第三章 数值积分与微分法

章节概述 所有的微积分$\int f(x)dx$核心问题在于求解原函数。数学原理：任意函数均有原函数。
应对两种情况： ① 函数用表格形式给出，不知道$f(x)$，无法直接求导或求积
② 函数的解析表达式结构复杂，不易求导或求积

3.1 Newton-cotes 求积公式

3.1.1 插值型求积公式

基本条件 设$f \in C[a,b]$连续，求$I = \int_a^b f(x)dx$的近似值。

问题简化 利用插值法构造

公式推导 **等分** 将$[a,b]$ n 等分，有**步长**：$h = \frac{b-a}{n}$，则**节点**：$x_k = a + kh\ (k = 0,1,2,\dots,n)$

L 插值 有 $f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) + R_n(x)$ 已知系数构造基函数。等号由于误差项存在。

回代 $I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b l_k(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx$ 积分满足交换律

导出 原本$f(x)$用插值法中$f(x_k)_{系数} l_k(x)_{基}$ 令 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j} dx$ （标准多项式）

区间$[a,b]$是任意的，则该式也是任意的，如果写为 0、1 就好了。我们想要标准化以便于不同数量级数据合并计算。

则称$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 为**插值型求积公式，A_k为求积系数**

余项 取$I \approx I_n$，有$R_n(I_n) = \int_a^b R_n(x)dx = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi) \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)dx \Rightarrow I = I_n + R_n(I_n)$

ξ是使用 n 次罗尔定理得到的，与x_k有关系。较难处理。

3.1.2 科茨系数（Cotes 系数）

概述 **为了计算I_n，只需求出A_k**

导出 记$x = a + th$，则$0 \le t \le n$，$dx = hdt$，$x - x_j = (t-j)h$，$x_k - x_j = (k-j)h$ 代入上式：

$$A_k = \int_0^n h \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{(t-j)h}{(k-j)h} dt = \underbrace{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{h}{k-j}}_{常数} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t-j)dt = \frac{h(-1)^{n-k}}{\prod_{j=0}^{k-1}(k-j) \prod_{j=k+1}^{n}(j-k)} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t-j)dt = \frac{h(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t-j)dt$$

（不能为 k，所以分为两部分$\prod_{j=0}^{k-1}(k-j) = k!$，$\prod_{j=k+1}^{n}(j-k) = (n-k)!$，$(-1)^{n-k}$）

$$A_k = (b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t-j)dt = (b-a)C_k^{(n)}$$ 把区间$[a,b]$去除，做标准化过程

定义 记$C_k^{(n)}$为 cotes 系数，$k = 0,1,2,\dots,n$ **该值可预先计算**

注意 ① $C_k^{(n)}$中 n为等分数，k 为节点下标，与区间无关

② $n = 1$时，$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2}$ $C_1^{(1)} = \int_0^1 (t)dt = \frac{1}{2}$ 即为**梯形公式**

$n = 2$时，$C_0^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6}$ $C_1^{(2)} = -\frac{1}{2}\int_0^2 (t)(t-2)dt = \frac{4}{6}$ $C_2^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt = \frac{1}{6}$

其余可查 Cotes 系数表

③ $C_i^{(n)} = C_{n-i}^{(n)}$ 每一行中心对称，且求和为 1

④ $n \le 7$时，$C_i^{(n)}$均为正数；$n \ge 8$时，其有正有负 （龙格现象）

3.1.3 Newton-cotes 求积公式

定义 称$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$ 为 Newdon-Cotes 公式。其中，$n = 1,2,4$尤为重要

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

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

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

3.1.4 代数精度

内容 衡量求积公式的精度。可以理解为评价标准

准确成立 若$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = I_n$ ， 则称求积公式对函数 f(x)能**准确成立**

定义 1.1 设有求积公式 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$。若 $\forall 0 \le i \le m, \int_a^b P_i(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k P_i(x_k)$

但$\int_a^b P_{m+1}(x)dx \ne \sum_{k=0}^{n} A_k P_{m+1}(x_k)$，则称求积公式具有$m$次代数精度（从 0 开始到达的最大精度）

注意 ① 求积公式具有m次代数精度 $\Leftrightarrow$ $\forall\, 0 \le i \le m$有$\int_a^b x^i dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x^i$,但$\int_a^b x^{m+1}dx \ne \sum_{k=0}^{n} A_k x^{m+1}$

② 梯形, Simpson, Cotes 公式分别**具有1, 3, 5次（阶）代数精度**.

③ 若f为n次多项式，则$f^{(n+1)}(\xi) = 0$，故$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$**至少是**$n$次代数精度。

④ **若 n 为偶数**，则 Newdon-Cotes 公式**至少具有 n+1** 次代数精度

⑤ $\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$

3.1.5 几种低阶 Newton-cotes 求积公式的积分余项

梯形公式 $R(T) = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi_x)\omega_2(x)dx$， $\xi_x \in [a,b]$。由于$\omega_2(x) = (x-a)(x-b)$在$[a,b]$上不变号

所以**积分中值定理**得$R(T) = \frac{1}{2} f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^3 f''(\eta)$， $\eta \in (a,b)$

Simpson 公式 $R(S) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta)$， $\eta \in (a,b)$

Cotes 公式 $R(C) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{2}\right)^6 f^{(6)}(\eta) = \frac{8}{945}\left(\frac{b-a}{2}\right)^7 f^{(6)}(\eta)$, $\eta \in (a,b)$

3.1.6 数值求积公式的数值稳定性

因为相对而言，$C_k^{(n)}$(查表可得)和x_k(n 等分)均能准确计算。所以积分的舍入误差来自$f(x_k)$的计算。

规定 记$\bar{f}(x_k)$为$f(x_k)_{准确值}$的**计算值**。$\varepsilon_k = f(x_k) - \bar{f}(x_k)$ $\bar{I_n} = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}\bar{f}(x_k)$

推导 考虑$I_n - \bar{I_n} = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}\left(f(x_k) - \bar{f}(x_k)\right) = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}\varepsilon_k$

当$C_k^{(n)}$ 全为正数时，$|I_n-\bar{I_n}|\le \max|\varepsilon_k|(b-a)$

推导：$|I_n-\bar{I_n}|=|(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}\varepsilon_k|=|b-a||\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}\varepsilon_k|\le(b-a)\sum_{k=0}^{n}|C_k^{(n)}\varepsilon_k|\le(b-a)\max|\varepsilon_k||\sum C_k^{(n)}|=\max|\varepsilon_k|(b-a)$

当$C_k^{(n)}$存在变号时$(n\ge 8)$，$\max|\varepsilon_k|(b-a)\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right|>(b-a)\max|\varepsilon_k|$ 将影响公式的稳定性。

所以高阶会显著影响稳定性。因此**一般实用的是低阶公式**。

3.2 复合求积分

3.2.1 复合求积公式

条件　　**考虑$[a,b]$分为小区间，在每个小区间上用低阶公式，再将结果求和**。

设有$x=a+th\ (k=0,1,2,\dots,n)$　　$h=\frac{b-a}{n}$ 在区间$[x_k,x_{k+1}]$使用**梯形公式**

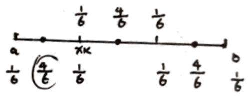
推导　　$\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)dx\approx\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$

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

称其为**复合梯形公式**

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

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



复合 Cotes 公式：$C_n=\frac{b-a}{90n}\left[7f(a)+14\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+7f(b)+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{4}})+12\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{3}{4}})\right]$

例题　　1. 依次使用$n=8$的复合梯形，$n=4$的符合 Simpson，$n=2$的复合 Cotes 计算定积分 $\int_0^1\frac{\sin x}{x}dx$

首先计算所需各节点的函数值，再利用公式分别计算T_8,S_4,C_2

3.2.2 复合求积公式的余项及收敛的阶

1　复合梯形　余项：$I-T_n=-\frac{nh^3}{12}f''(\eta)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)\approx-\frac{h^2}{12}[f'(b)-f'(a)]$ (n充分大时)

推导　　$I-I_n=\sum_{k=0}^{n-1}\underbrace{\left(-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right)}_{\text{每个的误差项}}=-\frac{nh^3}{12}\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)}_{\text{期望}}$ 设在$[a,b]$上连续，

则由连续函数的中值定理知 $\exists\eta\in(a,b)$使得$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=f''(\eta)$

即$I-T_n=-\frac{nh^3}{12}f''(\eta)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta)$ 整体误差只取决于h^2,步长越小精度越高

又有$\lim_{h\to0}\frac{I-T_n}{h^2}=\lim_{h\to0}(-\frac{nh^3}{12}f''(\eta)h)=-\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx=-\frac{1}{12}[f'(b)-f'(a)]$

2　复合 Simpson 公式　$I-S_n=-\left(\frac{h}{2}\right)^4\frac{(b-a)}{180}f^{(4)}(\eta)\approx-\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4[f'''(b)-f'''(a)]$

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

注意：若f在$[a,b]$上具有 2，4，6 阶连续函数，则当$n\to\infty(h\to0)$时，$\boldsymbol{T_n,S_n,C_n\to I}$,**且速度一个比一个快**

收敛阶　　公式收敛的速度

定义 2 设I_n为复合求积公式，若$\lim\limits_{h\to 0}\frac{I-I_n}{h^p}=C\neq 0$，则称求积公式是 p 阶收敛的

注意：T_n,S_n,C_n分别是 2，4，6 阶收敛的。
计算值的精度与$h(n)$有关，还与$f''(f(4)$，$f(6))$有关，估值困难，通常采用算后估值误差来调整步长.

3.2.3 步长的自动选择

原理 因为$I-T_n=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi_1)$，$I-T_{2n}=-\frac{b-a}{12}h^2_{\text{为左边一半}}f''(\xi_2)$

其中$f''(\xi_1)=\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_i)$ (n 个 2 阶导数的平均值) $f''(\xi_2)=\frac{1}{2n}\sum_{k=0}^{2n-1}f''(\eta_i)$ (2n 个 2 阶导数的平均值)

当n充分大时，$f''(\eta_2)\approx f''(\eta_1)$ 从而 $\frac{I-T_{2n}}{I-T_n}\approx\frac{1}{4}\Rightarrow I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$

即以T_{2n}作为I 的近似值时，其误差约为$\Delta=\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$ 若规定精度误差限为ε，只需$\Delta\le\varepsilon$

步长折半法 先令$h=b-a$，计算T_1，步长折半后，计算T_2，则$\Delta=\frac{1}{3}(T_2-T_1)$. 若$\Delta\le\varepsilon$，则停止，取$I\approx T_2$

否则步长再次折半，计算T_4，$\Delta=\frac{1}{3}(T_4-T_2)$,⋯,直到$\Delta\le\varepsilon$为止。最后得到的积分值即满足精度要求

同理，由$I-S_n=-\left(\frac{h}{2}\right)^4\frac{(b-a)}{180}f^{(4)}(\xi_2)$可以推出$I-S_{2n}\approx\frac{1}{15}(S_{2n}-S_n)$ 用$\Delta=\frac{1}{15}|S_{2n}-S_n|\le\varepsilon$ 作为复合 Simpson 公式中控制步长的条件。 由$I-C_n=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{2}\right)^6f^{(6)}(\xi_3)$可推出$I-C_{2n}\approx\frac{1}{63}(C_{2n}-C_n)$，用$\Delta=\frac{1}{63}|C_{2n}-C_n|\le\varepsilon$作为复合 Cotes 公式中控制步长的条件。

例题 1. 用变步长的复合 Simpson 公式计算定积分$\int_0^1\frac{\sin x}{x}dx$，并给定误差限$\varepsilon=\frac{1}{2}\times 10^{-6}$

先取$h=b-a=1,S_1=0.9461459$，再取$h=0.5,S_2=0.94608688,\Delta=\frac{1}{15}|S_1-S_2|=0.36*10^{-4}>\varepsilon$

继续$h=0.25,S_4=0.9460833,\Delta-\frac{1}{15}|S_4-S_2|=2.4*10^{-7}<\varepsilon$ 故$I\approx S_4=0.9460833$

注：在步长折半过程中，出现一批新节点，还有一点旧节点，将重复计算函数值.