第3章 数值积分与数值微分

计算机学院 孙伟平

第3章

3.1 数值积分

3.1.1 机械求积公式和代数精度

3.1.2 求积公式的构造方法

3.1.3 Newton-Cotes 求积公式

3.1.4 复化求积法

3.1.5 Romberg 求积公式

3.2 数值微分

3.2.1 差商型数值微分

3.2.2 插值型数值微分

3.1 数值积分

艾萨克·牛顿
（Isaac Newton 1643年-1727年）
英国著名的物理学家、数学家

戈特弗里德·威廉·莱布尼茨
(Gottfried Wilhelm Leibniz，1646年-1716年)
德国数学家

设函数 $f(x)$ 在积分区间 $[a, b]$ 上连续，且 $F'(x) = f(x)$，理论上可以用牛顿-莱布尼兹公式计算定积分：

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

然而在生产实践和科学研究中，极少直接用上述公式进行求积。

- 原函数无法用简单的初等函数表示出来

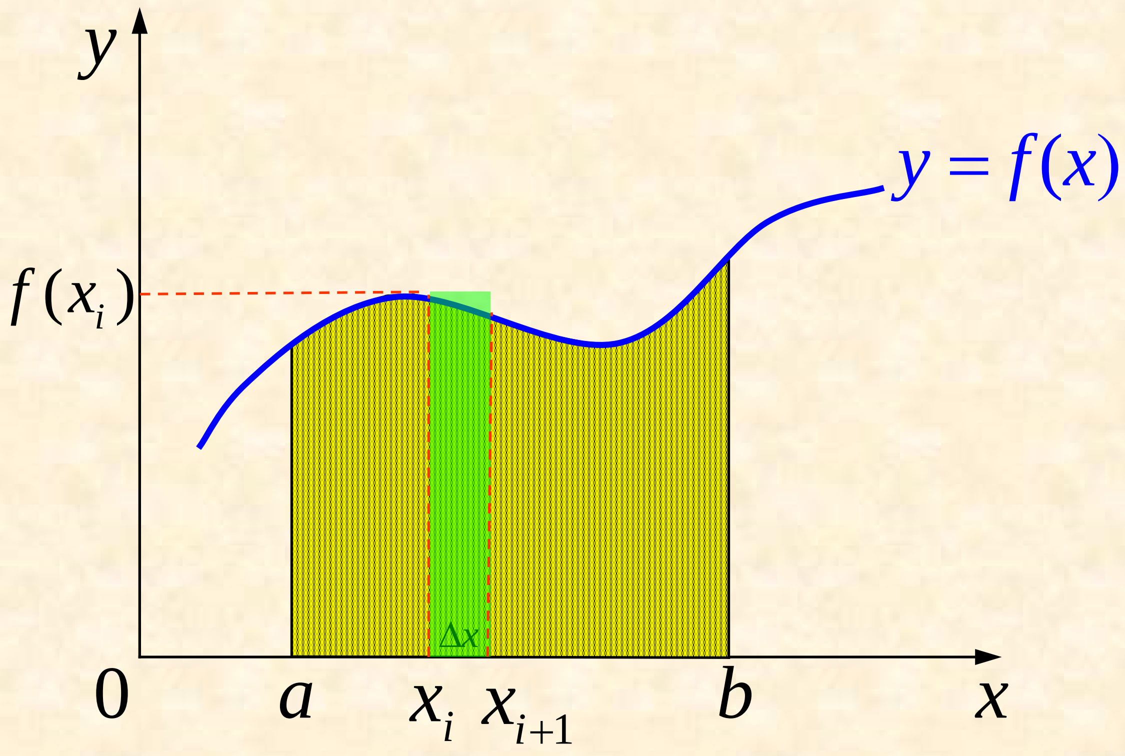
$$\int_a^b \sin x^2\,\mathrm{d}x,\quad \int_a^b \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x,\quad \int_a^b e^{-x^2}\,\mathrm{d}x,\quad \int_a^b \frac{1}{\ln x}\,\mathrm{d}x$$

- 被积函数 $f(x)$ 是以离散形式给出，无法得到它的原函数
- $f(x)$ 的原函数能用初等函数表示，但表达式过于复杂，利用牛顿-莱布尼兹公式直接求积不方便

$$\int_{x_0}^{x_1}\sqrt{ax^2+bx+c}\,\mathrm{d}x=\left[\frac{2ax+b}{4a}\sqrt{ax^2+bx+c}\right.$$

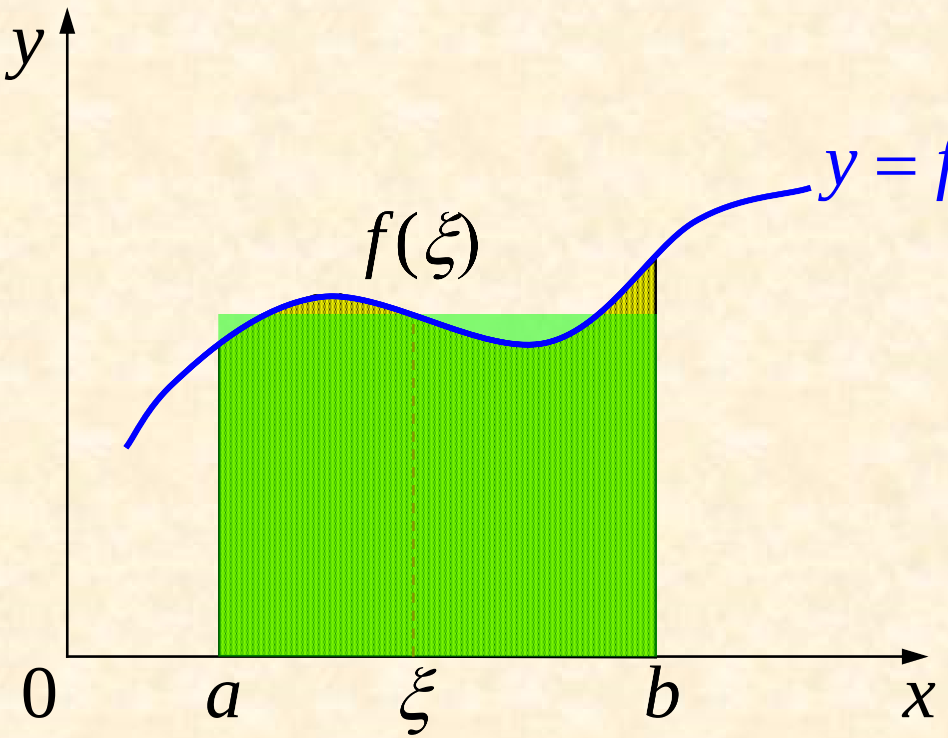
$$\left.+\frac{4ac-b^2}{8\sqrt{a^3}}\ln\left|2ax+b+2\sqrt{a}\sqrt{ax^2+bx+c}\right|\right]_{x_0}^{x_1}$$

3.1.1 机械求积与代数精度



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

3.1.1 机械求积与代数精度



积分中值定理：

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

$f(x)$ 在积分区间 $[a, b]$ 上的平均高度

未知

机械求积（续）

- 梯形公式：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times \boxed{\frac{f(a)+f(b)}{2}}$$

- 中矩形公式：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times \boxed{f\left(\frac{a+b}{2}\right)}$$

- 辛普森（Simpson）公式：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times \boxed{\frac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6}}$$

$f(\xi)$的近似值

机械求积（续）

- 可以在积分区间 $[a, b]$ 中选择若干个节点 x_i，用这些节点处的高度（函数值 $f(x_i)$）的加权平均值近似替代 $f(\xi)$，从而构造出如下所示的求积公式：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\left[k_0 f(x_0) + k_1 f(x_1) + \cdots + k_n f(x_n)\right]$$

其中加权系数： $k_0 + k_1 + \cdots + k_n = 1$

- 更一般的形式：

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

求积系数 求积节点

机械求积（续）

$$\text{机械求积公式：}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

特点：

- 求积系数 A_i 仅与节点 x_i 和积分区间长度有关，与被积函数 $f(x)$ 的具体形式无关
- 公式具有通用性
- 避开了原函数的求解计算

代数精度

$$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)+\underline{R}$$

余项

为了衡量一个求积公式的精确程度，一般通过余项的大小来衡量。

例 用梯形公式和**Simpson**公式分别近似 $\int_0^2 f(x)dx$ 。

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

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

$f(x)$	1	x	x^2	x^3	x^4	e^x
积分的准确值	2	2	2.67	4	6.40	6.389
T公式所得的值	2	2	4	8	16	8.389
S公式所得的值	2	2	2.67	4	6.67	6.421

使得求积公式准确成立的多项式的次数，可以作为衡量求积公式精确程度的标准。

代数精度

定义 3.1　如果求积公式

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

对于一切次数 $\le m$ 的多项式均准确成立，而对于次数 $> m$ 的某个多项式不能准确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

代数精度（续）

如果机械求积公式对 $x^j,\ j=0,1,\cdots,k$ 能准确成立，则它对一切 k 次代数多项式均准确成立。

机械求积公式对一切 $x^j,(0\le j\le k)$ 均准确成立，则有：

$$\int_a^b (a_0x^0+a_1x^1+\cdots+a_kx^k)\,\mathrm{d}x$$

$$=a_0\int_a^b x^0\,\mathrm{d}x+a_1\int_a^b x^1\,\mathrm{d}x+\cdots+a_k\int_a^b x^k\,\mathrm{d}x$$

$$=a_0\sum_{i=0}^n A_ix_i^0+a_1\sum_{i=0}^n A_ix_i^1+\cdots+a_k\sum_{i=0}^n A_ix_i^k$$

$$=\sum_{i=0}^n A_i(a_0x_i^0+a_1x_i^1+\cdots+a_kx_i^k)$$

$$\boxed{\begin{aligned}\int_a^b x^0\,\mathrm{d}x&=\sum_{i=0}^n A_ix_i^0\\ \int_a^b x^1\,\mathrm{d}x&=\sum_{i=0}^n A_ix_i^1\\ &\vdots\\ \int_a^b x^k\,\mathrm{d}x&=\sum_{i=0}^n A_ix_i^k\end{aligned}}$$

代数精度的求法

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

考查 $f(x) = 1, x, x^2, x^3 \ldots$，依次验证求积公式

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

是否成立，若第一个不成立的机械求积等式的 $f(x)$ 是 x^m，则求积公式的代数精度为 $m-1$。

代数精度 例题

例1 考查梯形公式的代数精度

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

- 零次多项式

设 $f(x)=c$ (常数)

$$\left.\begin{aligned}&\text{左边}=\int_a^b c\,\mathrm{d}x = cx\Big|_a^b = c(b-a)\\&\text{右边}=(b-a)\times\frac{c+c}{2}=c(b-a)\end{aligned}\right\}$$

梯形公式对一切零次多项式均准确成立

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

- 一次多项式

设 $f(x)=cx+d \quad (c,d$为常数)

$$左边=\int_a^b (cx+d)\,\mathrm{d}x=\left.\frac{cx^2}{2}\right|_a^b+\left.dx\right|_a^b=\boxed{\frac{c(b^2-a^2)}{2}+d(b-a)}$$

梯形公式对一切一次多项式均准确成立

$$右边=(b-a)\times\frac{(ca+d)+(cb+d)}{2}$$

$$=\frac{1}{2}(b-a)\left[c(b+a)+2d\right]=\boxed{\frac{c(b^2-a^2)}{2}+d(b-a)}$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

- 二次多项式

设 $f(x)=cx^2+dx+e \quad (c,d,e\text{为常数})$

$$\text{左边}=\int_a^b (cx^2+dx+e)\,\mathrm{d}x=\left.\frac{cx^3}{3}\right|_a^b+\left.\frac{dx^2}{2}\right|_a^b+\left.ex\right|_a^b$$

$$=\frac{c(b^3-a^3)}{3}+\frac{d(b^2-a^2)}{2}+e(b-a)$$

$$\text{右边}=(b-a)\times\frac{(ca^2+da+e)+(cb^2+db+e)}{2}$$

$$=\frac{1}{2}(b-a)\left[c(b^2+a^2)+d(b+a)+2e\right]$$

$$=\frac{c(b-a)(b^2+a^2)}{2}+\frac{d(b^2-a^2)}{2}+e(b-a)$$

不恒等

代数精度 例题

例2 已知$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$，试确定系数 A_0, A_1, A_2，使得上式的代数精度尽可能高。

解：分别设 $f(x) = 1, x, x^2$，则有：

$$\left.\begin{aligned} A_0 + A_1 + A_2 &= 2 \\ -A_0 + A_2 &= 0 \\ A_0 + A_2 &= 2/3 \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} A_0 &= 1/3 \\ A_1 &= 4/3 \\ A_2 &= 1/3 \end{aligned}$$

则$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx [f(-1) + 4f(0) + f(1)]/3$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx [f(-1)+4f(0)+f(1)]/3$$

取 $f(x)=x^3$，则左边 = 右边 = 0

取 $f(x)=x^4$，左边 $=\int_{-1}^{1} x^4 dx = 2/5 \neq$ 右边 $= 2/3$

所以上述求积公式的代数精度为 3。

小练习：请写出积分 $\int_{-1}^{1} f(x)dx$ 的**Simpson**公式。

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx [f(-1)+4f(0)+f(1)]/3$$

其代数精度为 3。

代数精度（续）

定理3.1 对于任意给定的 $n+1$ 个互异的积分节点

$$a \le x_0 < x_1 < x_2 \cdots < x_n \le b$$

总存在系数 $A_0, A_1, \dots, A_n$，使得求积公式

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

的代数精度至少为 n。

证：若已知插值节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 处的函数值 $f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n)$，则可构造 n 次代数多项式：

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)$$

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) \qquad f(x) = L_n(x) + R(x)$$

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

$$= \sum_{i=0}^{n}\left[f(x_i) \underbrace{\boxed{\int_a^b l_i(x)}}_{=A_i} \mathrm{d}x \right] + \overbrace{\boxed{\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi)\cdot\omega(x)\,\mathrm{d}x}}^{=0}$$

若 $f(x)$ 是不高于 n 次的代数多项式，则 $f^{(n+1)}(x) = 0$

3.1.2 求积公式的构造方法

1. 可以用代数精度为标准来构造求积公式。

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

如果上述求积公式具有 n 次代数精度。则

$$\boxed{\begin{array}{l} \int_a^b x^0\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^0 \\ \int_a^b x^1\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^1 \\ \cdots \\ \int_a^b x^k\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^k \end{array}}$$

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

2. 插值型求积公式

设 $a \le x_0 < x_1 < x_2 \cdots < x_n \le b$，根据 $[x_i, f(x_i)]$ 可以构造

n 次 Lagrange 插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x)$$

去逼近 $f(x)$。因此

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

插值型求积公式

$$= \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) \right) \mathrm{d}x$$

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

$$= \sum_{i=0}^{n} \boxed{\left[\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x \right]} f(x_i)$$

定理3.2

- 给定 $n+1$ 个积分节点 x_i 以及相应的函数值 $f(x_i)$，$i=0,1,\cdots,n$。则求积公式：

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

代数精度至少为 n 次 ⟷ 求积公式为插值型

证：以 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为插值节点的 Lagrange 插值基函数 $l_i(x)$，$i=0,1,\cdots,n$ 也是一个 n 次代数多项式，如果求积公式的代数精度至少有 n 次，则：

$$\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} A_j \boxed{l_i(x_j)} = A_i \qquad l_i(x_j) = \begin{cases} 1 & j=i \\ 0 & j\neq i \end{cases}$$

所以 求积公式为插值型

另一方面，若被积函数 $f(x)$ 是不大于 n 的代数多项式，设 $f(x)=a_0x^0+a_1x^1+\cdots+a_nx^n=\sum_{i=0}^{n}a_ix^i$

由于 $\sum_{i=0}^{n}x_i^k l_i(x)=x^k \qquad k=0,1,\cdots,n$

$$\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i(x)=\sum_{i=0}^{n}(a_0x_i^0+a_1x_i^1+\cdots+a_nx_i^n)l_i(x)$$

$$=a_0\sum_{i=0}^{n}x_i^0 l_i(x)+a_1\sum_{i=0}^{n}x_i^1 l_i(x)+\cdots+a_n\sum_{i=0}^{n}x_i^n l_i(x)$$

$$=a_0x^0+a_1x^1+\cdots+a_nx^n=f(x)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}\overbrace{\left[\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x\right]}^{A_i}f(x_i)$$

插值型求积公式 例题

例3 已知某求积公式 $\int_0^4 f(x)\,\mathrm{d}x \approx \dfrac{16f(1)+12f(2)+8f(4)}{9}$

试问该机械求积公式是插值型的吗？

解：根据已知的三个求积节点$x_0=1,\ x_1=2,\ x_2=4$进行 Lagrange 插值，则插值基函数为：

$$l_0(x)=\frac{(x-2)(x-4)}{(1-2)(1-4)}=\frac{1}{3}(x^2-6x+8)$$

$$l_1(x)=\frac{(x-1)(x-4)}{(2-1)(2-4)}=-\frac{1}{2}(x^2-5x+4)$$

$$l_2(x)=\frac{(x-1)(x-2)}{(4-1)(4-2)}=\frac{1}{6}(x^2-3x+2)$$

$$\int_0^4 f(x)\,dx \approx \frac{16f(1)+12f(2)+8f(4)}{9}$$

$$l_0(x)=\frac{1}{3}(x^2-6x+8) \quad l_1(x)=-\frac{1}{2}(x^2-5x+4) \quad l_2(x)=\frac{1}{6}(x^2-3x+2)$$

$$\int_0^4 l_0(x)\,dx=\frac{1}{3}\left(\frac{x^3}{3}-3x^2+8x\right)\Bigg|_0^4=\frac{1}{3}\left(\frac{64}{3}-3\times16+8\times4\right)=\frac{16}{9}$$

$$=A_0$$

$$\int_0^4 l_1(x)\,dx=-\frac{1}{2}\left(\frac{x^3}{3}-\frac{5}{2}x^2+4x\right)\Bigg|_0^4=-\frac{1}{2}\left(\frac{64}{3}-\frac{5}{2}\times16+4\times4\right)=\frac{4}{3}$$

$$=A_1$$

$$\int_0^4 l_2(x)\,dx=\frac{1}{6}\left(\frac{x^3}{3}-\frac{3}{2}x^2+2x\right)\Bigg|_0^4=\frac{1}{6}\left[\frac{64}{3}-\frac{3}{2}\times16+2\times4\right]=\frac{8}{9}$$

$$=A_2$$

所以原机械求积公式是插值型的求积公式。

3.1.3 Newton-Cotes 公式

1. 公式的推导

积分区间等分 ⇨ Cotes系数

2. 数值稳定性

3. 截断误差

4. 低阶Newton-Cotes公式

- 梯形公式
- Simpson公式
- Cotes公式

公式
截断误差

- 梯形公式：

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

- 辛普森（Simpson）公式：

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

积分节点等距——积分区间等分

系数是常数，与区间长度无关，与节点数有关

1. Newton-Cotes 公式

如果将积分区间 $[a, b]$ 分为 n 等分，其求积节点 x_i 为：

$$x_i = a + ih, \qquad i = 0,1,2,\cdots,n$$

（上式中，$h = \dfrac{b-a}{n}$ 表示各等分小区间的宽度，称为**步长。**）

以上述 $n+1$ 个求积节点为插值节点，构建被积函数 $f(x)$ 的 n 次拉格朗日插值多项式 $L_n(x)$。

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

$$= \int_a^b \left[\sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) \right] \mathrm{d}x$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \left[f(x_i) \int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x \right]$$

$$= (b-a) \sum_{i=0}^{n} \left[\boxed{\frac{\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x}{b-a}} \cdot f(x_i) \right]$$

C_i Cotes系数

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

$$\prod_{j=0,j\neq i}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}$$

$$x_j=a+jh$$

$$C_i=\frac{\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x}{b-a}$$

$$nh \qquad \mathrm{d}x=h\mathrm{d}t$$

积分变量替换：$x=a+th$

$$\begin{cases} x=a & t=0 \\ x=b & t=\dfrac{b-a}{h}=n \end{cases}$$

$$C_i=\frac{1}{nh}\int_0^n\left[\prod_{j=0,j\neq i}^{n}\frac{(a+th)-(a+jh)}{(a+ih)-(a+jh)}\right]h\mathrm{d}t$$

$$=\frac{1}{n}\int_0^n\left[\prod_{j=0,j\neq i}^{n}\frac{t-j}{i-j}\right]\mathrm{d}t$$

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

$$C_i = \frac{1}{n}\int_0^n \left[\prod_{j=0,j\neq i}^{n} \frac{t-j}{i-j}\right]\mathrm{d}t$$

$$= \frac{1}{n}\boxed{\frac{1}{i-0}\cdots\frac{1}{i-(i-1)}}\cdot\boxed{\frac{1}{i-(i+1)}\cdots\frac{1}{i-n}}\int_0^n \left[\prod_{j=0,j\neq i}^{n}(t-j)\right]\mathrm{d}t$$

$$= \frac{1}{n}\cdot\frac{1}{i!}\left(-\frac{1}{1}\right)\left(-\frac{1}{2}\right)\cdots\left(-\frac{1}{n-i}\right)\int_0^n \left[\prod_{j=0,j\neq i}^{n}(t-j)\right]\mathrm{d}t$$

$$= \frac{(-1)^{n-i}}{n\times i!\times(n-i)!}\int_0^n \left[\prod_{j=0,j\neq i}^{n}(t-j)\right]\mathrm{d}t \qquad i = 0,1,2,\cdots,n$$

将积分区间 [a, b] n 等分

Cotes系数

n	$C_i^{(n)}$								
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	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$		
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\boxed{\frac{-928}{28350}}$	$\frac{10496}{28350}$	$\boxed{\frac{-4540}{28350}}$	$\frac{10496}{28350}$	$\boxed{\frac{-928}{28350}}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

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

负数

2. Newton-Cotes公式的稳定性

在设计计算法时，需要考虑

- 符合精度要求?
- 计算结果可靠?

算法的计算结果可靠，是指在运算过程中，舍入误差的积累不会对计算结果产生较大的影响。

数值稳定性：一个算法，如果在执行它的过程中舍入误差在一定条件下能够得到控制，则称它是数值稳定的；否则，称它是数值不稳定的。

Newton-Cotes公式的稳定性

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

如考虑计算 $f(x_i)$ 时产生的舍入误差 ε_i

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

则由舍入误差引起的积分误差为：

$$\varepsilon = \left\{(b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i [f(x_i)+\varepsilon_i]\right\} - \left\{(b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i f(x_i)\right\}$$

$$= (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i \varepsilon_i$$

$$\varepsilon = (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i \varepsilon_i \qquad \boxed{\sum_{i=0}^{n} C_i = 1}$$

记 $\varepsilon_{\max} = \max|\varepsilon_i|, \quad i = 0,1,\cdots,n$

$$|\varepsilon| = \left|(b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i\varepsilon_i\right| \le (b-a)\varepsilon_{\max}\sum_{i=0}^{n}|C_i|$$

$n \le 7$ 时，C_i皆为正，故 $\sum_{i=0}^{n}|C_i| = \sum_{i=0}^{n} C_i = 1$

$|\varepsilon| \le (b-a)\varepsilon_{\max}$ ⟶ 由舍入误差引起的积分误差**有上界**

$n \ge 8$ 时，C_i 出现负数，$\sum_{i=0}^{n}|C_i|$随着 n 的增加而不断增大

$|\varepsilon|$无上界 ⟶ 由舍入误差引起的积分误差无上界

高阶Newton-Cotes公式不是数值稳定的，不宜采用。

3. Newton-Cotes公式误差

把Lagrange余项代入积分式，得

$$R=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\omega_{n+1}(x)=\underbrace{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}_{\downarrow}$$

$$h^{n+1}(t-0)(t-1)\cdots(t-n)$$

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

$$x=a+th$$

$$x_i=a+ih$$

$$x-x_i=(t-i)h$$

$$\mathrm{d}x=h\mathrm{d}t$$

积分区间

变为[0, n]

$$R=\frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)(t-0)(t-1)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t$$

$$=\frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)\prod_{j=0}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t$$

定理3.3 对于 n 阶 Newton-Cotes 公式，当 n 为偶数时，其代数精度至少可以达到 $n+1$。

证明： $$R=\frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)(t-0)(t-1)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t$$

若 $f(x)$ 为 $n+1$ 次代数多项式，则

$$f^{(n+1)}(x)=a_{n+1}(n+1)!$$

$$R=\frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n a_{n+1}(n+1)!(t-0)(t-1)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t$$

$$=a_{n+1}h^{n+2}\int_0^n (t-0)(t-1)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t$$

n 为偶数，$n=2m$　　变量替换：$u=t-m$

$$\boxed{t=u+m,\quad \mathrm{d}t=\mathrm{d}u,\quad t=0\quad u=-m;\quad t=n\quad u=m}$$

$$R=a_{n+1}h^{n+2}\int_{-m}^{m}(u+m)(u+m-1)\cdots(u+m-2m)\,\mathrm{d}u$$

$$=a_{n+1}h^{n+2}\boxed{\int_{-m}^{m}(u+m)(u+m-1)\cdots(u-m)\,\mathrm{d}u}=0$$

设 $g(u)=(u+m)(u+m-1)\cdots(u-m+1)(u-m)$

$$g(-u)=(-u+m)(-u+m-1)\cdots(-u-m+1)(-u-m)$$

$$=(-1)^{2m+1}(u-m)(u-m+1)\cdots(u+m-1)(u+m)=-g(u)$$

即 n 为偶数时， n 阶Newton-Cotes积分公式对任意 n 次多项式均精确成立，所以其代数精度至少可以达到 $n+1$。

补 充

积分第二中值定理

设 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上连续，$g(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上不变号，则必存在一点 $\eta \in [a, b]$，使得：

$$\int_a^b f(x) \cdot g(x)\,\mathrm{d}x = f(\eta)\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x$$

4. 低阶Newton-Cotes公式

公式截断误差			
	• 梯形公式	一等分	一阶
	• Simpson公式	二等分	二阶
	• Cotes公式	四等分	四阶

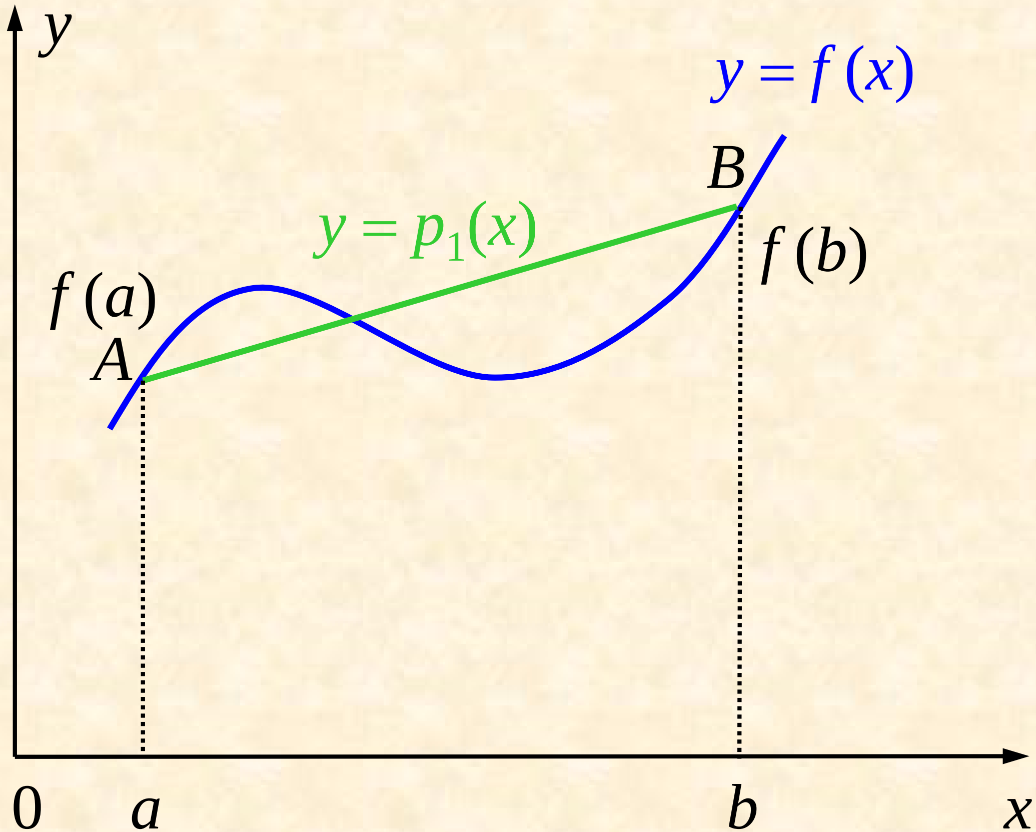
梯形公式 T

- 若积分区间 $[a, b]$ 两端点处的函数值 $f(a), f(b)$ 为已知，可应用线性插值公式 $p_1(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的积分来近似替代 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的积分，即牛顿-柯特斯公式中取 $n = 1$ 的情况。
- 当 $n = 1$ 时，$C_0^{(1)} = C_1^{(1)} = 1/2$，于是有：

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

$$\approx (b-a)\times\frac{f(a)+f(b)}{2} \qquad (h = b-a)$$

梯形公式（续）



- 梯形公式的几何意义是用四边梯形的面积近似代替 $y = f(x)$ 围成的曲边梯形的面积。

梯形公式的余项

$$R=\frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)(t-0)(t-1)\cdots(t-n)\,\mathrm{d}t$$

设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上有二阶连续导数。

$$R_T=\frac{h^{1+2}}{(1+1)!}\int_0^1 f^{(1+1)}(\xi)(t-0)(t-1)\,\mathrm{d}t=\frac{h^3}{2}\int_0^1 f''(\xi)(t^2-t)\,\mathrm{d}t$$

$$=\frac{h^3}{2}f''(\eta)\int_0^1(t^2-t)\,\mathrm{d}t=\frac{h^3}{2}f''(\eta)\left(\frac{t^3}{3}-\frac{t^2}{2}\right)\Bigg|_0^1$$

$$=\frac{h^3}{2}f''(\eta)\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2}\right)=-\frac{h^3}{12}f''(\eta)\qquad \eta\in[a,b]\qquad h=b-a$$

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

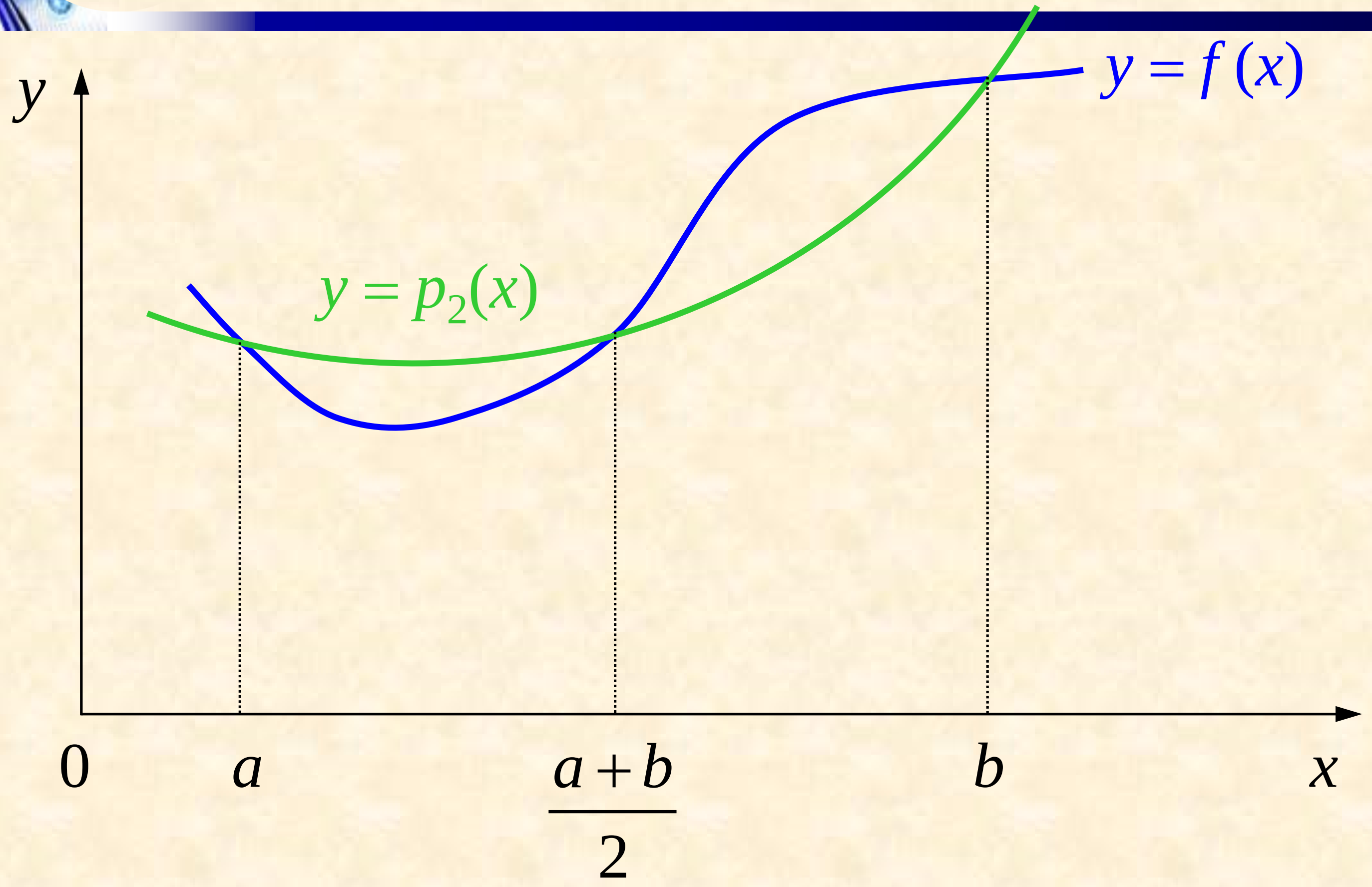
辛普森公式 S

- 若积分区间 $[a, b]$ 两端点以及积分区间中点 $(a+b)/2$ 处的函数值 $f(a), f(b), f[(a+b)/2]$ 为已知，可应用抛物线插值公式 $p_2(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的积分来近似替代 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的积分，即牛顿-柯特斯公式中取 $n=2$ 的情况。
- 当 $n=2$ 时，$C_0^{(2)}=C_2^{(2)}=1/6$， $C_1^{(2)}=4/6$，从而:

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

$$\approx (b-a)\times\frac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6} \qquad \left(h=\frac{b-a}{2}\right)$$

辛普森公式（续）



- 辛普森公式的几何意义为用抛物线 $y = p_2(x)$ 围成的曲边梯形面积近似 $y=f(x)$ 围成的曲边梯形的面积。

辛普森公式的余项

设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有四阶连续导数。

辛普森公式代数精度为 3。

构造三次 Hermite 插值多项式满足：

$$H_3(a) = f(a), \quad H_3\left(\frac{a+b}{2}\right) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$H_3(b) = f(b), \quad H_3'\left(\frac{a+b}{2}\right) = f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

辛普森公式的余项（续）

设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有四阶连续导数。

构造三次 Hermite 插值多项式满足：

$$H_3(a) = f(a), \quad H_3\left(\frac{a+b}{2}\right) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$H_3(b) = f(b), \quad H_3'\left(\frac{a+b}{2}\right) = f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

其截断误差为：$R_3 = \dfrac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\dfrac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$

$$R_3=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$$

$$R_S=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

恒为负

$$=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$x\in[a,b]$ 所以：

$(x-a)(x-b)\le 0$

作变量替换：$t=x-\dfrac{a+b}{2}$ 并记：$h=\dfrac{b-a}{2}$

$x=a,t=-h$

$x=b,t=h$

$\mathrm{d}x=\mathrm{d}t$

$$R_S=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{-h}^{h}(t+h)t^2(t-h)\,\mathrm{d}t$$

$$=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{-h}^{h}(t^2-h^2)t^2\,\mathrm{d}t$$

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{-h}^{h}(t^2-h^2)t^2\,\mathrm{d}t$$

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{-h}^{h}(t^4-h^2t^2)\,\mathrm{d}t = \frac{2f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_{0}^{h}(t^4-h^2t^2)\,\mathrm{d}t$$

$$= \frac{2f^{(4)}(\eta)}{4!}\left(\frac{t^5}{5}-h^2\frac{t^3}{3}\right)\Bigg|_0^h = \frac{2f^{(4)}(\eta)}{4!}\left(\frac{h^5}{5}-h^2\frac{h^3}{3}\right)$$

$$= -\frac{2f^{(4)}(\eta)}{24}\cdot\frac{2h^5}{15}$$

$$= -\frac{h^5}{90}\cdot f^{(4)}(\eta) \qquad \eta\in[a,b] \qquad h=\frac{b-a}{2}$$

$$\left(-\frac{(b-a)^5}{2880}\cdot f^{(4)}(\eta)\right)$$

柯特斯公式 C

- 当 $n=4$ 时，由四次 Lagrange 插值式推导而得的求积公式称为柯特斯（Cotes）公式:

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

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

$$\begin{cases} x_0 = a \\ x_1 = a+h \\ x_2 = a+2h \\ x_3 = a+3h \\ x_4 = a+4h = b \end{cases} \qquad (h=\frac{b-a}{4})$$

柯特斯公式的余项

设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有六阶连续导数。

柯特斯公式

代数精度为 5

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\times\frac{7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)}{90}$$

其截断误差为:

$$R_C = -\frac{8h^7}{945}\cdot f^{(6)}(\eta) \qquad \eta\in[a, b] \qquad h=\frac{b-a}{4}$$

三种求积公式及其余项

$$I \approx (b-a)\times\left[\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

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

$$I \approx (b-a)\times\left[\frac{1}{6}f(a)+\frac{4}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{1}{6}f(b)\right]$$

$$R_S = -\frac{h^5}{90}\cdot f^{(4)}(\eta) \qquad h = \frac{b-a}{2}$$

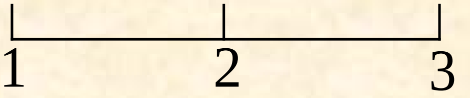
$$I \approx (b-a)\times\frac{7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)}{90}$$

$$R_C = -\frac{8h^7}{945}\cdot f^{(6)}(\eta) \qquad h = \frac{b-a}{4}$$

例 题

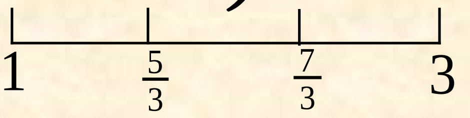
用 $n=2$ 和 $n=3$ 的 Newton-Cotes 公式求 $\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}\,dx$ 的近似值

解： 1) $n=2$ 时



$$\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx \approx (3-1)\cdot\left(\frac{1}{6}e^{-\frac{1}{2}}+\frac{4}{6}e^{-\frac{2}{2}}+\frac{1}{6}e^{-\frac{3}{2}}\right)=0.766575505$$

2) $n=3$ 时



$$\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx \approx (3-1)\cdot\left(\frac{1}{8}e^{-\frac{1}{2}}+\frac{3}{8}e^{-\frac{5}{6}}+\frac{3}{8}e^{-\frac{7}{6}}+\frac{1}{8}e^{-\frac{3}{2}}\right)$$

$$=0.766916279$$

$\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}\,dx$ 的准确值为 $0.7668009991\cdots$

回 顾

- 数值积分：
  - 机械求积公式
  - 代数精度
  - 插值型求积公式
  - Newton-Cotes公式
    - 梯形公式
    - Simpson公式
    - Cotes梯形公式

插值：

- 整体插值 ⟺
- 分段插值 ⟺

数值积分：

- 利用Lagrange插值得到积分公式
- ？

3.1.4 复化求积法

- **Newton-Cotes** 公式实质上是以积分区间内的等距节点为插值节点，通过构造被积函数的 **Lagrange** 插值多项式而推导出的求积公式。
- 在一定范围内，求积公式的代数精度随插值节点的增加而提高。
- 高次插值出现**Runge**现象。
- n 较大时，**Newton-Cotes** 系数不容易求解，且出现负数项，高阶**Newton-Cotes** 公式数值不稳定。

复化求积（续）

- 从余项的讨论看到，积分区间越小，求积公式的截断误差也越小。因此，我们经常把积分区间分成若干小区间，在每个小区间上采用次数不高的插值公式，构造出相应的求积公式，然后再把它们加起来得到整个区间上的求积公式，这就是复化求积公式的基本思想。
- 复化求积公式克服了高次 **Newton-Cotes** 公式计算不稳定的问题，其运算简单且易于在计算机上实现。
- 复化**T**公式，复化**S**公式，复化**C**公式

复化梯形公式

- 将区间 [a, b] 划分为 n 等分，积分节点表示为

$$x_i = a + ih \qquad i = 0,1,\cdots,n$$

- 小区间的长度称为**步长**： $h = \dfrac{b-a}{n}$

- 每个小区间 [x_i, x_{i+1}] 上的积分为：

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx h\frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}$$

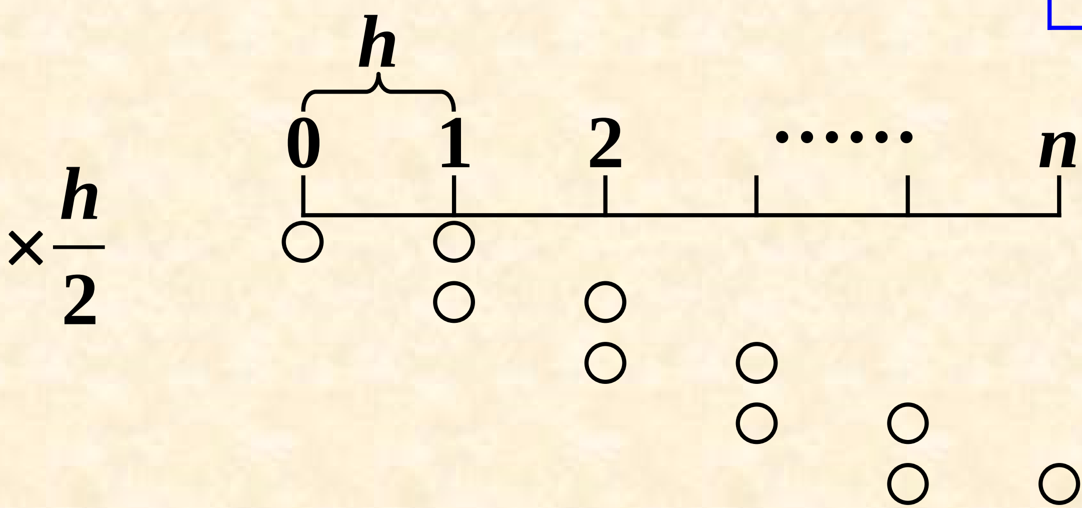
复化梯形公式（续）

◆ $f(x)$在区间 $[a, b]$ 上的积分为每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上的积分之和，即：

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

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

中间节点



复化辛普森公式

- 将区间 $[a, b]$ 划分为偶数等分 $n=2m$，每个小区间 $[x_{2i}, x_{2i+2}]$ 上的积分为：

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2h\frac{f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})}{6}$$

其中步长 $h=(b-a)/n$

- $f(x)$在区间 $[a, b]$ 上的积分为每个小区间 $[x_{2i}, x_{2i+2}]$ 上的积分之和，即：

$$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{m-1}\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,\mathrm{d}x$$

偶数节点

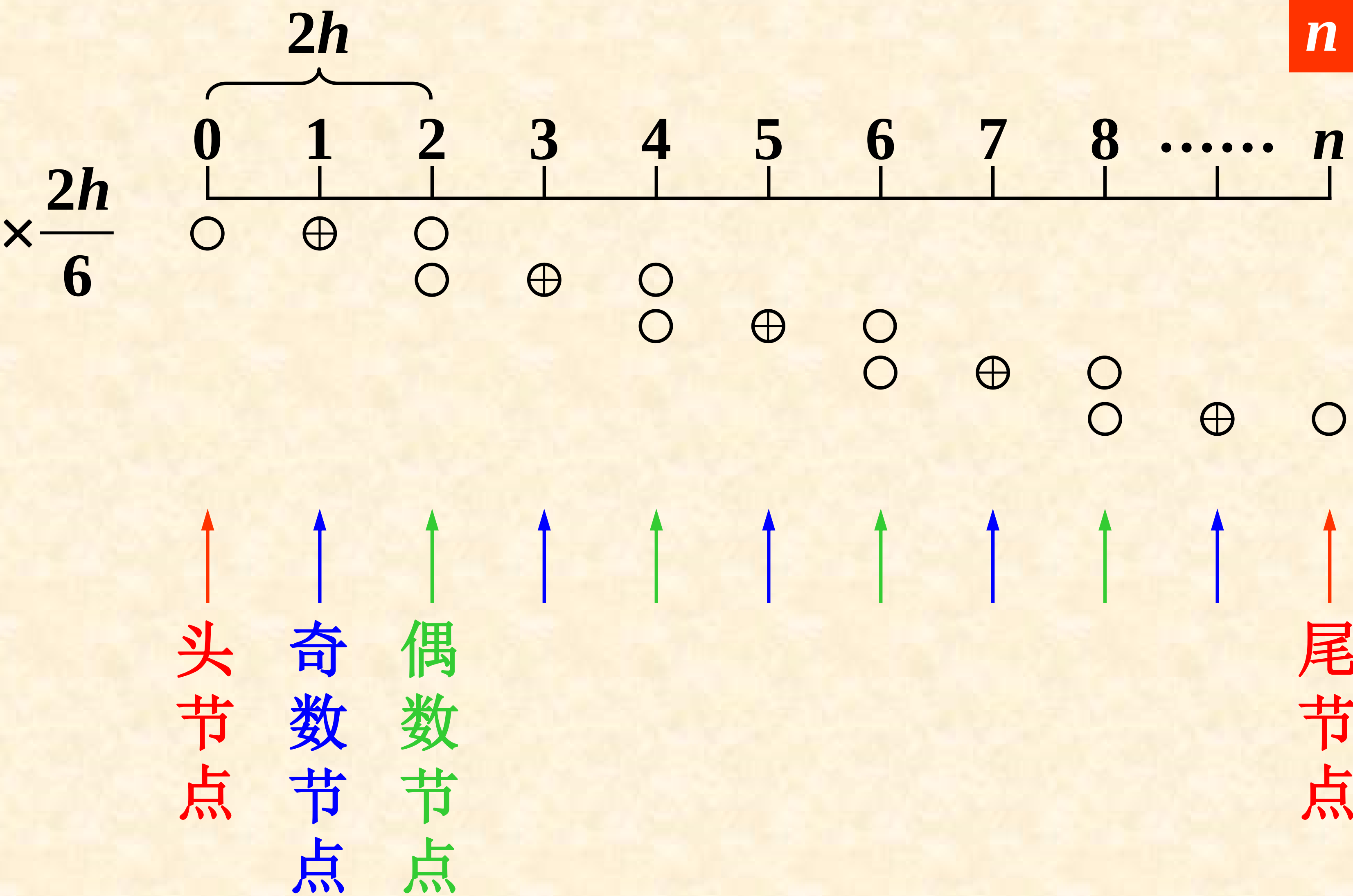
S_n

奇数节点

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

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

n 为偶数



复化柯特斯公式

◈ 将区间 $[a, b]$ 划分为偶数等分 $n = 4m$，每个小区间 $[x_{4i}, x_{4i+4}]$ 上的积分为：

$$\int_{x_{4i}}^{x_{4i+4}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$

步长 $h = \dfrac{b-a}{n}$

$$4h\frac{7f(x_{4i})+32f(x_{4i+1})+12f(x_{4i+2})+32f(x_{4i+3})+7f(x_{4i+4})}{90}$$

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{m-1}\int_{x_{4i}}^{x_{4i+4}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx$$

C_n

$$\boxed{\frac{4h}{90}\left[7f(a)+32\sum_{i=0}^{m-1}f(x_{4i+1})+12\sum_{i=0}^{m-1}f(x_{4i+2}) +32\sum_{i=0}^{m-1}f(x_{4i+3})+14\sum_{i=1}^{m-1}f(x_{4i})+7f(b)\right]}$$

例 题

用复化梯形公式 T_7 计算 $\int_0^{\frac{\pi}{6}} \sqrt{4-\sin^2 x}\, \mathrm{d}x$

解：步长 $h = \dfrac{b-a}{7} = \dfrac{\frac{\pi}{6}-0}{7} = \dfrac{\pi}{42}$

$$T_7 = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{6} f(x_i) + f(b) \right]$$

其中：$x_i = a + ih = \dfrac{\pi}{42} i$

将数据代入求得：$T_7 = 1.035$

复化梯形公式的余项

- 梯形公式的余项：

$$R_T = -\frac{h^3}{12} f''(\eta), \quad \eta \in [a, b], \quad h = b - a$$

- 因此每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 的余项： $h = \frac{b-a}{n}$

$$R_T^{(i)} = -\frac{h^3}{12} f''(\eta_i), \quad \eta_i \in [x_i, x_{i+1}], i = 0,1,\cdots,n-1$$

- 复化梯形公式在整个区间 $[a, b]$ 上的截断误差：

$$I - T_n = \sum_{i=0}^{n-1} R_T^{(i)} = \sum_{i=0}^{n-1} \left(-\frac{h^3}{12} f''(\eta_i) \right)$$

$$= -\frac{nh^3}{12} \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) = -\frac{nh^3}{12} f''(\eta) \quad \eta \in [a, b]$$

复化辛普森公式的余项

- 辛普森公式的余项：

$$R_S = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta) \qquad \eta \in [a, b] \qquad h = \frac{b-a}{2}$$

- 复化辛普森公式的余项：$n = 2m$

$$R_{S_n} = -\frac{mh^5}{90} f^{(4)}(\eta) \qquad \eta \in [a, b] \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

复化柯特斯公式的余项

- 柯特斯公式的余项：

$$R_C = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\eta) \qquad \eta \in [a, b] \qquad h = \frac{b-a}{4}$$

- 复化柯特斯公式的余项： $n = 4m$

$$R_{C_n} = -\frac{(n/4)\cdot 8h^7}{945} f^{(6)}(\eta)$$

$$= -\frac{m \cdot 8h^7}{945} f^{(6)}(\eta) \qquad \eta \in [a, b] \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

例 题

采用复化梯形公式和复化辛普森公式分别计算

$$I=\int_0^1 \mathrm{e}^{x^2}\mathrm{d}x$$

要求计算结果的误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-6}$，试估算两种公式分别需要将积分区间划分的等份数。

被积函数：$f(x)=\mathrm{e}^{x^2}$

积分区间：[0, 1]

$'$ $\mathrm{e}^{x^2}\cdot 2x=2x\mathrm{e}^{x^2}$

$''$ $2(\mathrm{e}^{x^2}+x\cdot 2x\mathrm{e}^{x^2})=2(1+2x^2)\mathrm{e}^{x^2}$

$'''$ $2[4x\mathrm{e}^{x^2}+(1+2x^2)\cdot 2x\mathrm{e}^{x^2}]=4(3x+2x^3)\mathrm{e}^{x^2}$

$^{(4)}$ $4[(3+6x^2)\mathrm{e}^{x^2}+(3x+2x^3)\cdot 2x\mathrm{e}^{x^2}]=4(3+12x^2+4x^4)\mathrm{e}^{x^2}$

$$f''(x)=2(1+2x^2)e^{x^2}$$

$$f^{(4)}(x)=4(3+12x^2+4x^4)e^{x^2}$$

$$h=\frac{b-a}{n}=\frac{1-0}{n}=\frac{1}{n}$$

$$\max_{0\le x\le 1} f''(x)=2(1+2\times 1^2)e^{1^2}=6e$$

$$\max_{0\le x\le 1} f^{(4)}(x)=4(3+12\times 1^2+4\times 1^4)e^{1^2}=76e$$

$$\left|R_{T_n}\right|=\left|-\frac{nh^3}{12}f''(\eta)\right|\le\frac{n(1/n)^3}{12}\cdot 6e=\frac{e}{2}\cdot\frac{1}{n^2}\le\frac{1}{2}\times 10^{-6}$$

$n^2\ge e\cdot 10^6$ $\quad$ $n\ge\sqrt{e\cdot 10^6}=10^3\cdot\sqrt{e}\approx 1648.7$ 取 1649

$$\left|R_{S_n}\right|=\left|-\frac{mh^5}{90}f^{(4)}(\eta)\right|\le\frac{(n/2)\cdot(1/n)^5}{90}\cdot 76e=\frac{76e}{180}\cdot\frac{1}{n^4}\le\frac{1}{2}\times 10^{-6}$$

$n^4\ge\frac{76e}{90}\cdot 10^6$ $\quad$ $n\ge\sqrt[4]{\frac{76e}{90}\cdot 10^6}\approx 38.9$ 取 39

步长的自动选取

- 从上述误差分析可以看到，复化积分的截断误差随着分割因子 n 的增大而减小，如何在求积分之前就确定 n 的值，使误差在允许范围之内?
- 尽管可以利用余项公式来估计 n，但由于余项公式中含有被积函数的导数，而估计各阶导数的最大值往往比较困难，且用这种方法估计的误差上界一般偏大，在实际运用上很困难。
- 在实际计算中，最有效的方法是“事后估计误差法”，它自动选取积分步长，从而在求积过程中，根据精度要求，自动确定 n，并算出近似值。

二分法

- 具体方法如下（假设使用复化梯形公式）

  1、在积分区间 $[a, b]$ 上选用某个固定的 n，用 T_n 近似计算 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$

  2、在第 1 步的基础上将每个积分小区间分半处理，用 T_{2n} 近似计算 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$

  3、判断 $|T_{2n} - T_n| \le \varepsilon$ 是否成立，成立则表示 T_{2n} 满足精度要求，否则在第 2 步的基础上将积分小区间再分半，重复 2、3 步直至获得满足精度要求的结果

小区间$[x_i, x_{i+1}]$，记小区间中点： $x_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$

该区间二分前、后的积分值分别记为：T_{i1}，T_{i2}

$$T_{i1} = \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

二分前的步长 $\dfrac{b-a}{n}$

$$T_{i2} = \frac{h/2}{2}[f(x_i) + f(x_{i+\frac{1}{2}})] + \frac{h/2}{2}[f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(x_{i+1})]$$

$$= \frac{h}{4}[f(x_i) + f(x_{i+1})] + \frac{h}{2} f(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}T_{i1} + \frac{h}{2} f(x_{i+\frac{1}{2}})$$

$$T_{2n} = \sum_{i=0}^{n-1} T_{i2} = \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n-1} T_{i1} + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} \boxed{f(x_{i+\frac{1}{2}})}$$

二分点的被积函数值

例　题

用变步长的梯形法计算：$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

解：(1) 对整个[0,1]区间用梯形法计算。 $h=1$

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

$$a=0, b=1; f(0)=1, f(1)=0.8414710$$

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

$$=\frac{1}{2}(1+0.8414710)=0.9207355$$

例　题（续）

用变步长的梯形法计算：$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

解：**(1)** 区间**[0,1]**　$h=1$　$T_1=0.9207355$

(2) 将区间**[0,1]**二分为**[0,1/2]**和**[1/2,1]**

$$f(\tfrac{1}{2})=0.9588510$$

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

$$=0.9397933$$

例 题（续）

用变步长的梯形法计算：$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

解：(2) 将区间[0,1]二分为[0,1/2]和[1/2,1]　$h=\frac{1}{2}$

$$T_2=0.9397933$$

(3) 将区间再次二分：[0,1/4][1/4,1/2][1/2,3/4][3/4,1]

$$f(\tfrac{1}{4})=0.9896158,\quad f(\tfrac{3}{4})=0.90885168$$

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

3.1.5 Romberg求积公式

- 变步长的梯形法算法简单，但是收敛速度慢。
- 如何提高收敛速度，节省计算量？

- 复化梯形求积，积分区间分为 n 等分的截断误差为：

$$I-T_n=\sum_{i=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)\right]=-\frac{h^2}{12}\sum_{i=0}^{n-1}\left[hf''(\xi_i)\right]$$

$$\approx-\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)\,\mathrm{d}x=-\frac{h^2}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right]$$

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

- 积分区间分为 $2n$ 等分的截断误差为：

$$I-T_{2n}\approx-\frac{1}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2\left[f'(b)-f'(a)\right]$$

$$=\frac{1}{4}\left\{-\frac{h^2}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right]\right\}=\frac{1}{4}(I-T_n)$$

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

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

$$4(I - T_{2n}) \approx I - T_n \qquad 3I - 3T_{2n} \approx T_{2n} - T_n$$

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

叠加上误差，可得到比 T_{2n} 更精确的积分值：

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

$$\frac{4}{3}T_{2n} = \frac{4}{3}\cdot\frac{h/2}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right]$$

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

$$\frac{4}{3}T_{2n}=\frac{h}{6}\left[2f(a)+4\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{1}{2}})+4\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+2f(b)\right]$$

$$\frac{1}{3}T_n=\frac{1}{3}\cdot\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right]$$

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

$$\bar{T}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$$

$$\boxed{\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n=S_{2n}}$$

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

$$=S_{2n}$$

$$\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n=S_{2n}$$

用复化梯形法二分前后的两个积分值按上式作线性组合，结果得到复化Simpson法的积分值。

$$R_{T_n}=-\frac{nh^3}{12}f^{(2)}(\eta)=-\frac{h^2}{12}\cdot nh\cdot f^{(2)}(\eta)$$

$$=-\frac{h^2}{12}\cdot(b-a)\cdot f^{(2)}(\eta)\approx-\frac{h^4}{12}\cdot[f'(b)-f'(a)]\propto h^2$$

微分中值定理

微分中值定理： $f(b)-f(a)=f'(\xi)(b-a)$

$$R_{S_n}=-\frac{mh^5}{90}f^{(4)}(\eta)=-\frac{h^4}{90}\cdot\frac{1}{2}nh\cdot f^{(4)}(\eta)$$

$$=-\frac{h^4}{180}\cdot(b-a)\cdot f^{(4)}(\eta)\approx-\frac{h^4}{180}\cdot[f'''(b)-f'''(a)]\propto h^4$$

$$R_{C_n}=-\frac{m\cdot 8h^7}{945}f^{(6)}(\eta)=-\frac{8h^6}{945}\cdot\frac{1}{4}nh\cdot f^{(6)}(\eta)$$

$$=-\frac{2h^6}{945}\cdot(b-a)\cdot f^{(6)}(\eta)$$

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

龙贝格求积公式（续）

$$R_{T_n} \propto h^2 \longrightarrow \frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4} \longrightarrow \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n = S_{2n}$$

$$R_{S_n} \propto h^4 \longrightarrow \frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16} \longrightarrow \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n = C_{2n}$$

$$R_{C_n} \propto h^6 \longrightarrow \frac{I - C_{2n}}{I - C_n} \approx \frac{1}{64} \longrightarrow \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n = R_{2n}$$

Romberg求积公式

$$S_{2n}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \qquad C_{2n}=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n \qquad R_{2n}=\frac{64}{63}C_{2n}-\frac{1}{63}C_n$$

$$\begin{tikzcd}
T_1 \arrow[dr] & & & \\
T_2 \arrow[r] \arrow[dr] & S_2 \arrow[dr] & & \\
T_4 \arrow[r] \arrow[dr] & S_4 \arrow[r] \arrow[dr] & C_4 \arrow[dr] & \\
T_8 \arrow[r] \arrow[dr] & S_8 \arrow[r] \arrow[dr] & C_8 \arrow[r] \arrow[dr] & R_8 \\
T_{16} \arrow[r] \arrow[dr] & S_{16} \arrow[r] \arrow[dr] & C_{16} \arrow[r] \arrow[dr] & R_{16} \\
T_{32} \arrow[r] & S_{32} \arrow[r] & C_{32} \arrow[r] & R_{32}
\end{tikzcd}$$

二分前的步长

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

达到精度要求了吗？

逐次减半加速法

例 题

利用Romberg积分公式计算积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx.$

k	$n=2^k$	T_n	S_n	C_n	R_n

$$T_1=(b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} \qquad T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}})$$

$$S_{2n}=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \qquad C_{2n}=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n \qquad R_{2n}=\frac{64}{63}C_{2n}-\frac{1}{63}C_n$$

3.2 数值微分

问题 测得一个移动物体的距离 $S(t)$ 的数据如下

t	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
S(t)	12.07	19.91	30.11	42.13	55.85	72.00

求速度 $v(6)$ 和加速度 $a(6)$?

- 把导数表示成某些点函数值的线性组合-导数的定义
- 利用插值多项式近似函数，再求导

3.2.1 差商型数值微分

1. 向前差商数值微分公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

Taylor展开式

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0+\theta h) \qquad 0\le\theta\le1$$

得到误差

$$f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}=-\frac{h}{2}f''(x_0+\theta h) \qquad 0\le\theta\le1$$

2. 向后差商数值微分公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

Taylor展开式

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{h^2}{2} f''(x_0 - \theta h) \qquad 0 \le \theta \le 1$$

得到误差

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{h}{2} f''(x_0 - \theta h) \qquad 0 \le \theta \le 1$$

3. 中心差商数值微分公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

$$= -\frac{h^2}{12}[f'''(x_0+\theta_1 h)+f'''(x_0-\theta_2 h)]$$

$$= -\frac{h^2}{6} f'''(x_0+\theta h) \qquad -1 \le \theta \le 1$$

4. 二阶中心差商数值微分公式

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}$$

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0+\theta_1 h)$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0-\theta_2 h)$$

$$f''(x_0)-\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}=-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_0+\theta h)$$

$$-1\le\theta\le 1$$

例 题

问题 测得一个移动物体的距离 $S(t)$ 的数据如下

t	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
S(t)	12.07	19.91	30.11	42.13	55.85	72.00

求速度 $v(6)$ 和加速度 $a(6)$ ？

向前差商 $v(6) \approx \dfrac{S(7)-S(6)}{7-6} = 13.72$

向后差商 $v(6) \approx \dfrac{S(6)-S(5)}{6-5} = 12.02$

中心差商 $v(6) \approx \dfrac{S(7)-S(5)}{7-5} = 12.87$

二阶中心差商 $a(6) \approx \dfrac{S(7)-2S(6)+S(5)}{1} = 1.70$

3.2.2 插值型数值微分

对于列表函数

x	x_0	x_1	x_2	…	x_n
y	y_0	y_1	y_2	…	y_n

可以利用插值方法，得到函数的近似表达式：

$$f(x) \approx L_n(x)$$

于是取 $L_n'(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似。

必须指出，即使 $f(x)$ 与 $L_n(x)$ 的值相差不多，导数的近似值 $L_n'(x)$ 与导数的真值 $f'(x)$ 仍然可能差别很大，因而在使用求导公式时应特别注意误差分析.

误差分析

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\boxed{\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)}$$

$\omega_{n+1}(x)$

$\omega(x)$

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

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

两点公式

给定两个节点 x_0, x_1上的函数值 $f(x_0)$, $f(x_1)$, 线性插值

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

记$h=x_1-x_0$,

$$L_1'(x)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]$$

$$L_1'(x_0)=L_1'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]$$

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

- 带余项的两点公式为： $h=x_1-x_0,$

$$f'(x_0)=L_1'(x_0)+\frac{f''(\xi)}{2}(x_0-x_1)$$

$$=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]-\frac{h}{2}f''(\xi)$$

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

三点公式

给定三个节点 $x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$

及其函数值 $f(x_0), f(x_1), f(x_2)$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

$$= \frac{1}{2h^2}[(x-x_1)(x-x_2)f(x_0) - 2(x-x_0)(x-x_2)f(x_1) + (x-x_0)(x-x_1)f(x_2)]$$

求 $L_2'(x)$,

分别令$x = x_0, x_1, x_2$

$$L_2'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)]$$

$$L_2'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)]$$

$$L_2'(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)]$$

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

- 带余项的三点公式为:

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

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$

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

第3章 小结

3.1 数值积分

- 3.1.1 机械求积公式和代数精度
- 3.1.2 求积公式的构造方法
- 3.1.3 Newton-Cotes 求积公式
- 3.1.4 复化求积法
- 3.1.5 Romberg 求积公式

3.2 数值微分

- 3.2.1 差商型数值微分
- 3.2.2 插值型数值微分

- 代数精度
- 插值型求积公式
- Cotes系数
- T，S，C
- 复化T，复化S，复化C
- Romberg逐次减半加速法