[f]=Q[f]$.

Definition

（**代数精度**）设某一近似式(例如数值积分公式$I[f]\approx Q[f]$) 的截断误差为$R[f]$, 如果对任意不超过m次的多项式$f(x)$, 都有$R[f]=0$；而当$f(x)$是$m+1$次多项式时$R[f]\neq 0$, 则称该近似式的代数精度为m.

梯形求积公式的代数精度$m=1$, 辛普生求积公式的代数精度$m=3$, 柯特斯求积公式的代数精度$m=5$. 具有$n+1$个插值节点的插值型求积公式, 其代数精度$m=n$.

近似式代数精度为m的充要条件是

$$R[x^k]=0 \quad (k=0,1,2,\cdots,m), \quad R[x^{m+1}]\neq 0.$$

Definition

当节点x_i给定后，通过解方程组

$$R[x^k]=0, \quad k=0,1,\cdots,m.$$

（注意：方程的个数应等于未知量A_i的个数）求出求积系数A_i，由此得到求积公式的方法称为**待定系数法**.

例6.3 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(-h) + A_1 f(0) + A_2 f(h),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 取 $f(x) = 1, x, x^2$, 令$R[x^k] = 0$ $(k = 0, 1, 2)$, 得方程组

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 4h, \\ -A_0 h + A_2 h = 0, \\ A_0 h^2 + A_2 h^2 = \frac{16}{3} h^3. \end{cases}$$

解之, 得 $A_0 = A_2 = 8h/3, \quad A_1 = -4h/3.$

令 $f(x) = x^3$, 显然, $R[x^3] = 0$. 再令$f(x) = x^4$, 则

$$I[x^4] = \int_{-2h}^{2h} x^4\,\mathrm{d}x = \frac{64h^5}{5}, \quad Q[x^4] = \frac{4h}{3}[2(-h)^4 + 2(h)^4] = \frac{16h^5}{3}.$$

$R[x^4] = I[x^4] - Q[x^4] = \frac{112}{15} h^5 \neq 0$, 故其代数精度$m = 3$.

例6.4 确定求积公式

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 令 $R[x^k] = 0\ (k = 0, 1, 2)$，得方程组

$$A_0 + A_1 = h, \quad A_1 h + A_2 = h^2/2, \quad A_1 h^2 = h^3/3.$$

解之，得$A_0 = 2h/3, \quad A_1 = h/3, \quad A_2 = h^2/6.$

例6.4 确定求积公式

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 令 $R[x^k] = 0$ $(k = 0, 1, 2)$ ，得方程组

$$A_0 + A_1 = h, \quad A_1 h + A_2 = h^2/2, \quad A_1 h^2 = h^3/3.$$

解之，得$A_0 = 2h/3, \quad A_1 = h/3, \quad A_2 = h^2/6.$
令 $f(x) = x^3$, 则 $I[x^3] = \int_0^h x^3\,\mathrm{d}x = h^4/4$,
$Q[x^3] = \frac{h}{6}[4f(0) + 2f(h) + hf'(0)] = \frac{h^4}{3}$, $R[x^3] = -\frac{h^3}{12} \neq 0$. 故该求积公式的代数精度$m = 2$.

广义佩亚诺定理

一般地，近似公式的误差项$R[f]$是函数f的线性泛函，即

$$R[c_1 f_1 + c_2 f_2] = c_1 R[f_1] + c_2 R[f_2]. \quad \forall c_1, c_2 \in R.$$

Theorem

（广义佩亚诺定理）设近似式的误差项$R[f]$是区间$[a,b]$上$m+1$阶导数连续的函数$f(x)$的线性泛函，且近似式的代数精度为m，则

$$R[f(x)] = R[e(x)],$$

$$\text{其中} \quad e(x) = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}(x-\tilde{x}_0)(x-\tilde{x}_1)\cdots(x-\tilde{x}_m),$$

$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$是区间$[a,b]$上的任意点，$\xi$与$x, \tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$有关且位于$x, \tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$之间.

证明 设$p_m(x)$是以$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$为插值节点构成的插值多项式，则

$$f(x) = p_m(x) + e(x).$$

所以，$R[f] = R[p_m + e] = R[p_m] + R[e] = R[e]$.

定理中的插值节点$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$的取法比较灵活，可以不同，也可以相同. 当$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$ 中某些点相同时，$p_m(x)$ 是埃尔米特插值多项式. 点$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$ 的灵活选取是该定理的最大优点，若选择适当，可以简化$R[f]$的表达式.

例6.5 利用广义佩亚诺定理确定例6.3、例6.4中数值积分公式的截断误差.

解 例6.3中$m=3$,

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{8h}{3}f(-h)-\frac{4h}{3}f(0)+\frac{8h}{3}f(h),$$

取$e(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-h)^2(x+h)^2$, 则

$$\begin{aligned} R[f] &= R[e]=I[e]-Q[e] \\ &= \int_{-2h}^{2h}\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-h)^2(x+h)^2\,\mathrm{d}x-\frac{4h}{3}[2e(-h)-e(0)+2e(h)] \\ &= \frac{23h^5f^{(4)}(\eta_1)}{90}+\frac{h^5f^{(4)}(\xi)}{18}=\frac{14}{45}h^5f^{(4)}(\eta), \quad -2h\le\eta\le 2h. \end{aligned}$$

广义佩亚诺定理

可用广义佩亚诺定理确定近似式的截断误差.

由广义佩亚诺定理知, 数值积分公式的截断误差$R[f]=R[e]$

$=I[e]-Q[e]$.

故选取插值节点$\tilde{x}_0,\tilde{x}_1,\cdots,\tilde{x}_m$有两个原则:

1) 为对$I[e]$应用广义积分中值定理, 选取$\tilde{x}_0,\tilde{x}_1,\cdots,\tilde{x}_m$应使

$$(x-\tilde{x}_0)(x-\tilde{x}_1)\cdots(x-\tilde{x}_m)$$

在积分区间$[a,b]$上不变号.

2) 选取$\tilde{x}_0,\tilde{x}_1,\cdots,\tilde{x}_m$使计算$Q[e]$尽可能简单, 最好使$Q[e]=0$.

例6.4中 $m=2$,

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2h/3f(0)+h/3f(h)+h^2/6f'(0),$$

选取 $\tilde{x}_0=\tilde{x}_1=0,\ \tilde{x}_2=h$, 则

$$e(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}x^2(x-h).$$

$$\begin{aligned}
R[f]=R[e]&=I[e]-Q[e]\\
&=\int_0^h \frac{f'''(\xi)}{3!}x^2(x-h)\,\mathrm{d}x-\frac{h}{6}[4e(0)+2e(h)+he'(0)]\\
&=\frac{1}{6}f'''(\eta)\int_0^h x^2(x-h)\,\mathrm{d}x=-\frac{h^4}{72}f'''(\eta),\ 0\le\eta\le h.
\end{aligned}$$

例6.6 利用广义佩亚诺定理确定辛普生求积公式的截断误差.

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f] = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

解 可以验证辛普生求积公式的代数精度$m = 3$, 取

$$e(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b).$$

则由广义佩亚诺定理

$$R[f] = R[e] = I[e] - Q[e] = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$$-\frac{b-a}{6}[e(a) + 4e(\frac{a+b}{2}) + e(b)] = -\frac{(b-a)^5}{2\,880}f^{(4)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

Definition

若适当的选择$n+1$个插值节点x_i, 求积公式$I[f] \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$的代数精度可以达到$2n+1$. 我们将具有$n+1$个节点的且其代数精度达到$2n+1$ 的求积公式称为**高斯(Gauss)型求积公式（或最高代数精度求积公式）**，节点x_i称为**高斯点**.

高斯型求积公式中含有$2n+2$个参数$x_i, A_i (i = 0, 1, \cdots, n)$, 这些参数必然满足$R[x^k] = 0 \ (k = 0, 1, \cdots, 2n+1)$, 即

$$\int_a^b \omega(x) x^k \,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^k, \quad k = 0, 1, \cdots, 2n+1.$$

可以通过解方程组求出高斯型求积公式中的节点和求积系数$x_i, A_i \ (i = 0, 1, \cdots, n)$, 从而得到高斯型求积公式.

例6.7 确定以下高斯型求积公式及其误差项.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1).$$

解 这是$n=1$的高斯型求积公式, 其代数精度$m=2n+1=3$.

所以求积公式对$f(x)=1,x,x^2,x^3$ 准确成立, 由此得

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

解之, 得 $x_0 = -\sqrt{3}/3$, $x_1 = \sqrt{3}/3$, $A_0 = A_1 = 1$. 所求高斯型求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3).$$

下面利用广义佩亚诺定理确定误差项. 由于代数精度$m=3$, 取

$$\boxed{e(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x+\frac{\sqrt{3}}{3})^2(x-\frac{\sqrt{3}}{3})^2=\frac{f^{(4)}(\xi)}{24}(x^2-\frac{1}{3})^2.}$$

则,

$$R[f]=R[e]=I[e]-Q[e]=I[e]=\int_{-1}^{1}\frac{f^{(4)}(\xi)}{24}(x^2-\frac{1}{3})^2\,\mathrm{d}x$$
$$=\frac{f^{(4)}(\eta)}{24}\int_{-1}^{1}(x^2-\frac{1}{3})^2\,\mathrm{d}x=\frac{1}{135}f^{(4)}(\eta),\quad -1\le\eta\le 1.$$

方程组是个非线性方程组, 不易求解.下述定理则给出了一个构造高斯型求积公式的方法.

Theorem

求积公式的代数精度$m=2n+1$的充分必要条件是节点x_i $(i=0,1,\cdots,n)$ 为区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$ 正交的$n+1$次正交多项式$g_{n+1}(x)$的零点, 且求积系数

$$A_i=\int_a^b \omega(x)l_i(x)\,\mathrm{d}x,\quad i=0,1,\cdots,n.$$

证明 充分性 对任意次数不超过$2n+1$的多项式$p_{2n+1}(x)$，设$p_{2n+1}(x)$除以$g_{n+1}(x)$的商为$q_n(x)$，余式为$r_n(x)$，则

$$p_{2n+1}(x) = g_{n+1}(x)q_n(x) + r_n(x),$$

$$\begin{aligned} R[p_{2n+1}] &= R[g_{n+1}q_n] + R[r_n] \quad （m \geq n，则 R[r_n] = 0.） \\ &= I[g_{n+1}q_n] - Q[g_{n+1}q_n] \\ &= \int_a^b \omega(x)g_{n+1}(x)q_n(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i)q_n(x_i). \end{aligned}$$

由于g_{n+1}与任意不超过n次的多项式正交，故上式第一项等于零；又由于$x_i(i=0,1,\cdots,n)$是$g_{n+1}(x)$ 的零点，故第二项等于零. 所以，

$$R[p_{2n+1}] = 0.$$

即代数精度$m \geq 2n+1$，结合前面的讨论结果$m \leq 2n+1$，所以其代数精度$m = 2n+1$.

必要性　设其代数精度为$m = 2n+1$，则$R[p_{2n+1}] = 0, R[r_n] = 0$. 于是

$$
\begin{aligned}
0 = R[p_{2n+1}] = R[g_{n+1}q_n] + R[r_n] &= I[g_{n+1}q_n] - Q[g_{n+1}q_n] \\
&= \int_a^b \omega(x) g_{n+1}(x) q_n(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i) q_n(x_i) \\
&= -\sum_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i) q_n(x_i).
\end{aligned}
$$

即$\sum\limits_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i) q_n(x_i) = 0$，由$p_{2n+1}(x)$的任意性知$q_n(x_i)$也具有任意性. 因此，$g_{n+1}(x_i) = 0$，即$x_i$为$g_{n+1}(x)$的零点.

Lemma

设$\{g_k(x)\}$是区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为*1*的k次正交多项式，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点，则下式成立.

$$\boxed{\frac{g_{n+1}(x)}{x-x_i}=\frac{\gamma_n}{g_n(x_i)}\sum_{k=0}^{n}\frac{g_k(x)g_k(x_i)}{\gamma_k}.}$$

Theorem

设$\{g_k(x)\}$是区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为*1*的k次正交多项式，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点，则高斯型求积公式的求积系数可以表示为

$$A_i=\frac{\gamma_n}{g'_{n+1}(x_i)g_n(x_i)},\quad i=0,1,\cdots,n.$$

Theorem

设被积函数$f(x) \in C^{2n+2}$，设$\{g_k(x)\}$是区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为1的k次正交多项式，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点，则高斯型求积公式的截断误差为

$$R[f] = \frac{\gamma_{n+1}}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

证明　由于高斯型求积公式的代数精度$m = 2n+1$

$$e(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2,$$

则 $$R[f] = R[e] = I[e] = \frac{\gamma_{n+1}}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

Theorem

高斯型求积公式的求积系数大于零.

证明　由于高斯型求积公式对不超过$2n+1$次的多项式准确成立. 分别取$f(x) = l_k^2(x)$ $(k = 0, 1, \cdots, n)$ 有

$$0 < \int_a^b \omega(x) l_k^2(x) \, \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i) = A_k, \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$

Theorem

高斯型求积公式的求积系数大于零.

证明　由于高斯型求积公式对不超过$2n+1$次的多项式准确成立. 分别取$f(x)=l_k^2(x)$ $(k=0,1,\cdots,n)$ 有

$$0<\int_a^b \omega(x) l_k^2(x)\,\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i)=A_k, \quad k=0,1,\cdots,n.$$

对于最高次项系数为a_k的正交多项式$\{g_k(x)\}$，高斯型求积公式的求积系数和则截断误差分别为

$$A_i=\frac{a_{n+1}}{a_n}\frac{\gamma_n}{g'_{n+1}(x_i)g_n(x_i)}, \quad i=0,1,\cdots,n.$$

$$R[f]=\frac{\gamma_{n+1}}{a_{n+1}^2(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta), \quad a\leq\eta\leq b.$$

1．高斯-勒让德(Gauss-Legendre)求积公式

勒让德多项式$p_n(x)$ 是在区间$[-1,1]$上关于权函数$\omega(x)\equiv 1$正交的正交多项式. $p_n(x)$最高次项x^n的系数$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$, 内积$\gamma_n=(p_n,p_n)=\frac{2}{2n+1}$. 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为勒让德多项式$p_{n+1}(x)$ 的零点, 则得高斯-勒让德求积公式和求积系数及截断误差：

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

1. 高斯-勒让德(Gauss-Legendre)求积公式

勒让德多项式$p_n(x)$ 是在区间$[-1,1]$上关于权函数$\omega(x)\equiv 1$正交的正交多项式. $p_n(x)$最高次项x^n的系数$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$, 内积$\gamma_n=(p_n,p_n)=\frac{2}{2n+1}$. 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为勒让德多项式$p_{n+1}(x)$ 的零点, 则得高斯-勒让德求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$A_i=\frac{2}{(n+1)p'_{n+1}(x_i)p_n(x_i)},$$

$$R[f]=\frac{2^{(2n+3)}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}f^{(2n+2)}(\eta),\quad -1\le\eta\le 1.$$

常用的四种高斯型求积公式

对于一般区间$[a,b]$上的积分$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$，通过变量代换$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$，化为区间$[-1,1]$上的积分

$$\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{b+a}{2}+\frac{b-a}{2}t)\,\mathrm{d}t.$$

例6.8　用$n=3$的高斯-勒让德求积公式计算积分

$$\int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x.$$

解　令$x=(t+1)/2$，则$I[f]=\int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x=\int_{-1}^1 \frac{sin\frac{t+1}{2}}{t+1}\,\mathrm{d}t$，记$f(t)=\frac{sin\frac{t+1}{2}}{t+1}$，$n=3$。由表6.2知

$$I[f]\approx Q[f]=\sum_{i=0}^{3} A_i f(t_i)=0.9460830702.$$

2. 高斯-拉盖尔(Gauss-Laguerre)求积公式

拉盖尔多项式$\{L_n(x)\}$是区间$[0,+\infty)$上关于权函数$\omega(x)=e^{-x}$正交的正交多项式. $L_n(x)$最高次项x^n 的系数$a_n=(-1)^n$, 内积$\gamma_n=(n!)^2$, 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为拉盖尔多项式$L_{n+1}(x)$的零点. 则得高斯-拉盖尔求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$A_i=-\frac{(n!)^2}{L'_{n+1}(x_i)L_n(x_i)},$$

$$R[f]=\frac{[(n+1)!]^2}{(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta),\quad 0\le\eta<+\infty.$$

3. 高斯-埃尔米特(Gauss-Hermite)求积公式

埃尔米特多项式$\{H_n(x)\}$ 是在区间$(-\infty,+\infty)$上关于权函数$\omega(x)=e^{-x^2}$正交的正交多项式. $H_n(x)$最高次项x^n 的系数$a_n=2^n$, 内积$\gamma_n=2^n(n!)\sqrt{\pi}$, 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为埃尔米特多项式$H_{n+1}(x)$ 的零点. 则得高斯-埃尔米特求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$A_i=\frac{2^{n+1}n!\sqrt{\pi}}{H'_{n+1}(x_i)H_n(x_i)},$$

$$R[f]=\frac{(n+1)!\sqrt{\pi}}{2^{n+1}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta),\quad -\infty<\eta<+\infty.$$

4. 高斯-切比雪夫(Gauss-Chebyshev)求积公式

切比雪夫多项式$\{T_n(x)\}$是在区间$[-1,1]$上关于权函数$\omega(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交的正交多项式. $T_n(x)$最高次项x^n的系数$a_n=2^{n-1}$, 内积$\gamma_n=\pi/2\ (n\geq 1)$. 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 为切比雪夫多项式多项式$T_{n+1}(x)$的零点

$$x_i = cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi, \quad i=0,1,\cdots,n.$$

得高斯-切比雪夫求积公式和截断误差:

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{n+1}\sum_{i=0}^{n} f\left(cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right).$$

$$R[f]=\frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta), \quad -1\leq\eta\leq 1.$$

重积分的计算

考虑二重积分

$$\iint_{\Omega} f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

取步长 $h_1 = (b-a)/n, h_2 = (c-d)/m,$

考虑二重积分

$$\iint_{\Omega} f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

取步长 $h_1 = (b-a)/n, h_2 = (c-d)/m$,

对积分$\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}y$, 应用复化Simpson公式

$$\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}y \approx Q[f(\cdot,y)]$$

$$= \frac{h_2}{6}\Big[f(x,c) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x,y_j) + 4\sum_{j=1}^{m} f(x,\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) + f(x,d)\Big].$$

再对积分$\int_a^b f(x,y_j)\,\mathrm{d}x$, 应用复化Simpson公式

$$\int_a^b f(x,y_j)\,\mathrm{d}x \approx S_n$$
$$= \frac{h_1}{6}\Big[f(a,y_j)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j)+4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},y_j)+f(b,y_j)\Big].$$

从而

$$\int_a^b f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx Q[f(x,y)] = \ldots.$$

重积分的计算

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx S_{n,m} =$$

$$\frac{h_1 h_2}{36}\left[f(a,c) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,c) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},c) + f(b,c)\right]$$

$$+\frac{h_1 h_2}{18}\sum_{j=1}^{m-1}\left[f(a,y_j) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},y_j) + f(b,y_j)\right]$$

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx S_{n,m} =$$

$$\frac{h_1 h_2}{36}\left[f(a,c) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,c) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},c) + f(b,c)\right]$$

$$+\frac{h_1 h_2}{18}\sum_{j=1}^{m-1}\left[f(a,y_j) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},y_j) + f(b,y_j)\right]$$

$$+\frac{h_1 h_2}{9}\sum_{j=1}^{m}[f(a,\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) +$$

$$+4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) + f(b,\frac{y_{j-1}+y_j}{2})]$$

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,\mathrm{dxdy} \approx S_{n,m} =$$

$$\frac{h_1 h_2}{36}\left[f(a,c) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,c) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},c) + f(b,c)\right]$$

$$+\frac{h_1 h_2}{18}\sum_{j=1}^{m-1}\left[f(a,y_j) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},y_j) + f(b,y_j)\right]$$

$$+\frac{h_1 h_2}{9}\sum_{j=1}^{m}[f(a,\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) +$$

$$+4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},\frac{y_{j-1}+y_j}{2}) + f(b,\frac{y_{j-1}+y_j}{2})]$$

$$\frac{h_1 h_2}{36}\left[f(a,d) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,d) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2},d) + f(b,d)\right]$$

复化梯形公式

$$\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}y \approx \frac{h_2}{2}\Big[f(x,c) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x,y_j) + f(x,d)\Big] = T_m.$$

$$\int_a^b f(x,y_j)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h_1}{2}\Big[f(a,x_j) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j) + f(b,y_j)\Big] = T_n.$$

复化梯形公式

$$\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}y \approx \frac{h_2}{2}\left[f(x,c)+2\sum_{j=1}^{m-1} f(x,y_j)+f(x,d)\right] = T_m.$$

$$\int_a^b f(x,y_j)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h_1}{2}\left[f(a,x_j)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j)+f(b,y_j)\right] = T_n.$$

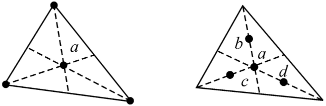
从而

$$\int_a^b\int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \approx T_{n,m} = \frac{h_1h_2}{4}\left[f(a,c)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,c)+f(b,c)\right]$$

$$+\frac{h_1h_2}{2}\sum_{j=1}^{m-1}\left[f(a,y_j)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,y_j)+f(b,y_j)\right]$$

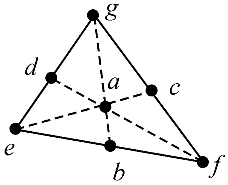
$$+\frac{h_1h_2}{4}\left[f(a,d)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i,d)+f(b,d)\right]$$

$$\int_0^1 \int_0^{1-\lambda_1} f(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)\, \mathrm{d}\lambda_2 \mathrm{d}\lambda_1 = \sum_{j=1}^{n} A_j f(\lambda_1^j, \lambda_2^j, \lambda_3^j).$$



$$m = 1, \qquad a = (1/3, 1/3, 1/3), \qquad 2A_i = 1$$

$$m = 2, \quad \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 11/15 & 2/15 & 2/15 \\ 2/15 & 11/15 & 2/15 \\ 2/15 & 2/15 & 11/15 \end{pmatrix}, \quad 2A_i = \begin{pmatrix} -27/48 \\ 25/48 \\ 25/48 \\ 25/48 \end{pmatrix}$$



$$m = 3$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/ \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad 2A_i = \begin{pmatrix} 0.225 \\ 0.13239415 \\ 0.13239415 \\ 0.13239415 \\ 0.12593918 \\ 0.12593918 \\ 0.12593918 \end{pmatrix}$$

计算列表函数近似导数的方法, 即数值微分法.

插值型数值微分公式是取$f(x)$的插值多项式（如$L_n(x)$）的k阶导数作为$f(x)$的k阶导数的近似表达式. 即取$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$, $f^{(k)}(x_i) \approx L_n^{(k)}(x_i)$. 由插值法知

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x),$$

则$f^{(k)}(x) = L_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x)$.

截断误差

$$R[f] = f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) = R_n^{(k)}(x) = \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left\{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)\right\}.$$

其中ξ与$x, x_0, x_1, \cdots, x_n$有关.

1. 两点数值微分公式 $(n=1,k=1)$

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

$$R_1(x)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1).$$

则 $L_1'(x)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$，其中 $h=x_1-x_0$.

$$R_1'(x_0)=-\frac{h}{2}f''(\xi),\quad R_1'(x_1)=\frac{h}{2}f''(\xi).$$

所以，由 $f'(x)=L_1'(x)+R_1'(x)$ 得

$$\begin{cases} f'(x_0)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi), \\ f'(x_1)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi). \end{cases}$$

2. 三点数值微分公式$(n=2),(k=1)$

设插值节点等距分布, 即$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, 2.$

$$L_2(x) = \sum_{i=0}^{2} l_i(x) f(x_i), \quad R_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2).$$

$$L_2'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} y_0 + \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} y_1 + \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} y_2$$

$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi), \\ f'(x_1) = \frac{f(x_2)-f(x_0)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \\ f'(x_2) = \frac{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi). \end{cases}$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi).$$

（2）求二阶导数$(k=2)$

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

$$R_2''(x)=\frac{1}{3}(x-x_0+x-x_1+x-x_2)f'''(\xi)$$
$$+\frac{2}{4!}[(x-x_1)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_1)]f^{(4)}(\bar{\xi}$$
$$+\frac{1}{6}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\frac{d^2f'''(\xi)}{dx^2}.$$

$$\begin{cases} f''(x_0)=\frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2}-hf'''(\xi)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\bar{\xi}), \\ f''(x_1)=\frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\bar{\xi}), \\ f''(x_2)=\frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2}+hf'''(\xi)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\bar{\xi}). \end{cases}$$

一个常用的二阶数值微分公式

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi).$$

由数值微分公式可见，其截断误差都随步长h的减小而减小，

但所有公式都是以h作除数，因而随步长h的减小，式中函数值的

误差将给导数计算带来越大的误差.

所以，h的选取要合适，不宜太大，也不宜太小，原则上不能让舍入误差超过截断误差.

与数值积分法中的待定系数法类似，也可用待定系数法导出数值微分公式

例6.9 确定如下数值微分公式

$$f''(x_0) \approx c_0 f(x_0) + c_1 f'(x_0) + c_2 f(x_1),$$

使其具有尽可能高的代数精度，并给出截断误差表示式.

解 为了便于计算，令$x_0 = 0$, $x_1 = h$, 则截断误差

$$R[f] = f''(0) - c_0 f(0) - c_1 f'(0) - c_2 f(h).$$

分别取$f = 1, x, x^2$, 令$R[f] = 0$, 则得方程组

$$-c_0 - c_2 = 0,$$

$$-c_1 - c_2 h = 0,$$

$$2 - c_2 h^2 = 0.$$

待定系数法

解之，得 $c_0 = -2/h^2, c_1 = -2/h, c_2 = 2/h^2$. 从而，

$$f''(x_0) \approx \frac{2}{h^2}[-f(x_0) - hf'(x_0) + f(x_1)],$$

其中 $h = x_1 - x_0$.
由于 $R[x^3] = -c_2 h^3 = -2h \neq 0$. 所以，代数精度 $m = 2$.根据广义佩亚诺定理取

$$e(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x - x_0)^2(x - x_1),$$

则 $R[f] = R[e] = e''(x_0) - \frac{2}{h^2}[-e(x_0) - he'(x_0) + e(x_1)] = e''(x_0) = -\frac{h}{3}f'''(\xi)$.

外推求导法

所谓外推法即利用几次计算结果的适当组合得到更精确的结果.

下面以计算一阶导数为例来说明外推法在数值微分中的应用. 根据泰勒公式

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2!}f''(x)+\frac{h^3}{3!}f'''(x)+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x)+\cdots$$
$$f(x-h)=f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2!}f''(x)-\frac{h^3}{3!}f'''(x)+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x)+\cdots$$

以上两式相减, 得

$$f(x+h)-f(x-h)=2hf'(x)+\frac{2h^3}{3!}f'''(x)+\frac{2h^5}{5!}f^{(5)}(x)+\frac{2h^7}{7}f^{(7)}(x)+\cdots$$

由此可得

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{h^2}{3!}f'''(x)-\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x)-\frac{h^6}{7!}f^{(7)}(x)-\cdots$$

外推求导法

若记$T(h)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$，则

$$f'(x)=T(h)-\frac{h^2}{3!}f'''(x)-\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x)-\frac{h^6}{7!}f^{(7)}(x)-\cdots \qquad (1)$$

若取$f(x)\approx T(h)$, 则截断误差$R[f]=f'(x)-T(h)=O(h^2)$.

将步长h缩小一半，记

$$T(h/2)=\frac{f(x+h/2)-f(x-h/2)}{2\times h/2},$$

有

$$f'(x)=T(h/2)-\frac{(h/2)^2}{3!}f'''(x)-\frac{(h/2)^4}{5!}f^{(5)}(x)-\frac{(h/2)^6}{7!}f^{(7)}(x)-\cdots \qquad (2)$$

上式两端乘以4减去(1)式得

$$\begin{aligned} f'(x) &= T(h/2) + \tfrac{1}{4-1}(T(h/2) - T(h)) + \tfrac{h^4}{4\times 5!} f^{(5)}(x) + \cdots \\ &= T_1^0 + \tfrac{h^4}{4\times 5!} f^{(5)}(x) + \cdots \end{aligned}$$

其中

$$T_1^0 = T(h/2) + \frac{1}{4-1}(T(h/2) - T(h))$$

若取$f'(x) \approx T_1^0$, 则截断误差

$$R[f] = f'(x) - T_1^0 = O(h^4).$$

再

外推求导法

将步长缩小一半，有

$$f'(x) = T(h/4) + \tfrac{1}{4-1}\big(T(h/4) - T(h/2)\big) + \tfrac{(h/2)^4}{4\times 5!} f^{(5)}(x) + \cdots$$
$$= T_1^1 + \tfrac{(h/2)^4}{4\times 5!} f^{(5)}(x) + \tfrac{5(h/2)^6}{16\times 7!} f^{(7)}(x) + \cdots \tag{3}$$

其中 $T_1^1 = T(h/4) + \tfrac{1}{4-1}\big(T(h/4) - T(h/2)\big)$.
(3)式两端乘以16减去(2)式得得

$$f'(x) = T_2^0 - \frac{h^6}{64\times 7!} f^{(7)}(x) - \cdots$$

其中 $T_2^0 = T_1^1 + \frac{1}{4^2-1}(T_1^1 - T_1^0)$. 取 $f'(x) \approx T_2^0$,
则截断误差 $R[f] = f'(x) - T_2^0 = O(h^6)$.

$$\begin{cases} h_i = \frac{h}{2^i}, \\ T_0^0 = T(h_0) = T(h) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}, \\ T_0^i = T(h_i) = \frac{f(x+h_i)-f(x-h_i)}{2h_i}. \end{cases}$$

则 $T_1^0 = T_0^1 + \frac{1}{4-1}(T_0^1 - T_0^0), \quad T_1^1 = T_0^2 + \frac{1}{4-1}(T_0^2 - T_0^1).$

一般地,

$$T_k^i = T_{k-1}^{i+1} + \frac{1}{4^k - 1}(T_{k-1}^{i+1} - T_{k-1}^i).$$

若取 $f'(x) \approx T_k^0$ ，则截断误差

$$R[f] = f'(x) - T_k^0 = O(h^{2(k+1)}).$$

例6.4.2

利用三次样条插值函数求导法

$$\begin{array}{|lllll|}
T_0^0 & & & & \\
T_0^1 & T_1^0 & & & \\
T_0^2 & T_1^1 & T_2^0 & & \\
T_0^3 & T_1^2 & T_2^1 & T_3^0 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}$$

数值微分公式的误差都包含$f(x)$ 的高阶导数，当高阶导数值较大时难保证截断误差很小，此时应用三次样条插值函数求导.

$$S(x) = \frac{(x_i - x)^3}{6h_i}M_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i}M_i + (y_{i-1} - \frac{h_i^2}{6}M_{i-1})\frac{x_i - x}{h_i}$$
$$+(y_i - \frac{h_i^2}{6}M_i)\frac{x - x_{i-1}}{h_i}, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i.$$

利用三次样条插值函数求导法

由第4章知 $\max\limits_{a\le x\le b}|f^{(k)}(x)-S^{(k)}(x)|\le c_kM_4h^{4-k}, \quad k=0,1,2,3.$

显然，当$h\to 0$时，$S(x),S'(x),S''(x)$在区间$[a,b]$上分别一致地收敛于$f(x),f'(x),f''(x)$.

$$f'(x)\approx S'(x)=\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h_i}-\frac{h_i}{6}(M_i-M_{i-1})$$

$$-\frac{M_{i-1}}{2h_i}(x_i-x)^2+\frac{M_i}{2h_i}(x-x_{i-1})^2, \quad x_{i-1}\le x\le x_i.$$

其中$h_i=x_i-x_{i-1}$.

$$f''(x)\approx S''(x)=\frac{x_i-x}{h_i}M_{i-1}+\frac{x-x_{i-1}}{h_i}M_i$$

$$=M_{i-1}+\frac{M_i-M_{i-1}}{h_i}(x-x_{i-1}), x_{i-1}\le x\le x_i.$$

$$f'''(x)\approx S'''(x)=\frac{M_i-M_{i-1}}{h_i}, \quad x_{i-1}\le x\le x_i.$$