数值分析

理学院　　数学系

计算数学教研室

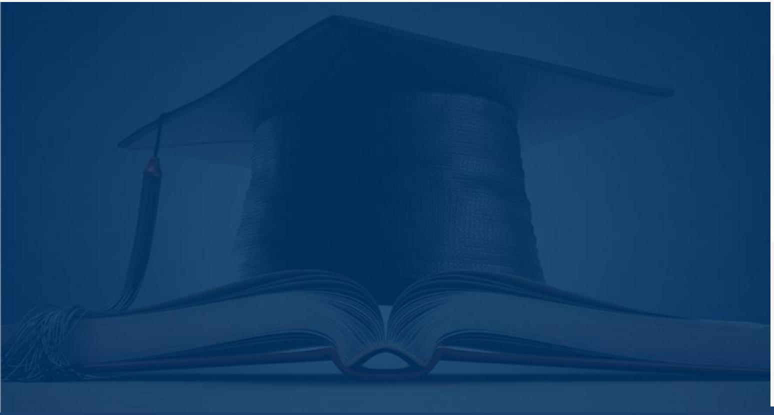
2017年12月13日

目 录

Contents

06

数值积分与数值微分



数值积分的基本概念

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

数值积分的基本概念

牛顿-莱布尼茨公式

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

但很多函数找不到原函数，如

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

另一方面，有很多函数只知一些离散点的函数值，并无表达式。

所以牛顿-莱布尼茨公式有时不能直接应用。

数值积分的基本概念

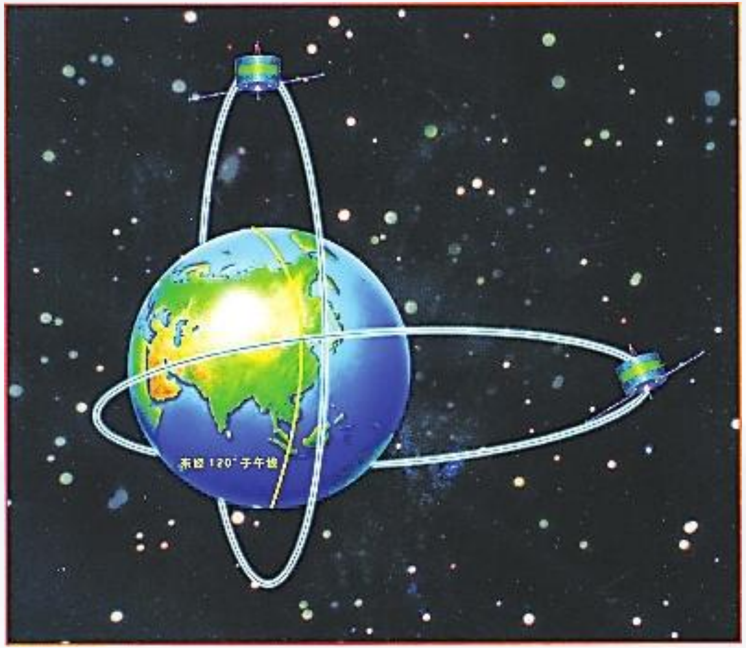
例如，一块铝合金的横断面为正弦波，要求原材料铝合金板的长度，也就是$f(x)=\sin x$从$x=0$到$x=b$的曲线弧长L，可用积分表示为

$$L=\int_0^b \sqrt{1+(f'(x))^2}dx=\int_0^b \sqrt{1+\cos^2 x}dx$$

这是一个椭圆积分计算问题。

数值积分的基本概念

卫星轨道的计算也一个椭圆积分计算问题。找不到被积函数的原函数。然而，这时我们可以用数值积分方法计算。



数值积分的基本概念

从定积分的定义$I=\int_a^b f(x)dx=\lim\limits_{\Delta x\to 0}\sum\limits_{i=0}^{n} f(x_i)\Delta x_i$，自然想到可以利用被积函数 $f(x)$ 在区间$[a,b]$ 上一些离散节点 x_k 处的函值 $f(x_k)$ 的线性组合

$I_n=\sum\limits_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 近似定积分，即有$\int_a^b f(x)dx\approx\sum\limits_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\cdots\cdots(1)$，或

$\int_a^b f(x)dx=\sum\limits_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+R[f]$. 称(1)为求积公式的一般形式,$\{x_k\}(k=0,1,\cdots,n)$ 为求积节点，$\{A_k\}(k=0,1,\cdots,n)$ 为求积系数, $R[f]$ 为求积公式的误差或余项.

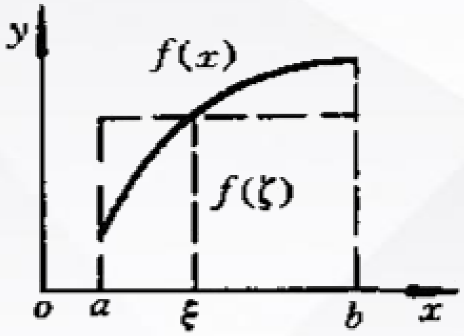
显然，一个求积公式由它的求积节点和求积系数唯一确定.

数值积分的基本概念

积分中值定理：在 $[a,b]$ 内存在一点 ,有

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

成立。

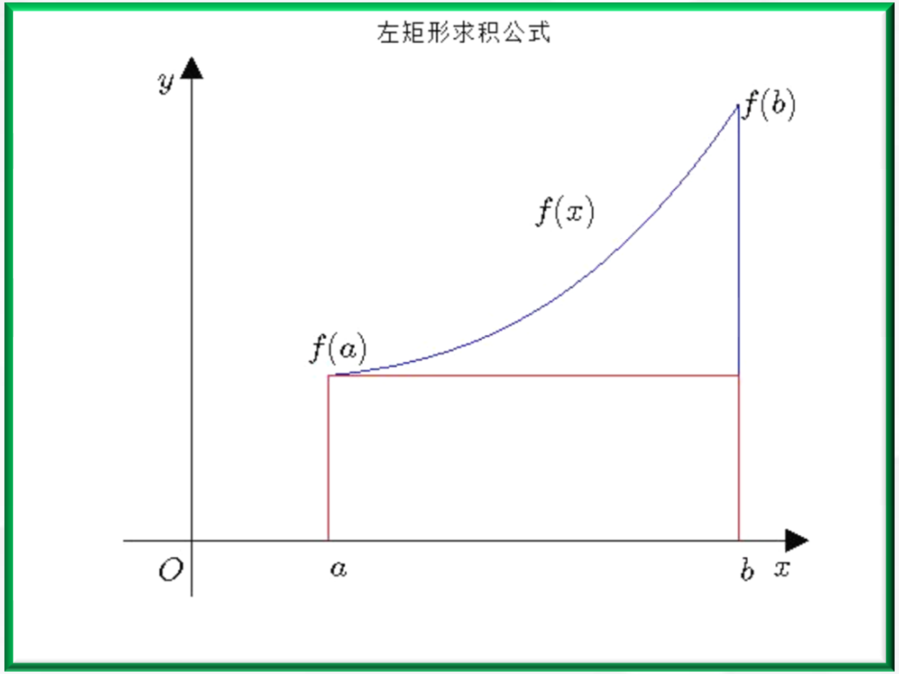


就是说, 底为 $b-a$ 而高为 $f(\xi)$ 的矩形面积恰等于所求曲边梯形的面积。

问题在于点 ξ 的具体位置一般是不知道的,因而难以准确算出 $f(\xi)$ 的值. 我们对 $f(\xi)$ 提供一种近似算法,相应地便获得一种数值求积方法.

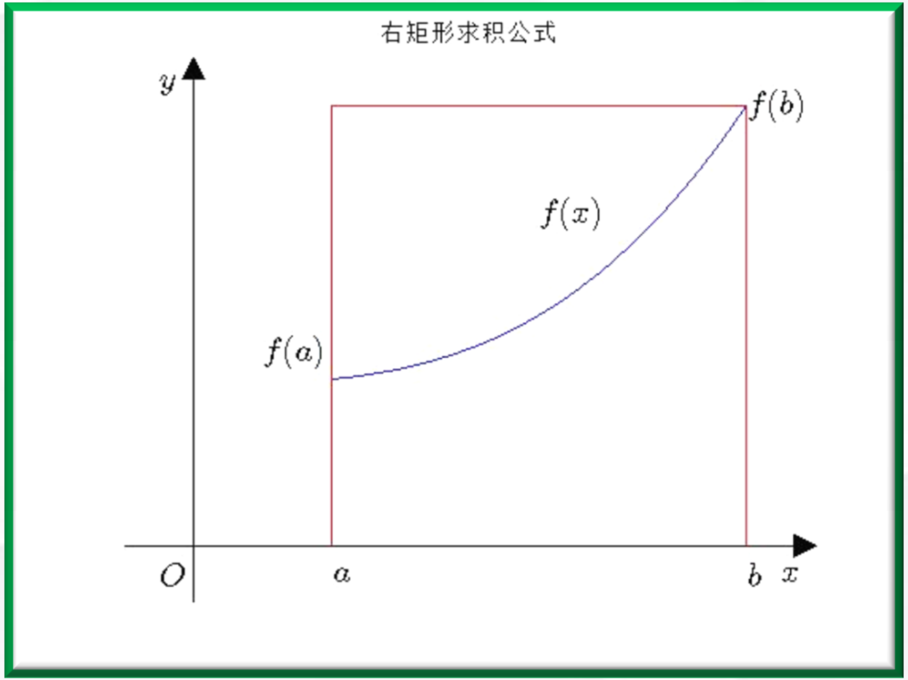
数值积分的基本概念

左矩形公式为： $\int_a^b f(x)dx \approx f(a)(b-a)$



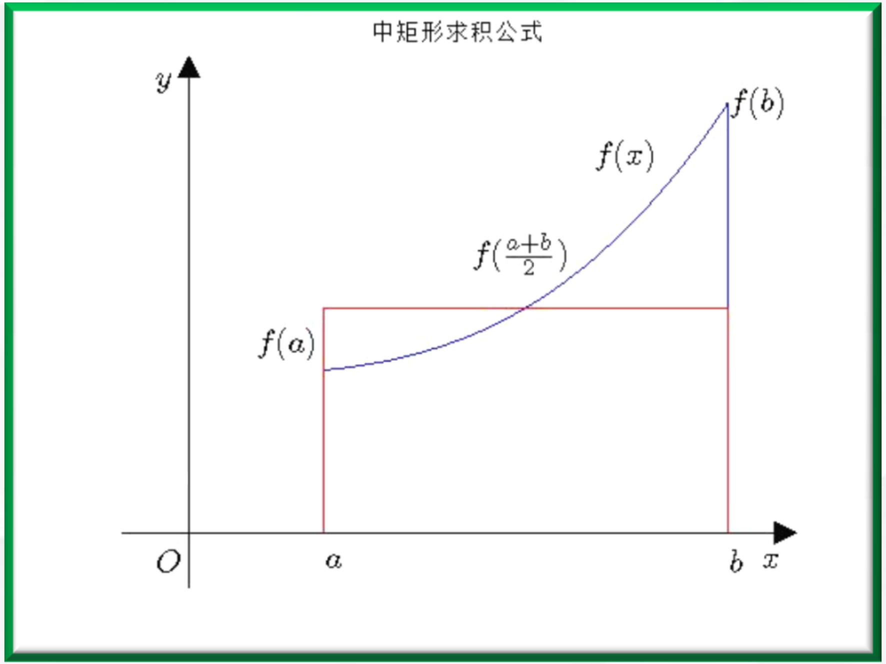
数值积分的基本概念

右矩形公式为: $\int_a^b f(x)dx \approx f(b)(b-a)$



数值积分的基本概念

中矩形公式为：$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2})$$



左矩形公式误差估计：由于 $f(x)-f(a)=f'(\xi_x)(x-a)$，所以有

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

$$=\int_a^b f'(\xi_x)(x-a)dx=\frac{(b-a)^2}{2}f'(\xi),\qquad \xi\in(a,b).$$

右矩形公式误差估计：由于 $f(x)-f(b)=f'(\eta_x)(x-b)$，所以有

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

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

中矩形求积公式误差估计： 由Taylor展开式有

$$f(x)=f(\frac{a+b}{2})+f'(\frac{a+b}{2})(x-\frac{a+b}{2})+\frac{f''(\xi_x)}{2}(x-\frac{a+b}{2})^2,$$

所以有

$$\int_a^b f(x)dx-f(\frac{a+b}{2})(b-a)=-\frac{f''(\eta)}{24}(b-a)^3,\ \ \eta\in(a,b).$$

求积公式的代数精度

数值积分公式用来近似计算定积分，求积节点和求积系数的选择不同近似程度可能不同，如何衡量近似程度？

求积公式的代数精度

定义 若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 对 $f(x)=x^j (j=0,1,2\cdots,m)$

都精确成立，但对 $f(x)=x^{m+1}$不精确成立,即

$$\int_a^b x^j dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^j, \quad j=0,1,2,\ldots,m, \qquad \int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1},$$

则称此公式具有 m 次代数精度.

可见, 若求积公式具有 m 次代数精度,则公式对所有次数不超过 m 的多项式都精确成立.考虑到任何连续函数都可由多项式序列逼近，因此，代数精度越高求积公式的精度一般也就越高.

求积公式的代数精度

若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$，具有 n 次代数精度，则

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

这是关于$A_0, A_1, \cdots, A_n$ 的线性方程组，其系数行列式为

$$D = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ x_0^n & x_1^n & x_2^n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{0 \le i < j \le n} (x_j - x_i) \neq 0$$

所以方程组(1)有唯一解。

求积公式的代数精度

例1 试确定参数 A_0, A_1, A_2 使求积公式

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

具有尽可能高的代数精度,并问代数精度是多少?

解：令公式对$f(x)=1, x, x^2$都精确成立，则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 2 \\ -A_0 + A_2 = 0 \\ A_0 + A_2 = 2/3 \end{cases}，解得：A_0 = A_2 = \frac{1}{3}，\quad A_1 = \frac{4}{3},$$

求积公式为$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(-1)+4f(0)+f(1)]$,

当$f(x)=x^3$时，左=0，右=0，公式也精确成立，

当$f(x)=x^4$时，左=2/5，右=2/3，公式不精确成立，

所以，此公式的代数精度为3.

例2 试确定参数 A_0, A_1, A_2 使求积公式

$$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

具有尽可能高的代数精度,并问代数精度是多少?

解：令公式对$f(x)=1, x, x^2$都精确成立，则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 2/3 \\ -A_0 + A_2 = 0 \\ A_0 + A_2 = 2/5 \end{cases}，解得：A_0 = A_2 = \frac{1}{5}，A_1 = \frac{4}{15},$$

求积公式为$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx \approx \frac{1}{15}[3f(-1)+4f(0)+3f(1)]$,

经验证公式对$f(x)=x^3$精确成立，但对$f(x)=x^4$不精确成立，

所以，公式的代数精度为3.

例3 试确定参数 A_0, A_1 和 x_0, x_1 使求积公式

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

具有尽可能高的代数精度,并问代数精度是多少?

解：令公式对$f(x)=1, x, x^2, x^3$都精确成立，则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = 2/3 \\ A_0 x_0^3 + A_1^3 = 0 \end{cases}, \quad \text{解得：} \begin{cases} A_0 = A_1 = 1 \\ -x_0 = x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \end{cases},$$

求积公式为$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$,

求积公式的代数精度为3.

插值型数值求积公式

若已知定积分 $I=\int_a^b f(x)dx$ 的被积函数 $f(x)$ 在节点 $a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$ 上的函数值 $y_k=f(x_k)$, $k=0,1,2,\cdots,n$, 则可以构造 n 次Lagrange插值多项式

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$$

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

若记 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx\cdots\cdots(1)$，则有 $\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)\cdots\cdots(2)$.

求积系数由式(1)确定的求积公式(2)称为插值型求积公式.

插值型数值求积公式

设 $f(x)$ 在$[a,b]$具有$n+1$ 阶连续导数， 则Lagrange插值余项为

$$f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \quad \xi_x\in(a,b)$$

从而得到插值型求积公式的误差如下

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

$$=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi_x)\omega_{n+1}(x)dx,\quad \xi_x\in(a,b).$$

插值型数值求积公式

对于区间 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的积分

$$I=\int_a^b \rho(x) f(x)dx$$

这里函数$\rho(x)$是非负连续函数,称为 $[a,b]$ 上的权函数.

它的物理意义可以解释为密度函数.

以 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$ 为节点的插值型求积公式为 $I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$,

其中,求积系数为 $A_k=\int_a^b \rho(x) l_k(x)dx$,

误差表达式 $R[f]=\dfrac{1}{(n+1)!}\int_a^b \rho(x) f^{n+1}(\xi_x)\omega_{n+1}(x)dx$.

插值型数值求积公式

为了简化计算，取等距节点 $x_k = a + kh, (k = 0,1,2,\cdots,n, h = \dfrac{b-a}{n})$

则 $$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} dx \overset{令x=a+th}{=} \frac{(-1)^{n-k} h}{k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^{n} (t-i)dt$$

令 $$C_k^{(n)} = \frac{1}{b-a} A_k = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^{n} (t-i)dt, k = 0,1,\ldots,n \cdots\cdots(3)$$

则有 $$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k) \cdots\cdots(4)$$

称式(4)为Newton-Cotes公式. $C_k^{(n)}$ 称为Cotes系数.

例1 设 $f(x)\in C^2[a,b]$ ，求 $n=1$ 时的Newton-Cotes公式并估计误差.

解：计算Cotes系数 $C_0^{(1)}=-\int_0^1(t-1)dt=\frac{1}{2}, C_1^{(1)}=\int_0^1 tdt=\frac{1}{2},$

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

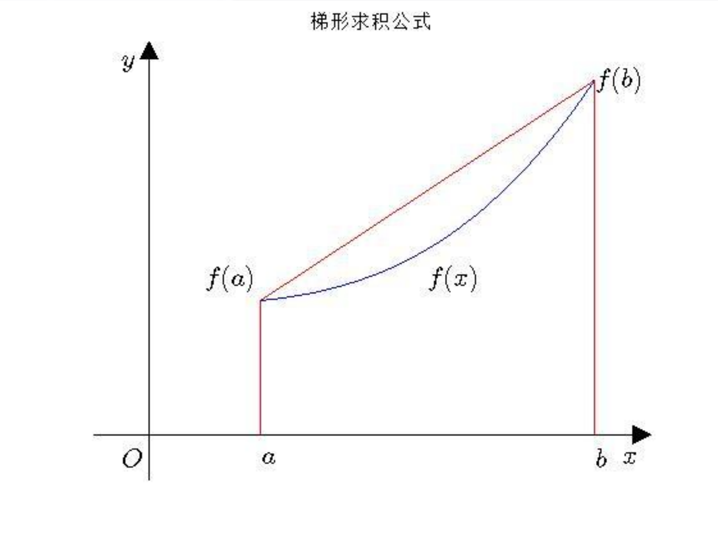
$$R[f]=\frac{1}{2!}\int_a^b f''(\xi_x)(x-a)(x-b)dx=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)dx$$

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

若记 $M_2=\max\limits_{a\le x\le b}|f''(x)|$，则有误差估计 $|R[f]|\le\frac{M_2}{12}(b-a)^3.$

插值型数值求积公式

从几何上看:



所以公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\mathrm{T}$

也称为梯形公式,记为T.

例　设 $f(x)\in C^2[a,b]$，求 $n=1$时的Newton-Cotes公式并估计误差.

解：计算Cotes系数$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6}$,

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

于是有$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]=S$,

称之为Simpson公式或抛物线公式，记为S.

Newton-Cotes求积公式

容易证明Simpson公式对不高于三次的多项式精确成立,即

$$\int_a^b p_3(x)dx = \frac{b-a}{6}[p_3(a)+4p_3(\frac{a+b}{2})+p_3(b)]$$

下面考虑Simpson求积公式的误差

构造三次多项式 $H_3(x)$ 使满足 $H_3(a)=f(a), H_3(b)=f(b)$,

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

这时插值误差为

$$f(x)-H_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi_x)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b),\quad \xi_x\in(a,b)$$

于是有

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

$$=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}\left[H_3(a)+4H_3\left(\frac{a+b}{2}\right)+H_3(b)\right]$$

$$=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b H_3(x)dx$$

$$=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi_x)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$$

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

$$=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\qquad \eta\in(a,b),$$

若记$M_4=\max\limits_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right|$,则有$\left|R[f]\right|\le\frac{M_4}{2880}(b-a)^5.$

Newton-Cotes求积公式

由于构造Newton-Cotes公式需要Cotes系数,将其列表如下:

n \ k	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

Newton-Cotes求积公式

一般地，Newton-Cotes公式的截断误差为

$$R[f]=\begin{cases}\dfrac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_a^b \omega_{n+1}(x)dx & (n\text{为奇数}) \\[2ex] \dfrac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_a^b x\omega_{n+1}(x)dx & (n\text{为偶数})\end{cases}\qquad \eta\in(a,b).$$

从而，$n+1$个节点的插值型求积公式至少具有 n 次代数精度，n 是偶数时Newton-Cotes公式具有 $n+1$ 次代数精度.

例1 求 $n=4$ 的Newton-Cotes公式及误差.

解：查表可得$C_0^{(4)}=\dfrac{7}{90},C_1^{(4)}=\dfrac{16}{45},C_2^{(4)}=\dfrac{2}{15},C_3^{(4)}=\dfrac{16}{45},C_4^{(4)}=\dfrac{7}{90}$,

于是有$\int_a^b f(x)dx\approx\dfrac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$,

其中$x_k=a+kh,k=0,1,2,3,4,h=\dfrac{b-a}{4}$,称之为Cotes公式，记为C.

其误差为$R[f]=-\dfrac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\eta),\qquad \eta\in(a,b)$.

例2 用梯形公式、Simpson公式和Cotes公式求积分

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

的近似值.

解：$I \approx T = 1/2(4+2) = 3$

$I \approx S = 1/6(4+12.8+2) = 3.13333$

$I \approx C = 1/90(28+\ldots+14) = 3.14212$

复化求积公式

问题1 由梯形、辛普森和柯特斯求积公式余项，分析随着求积节点数的增加，对应公式的精度是怎样变化？

问题2 当 $n \geq 8$时，Newton-Cotes 求积公式还具有数值稳定性吗？可用增加求积节点数的方法来提高计算精度吗？

在实际应用中，通常将积分区间分成若干小区间，将每个小区间上的计算结果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

在区间$[a,b]$上，取等距节点 $x_k = a + kh, k = 0,1,2,\cdots n, h = \dfrac{b-a}{n}$，由定积分

的区间可加性，有 $$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n}\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \cdots\cdots(1)$$

若在每个小区间$[x_{k-1}, x_k]$用梯形公式，则有

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

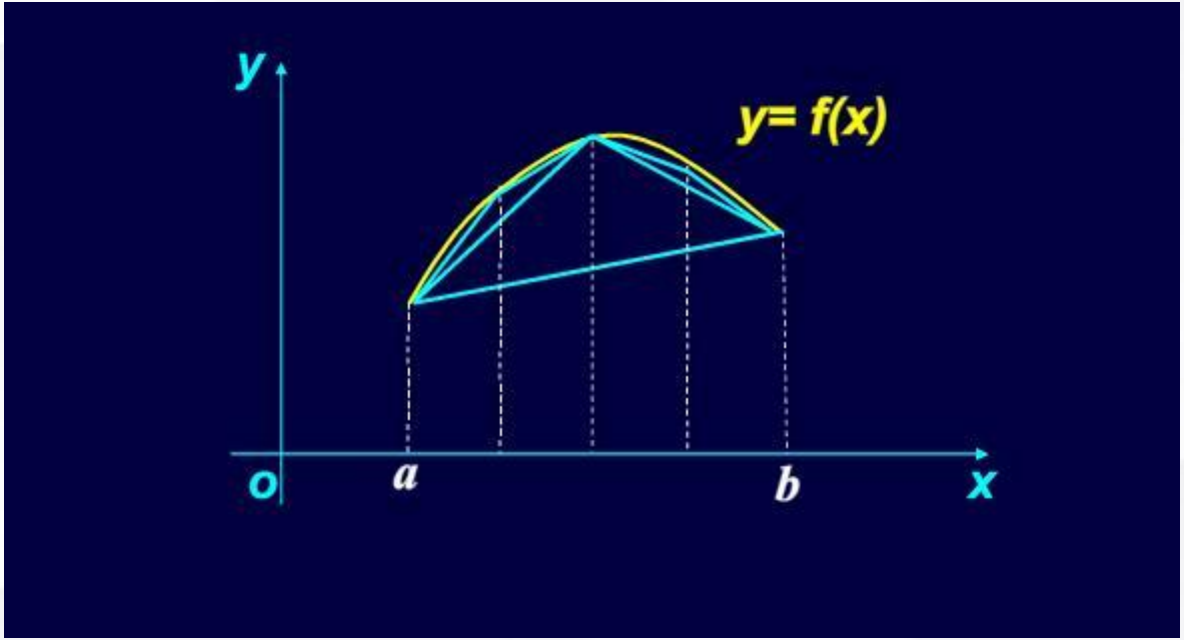
$$= \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1) + f(x_1) + f(x_2) + f(x_2) + f(x_3) + \ldots + f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

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

称为复化梯形公式，记为

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

复化求积公式



复化求积公式

复化梯形公式的误差为

$$I-T_n=-\frac{h^3}{12}[f''(\xi_1)+f''(\xi_2)+\cdots+f''(\xi_n)]$$

$$=-\frac{h^2(b-a)}{12}f''(\eta)\qquad ,\eta\in(a,b),$$

若果记$M_2=\max\limits_{a\le x\le b}|f''(x)|$,则有$|I-T_n|\le\frac{(b-a)^3}{12n^2}M_2$,

可见，复化梯形公式是收敛的. 而且，要是$|I-T_n|<\varepsilon$,只要

$$\frac{(b-a)^3}{12n^2}M_2<\varepsilon \qquad 或 \qquad n>\sqrt{\frac{(b-a)^3M_2}{12\varepsilon}}$$

复化求积公式

若将(1)式中,每个小区间上的积分采用Simpson公式,则可得到复化Simpson公式:

$$I=\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{k=1}^{n}\frac{h}{6}[f(x_{k-1})+4f(x_{k-\frac{1}{2}})+f(x_k)]$$

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

其中，$x_{k-\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x_{k-1}+x_k)=a+(k-\frac{1}{2})h$，而且误差为

$$I-S_n=-\frac{h^5}{2880}[f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)+\cdots+f^{(4)}(\xi_n)]$$

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

如果记$M_4=\max\limits_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right|$，则有$\left|I-S_n\right|\le\frac{(b-a)^5}{2880n^4}M_4$.

复化求积公式

复化Simpson公式也是收敛的，而且，要使$|I-S_n|<\varepsilon$，只要

$$\frac{(b-a)^5}{2880n^4}M_4<\varepsilon \qquad \text{或} \qquad n>\sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M_4}{2880\varepsilon}}.$$

类似的可得复化Cotes公式：

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{90}[7f(a)+32\sum_{k=1}^{n}(f(x_{k-\frac{3}{4}})+f(x_{k-\frac{1}{4}}))$$

$$+12\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}})+14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+7f(b)]$$

其中，$x_{k-\frac{3}{4}}=a+(k-\frac{3}{4})h$，$x_{k-\frac{1}{4}}=a+(k-\frac{1}{4})h.$

复化求积公式

复化Cotes公式的误差为：

$$I-C_n=-\frac{(b-a)h^6}{1935360}f^{(6)}(\eta),\qquad \eta\in(a,b),$$

$$\left|I-C_n\right|\le\frac{(b-a)^7}{1935360\ \ n^6}M_6,\ \ M_6=\max_{a\le x\le b}\left|f^{(6)}(x)\right|$$

复化Cotes公式也是收敛的，而且，要使 $|I-C_n|<\varepsilon$，只要

$$\frac{(b-a)^7}{1935360n^6}M_6<\varepsilon \qquad \text{或} \qquad n>\sqrt[6]{\frac{(b-a)^7M_6}{1935360\ \ \varepsilon}}.$$

例1 已知函数 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$ 的数据表

x_k	$f(x_k)$	x_k	$f(x_k)$	x_k	$f(x_k)$
0	1	3/8	0.9767267	3/4	0.9088517
1/8	0.9973978	1/2	0.9588511	7/8	0.8771926
1/4	0.9896158	5/8	0.9361556	1	0.8414710

分别用复化梯形公式、复化Simpson公式和复化Cotes公式计算积分

$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$ 的近似值.

复化求积公式的应用

解： 复化梯形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx T_n = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$

$$T_8 = \frac{1}{16}[f(0) + 2f(\frac{1}{8}) + 2f(\frac{1}{4}) + 2f(\frac{3}{8}) + 2f(\frac{1}{2})$$

$$+2f(\frac{5}{8}) + 2f(\frac{3}{4}) + 2f(\frac{7}{8}) + f(1)] = 0.9456909$$

复化辛普森公式：$\int_a^b f(x)dx \approx S_n = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$

$$S_4 = \frac{1}{24}[f(0) + 4f(\frac{1}{8}) + 4f(\frac{3}{8}) + 4f(\frac{5}{8}) + 4f(\frac{7}{8})$$

$$+2f(\frac{1}{4}) + 2f(\frac{1}{2}) + 2f(\frac{3}{4}) + f(1)] = 0.9460833$$

复化求积公式的应用

复化Cotes公式： $$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{90}[7f(a)+32\sum_{k=1}^{n}(f(x_{k-\frac{3}{4}})+f(x_{k-\frac{1}{4}}))$$

$$+12\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}})+14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+7f(b)]$$

$$C_2=\frac{1}{180}[7f(0)+32f(\frac{1}{8})+32f(\frac{3}{8})+32f(\frac{5}{8})+32f(\frac{7}{8})$$

$$+12f(\frac{1}{4})+12f(\frac{3}{4})+14f(\frac{1}{2})+7f(1)]=0.9460830$$

定积分 I 精确到小数点后7位的值是0.9460831.

例2 利用复化梯形公式和复化Simpson公式分别计算上例中定积分，若使精度 $\varepsilon=10^{-6}$，问各需取 n 为多少?

解 复化梯形公式要使 $|I-T_n|<\varepsilon$ ，只要

$$\frac{(b-a)^5}{2880n^4}M_4<\varepsilon \quad \text{或} \quad n>\sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M_4}{2880\varepsilon}}$$

因为 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}=\int_0^1\cos xt\,dt$ ，所以有

$$f'(x)=-\int_0^1 t\sin xt\,dt, \qquad f''(x)=-\int_0^1 t^2\cos xt\,dt,$$

$$f'''(x)=\int_0^1 t^3\sin xt\,dt, \qquad f^{(4)}(x)=\int_0^1 t^4\cos xt\,dt.$$

于是有 $\left|f''(x)\right| \le \int_0^1 t^2 \,|\cos xt|\, dt < \frac{1}{3} = M_2$， $\left|f^{(4)}(x)\right| \le \int_0^1 t^4 \,|\cos xt|\, dt < \frac{1}{5} = M_4$.

对复化梯形公式，若使 $|I - T_n| < 10^{-6}$ ，只要

$$n > \sqrt{\frac{1}{36 \times 10^{-6}}} = \frac{10^3}{6} = 166.67,$$ 故应取 $n = 167.$

对复化Simpson公式，若使 $|I - S_n| < 10^{-6}$ ， 只要

$$n > \sqrt[4]{\frac{1}{5 \times 2880 \times 10^{-6}}} = 2.89,$$ 故应取 $n = 3.$

实际上，$S_3 = 0.9460838$

Romberg求积公式

复化求积公式对提高积分精度是可行的方法，但在使用求积公式前需要给出合适的步长，步长取得太大精度难以保证，步长太小又会导致计算量大大增加.为了克服这些困难，我们来介绍Romberg求积公式，以及相关算法.

Romberg求积公式

由于 $$I - T_n = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\eta), \qquad \eta \in (a,b)$$

$$I - T_{2n} = -\frac{(b-a)^3}{12(2n)^2} f''(\tilde{\eta}), \qquad \tilde{\eta} \in (a,b)$$

所以有 $\dfrac{I - T_n}{I - T_{2n}} \approx 4$ 由此得 $I \approx \dfrac{4T_{2n} - T_n}{3}$ 或 $I - T_{2n} \approx \dfrac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$

一方面，若 $|T_{2n} - T_n| < 3\varepsilon$ ，则有近似误差 $|I - T_{2n}| < \varepsilon$

另一方面，$\dfrac{4T_{2n} - T_n}{3}$ 应比 T_n 和 T_{2n} 的近似程度更好.

Romberg求积公式

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

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

其中， $x_k = a + kh$， $k = 0,1,2,\cdots,n$， $h = \frac{b-a}{n}$， $x_{k-\frac{1}{2}} = a + (k - \frac{1}{2})h.$

于是有 $\frac{4T_{2n} - T_n}{3} = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] = S_n$

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

Romberg求积公式

因此有逐次分半的复化梯形公式的递推公式：

$$\begin{cases} T_{2^0} = T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2^k} = \dfrac{T_{2^{k-1}}}{2} + \dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f\left(a+\dfrac{(i-\frac{1}{2})(b-a)}{2^{k-1}}\right), \quad k=1,2,3,\cdots \end{cases}$$

而且，要使$\left|I-T_{2^k}\right|<\varepsilon$，只要$\left|T_{2^k}-T_{2^{k-1}}\right|<3\varepsilon.$

也有逐次分半的复化Simpson公式的递推公式：

$$\begin{cases} T_{2^0} = T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2^k} = \dfrac{T_{2^{k-1}}}{2} + \dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f\left(a+\dfrac{(i-\frac{1}{2})(b-a)}{2^{k-1}}\right) \quad ,k=1,2,3,\cdots \\ S_{2^{k-1}} = \dfrac{4T_{2^k}-T_{2^{k-1}}}{3} \qquad ,k=1,2,3,\cdots \end{cases}$$

Romberg求积公式

由复化Simpson公式的误差估计式有：

$$I-S_n=-\frac{(b-a)^5}{2880n^4}f^{(4)}(\eta),\qquad \eta\in(a,b),$$

$$I-S_{2n}=-\frac{(b-a)^5}{2880(2n)^4}f^{(4)}(\bar{\eta}),\qquad \bar{\eta}\in(a,b).$$

所以有 $\dfrac{I-S_n}{I-S_{2n}}\approx 16$，由此得 $I\approx\dfrac{16S_{2n}-S_n}{15}$ 或 $I-S_{2n}\approx\dfrac{1}{15}(S_{2n}-S_n)$.

一方面，若 $|S_{2n}-S_n|<15\varepsilon$，则有近似误差 $|I-S_{2n}|<\varepsilon$.

另一方面，$\dfrac{16S_{2n}-S_n}{15}$ 应比 S_n 和 S_{2n} 的近似程度更好.

事实上，有 $\dfrac{16S_{2n}-S_n}{15}=C_n$.

Romberg求积公式

类似地，由于 $I - C_n = -\dfrac{(b-a)^7}{1935360n^6} f^{(6)}(\eta), \qquad \eta \in (a,b),$

$$I - C_{2n} = -\frac{(b-a)^7}{1935360(2n)^6} f^{(6)}(\bar{\eta}), \qquad \bar{\eta} \in (a,b)$$

所以有 $\dfrac{I - C_n}{I - C_{2n}} \approx 64$，由此得 $I \approx \dfrac{64C_{2n} - C_n}{63}$ 或 $I - C_{2n} \approx \dfrac{1}{63}(C_{2n} - C_n)$.

一方面，若 $|C_{2n} - C_n| < 63\varepsilon$，则有近似误差 $|I - C_{2n}| < \varepsilon$.

另一方面，$\dfrac{64C_{2n} - C_n}{63}$ 应比 C_n 和 C_{2n} 的近似程度更好.

记 $\dfrac{64C_{2n} - C_n}{63} = R_n$，称为Romberg求积公式.

Romberg求积公式

用$T_{2^k}^{(0)}(k=1,2,\cdots)$分别表示把区间$2^k$等分的复化梯形公式，$T_{2^k}^{(m)}$表示复化Simpson公式，复化Cotes公式和Romberg求积公式....($T_{2^k}^{(1)}=S_{2^k}, T_{2^k}^{(2)}=C_{2^k}, T_{2^k}^{(3)}=R_{2^k}$)，则有

$$\begin{cases} T_1^{(0)}=\dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2^k}^{(0)}=\dfrac{T_{2^{k-1}}^{(0)}}{2}+\dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}}f\left(a+\frac{(i-\frac{1}{2})(b-a)}{2^{k-1}}\right) \quad ,k=1,2,3,\cdots \\ T_{2^k}^{(m)}=\dfrac{4^m T_{2^{k+1}}^{(m-1)}-T_{2^k}^{(m-1)}}{4^m-1} \quad ,k=1,2,3,\cdots,\quad m=1,2,3\ldots \end{cases}$$

而且，要使$|I-T_{2^k}^{(m)}|<\varepsilon$，只要$|T_{2^k}^{(m)}-T_{2^{k-1}}^{(m)}|<(4^{m+1}-1)\varepsilon \quad (m=0,1,2,\cdots)$.

若对Romberg求积公式作组合也有

$$I\approx\frac{4^4R_{2n}-R_n}{4^4-1}=\frac{4^4}{4^4-1}R_{2n}-\frac{1}{4^4-1}R_n$$

Romberg求积公式

实际计算可按下表顺序进行

k	区间等分数 $n=2^k$	梯形公式 $T_n^{(0)}$	Simpson公式 $T_n^{(1)}$	Cotes公式 $T_n^{(2)}$	Romberg公式 $T_n^{(3)}$
0	1	$T_1^{(0)}$			
1	2	$T_2^{(0)}$	$T_1^{(1)}$		
2	4	$T_4^{(0)}$	$T_2^{(1)}$	$T_1^{(2)}$	
3	8	$T_8^{(0)}$	$T_4^{(1)}$	$T_2^{(2)}$	$T_1^{(3)}$
4	16	$T_{16}^{(0)}$	$T_8^{(1)}$	$T_4^{(2)}$	$T_2^{(3)}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

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

解 按递推公式计算，结果如下

k	$n=2^k$	$T_n^{(0)}$	$T_n^{(1)}$	$T_n^{(2)}$	$T_n^{(3)}$
0	1	3.0000000			
1	2	3.1000000	3.1333333		
2	4	3.1311765	3.1415687	3.1421177	
3	8	3.1389885	3.1415925	3.1415941	3.1415858
4	16	3.1409416	3.1415926	3.1415926	3.1415926

Romberg求积公式

由于$|T_{16}^{(0)}-T_{8}^{(0)}|=0.0019531$，应有$|I-T_{16}^{(0)}|<0.000651033.$

由于$|T_{8}^{(1)}-T_{4}^{(1)}|=0.0000001$，应有$|I-T_{8}^{(1)}|<0.000000006.$

由于$|T_{4}^{(2)}-T_{2}^{(2)}|=0.0000015$，应有$|I-T_{4}^{(2)}|<0.000000023.$

由于$|T_{2}^{(3)}-T_{1}^{(3)}|=0.0000068$，应有$|I-T_{2}^{(3)}|<0.00000026.$

正交多项式

记区间$[a,b]$上所有连续函数的全体为$C[a,b]$, 可以证明$C[a,b]$是一个线性空间，把所有次数不超过 n 的多项式全体记为P_n ，则P_n是$C[a,b]$的子空间.

若 $f(x),g(x)\in C[a,b]$, 则称$\int_a^b f(x)g(x)dx$为$f(x)$与$g(x)$的内积,记为 (f,g), 满足

(1) $(f,g)=(g,f)$;

(2) $(cf,g)=c(f,g)$;

(3) $(f_1+f_2,g)=(f_1,g)+(f_2,g)$.

若$(f,g)=0$，称$f(x)$与$g(x)$正交，记为$f\perp g$. 利用内积可以定义函数的平方模 $\|f\|_2=\sqrt{(f,f)}=\sqrt{\int_a^b f^2(x)dx}$.

函数的平方模满足 (1) $\|f\|_2 \geq 0$, 而且 $\|f\|_2 = 0 \Leftrightarrow f(x) = 0$;

(2) $\|cf\|_2 = |c|\,\|f\|_2$;

(3) $\|f+g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2$;

(4) $|(f,g)| \leq \|f\|_2\,\|g\|_2$.

考虑到 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上各点的函数值比重不同，常引进加权形式的

定义: $(f,g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$, $\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx}$. 这里函数 $\rho(x)$ 是非负连续函数.

定理1 若 $f_0(x), f_1(x),\cdots, f_n(x)$ 为 $C[a,b]$ 上的一组线性无关函数,则可得到 $C[a,b]$ 上一组两两正交的函数组 $g_0(x), g_1(x),\cdots, g_n(x)$ 满足

(1) $g_k(x)$ 为 $f_0(x), f_1(x),\cdots, f_k(x)$ 的线性组合,

(2) $f_k(x)$ 为 $g_0(x), g_1(x),\cdots, g_k(x)$ 的线性组合.

证明 只要按Schemite正交化过程构造

$$g_0(x)=f_0(x),$$

$$g_1(x)=f_1(x)-\frac{(f_1,g_0)}{(g_0,g_0)}g_0(x),$$

$$g_2(x)=f_2(x)-\frac{(f_2,g_0)}{(g_0,g_0)}g_0(x)-\frac{(f_2,g_1)}{(g_1,g_1)}g_1(x),$$

$$\vdots$$

$$g_n(x)=f_n(x)-\sum_{i=0}^{n-1}\frac{(f_n,g_i)}{(g_i,g_i)}g_i(x).$$

$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_n(x)$ 两两正交且满足(1)、(2)，再令

$$e_k(x) = \frac{1}{\|g_k\|_2} g_k(x), \qquad k = 0,1,\ldots,n,$$

称函数组 $e_0(x), e_1(x), \cdots, e_n(x)$ 为规范正交组.

P_n 上由线性无关函数 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 经过Schemite正交化过程得到的多项式 $p_0(x), p_1(x), \cdots, p_n(x)$ 称为 $[a,b]$ 上的正交多项式.

例1 求区间[-1,1]上,权函数 $\rho(x)$ 的正交多项式.

解 按Schemite正交化过程有

$$p_0(x)=1,$$

$$p_1(x)=x-\frac{(x,1)}{(1,1)}\times 1=x-\frac{\int_{-1}^{1}xdx}{\int_{-1}^{1}dx}=x,$$

$$p_2(x)=x^2-\frac{(x^2,1)}{(1,1)}\times 1-\frac{(x^2,x)}{(x,x)}x$$

$$=x^2-\frac{\int_{-1}^{1}x^2dx}{\int_{-1}^{1}dx}-\frac{\int_{-1}^{1}x^3dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}x$$

$$=x^2-\frac{1}{3}$$

$$p_3(x) = x^3 - \frac{(x^3,1)}{(1,1)}\times 1 - \frac{(x^3,x)}{(x,x)}x - \frac{(x^3,x^2-\frac{1}{3})}{(x^2-\frac{1}{3},x^2-\frac{1}{3})}(x^2-\frac{1}{3})$$

$$= x^3 - \frac{\int_{-1}^{1} x^3 dx}{\int_{-1}^{1} dx} - \frac{\int_{-1}^{1} x^4 dx}{\int_{-1}^{1} x^2 dx}x - \frac{\int_{-1}^{1} x^5 - \frac{1}{3}x^3 dx}{\int_{-1}^{1} (x^2-\frac{1}{3})^2 dx}(x^2-\frac{1}{3})^2$$

$$= x^3 - \frac{3}{5}x$$

$$\vdots$$

若$p_0(x), p_1(x),\cdots, p_n(x)$ 是$[a,b]$上权函数为$\rho(x)$ 的正交多项式，则有下列性质：

(1) $p_k(x)$是首项系数不为零的k 次多项式；

(2) $p_0(x), p_1(x),\cdots, p_n(x)$ 构成 P_n 上的一组正交基；

(3) $p_n(x)$与任一不高于$n-1$次的多项式正交，即 $p_n(x)\perp P_{n-1}$；

(4) 方程 $p_n(x)=0$ 在$[a,b]$ 上有n 个单根；

(5) 方程$p_{n-1}(x)=0$ 的根 $x_1^{(n-1)}, x_2^{(n-1)},\cdots, x_{n-1}^{(n-1)}$ 与方程$p_n(x)=0$的根 $x_1^{(n)}, x_2^{(n)},\cdots, x_{n-1}^{(n)}$在上交错分布.

1. Legendre多项式

$$L_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \qquad x\in[-1,1],\ \ n=0,1,2,\cdots$$

是区间[-1,1]上权函数$\rho(x)=1$的正交多项式，且满足:

(1) $$(L_m,L_n)=\int_{-1}^{1}L_m(x)L_n(x)dx=\begin{cases}0 & m\neq n,\\ \dfrac{2}{2n+1} & m=n,\end{cases}$$

(2) 有三项递推关系 $$\begin{cases}(n+1)L_{n+1}(x)=(2n+1)xL_n(x)-nL_{n-1}(x), & n\geq 1,\\ L_0(x)=1,\ \ L_1(x)=x.\end{cases}$$

2. Chebyshev多项式

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x) \qquad x\in[-1,1],\ \ n=0,1,2\cdots$$

是区间[-1,1]上权函数$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式，且满足：

(1) $$(T_m,T_n)=\int_{-1}^{1}T_m(x)T_n(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx=\int_0^{\pi}\cos m\theta\cos n\theta d\theta=\begin{cases}0 & m\neq n,\\ \pi & m=n=0,\\ \pi/2 & m=n\neq 0,\end{cases}$$

(2) 有三项递推公式 $$\begin{cases}T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x), \quad n=1,2,\cdots\\ T_0(x)=1,\quad T_1(x)=x,\end{cases}$$

(3) $T_n(x)$在$[-1,1]$上的n个零点为$x_k^{(n)}=\cos\dfrac{2k-1}{2n}\pi, \qquad k=1,2,\ldots,n.$

3. Laguere多项式

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}),\quad 0<x<+\infty,\quad n=0,1,2,\cdots$$

是区间[0,+∞)上权函数 为 $\rho(x)=e^{-x}$ 的正交多项式，且满足:

(1) $(L_m,L_n)=\int_0^{+\infty}e^{-x}L_m(x)L_n(x)dx==\begin{cases}0 & m\neq n,\\ (n!)^2 & m=n,\end{cases}$

(2) 三项递推关系 $\begin{cases}L_{n+1}(x)=(2n+1-x)L_n(x)-n^2L_{n-1}(x), & n=1,2,\cdots\\ L_0(x)=1,\quad L_1(x)=1-x.\end{cases}$

4. Hermite多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2}), \qquad -\infty < x < +\infty, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

是区间(-∞,+∞)上权函数为$\rho(x) = e^{-x^2}$的正交多项式，且满足：

(1) $(H_m, H_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \begin{cases} 0 & m \neq n, \\ 2^n n! \pi & m = n, \end{cases}$

(2) 三项递推关系 $\begin{cases} H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), & n = 1, 2, \cdots \\ H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 1 - x. \end{cases}$

Gauss型求积公式的一般理论

由前面的讨论已经知道，以$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$为节点的Newton-Cotes公式的代数精度一般为n或$n+1$. 这时节点简单地按照等距的方式确定.

对于一个求积公式而言，如果不固定节点的位置，在节点数目不变的情况下，代数精度能否提高，最多能达到多少？

高斯型求积公式讨论的就是最高代数精度的求积公式

Gauss型求积公式的一般理论

定理1 区间 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的具有 n 个节点的数值积分公式代数精度不超过 $2n-1$ 次.

证明 若记 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 为求积节点，则求积公式为

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \qquad (1)$$

取 $2n$ 次多项式 $p(x)=(x-x_1)^2(x-x_2)^2\cdots(x-x_n)^2$，则有

$$0<\int_a^b p(x)\rho(x)dx \neq \sum_{k=1}^{n} A_k p(x_k)=0$$

所以，求积求积公式的代数精度不超过 $2n-1$.

现在的问题是，如何适当地选取节点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，使求积公式(1)具有 $2n-1$ 次代数精度.

Gauss型求积公式的一般理论

使求积公式具有 $2n-1$ 次代数精度的节点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 称为Gauss点，此时的插值型求积公式称为Gauss型求积公式.

下面用构造性方法给出Gauss点的求法.

取区间$[a,b]$上权函数为$\rho(x)$的正交多项式$p_n(x)$的n个零点$x_1,x_2,\cdots,x_n$作为求积节点，用Newton插值余项有误差

$$
\begin{aligned}
R[f] &= \int_a^b f(x)\rho(x)dx - \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \\
&= \int_a^b f[x_1,x_2,\cdots,x_n,x]\omega_n(x)\rho(x)dx \\
&= C\int_a^b f[x_1,x_2,\cdots,x_n,x]p_n(x)\rho(x)dx
\end{aligned}
$$

所以当$f(x)$是次数不超过$2n-1$的多项式时$R[f]=0$.

Gauss型求积公式的一般理论

定理2 对区间 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的积分 $I=\int_a^b f(x)\rho(x)dx$，区间 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的正交多项式 $p_n(x)$ 的 n 个零点恰为Gauss点.

由定理2可见,构造Gauss型求积公式的方法为:

(1) 求出区间 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的正交多项式 $p_n(x)$.

(2) 求出 $p_n(x)$ 的 n 个零点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 即为Gauss点.

(3)计算积分系数 $A_i=\int_a^b l_i(x)\rho(x)dx \quad (i=1,2,\cdots,n)$.

例1 求积分$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx$ 的2点Gauss公式.

解 按Schemite正交化过程作出正交多项式:

$$p_0(x)=1$$

$$p_1(x)=x-\frac{(x,p_0(x))}{(p_0(x),p_0(x))}p_0(x)=x-\frac{\int_{-1}^{1}x^3dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}=x$$

$$p_2(x)=x^2-\frac{(x^2,p_0(x))}{(p_0(x),p_0(x))}p_0(x)-\frac{(x^2,p_1(x))}{(p_1(x),p_1(x))}p_1(x)$$

$$=x^2-\frac{\int_{-1}^{1}x^4dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}-\frac{\int_{-1}^{1}x^5dx}{\int_{-1}^{1}x^4dx}x=x^2-\frac{3}{5}$$

$p_2(x)$ 的两个零点为 $x_1=-\sqrt{\frac{3}{5}}$ ，$x_2=\sqrt{\frac{3}{5}}$，　积分系数为

$$A_1=\int_{-1}^{1}x^2 l_1(x)dx=\int_{-1}^{1}x^2\frac{x-x_2}{x_1-x_2}dx=\frac{1}{3}$$

$$A_2=\int_{-1}^{1}x^2 l_2(x)dx=\int_{-1}^{1}x^2\frac{x-x_1}{x_2-x_1}dx=\frac{1}{3}$$

故两点Gauss公式为

$$\int_{-1}^{1}x^2 f(x)dx\approx\tfrac{1}{3}[f(-\sqrt{\tfrac{3}{5}})+f(\sqrt{\tfrac{3}{5}})]$$

Gauss型求积公式的一般理论

定理3 设 $f(x)\in C^{2n}[a,b]$ 则Gauss公式的误差为

$$R[f]=\int_a^b f(x)\rho(x)dx-\sum_{i=1}^{n}A_i f(x_i)=\frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)dx$$

其中，$\eta\in(a,b),\omega_n(x)=(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$.

1. Gauss-Legendre求积公式

区间[-1,1]上权函数 $\rho(x)=1$的Gauss型求积公式，称为Gauss-Legendre求积公式，其Gauss点为Legendre多项式的零点. 公式的Gauss点和求积系数可在数学用表中查到 .

Gauss-Legendre求积公式的余项为

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

几种Gauss型求积公式

n	x_k	A_k
1	0	2
2	± 0.5773502692	1
3	± 0.7745966692	0.5555555556
	0	0.8888888889
4	± 0.8611363116	0.3478548451
	± 0.3399810436	0.6521451549
5	± 0.9061798459	0.2369268851
	± 0.5384693101	0.4786286705
	0	0.5688888889

n	x_k	A_k
6	± 0.9324695142	0.1713244924
	± 0.6612093865	0.3607615730
	± 0.2386191861	0.4679139346
7	± 0.9491079123	0.1294849662
	± 0.7415311856	0.2797053915
	± 0.4058451514	0.3818300505
	0	0.4179591837
8	± 0.9602898565	0.1012285363
	± 0.7966664774	0.2223810345
	± 0.5255324099	0.3137066459
	± 0.1834346425	0.3626837834

例1 用3点Gauss公式计算积分$I=\int_{-1}^{1}\cos x dx$.

解 查表得$x_1=-0.7745966692$，$x_2=0$，$x_3=0.7745966692$，A_2=0.8888888889，$A_1=A_3=0.5555555556$，所以有

$$I\approx A_1\cos x_1+A_2\cos x_2+A_3\cos x_3=1.68300355$$

误差为 $R[f]=\left|\frac{2^7\times 6^4}{(6!)^3\times 7}(-\cos\eta)\right|\le 6.3492\times 10^{-5}$.

实际上，$I=2\sin 1=1.68294197$，误差为$|R[f]|=6.158\times 10^{-5}$.

用Simpson公式，则有$I=2\sin 1=1.69353487$，误差为$|R[f]|=1.06\times 10^{-2}$.

几种Gauss型求积公式

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

因此, $[a,b]$ 上权函数 $\rho(x)=1$ 的Gauss型求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^n A_i f(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}x_i)$$

求积误差可表示为 $R[f]=\frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^3(2n+1)} f^{(2n)}(\eta), \ \ \eta\in(a,b).$

例2 用3点Gauss公式计算积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$.

解 这里Gauss点和积分系数与上例相同，所以

$$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^3 A_i \frac{4}{1+[(1+x_i)/2]^2} = 3.141068$$

结果远比Simpson公式的结果精确.

2. Gauss-Laguerre求积公式

区间 $[0,+\infty)$ 上权函数 $\rho(x)=e^{-x}$ 的Gauss型求积公式，称为Gauss-Laguerre求积公式，其Gauss点为Laguerre多项式的零点.

公式的Gauss点和求积系数可在数学用表中查到 .

几种Gauss型求积公式

n	x_k	A_k
2	0.5858864376	0.8535533905
	3.4142135623	0.1464466094
3	0.4157745567	0.7110930099
	2.2942803602	0.2785177335
	602899450829	0.0103892565
4	0.3225476896	0.6031541043
	1.7457611011	0.3574186924
	4.5366202969	0.0388879085
	9.3950709123	0.0005392947

n	x_k	A_k
5	0.2635603197	0.5217556105
	1.4134030591	0.3986668110
	3.5964257710	0.0759424497
	7.0858100058	0.0036117587
	12.6408008442	0.0000233700
6	0.2228466041	0.4589646793
	1.1889321016	0.4170008307
	2.9927363260	0.1133733820
	5.7751435691	0.0103991975
	9.8374674183	0.0002610172
	15.9828739806	0.0000008985

3. Gauss-Hermite求积公式

区间 $(-\infty,+\infty)$ 上，权函数 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 的Gauss型求积公式，称为Gauss-Hermite求积公式，其Gauss点为Hermite多项式的零点.

Gauss-Hermite求积公式为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \quad \text{或} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i e^{x_i^2} f(x_i)$$

求积公式的误差为

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

几种Gauss型求积公式

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
2	±0.7071067811	0.8862269254	6	±0.4360774119 ±1.3358490704 ±2.3506049736	0.7246295952 0.1570673203 0.0045300099
3	±1.2247448713 0	0.2954089751 1.8163590006			
4	±0.5246476232 ±1.6506801238	0.8049140900 0.0813128354	7	±0.8162878828 ±1.6735516287 ±2.6519613563 0	0.4256072526 0.0545155828 0.0009717812 0.8102646175
5	±0.9585724646 ±2.0201828704 0	0.3936193231 0.0199532421 0.9453087204			

差商型数值微分

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 $a(6)$ ？

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的用差商近似导数.

1. 向前差商数值微分公式

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

由Taylor展开式

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

可得误差

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

2. 向后差商数值微分公式

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

由Taylor展开式 $f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{h^2}{2} f''(x_0 - \theta h) \quad ,0 \le \theta \le 1$

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

3. 中心差商数值微分公式

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

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

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

4. 二阶中心差商数值微分公式

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

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

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

可得误差 $$f''(x_0)-\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}=-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_0+\theta h),\quad \theta\in(-1,1)$$

差商型数值微分

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 $a(6)$？

解 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 $a(6) \approx \dfrac{S(7)-2S(6)+S(5)}{1} = 1.70$

实际应用时，可采用步长逐次减半的方法确定最终步长. 记 $G(h)$ 和 $G\left(\frac{h}{2}\right)$ 分别为步长取 h 和 $\frac{h}{2}$ 时的差商公式,对给定的精度 $\varepsilon>0$,如果

$$\left|G(h)-G\left(\frac{h}{2}\right)\right|<\varepsilon$$

就取步长为 $\frac{h}{2}$ 否则进一步将步长减半.

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

运用插值原理,可以建立插值多项式 $L_n(x)$ 作为它的近似.由于多项式的求导比较容易，我们取 $L_n'(x)$ 的值作为$f'(x)$ 的近似，这样建立的数值公式统称为插值型的求导公式.

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.

插值型数值微分

插值余项 $f(x)-L_n(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$，

所以，求导公式的余项为 $f'(x)-L_n'(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x)+\dfrac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\dfrac{d}{dx}f^{n+1}(\xi)$，

式中 $\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$.

在此余项公式中，由于ξ是x的未知函数，我们无法对 $\dfrac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\dfrac{d}{dx}f^{n+1}(\xi)$ 作出进一步估计. 但是，如果我们限定求某个节点x_k处求导数，那么上面的第二项因式$\omega_{n+1}(x_k)$ 变为零，这时有余项公式

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

考察节点处的导数值，假定所给节点是等距的.

两点公式

设已给出两个节点 x_0, x_1, 上的函数值 $f(x_0), f(x_1)$, 做线性插值得公式

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

对上式两端求导，记 $x_1-x_0=h$，有 $L_1'(x)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]$

于是有下列求导公式 $L_1'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]$ $L_1'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]$

再利用余项公式(1)知，带余项的两点公式是

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

三点公式

设已给出的三个节点 $x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$ 上的函数值 $f(x_0), f(x_1), f(x_2)$，

做二次插值

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

令 $x = x_0 + th$ ，上式可表示为

$$L_2(x_0+th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2) f(x_0) - t(t-2) f(x_1) + \frac{1}{2} t(t-1) f(x_2) \quad (2)$$

两端对 x 求导，有

$$L_2'(x_0+th) = \frac{1}{2h}[(2t-3) f(x_0) - (4t-4) f(x_1) + (2t-1) f(x_2)]$$

插值型数值微分

分别取$t=0,1,2$, 得到三种三点公式

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

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

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

而带余项的三点求导公式如下

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

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

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

插值型数值微分

用插值多项式$L_n(x)$作为$f(x)$的近似函数，还可以建立高阶数值微分公式

$$f^{(k)}(x)\approx L_n^{(k)}(x),\quad k=1,2,\cdots$$

例如将(2)再对x求导一次，有

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

于是，带余项的二阶导数的三点公式如下

$$f''(x_0)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]+[-hf'''(\xi_1)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2)]$$

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

$$f''(x_2)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]+[hf'''(\xi_1)-\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2)]$$