第四章 数值积分与数值微分

- 数值积分基本概念
- Newton-Cotes 求积公式
- 复合求积公式
- Romberg 求积公式
- Gauss 求积公式
- 自适应积分方法
- 多重积分
- 数值微分

4.1数值积分概论

$$I(f)=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

- 微积分基本公式： $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b)-F(a)$

- 但是在许多实际计算问题中

(1) $F(x)$ 表达式较复杂时，计算较困难。如 $f(x)=\dfrac{1}{1+x^6}$

(2) $F(x)$ 难求！ 甚至有时不能用初等函数表示。

如 $f(x)=\dfrac{1}{x}\sin x,\quad e^{-x^2}$

(3) $f(x)$ 表达式未知，只有通过测量或实验得来的数据表

几个简单公式

基本思想 $$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = (b-a)f(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

- **矩形公式**

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(a)$$ （左矩形公式，左点法）

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(b)$$ （右矩形公式，右点法）

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$ （中矩形公式，中点法）

- **梯形公式**

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

- **抛物线公式**（Simpson公式）

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

数值积分一般公式

一般地，用 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的一些离散点

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$$

上的函数值的加权平均作为 $f(\xi)$ 的近似值，可得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \underbrace{A_i}_{\text{求积系数}} f(\underbrace{x_i}_{\text{求积节点}}) \longrightarrow \boxed{\text{机械求积公式}}$$

- 将定积分计算转化成被积函数的**函数值**的计算
- 无需求原函数，易于计算机实现

注：求积公式并不局限于机械求积公式!

4.1.2代数精度

定义： 如果对于所有次数不超过 m 的多项式 $f(x)$，求积公式都精确成立，但对次数为 $m+1$ 的多项式不精确成立，则称该求积公式具有 **m 次代数精度**

- **代数精度的验证方法**
  - 将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^m$ 依次代入，公式精确成立;
  - 将 $f(x) = x^{m+1}$ 代入，公式不精确成立。

例： 试确定 A_i，使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度

$$I(f) \triangleq \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \triangleq I_n(x)$$

解： 将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^n$ 代入求积公式，使其精确成立，得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \cdots + A_n x_n = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 + \cdots + A_n x_n^2 = \dfrac{1}{3}(b^3 - a^3) \\ \cdots \quad \cdots \\ A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \cdots + A_n x_n^n = \dfrac{1}{n+1}(b^{n+1} - a^{n+1}) \end{cases}$$

$\Rightarrow$ 存在唯一解：$A_0^*, A_1^*, \ldots, A_n^*$

所以求积公式为：$\boxed{\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i^* f(x_i)}$

具有至少 n 次代数精度

例： 试确定系数 A_i，使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度，并求出此求积公式的代数精度。

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

解： 将 $f(x)=1, x, x^2$ 代入求积公式，使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = (b-a)/1 = 2 \\ -A_0 + A_2 = (b^2 - a^2)/2 = 0 \\ A_0 + A_2 = (b^3 - a^3)/3 = 2/3 \end{cases}$$

解得 $A_0=1/3$，$A_1=4/3$，$A_2=1/3$。所以求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}\left[f(-1) + 4f(0) + f(1)\right]$$

将 $f(x)=x^3$ 代入可得：公式左边=0，公式右边=0，公式精确成立。

将 $f(x)=x^4$ 代入可得：公式左边=2/5，公式右边=2/3，公式不精确成立。

所以此求积公式具有 3 次代数精度。

例：(P.100，非机械求积公式) 试确定下面求积公式中的系数，使其具有尽可能高的代数精度。

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + B_0 f'(0)$$

解：将 $f(x)=1, x, x^2$ 代入求积公式，使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 1 \\ A_1 + B_0 = 0.5 \\ A_1 = 1/3 \end{cases}$$

解得 $A_0=2/3$，$A_1=1/3$，$B_0=1/6$。所以求积公式为

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{2}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1) + \frac{1}{6} f'(0)$$

将 $f(x)=x^3$ 代入可得，公式左边=1/4，公式右边=1/3，公式不精确成立。所以该求积公式具有 2 次代数精度。

代数精度

可以验证：

- 左矩形公式 和 右矩形公式 具有 零次 代数精度
- 中矩形公式 和 梯形公式 具有 一次 代数精度

性质： 任意具有 $m\ (\geq 0)$ 次代数精度的机械求积公式一定满足

$$\sum_{i=0}^{n} A_i = A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a$$

练习： 抛物线公式 具有 几次 代数精度？

4.1.3插值型求积公式

设求积节点为：$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$

若 $f(x_i)$ 已知，则可做 n 次多项式插值：$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$

$$\boxed{\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x \equiv \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)}$$

其中 $A_i = \int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x$

余项： $R[f] = \int_a^b \big(f(x) - L_n(x)\big)\,\mathrm{d}x = \int_a^b R_n(x)\,\mathrm{d}x$

其中 $R_n(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$

插值型求积公式

当 $f(x)=1, x, x^2, \ldots, x^n$ 时，有 $R_n(x)\equiv 0 \Longrightarrow R[f]=0$

即公式精确成立

性质： 插值型求积公式具有至少 n 次代数精度

定理： 下面的求积公式具有至少 n 次代数精度的充要条件是该公式是插值型的

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

当**机械求积公式**具有尽可能高的代数精度时，它总是**插值型**的

求积公式的收敛性

设求积节点为：$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，令 $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$

定义： 如果求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 满足

$$\lim_{h\to 0}\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\boxed{h = \max_{1\le i\le n} \Delta x_i}$$

则称该求积公式是 **收敛的**。

求积公式的稳定性

定义： 对 $\forall \varepsilon > 0$，若存在 $\delta > 0$，使得当 $\left|\tilde{f}_i - f(x_i)\right| \le \delta$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$ 时，有

$$\left|\sum_{i=0}^{n} A_i \tilde{f}_i - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\right| \le \varepsilon$$

则称该求积公式是 **稳定的**。

定理： 若 $A_i > 0$，$i = 0, 1, \ldots, n$，则下面的求积公式是稳定的

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

4.2 Newton-Cotes 求积公式

基于等分节点的插值型求积公式就称为 Newton-Cotes 公式

- 积分区间：$[a, b]$
- 求积节点：$x_i = a + i \times h$

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

- 求积公式：

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)}$$

$$C_i^{(n)} = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_i^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{b-a}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{t-k}{i-k}\,\mathrm{d}t$$

$$\boxed{x = a + th}$$

$$= \frac{1}{n}\cdot\frac{(-1)^{n-i}}{i!\,(n-i)!}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(t-k)\,\mathrm{d}t$$

Cotes 系数

Newton-Cotes 公式

$n=1$: $C_0^{(1)}=\frac{1}{2},\quad C_1^{(1)}=\frac{1}{2}$

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

梯形公式 代数精度 = 1

$n=2$: $C_0^{(2)}=\frac{1}{6},\ C_1^{(2)}=\frac{2}{3},\ C_2^{(2)}=\frac{1}{6}$

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

抛物线公式
Simpson公式

代数精度 = 3

$n=4$: 科特斯 (Cotes) 公式 代数精度 = 5

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

$$x_i=a+i\cdot h,\quad h=(b-a)/4$$

- **Cotes 系数与被积函数 $f(x)$ 及积分区间 $[a, b]$ 无关**
- **Cotes 系数可通过查表获得**

n	$C_i^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$						
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	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

- **Cotes 系数具有以下特点：**

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

(2) $C_i^{(n)} = C_{n-i}^{(n)}$

(3) **当 $n \geq 8$ 时，出现负数，稳定性得不到保证。而且当 n 较大时，由于Runge现象，收敛性也无法保证。**

一般不采用高阶的牛顿-科特斯求积公式

- **当 $n \leq 7$ 时，Newton-Cotes 公式是稳定的**

N-C 公式代数精度

定理： n 阶 Newton-Cotes 公式至少有 n 次代数精度

定理： 当 n 为偶数时，Newton-Cotes 公式至少有 n+1 次代数精度

证：只要证明当 n 为偶数时，公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 精确成立。

$$R[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x \quad =\int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

$\boxed{x=a+t\,h}$

$$=h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}(t-i)\,\mathrm{d}t$$

$\boxed{t=n-s}$

$$=(-1)^{n+1}h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}\big(s-(n-i)\big)\,\mathrm{d}s$$

$$=(-1)^{n+1}h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}(s-i)\,\mathrm{d}s$$

$\Rightarrow$ $R[f]=-R[f]$

即 $R[f]=0$

余项估计

求积公式余项估计三步曲：

(1) 计算代数精度，设为 m

(2) 构造 $f(x)$ 的 m 次插值多项式 $p_m(x)$，使得 $I_n(f)=I_n(p_m)$，求插值余项

注1：根据求积公式中的函数值或导数值，确定插值条件

注2：确保插值余项中的 $\omega_n(x)$ 在求积区间内不变号

(3) 计算求积公式的余项： $R[f]=\int_a^b f(x)dx-I_n(f)=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b p_m(x)dx$

N-C 公式的余项

定理： 当 n 是奇数时，设 $f(x)\in C^{n+1}[a,b]$，则 N-C 公式的余项可表示为

$$R[f]=\frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\ \mathrm{d}t \qquad \boxed{\eta\in(a,b)}$$

当 n 是偶数时，设 $f(x)\in C^{n+2}[a,b]$，则 N-C 公式的余项可表示为

$$R[f]=\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\ \mathrm{d}t \qquad \boxed{\eta\in(a,b)}$$

注： 不适用非等步长的求积公式和非机械求积公式！

几种低阶求积公式及其余项

在Newton-Cotes公式中，n=1,2,4时的公式是最常用也最重要的三个公式，称为低阶公式。

1.梯形(trapezia)公式及其余项

取$n=1$,则$x_0=a$, $x_1=b$,$h=b-a$

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

Cotes系数为

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

$$C_1^{(1)}=\int_0^1 tdt=\frac{1}{2}$$

求积公式为

$$I_1(f)=(b-a)\sum_{k=0}^{1}C_k^{(1)}f(x_k)=\frac{b-a}{2}[f(x_0)+f(x_1)]$$

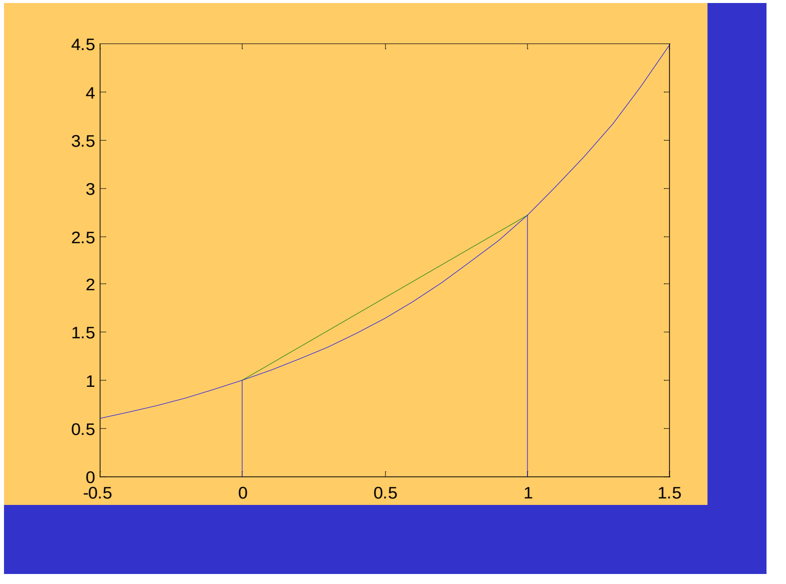
即 $$I_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

上式称为梯形求积公式,也称两点公式，记为

$$T=I_1(f)$$

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

几何意义如右图：



梯形公式的余项为

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

$$R(T)=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx$$

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

$$=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

第二积分
中值定理

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

$$\eta\in[a,b]$$

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

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

梯形(trapezia)公式具有1次代数精度。

2.Simpson公式及其余项

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

Cotes系数为

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

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

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

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

求积公式为

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

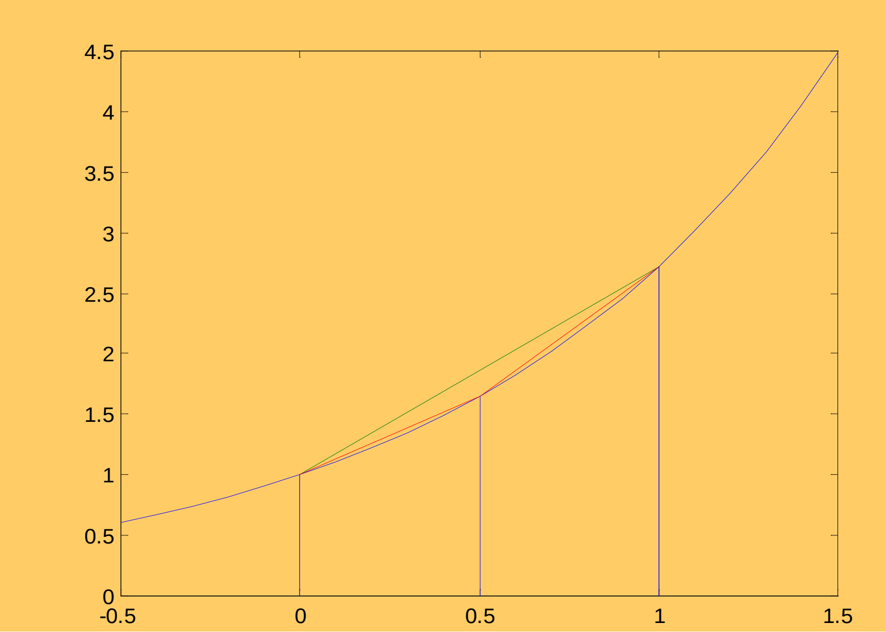
$$=(b-a)[\frac{1}{6}f(x_0)+\frac{4}{6}f(x_1)+\frac{1}{6}f(x_2)]\quad(7.3.12)$$

即

$$I_2(f)=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$

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：

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

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

Simpson公式具有3次代数精度。

3.Cotes公式及其余项

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

Cotes系数为

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

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

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

$$C_2^{(4)}=\frac{1}{4\cdot 2!\cdot 2!}\int_0^4 t(t-1)(t-3)(t-4)dt=\frac{12}{90}$$

$$C_3^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot 3!}\int_0^4 t(t-1)(t-2)(t-4)dt=\frac{32}{90}$$

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

求积公式为

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

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

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

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：

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

Cotes公式具有5次代数精度。

例 运用梯形公式、辛普森公式分别计算

积分 $\int_0^1 e^x dx$，并估计误差。

解： 运用梯形公式

$$\int_0^1 e^x dx \approx \frac{1}{2}[e^0 + e^1] = 1.8591409$$

其误差为 $|R(f)| = \left| -\frac{1}{12} e^{\eta} (1-0)^3 \right| \le \frac{e}{12} = 0.2265235, \quad \eta \in (0,1)$

运用辛普森公式

$$\int_0^1 e^x dx \approx \frac{1}{6}[e^0 + 4e^{\frac{1}{2}} + e^1] = 1.7188612$$

其误差为

$$|R(f)| = \left| -\frac{1}{180} e^{\eta} \left(\frac{1-0}{2}\right)^4 \right| = \left| -\frac{1}{2880} e^{\eta} \right| \le \frac{e}{2880} = 0.00094385, \quad \eta \in (0,1)$$

4.3复合求积公式

- 提高积分计算精度的常用两种方法
  - 用复合公式
  - 用非等距节点

- 复合求积公式
  - 将积分区间分割成多个小区间
  - 在每个小区间上使用低次 Newton-Cotes 求积公式

复合梯形公式

将 $[a, b]$ 分成 n 个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$，其中

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$$

通常是 n 等分

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h_i}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

$$h_i = x_{i+1} - x_i$$

取等距节点

$$h = (b-a)/n$$

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

复合梯形公式

余项公式

$$\boxed{R[f] = -\sum_{i=0}^{n-1} \frac{h_i^3}{12} f''(\eta_i)} \qquad \boxed{h_i = x_{i+1} - x_i,\quad \eta_i \in (x_i, x_{i+1})}$$

当 x_i 其中为等距节点时，即 $\boxed{x_i = a + ih,\quad h = \frac{b-a}{n}}$

$$R[f] = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i)$$

$$= -\frac{b-a}{12}h^2\left(\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i)\right) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)$$

$$\boxed{\eta \in (a,b)}$$

复合 Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x$$

取等距节点

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

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

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

注：复合 Simpson 公式实际使用了 $2n+1$ 个节点

复合 Simpson 公式

余项公式

$$R[f] = -\frac{h^5}{2880}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i) \qquad \boxed{\eta_i \in (x_i, x_{i+1})}$$

$$= -\frac{(b-a)h^4}{2880}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)\right)$$

$$= -\frac{(b-a)h^4}{2880} f^{(4)}(\eta) \qquad \boxed{\eta \in (a,b)}$$

性质： 复合梯形公式和复合 Simpson 公式都是收敛的，也都是稳定的。

复合Cotes公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx C_n = h\sum_{k=0}^{n-1}\sum_{i=0}^{4} C_i^{(4)} f(x_{k+\frac{i}{2}})$$

$$= \frac{h}{90}\sum_{k=0}^{n-1}[7f(x_k)+32f(x_{k+\frac{1}{4}})+12f(x_{k+\frac{2}{4}})+32f(x_{k+\frac{3}{4}})+7f(x_{k+1})]$$

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

复合Cotes公式的余项:

设被积函数$f(x)\in C^6[a,b]$,

$$I - C_n = \sum_{k=0}^{n-1}\left(-\frac{2h^7}{945\cdot 4^6}f^{(6)}(\eta_k)\right) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

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

比较三种复合公式的余项：

$$I-T_n \approx -\frac{1}{12}h^2[f'(b)-f'(a)] \qquad = o(h^2)$$

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

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

分别是h的2,4,6阶无穷小量,

即T_n,S_n,C_n趋于定积分I的速度依次更快。

例. 使用各种复合求积公式计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

解: 为简单起见，依次使用8阶复合梯形公式、4阶复合Simpson公式和2阶复合Cotes公式。

可得各节点的值如下表：

$Trapz$	$Simp.$	$Cotes$	x_i	$f(x_i)$
x_0	x_0	x_0	0	1
x_1	$x_{0+\frac{1}{2}}$	$x_{0+\frac{1}{4}}$	0.125	0.99739787
x_2	x_1	$x_{0+\frac{1}{2}}$	0.25	0.98961584
x_3	$x_{1+\frac{1}{2}}$	$x_{0+\frac{3}{4}}$	0.375	0.97672674
x_4	x_2	x_1	0.5	0.95885108
x_5	$x_{2+\frac{1}{2}}$	$x_{1+\frac{1}{4}}$	0.625	0.93615564
x_6	x_3	$x_{1+\frac{1}{2}}$	0.75	0.90885168
x_7	$x_{3+\frac{1}{2}}$	$x_{1+\frac{3}{4}}$	0.875	0.87719257
x_8	x_4	x_2	1	0.84147098

分别由复合Trapz、Simpson、Cotes公式有

$$T_8 = \frac{1}{16}[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1)] = 0.94569086$$

精度最低

$$S_4 = \frac{1}{24}[f(0) + 4\sum_{k=0}^{3} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{3} f(x_k) + f(1)] = 0.94608331$$

精度次高

$$C_2 = \frac{1}{180}[7f(0) + \sum_{k=0}^{1}[32f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12f(x_{k+\frac{2}{4}}) + 32f(x_{k+\frac{3}{4}})]$$

$$+14\sum_{k=1}^{1} f(x_k) + 7f(1)] = 0.94608307$$

精度最高

原积分的精确值为 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx = 0.946083070367183$

例： 计算定积分

$$\int_0^1 e^x \,\mathrm{d}x$$

用复合梯形公式和复合simpson公式时，n 分别取多大时才能使得误差不超过 0.5×10^{-5}

解： $f(x)=e^x \Rightarrow \max\limits_{0\le x\le 1}\left|f^{(k)}(x)\right| = \max\limits_{0\le x\le 1}\left|e^x\right| = e$

复合梯形公式

$$\left|R_T[f]\right| = \left|-\frac{b-a}{12}h_T^2 f''(\eta)\right| \le \frac{e}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2$$

要使误差不超过 0.5×10^{-5}，需要

$$\frac{e}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 \le \frac{1}{2}\times 10^{-5} \Rightarrow n \ge 212.85 \quad \text{取 } n=213$$

213 等分

复合 simpson 公式

$$\left|R_S[f]\right| = \left|-\frac{b-a}{2880} h_S^4 f^{(4)}(\eta)\right| \le \frac{e}{2880}\left(\frac{1}{n}\right)^4$$

要使误差不超过 0.5×10^{-5}， 需要

$$\frac{e}{2880}\left(\frac{1}{n}\right)^4 \le \frac{1}{2}\times 10^{-5} \quad \Rightarrow \quad n \ge 3.71$$

故取 $n=4$

$\boxed{\text{8 等分}}$

4.4Romberg 算法

利用复合梯形公式、复合simpson公式、复合Cotes公式等计算定积分时，如何选取步长 h？

太 大 → 计算精度难以保证

太 小 → 增加额外的计算量

解决办法：采用 变步长算法

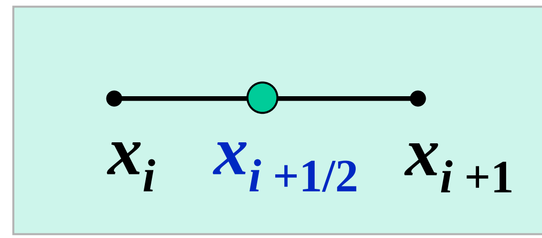
通常采取将区间不断对分的方法，即取 $n = 2^k$，反复使用复合求积公式，直到所得到的计算结果满足指定的精度为止。

梯形法递推公式

- 将 $[a, b]$ 分成 n 等分 $[x_i\,, x_{i+1}]$， $x_i = a + i \cdot h, \quad h = \dfrac{b-a}{n}$

$$\Rightarrow \quad T_n = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}\left[f(x_i) + f(x_{i+1}) \right] = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b) \right]$$

- 步长折半： $[x_i\,, x_{i+1/2}]$， $[x_{i+1/2}\,, x_{i+1}]$



$$\Rightarrow \quad T_{2n} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{4}\left[\left(f(x_i) + f(x_{i+1/2}) \right) + \left(f(x_{i+1/2}) + f(x_{i+1}) \right) \right]$$

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

$$= \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}\left[f(x_i) + f(x_{i+1}) \right] + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2}) \quad = \frac{1}{2} T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2})$$

梯形法递推公式

$$\boxed{T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2}) = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(a+ih+0.5h)}$$

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

$$T_1 = \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big)$$

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{h_0}{2}\sum_{i=0}^{0} f(a+ih_0+0.5h_0) \qquad \boxed{h_0 = b-a}$$

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{h_1}{2}\sum_{i=0}^{1} f(a+ih_1+0.5h_1) \qquad \boxed{h_1 = \frac{b-a}{2}}$$

$$T_8 = \frac{1}{2}T_4 + \frac{h_2}{2}\sum_{i=0}^{3} f(a+ih_2+0.5h_2) \qquad \boxed{h_2 = \frac{b-a}{4}}$$

梯形法递推公式

$$T_{2^k} = \frac{1}{2} T_{2^{k-1}} + \frac{h_{k-1}}{2} \sum_{i=0}^{2^{k-1}-1} f(a + ih_{k-1} + 0.5h_{k-1})$$

$$\boxed{h_{k-1} = \frac{b-a}{2^{k-1}}}$$

记 $\boxed{T^{(k)} \equiv T_{2^k}}$

$$\boxed{T^{(k)} = \frac{1}{2} T^{(k-1)} + \frac{h_{k-1}}{2} \sum_{i=0}^{2^{k-1}-1} f(a + ih_{k-1} + 0.5h_{k-1})}$$

$$\boxed{h_{k-1} = \frac{b-a}{2^{k-1}}}$$

$I[f]=0.946083070367\cdots$

例： 用梯形法的递推公式计算定积分 $\int_0^1 \frac{\sin(x)}{x}\,\mathrm{d}x$，要求计算精度满足 $|T_{2n}-T_n|<\varepsilon=10^{-7}$

解：

$$T^{(0)}=\frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big)=0.920735492$$

$$T^{(1)}=\frac{1}{2}T^{(0)}+\frac{h_0}{2}\sum_{i=0}^{0}f(a+ih_0+0.5h_0)=0.939793285$$

$$T^{(2)}=\frac{1}{2}T^{(1)}+\frac{h_1}{2}\sum_{i=0}^{1}f(a+ih_1+0.5h_1)=0.944513522$$

$$T^{(3)}=\frac{1}{2}T^{(2)}+\frac{h_2}{2}\sum_{i=0}^{1}f(a+ih_2+0.5h_2)=0.945690864$$

⋮

k	$T^{(k)}$
0	0.920735492
1	0.939793285
2	0.944513522
3	0.945690864
4	0.945985030
5	0.946058561
6	0.946076943
7	0.946081539
8	0.946082687
9	0.946082975
10	0.946083046

梯形法的加速

梯形法递推公式算法简单，编程方便

但收敛速度较 慢

梯形法的加速——龙贝格 (Romberg) 算法

定理： 设 $f(x)\in C^{\infty}[a, b]$, 记 $T_n = T(h)$, 则有

$$T(h) = I[f] + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_i h^{2i} + \cdots$$

证明：略（利用 Taylor 展开即可）

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

梯形法的加速

$$T(h) = I[f] + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_i h^{2i} + \cdots \quad = I[f] + O(h^2)$$

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = I[f] + \alpha_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \alpha_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \cdots + \alpha_i \left(\frac{h}{2}\right)^{2i} + \cdots$$

$$4T(h/2) - T(h) = 3I[f] + (-3/4)\alpha_2 h^4 + (-15/16)\alpha_3 h^6 + \cdots$$

$$S(h) \equiv \frac{1}{3}\left(4T\left(\frac{h}{2}\right) - T(h)\right) = I[f] + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots \quad = I[f] + O(h^4)$$

$$C(h) \equiv \frac{1}{15}\left(16S\left(\frac{h}{2}\right) - S(h)\right) = I[f] + \gamma_1 h^6 + \gamma_2 h^8 + \cdots = I[f] + O(h^6)$$

$$R(h) \equiv \frac{1}{63}\left(64C\left(\frac{h}{2}\right) - C(h)\right) = I[f] + O(h^8)$$

$$\vdots$$

Richardson 外推算法

$I[f]=0.946083070367\cdots$

例： 计算定积分 $\int_0^1 \frac{\sin(x)}{x}\,\mathrm{d}x$

$T_1 = 0.920735492$

$T_2 = 0.939793285$

$T_4 = 0.944513522$

$$S_1 = \frac{1}{3}(4T_2 - T_1) = 0.946145882$$

$$S_2 = \frac{1}{3}(4T_4 - T_2) = 0.946086934$$

$$C_1 = \frac{1}{15}(16S_2 - S_1) = 0.946083004$$

k	$T_0^{(k)}$
0	0.920735492
1	0.939793285
2	0.944513522
3	0.945690864
4	0.945985030
5	0.946058561
6	0.946076943
7	0.946081539
8	0.946082687
9	0.946082975
10	0.946083046

Romberg 算法

记: $T_0^{(k)} = T_{2^k}$, $T_1^{(k)} = S_{2^k}$, $T_2^{(k)} = C_{2^k}$, $T_3^{(k)} = R_{2^k}$

$T_0^{(k)}$: k 次等分后梯形公式计算所得的近似值

$T_m^{(k)}$: m 次加速后所得的近似值

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

① $T_1 = T_0^{(0)}$			
② $T_2 = T_0^{(1)}$	③ $S_1 = T_1^{(0)}$		
④ $T_4 = T_0^{(2)}$	⑤ $S_2 = T_1^{(1)}$	⑥ $C_1 = T_2^{(0)}$	
⑦ $T_8 = T_0^{(3)}$	⑧ $S_4 = T_1^{(2)}$	⑨ $C_2 = T_2^{(1)}$	⑩ $R_1 = T_3^{(0)}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$ $\ddots$

Romberg 算法是收敛的

k	区间等分数 $n=2^k$	梯形序列 T_{2^k}	辛浦生序列 $S_{2^{k-1}}$	柯特斯序列 $C_{2^{k-2}}$	龙贝格序列 $R_{2^{k-3}}$
0	$2^0=1$	T_1			
1	$2^1=2$	T_2	S_1		
2	$2^2=4$	T_4	S_2	C_1	
3	$2^3=8$	T_8	S_4	C_2	R_1
4	$2^4=16$	T_{16}	S_8	C_4	R_2
5	$2^5=32$	T_{32}	S_{16}	C_8	R_4
…	…	…	…	…	…

设以$T_0^{(k)}$表示二分 k 次后求得的梯形值，且以$T_m^{(k)}$表示序列$\left\{T_0^{(k)}\right\}$的m次加速值，可得

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

我们从收敛较慢的$\{T_n\}$序列只用了一些四则运算，便推出了收敛更快的$\{S_n\}$序列, $\{C_n\}$序列和$\{R_n\}$序列。$\{R_n\}$序列也称为龙贝格序列。

可以证明，如果 $f(x)$ 充分光滑，那么T 数表每一列的元素及对角线元素均收敛到所求的积分值 I，即

$$\lim_{k\to\infty}T_m^{(k)}=I\quad(m\text{固定})\qquad\qquad \lim_{m\to\infty}T_m^{(k)}=I$$

$I[f]=0.4$

例： 用 Romberg 算法计算定积分 $\int_0^1 \sqrt{x^3}\,\mathrm{d}x$，要求计算精度满足 $|T_m^{(k)} - T_{m-1}^{(k)}| < \varepsilon = 10^{-7}$

解： 逐步计算可得

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	$T_5^{(k)}$
0	0.50000000					
1	0.42677670	0.40236893				
2	0.40701811	0.40043192	0.40030278			
3	0.40181246	0.40007725	0.40005361	0.40004965		
4	0.40046340	0.40001371	0.40000948	0.40000878	0.40000862	
5	0.40011767	0.40000243	0.40000168	0.40000155	0.40000152	0.40000152

4.6 Gauss 型求积公式

怎样构造更高精度的求积方法？

考虑求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

含 $2n+2$ 个参数 (节点与系数)，为了使该公式具有尽可能高的代数精度，可将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^{2n+1}$ 代入公式，使其精确成立，则可构造出代数精度至少为 $2n+1$ 的求积公式!

自由选取求积节点！等分点不一定最佳！

例： 试确定节点 x_i 和系数 A_i，使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度，并求出此求积公式的代数精度。

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

解： 将 $f(x)=1, x, x^2, x^3$ 代入求积公式，使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0x_0 + A_1x_1 = 0 \\ A_0x_0^2 + A_1x_1^2 = 2/3 \\ A_0x_0^3 + A_1x_1^3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = 1,\ A_1 = 1 \\ x_0 = -\dfrac{\sqrt{3}}{3},\ x_1 = \dfrac{\sqrt{3}}{3} \end{cases}$$

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

该公式对 $f(x)=x^4$ 不精确成立，故有 3 次代数精度！

缺点： 非线性方程组求解较困难！

Gauss 型求积公式

一般情形：考虑机械带权求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

定义：若存节点在 $x_i \in [a, b]$ 及系数 A_i，使得上面的求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度，则称节点 x_i 为**高斯点**，A_i 为**高斯系数**，求积公式为 **高斯型求积公式**

性质：上面的求积公式至多具有 $2n+1$ 次代数精度

将 $f(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)^2$ 代入验证即可

Gauss 求积公式在所有机械求积公式中代数精度最高

Gauss 点

问题： 如何计算 Gauss 点 x_i 和 高斯系数 A_i

法一： 解非线性方程组

太困难! ☹

法二： 分开计算

- 先确定 Gauss 点
- 再通过解线性方程组计算 Gauss 系数

Gauss 点

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

定理： 上面的插值型求积公式中的节点 x_i $(i = 0, 1, \dots, n)$ 是 Gauss点的**充要条件**是：多项式 $\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$ 与任意次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 都关于权函数 $\rho(x)$ 正交，即

$$\int_a^b \rho(x) p(x) \omega_{n+1}(x)\, \mathrm{d}x = 0$$

Gauss 点

推论： 设 $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x), \ldots$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交的多项式族，则 Gauss 点即为 $p_{n+1}(x)$ 的零点！

- **计算 Gauss 点的一般方法**
  - 求出 $\omega_{n+1}(x)$ 的表达式 ← 与 $1, x, x^2, \ldots, x^n$ 带权正交
  - 计算其零点

特殊情形：

(1) $[a, b]=[-1, 1]$, $\rho(x)=1$,

则 Gauss 点即为 Legendre 多项式的零点

(2) $[a, b]=[-1, 1]$, $\rho(x)=\left(\sqrt{1-x^2}\right)^{-1}$

则 Gauss 点即为 Chebyshev 多项式的零点

例 构造下列积分的Gauss求积公式：

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

解：令其对$f(x)$=1，x，x^2，x^3 精确成立，得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \int_{-1}^{1} dx = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = \int_{-1}^{1} x dx = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2 dx = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3 dx = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = 1 \\ A_1 = 1 \\ x_0 = -\dfrac{1}{\sqrt{3}} \\ x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

余项公式

设 $p_{2n+1}(x)$ 是 $f(x)$ 在节点 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 上的 $2n+1$ 次 Hermite 插值多项式, 即 $p_{2n+1}(x_i) = f(x_i),\quad p'_{2n+1}(x_i) = f'(x_i)$

$$\Rightarrow \quad f(x) = p_{2n+1}(x) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)$$

$$\Rightarrow \quad \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x) p_{2n+1}(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\rho(x)\omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \sum_{i=0}^{n} A_i p_{2n+1}(x_i) + \int_a^b \rho(x)\frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{R[f] = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x} \quad \boxed{\eta \in (a,b)}$$

收敛性与稳定性

可以证明：当 a, b 为有限数，且 $f(x) \in C[a, b]$ 时

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x$$

Gauss 型公式是收敛的

令 $f(x) = l_i^2(x)$ $\Rightarrow$ $\int_a^b \rho(x) l_i^2(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} A_j l_i^2(x_j) = A_i$

$\Rightarrow$ $A_i > 0$

Gauss 型公式是稳定的

Gauss 公式与正交多项式

- **利用正交多项式构造 Gauss 求积公式**
  - **积分区间: [-1, 1]，权函数：** $\rho(x) = 1$

    ➡ **Gauss-Legendre 求积公式**

  - **积分区间: [-1, 1]，权函数：** $\rho(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

    ➡ **Gauss-Chebyshev 求积公式**

Gauss-Legendre 求积公式

- **积分区间: [-1, 1], 权函数: $\rho(x) = 1$**

  Gauss 点 = Legendre 多项式 $p_{n+1}(x)$ 的零点

- **G-L 求积公式:**

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

低阶 G-L 公式

- $n=0$ 时，$P_{n+1}(x)=x$ ⇒ Gauss 点：$x_0=0$

G-L 求积公式:

将 $f(x)=1$ 代入求出 A_0

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2f(0)$$

- $n=1$ 时，$P_{n+1}(x)=\dfrac{1}{2}(3x^2-1)$

⇒ Gauss 点：$x_0=-\dfrac{\sqrt{3}}{3},\ x_1=\dfrac{\sqrt{3}}{3}$

将 $f(x)=1,\ x$ 代入求出 $A_0,\ A_1$

两点 G-L 求积公式:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)+f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

低阶 G-L 公式

- n =2 时, $P_{n+1}(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$

➡ Gauss 点: $x_0=-\frac{\sqrt{15}}{5}, x_1=0, x_2=\frac{\sqrt{15}}{5},$

三点 G-L 求积公式:

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right)+\frac{8}{9} f(0)+\frac{5}{9} f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right)}$$

更多 G-L 公式

当 $n > 3$时，可用数值方法计算 $P_{n+1}(x)$ 的零点 (教材122页)

n	节点个数	Gauss点	Gauss系数
0	1	0.0000000	2.0000000
1	2	±0.5773503	1.0000000
2	3	±0.7745967 0.0000000	0.5555556 0.8888889
3	4	±0.8611363 ±0.3399810	0.3478548 0.6521452
4	5	±0.9061798 ±0.5384693 0.0000000	0.2369269 0.4786287 0.5688889
5	6	±0.93246951 ±0.66120939 ±0.23861919	0.17132449 0.36076157 0.46791393

G-L 公式余项

余项公式

$$R[f]=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_{-1}^{1}\tilde{P}_{n+1}^{2}(x)\,\mathrm{d}x$$

$$=\frac{2^{2n+3}\left[(n+1)!\right]^{4}}{(2n+3)\left[(2n+2)!\right]^{3}}f^{(2n+2)}(\eta)$$

$\boxed{\eta\in(-1,1)}$

一般区间上的 G-L 公式

- **积分区间: $[a, b]$, 权函数: $\rho(x) = 1$**

做变量代换 $x = \dfrac{b-a}{2}t + \dfrac{b+a}{2}$

$$g(t) = f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$$

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} g(t)\,\mathrm{d}t \approx \sum_{i=0}^{n} A_i g(t_i)}$$

G-L公式举例

$I[f]=0.46740110027234\cdots$

例： 用四点G-L公式 (n=3) 计算定积分 $\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2\cos(x)\,dx$

解： 令 $x=\frac{\pi}{4}t+\frac{\pi}{4}$

$$\Rightarrow \boxed{g(t)=\frac{\pi^2}{16}(t+1)^2\cos\frac{\pi}{4}(t+1)}$$

$$\Rightarrow \int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2\cos(x)\,dx=\frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1}\frac{\pi^2}{16}(t+1)^2\cos\frac{\pi}{4}(t+1)\,dt$$

$$\approx\frac{\pi}{4}[0.3479g(-0.8611)+0.6521g(-0.3400)$$
$$+0.6521g(0.3400)+0.3479g(0.8611)]$$

$$\approx 0.4674$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

- **积分区间: [-1, 1], 权函数:** $\rho(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

Gauss 点 = Chebyshev 多项式 $T_{n+1}(x)$ 的零点

- **G-C 求积公式:**

$$\boxed{\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\, \mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)}$$

G-C 公式

- $T_{n+1}(x)$ 的零点 $$\boxed{x_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2n+2}\pi\right)}$$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$

- Gauss 系数 $$\boxed{A_i = \frac{\pi}{n+1}}$$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$

- G-C 求积公式:

$$\boxed{\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{n+1}\sum_{i=0}^{n} f(x_i)}$$

- 余项: $$\boxed{R[f] = \frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta)} \quad \boxed{\eta \in (-1, 1)}$$

低阶 G-C 公式

- $n = 0$

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{-1/2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \pi f(0)$$

- $n = 1$

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{-1/2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{2}\left[f\left(-\sqrt{2}/2\right) + f\left(\sqrt{2}/2\right)\right]$$

两点 G-C 公式

- $n = 2$

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{-1/2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{3}\left[f\left(-\sqrt{3}/2\right) + f\left(0\right) + f\left(\sqrt{3}/2\right)\right]$$

三点 G-C 公式

G-C公式举例

例：用五点G-C公式计算奇异积分 $\int_{-1}^{1} \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}}\,dx$

解：直接代公式可得

$$\int_{-1}^{1} \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}}\,dx \approx \frac{\pi}{5}\sum_{i=0}^{4} f\left(\cos\left(\frac{2i-1}{2n+2}\pi\right)\right)$$

$$\approx 3.9775$$

误差估计

$$\left|R[f]\right| \le \frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!}\left\|f^{(2n+2)}(\eta)\right\|_\infty = \frac{2\pi}{2^{10}\times 10!}\,e \le 4.6\times 10^{-9}$$

无穷区间上Gauss公式

- **无穷区间上的 Gauss 型求积公式**
  - **积分区间: [0, ∞]，权函数：** $\rho(x) = e^{-x}$

Gauss-Laguerre 求积公式

  - **积分区间: [- ∞, ∞]，权函数：** $\rho(x) = e^{-x^2}$

Gauss-Hermite 求积公式

这两个求积公式的 Gauss 点和 Gauss 系数可以通过查表得到，见教材 124，125 页 。

几点注记

- **Gauss 型求积公式的优点**
  - 计算精度高
  - 可计算无穷区间上的积分和奇异积分
- **Gauss 型求积公式的缺点**
  - 需计算 Gauss 点和 Gauss 系数
  - 增加节点时需重新计算
- **实际应用中可以使用复合 Gauss求积公式**
  - 将积分区间分隔成若干小区间
  - 在每个小区间上使用 Gauss 求积公式

4.7二重积分

二重积分 $$\iint_{\Omega} f(x,y)\,\mathrm{d}v$$ $\boxed{\Omega \in R^2}$

- **基本思想：** **先化累次积分，然后数值积分**

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

$$\boxed{\iint_{\Omega} f(x,y)\,\mathrm{d}v = \int_a^b \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x,y)\,\mathrm{d}y\mathrm{d}x}$$

$$\boxed{\iint_{\Omega} f(x,y)\,\mathrm{d}v = \int_a^b \int_{x_1(y)}^{x_2(y)} f(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y}$$

举例

例： 用两点Gauss求积公式计算二重积分

$$\iint_{\Omega} x^2 + 2y^2 \mathrm{d}v$$

$$\boxed{\Omega = [-1,1]\times[-1,1]}$$

解： $\displaystyle \iint_{\Omega} x^2 + 2y^2 \mathrm{d}v = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} x^2 + 2y^2 \ \mathrm{d}y\mathrm{d}x$

令 $f(x,y) = x^2 + 2y^2$，可得

$$\int_{-1}^{1} x^2 + 2y^2 \ \mathrm{d}y \approx f\left(x, -\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(x, \frac{\sqrt{3}}{3}\right) = 2x^2 + \frac{4}{3}$$

令 $g(x) = 2x^2 + \dfrac{4}{3}$，可得

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} x^2 + 2y^2 \ \mathrm{d}y\mathrm{d}x \approx \int_{-1}^{1} g(x) \ \mathrm{d}x \approx g\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + g\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) = 4$$

4.8数值微分

基本思想：用函数值的线性组合来近似函数的导数值

已知 $f(x)$ 在节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 上的函数值，
对于 $[a, b]$ 中的任意一点，如何计算函数在这点的导数？

- **插值型求导公式**
  - 构造出 $f(x)$ 的插值多项式 $p_n(x)$
  - 用 $p_n(x)$ 的导数来近似 $f(x)$ 的导数
- **利用样条插值**
- **外推算法**

4.8.1中点方法与误差分析

数值微分就是用函数值的线性组合近似函数在某点的导数值．按导数定义可以简单地用差商近似导数，这样立即得到几种数值微分公式

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

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

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

其中h为一增量．称为步长．后一种数值微分方法称为中点方法、它是前两种方法的算术平均．但它的误差阶却由$O(h)$提高到$O(h^2)$．上面所给出的三个公式是很实用的．尤其是中点公式更为常用．

为要利用中点公式 $G(h)=\dfrac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$ 计算导数 $f'(a)$ 的近似值，首先须选取合适的步长．为此需要进行误差分析．分别将 $f(a\pm h)$ 在 $x=a$ 处做泰勒展开有

$$f(a\pm h)=f(a)\pm hf'(a)+\frac{h^2}{2!}f''(a)\pm\frac{h^3}{3!}f'''(a)$$

$$+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}(a)\pm\frac{h^5}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$$

代入$G(h)$得 $$G(h)=f'(a)+\frac{h^2}{3!}f'''(a)+\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$$

由此得知，从截断误差的角度看，步长越小，计算结果越准确.且

$$\left|f'(a)-G(h)\right|\le\frac{h^2}{6}M$$

其中 $M\ge\max\limits_{|x-a|\le h}\left|f'''(x)\right|$.

再考察舍入误差．按中点公式计算，当h很小时，因 $f(a+h)$ 与 $f(a-h)$很接近，直接相减会造成有效数字的严重损失(参看第1章第4节)．因此，从舍入误差的角度来看，步长不宜太小．

当 $f(a+h)$及 $f(a-h)$分别有舍入误差ε_1及ε_2时，若令 $\varepsilon=\max\{|\varepsilon_1|,|\varepsilon_2|\}$ 则计算 $f'(a)$ 的舍入误差上界为

$$\delta(f'(a))=|f'(a)-G(a)|\le\frac{|\varepsilon_1|+|\varepsilon_2|}{2h}=\frac{\varepsilon}{h}$$

它表明h越小，舍入误差 $\delta(f'(a))$ 越大，故它是病态的．用中点公式计算 $f'(a)$ 的误差上界为$E(h)=\dfrac{h^2}{6}M+\dfrac{\varepsilon}{h}$，要使误差$E(h)$最小，步长$h$不宜太大，也不宜太小．其最优步长应为 $h_{\text{opt}}=\sqrt[3]{3\varepsilon/M}$.

4.8.2插值型求导公式

- **插值型求导公式**

$$\boxed{f'(x) \approx P_n'(x)}$$

- **插值型求导公式的余项**

$$f'(x) - P_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\right)' + \frac{1}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right)'$$

- **在节点 x_i 处的余项**

$$f'(x_i) - P_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(x_i - x_j)$$

我们只考察节点处的导数值！

两点公式

- 节点 x_0，x_1， 步长 $h = x_1 - x_0$

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

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

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{h}\big(f(x_1) - f(x_0)\big) \\ f'(x_1) &= \frac{1}{h}\big(f(x_1) - f(x_0)\big) \end{aligned}} \begin{aligned} &-\frac{h}{2} f''(\xi_0) \\ &+\frac{h}{2} f''(\xi_1) \end{aligned}$$

三点等距公式

- **步长 h，节点 $x_i = x_0 + ih$，$i = 0, 1, 2$**

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

变量代换：$x = x_0 + th$

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

三点等距公式

$$\frac{dP_2}{dt}=\frac{1}{2}\left[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)\right]$$

$$\frac{dP_2}{dx}=\frac{dP_2}{dt}\frac{dt}{dx}$$

$$=\frac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)\right]$$

分别令 $t = 0, 1, 2,$ 可得

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}\left[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)\right]+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

$$\boxed{f'(x_1)=\frac{1}{2h}\left[-f(x_0)+f(x_2)\right]}-\frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}\left[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)\right]+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)$$

例　已知函数 $y=e^x$ 的下列数值.

x	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y	12.1825	13.4637	14.8797	16.4446	18.1741

试用二点、三点微分公式计算 $x=2.7$ 处的一阶、二阶导数值.

解　本题没有明确指出用哪些点处的函数值来求 $f'(2.7)$ 和 $f''(2.7)$. 因此，随着步长 h 不同，导数值有可能不同. 另外，用两点函数值时，只能求一阶导数值.

方法 1：　取 $h=0.1$ 时，两点公式有两种取法. 当 $x_0=2.6$，$x_1=2.7$时，

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.1}[f(2.7)-f(2.6)]=\frac{1}{0.6}[14.8797-13.4637]$$

$$=14.1600.$$

当 $x_0=2.7, x_1=2.8$ 时，

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.1}[f(2.8)-f(2.7)]=15.6490.$$

三点公式取 $x_0=2.6, x_1=2.7, x_2=2.8$，得

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.1}[f(2.8)-f(2.6)]=14.9045.$$

$$f''(2.7)\approx\frac{1}{0.1^2}[f(2.8)-2f(2.7)+f(2.6)]=14.8900.$$

方法 2： 取 $h=0.2$，此时两点公式仍有两种取法. 当 $x_0=2.5, x_1=2.7$ 时，

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.2}[f(2.7)-f(2.5)]=13.4860.$$

当 $x_0=2.7, x_1=2.9$ 时，

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{0.2}[f(2.9)-f(2.7)]=16.4720.$$

三点公式取 $x_0=2.5, x_1=2.7, x_2=2.9$,则

$$f'(2.7)\approx\frac{1}{2\times0.2}[f(2.9)-f(2.5)]=14.9790.$$

$$f''(2.7)\approx\frac{1}{0.2^2}[f(2.9)-2f(2.7)+f(2.5)]=14.9300.$$

注:$f'(2.7)$和 $f''(2.7)$的真值都是 14.87973…,上面的计算表明:

1) 当使用两点公式时,应取步长较小的函数值;

2) 一般情况下,同样步长的两点公式没有三点公式准确,步长越小越精确.但如果高阶导数无界或舍入误差超过截断误差时,这个结论就不一定对了.

高阶导数

$$\boxed{f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x)} \qquad k = 2, 3, 4, \ldots$$

- **二阶导数的近似**

$$\boxed{f''(x_1) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2) \right]} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

$$f''(x_1) \approx \frac{1}{h^2}\left[f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h) \right]$$

4.8.3利用三次样条求导

根据三次样条理论,

$$\max_{a\le x\le b}|f^{(k)}(x)-s^{(k)}(x)|\le C_k\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^{4-k},$$

$$f'(x_j)\approx s'(x_j+0)=-\frac{h_j}{3}M_j-\frac{h_j}{6}M_{j+1}+\frac{y_{j+1}-y_j}{h_j},$$

$$f''(x_j)\approx M_j.$$

$$\|f'-s'\|_\infty\le\frac{1}{24}\|f^{(4)}\|_\infty h^3,$$

$$\|f''-s''\|_\infty\le\frac{3}{8}\|f^{(4)}\|_\infty h^2.$$

4.8.4外推算法

$$\begin{cases} f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \dfrac{1}{2!}h^2 f''(x) + \dfrac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \dfrac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) + \cdots \\ f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \dfrac{1}{2!}h^2 f''(x) - \dfrac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \dfrac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) - \cdots \end{cases}$$

$$G_0(h) \triangleq \frac{1}{2h}\left[f(x+h) - f(x-h) \right] = f'(x) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \alpha_3 h^6 + \cdots$$

$$G_1(h) \triangleq \frac{4G_0(h/2) - G_0(h)}{3} = f'(x) + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots$$

$$\vdots$$

外推算法

$$\boxed{G_m^{(k)} = \frac{4^m G_{m-1}^{(k+1)} - G_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}}$$

$$\begin{array}{llll}
① \; G_0^{(0)} & & & \\
② \; G_0^{(1)} & ③ \; G_1^{(0)} & & \\
④ \; G_0^{(2)} & ⑤ \; G_1^{(1)} & ⑥ \; G_2^{(0)} & \\
⑦ \; G_0^{(3)} & ⑧ \; G_1^{(2)} & ⑨ \; G_2^{(1)} & ⑩ \; G_3^{(0)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \quad \ddots
\end{array}$$

总结

- **数值积分基本概念**
- **Newton-Cotes 求积公式**
- **复合求积公式**
- **Romberg 求积公式**
- **Gauss 求积公式**
- **自适应积分方法**
- **多重积分**
- **数值微分**