《数值计算方法》

数值积分

讲授人：杨 程
时　间：2021-2022学年
　　　　秋季学期
Email: yang_cheng@nun.edu.cn

目录

数值积分

PART 3

龙贝格算法

一、复化梯形和复化辛普森求积公式

原因：低阶**Newton-Cotes**求积公式一般不能满足精度要求。为了提高计算精度，在实际计算时，通常采用它们的复化形式进行计算。

思路：将积分区间分成**n**个等长的小区间，在每个区间上应用梯形求积公式（辛普森求积公式），然后相加便得到复化梯形求积公式（复化辛普森求积公式）。

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

1、复化梯形公式

将积分区间 $[a,b]$ n等分，分点 $x_k = a + kh, h = \dfrac{b-a}{n}$

在区间 $[x_k, x_{k+1}]$ $k = 0, 1, \cdots, n-1$ 上采用梯形公式

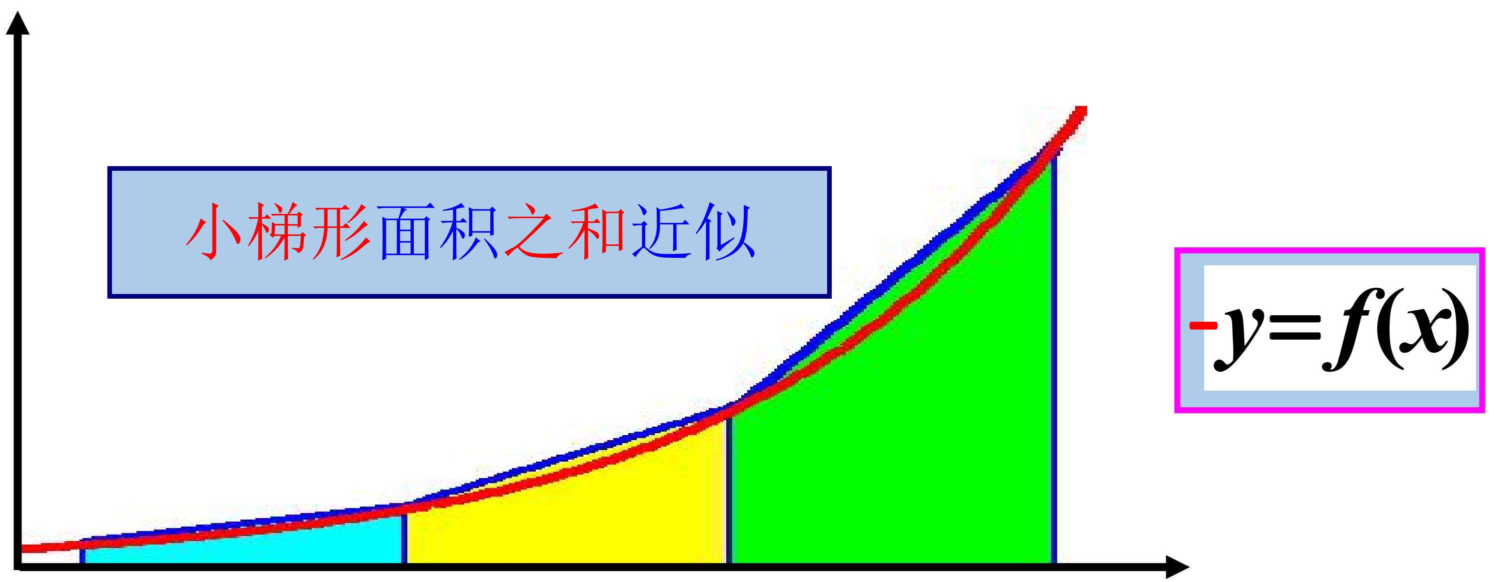
$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$$

$$= \boxed{\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right]} + R_n(f)$$

复化梯形公式

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

复化梯形公式的几何意义



复化梯形公式的余项

设 $f(x)\in C^2[a,b]$

$$R_n(f)=I-T_n(f)=\sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right]$$

$$\boxed{m=\min_{a\le x\le b}f''(x)\le\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)\le\max_{a\le x\le b}f''(x)=M}$$

由介值定理 $\exists\eta\in[a,b]$ $f''(\eta)=\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)$

余项估计式 $R_n(f)=I-T_n(f)=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta)$

二、复化Simpson公式

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

将积分区间 $[a,b]$ **n等分**，分点 $x_k = a+kh, h=\dfrac{b-a}{n}$

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$$

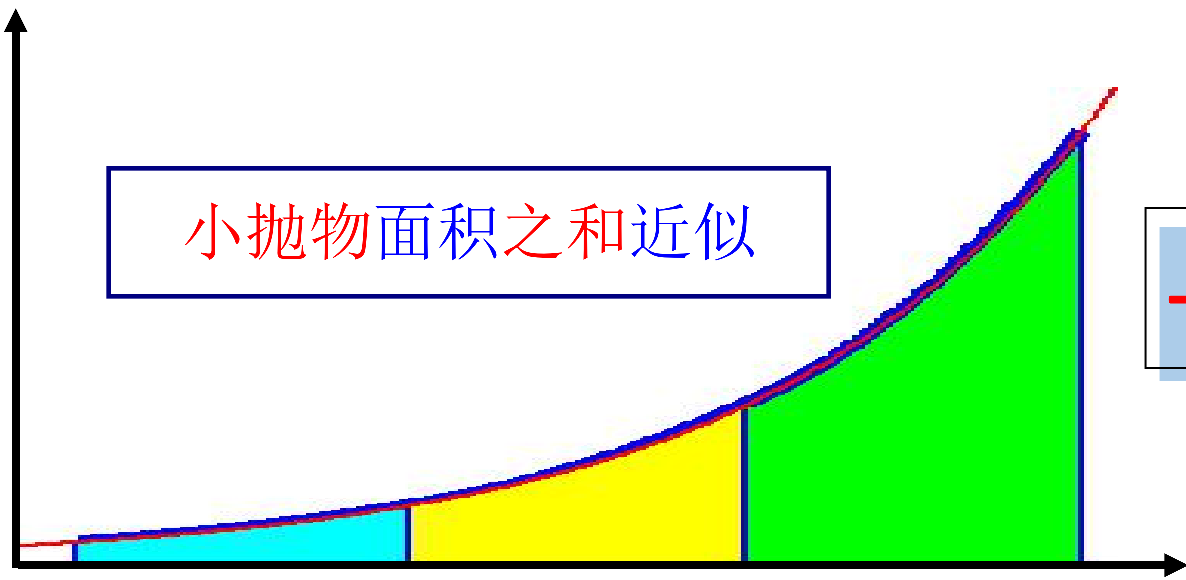
$$=\boxed{\frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})\right]}+R_n(f)$$

其中 $f(x_{k+\frac{1}{2}})=f(x_k+\dfrac{h}{2})$

复化Simpson公式

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

复化Simpson公式的几何意义



$y=f(x)$

注意事项：

（1）使用复化梯形公式、Simpson公式，首先要确定步长 h;

（2）而步长要根据余项确定，这就涉及到高阶导数的估计；

（3）高阶导数的估计一般比较困难，且估计值往往偏大；

（4）计算机上实现起来不方便，通常采用“事后估计法”。

- 复化求积方法对提高精度行之有效；
- 缺点：使用之前必须先给出步长，步长取的太大精度难以保证，步长太小则会导致计算量的增加，合理估计步长往往是困难的。

二、积分步长的自动选取：

- 基本思想： $\boxed{\text{将积分区间逐次分半}}$
- 终止法则： $\boxed{\text{前后两次近似值的误差小于已知精度}}$

$$\left|I_{2n}-I_{n}\right|<\varepsilon \quad !?$$

➢具体过程（以复化梯形公式为例）

1、首先将区间$[a,b]$n等分： $$h=\frac{b-a}{n}$$

$$T_n=\frac{h}{2}\left[f\left(x_0\right)+f\left(x_1\right)\right]+\frac{h}{2}\left[f\left(x_1\right)+f\left(x_2\right)\right]+\cdots+\frac{h}{2}\left[f\left(x_{n-1}\right)+f\left(x_n\right)\right]$$

$$T_n=h\left[\frac{1}{2}f\left(a\right)+f\left(x_1\right)+f\left(x_2\right)+\cdots+\frac{1}{2}f\left(b\right)\right]$$

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

2、再将区间 $[a,b]$ 2n等分，即步长减半：$h_1=\frac{h}{2}$

$$T_{2n}=\frac{h_1}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+2\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(b)\right]$$

$$=\frac{1}{2}T_n+\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})$$

$$\boxed{f(x_{k+\frac{1}{2}})=f(x_k+\frac{h}{2})}$$

3、终止条件：

由复化梯形公式的余项知

$f''(x)$ 变化不大时

$$I - T_n = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\eta_1)$$

$$I - T_{2n} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2 f''(\eta_2)$$

$$\boxed{\frac{I - T_n}{I - T_{2n}} \approx 4}$$

由此得到近似关系式 $I \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)$

误差控制条件 $\left|\frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)\right| < \varepsilon$

上述条件满足，程序终止；否则，继续分半计算。

➢对于复化梯形公式 $I \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n) = S_n$ 记

当n=1时：$S_1 = T_2 + \frac{1}{3}(T_2 - T_1) = \frac{4}{3}T_2 - \frac{1}{3}T_1 = \frac{4}{4-1}T_2 - \frac{1}{4-1}T_1$

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

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

$$= \frac{4}{3}\frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a) + f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$-\frac{1}{3}(b-a)\left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

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

所以S_1恰好是在[a,b]上应用辛普森公式的结果。

类似的可以验证 $S_2 = \frac{4}{4-1}T_4 - \frac{1}{4-1}T_2$ 恰好是将[a,b]二等分后，在每个小区间上应用辛普森公式的结果。一般地作：

$$S_{2^k} = \frac{4}{4-1}T_{2^{k+1}} - \frac{1}{4-1}T_{2^k}$$

恰好是将[a,b]分成2^k等份后，在每个小区间上应用辛普森公式的结果。

这说明，**将区间[a,b]逐次分半，由梯形公式前后两次结果作适当的线性组合，就能构成精确度较高的辛普森公式**。

同样，分析复化辛普森公式的截断误差可得：

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

类似前面梯形公式的分析过程，可推证：

$$C_1 = \frac{16}{15}S_2 - \frac{1}{15}S_1 = \frac{4^2}{4^2-1}S_2 - \frac{1}{4^2-1}S_1$$

它恰好是在[a,b]上应用精度更高的柯特斯（Cotes）公式的结果。

一般地： $$C_{2^k} = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2^{k+1}} - \frac{1}{4^2-1}S_{2^k}$$

它恰好是将区间[a,b]分成2^k等份后，在每个小区间上应用的柯特斯（Cotes）公式的结果。

三、Romberg求积公式

前面的分析说明，利用辛普森公式的前后两次结果作新的线性组合，又得到精确度更高的求积公式。

若将$C_{2^{k+1}}$与 C_{2^k} 作如下线性组合，得

$$R_{2^k}=\frac{4^3}{4^3-1}C_{2^{k+1}}-\frac{1}{4^3-1}C_{2^k}$$

上式就称为**Romberg求积公式**。其求积精度更高。

通过上述3个积分值序列求积分近似值的方法，称之为Romberg积分法。

4个积分值序列：

梯形值序列 $\{T_{2^k}\}$

Simpson值序列 $\{S_{2^k}\}$

Cotes值序列 $\{C_{2^k}\}$

Romberg值序列 $\{R_{2^k}\}$

$$S_{2^k} = \frac{4T_{2^{k+1}} - T_{2^k}}{4-1}$$

$$C_{2^k} = \frac{4^2 S_{2^{k+1}} - S_{2^k}}{4^2-1}$$

$$R_{2^k} = \frac{4^3 C_{2^{k+1}} - C_{2^k}}{4^3-1}$$

龙贝格（**Romberg)** 算法是在积分区间逐次分半的过程中，对用复合梯形法产生的近似值进行加权平均，获得准确程度较高的一种方法，具有公式简练, 使用方便 , 结果较可靠等优点。

k	区间等分数 $n=2^k$	梯形公式 T_{2^k}	辛甫生公式 $S_{2^{k-1}}$	柯特斯公式 $C_{2^{k-2}}$	龙贝格公式 $R_{2^{k-3}}$
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
…	…	…	…	…	…

例，用龙贝格方法计算积分 $I=\int_0^1 \sqrt{1+x^2}dx$

解：按上式步骤计算如下：

（1） $f(x)=\sqrt{1+x^2}, a=0, b=1, f(0)=1$

$f(1)=1.414213562$

$$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=1.207106781$$

（2） $f\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{1}{2}\right)=1.118033989$

$$T_2=\frac{1}{2}\left[T_1+f\left(\frac{1}{2}\right)\right]=1.162570385$$

$$S_1=\frac{4}{3}T_2+\frac{1}{3}T_1=1.14772492$$

（3） $$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}\left[f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right)\right] = 1.151479294$$

$$S_2 = \frac{4}{3}T_4 - \frac{1}{3}T_2 = 1.147782264$$

$$C_1 = \frac{16}{15}S_2 - \frac{1}{15}S_1 = 1.147786087$$

（4） $$T_8 = 1.148714467$$

$$S_4 = \frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4 = 1.147792857$$

$$C_2 = \frac{16}{15}S_4 - \frac{1}{15}S_2 = 1.147793564$$

$$R_1 = \frac{64}{63}C_2 - \frac{1}{63}C_1 = 1.147793682$$

Romberg积分法的一般公式

$$\boxed{T_{m,j}=\frac{4^{j-1}T_{m,j-1}-T_{m-1,j-1}}{4^{j-1}-1}} \quad j=2,3,4;m\ge j$$

m为加速次数，k为划分区间次数。

其中

$$T_{m,1}=T_{2^{m-1}}\,(m\ge 1) \qquad T_{m,3}=C_{2^{m-3}}\,(m\ge 3)$$

$$T_{m,2}=S_{2^{m-2}}\,(m\ge 2) \qquad T_{m,4}=R_{2^{m-4}}\,(m\ge 4)$$

Romberg积分表

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$$

$$T_{2,1} = \frac{1}{2}T_{1,1} + \frac{b-a}{2} f\left(\frac{b+a}{2}\right)$$

$$\begin{array}{llll}
T_{1,1} & & & \\
T_{2,1} & T_{2,2} & & \\
T_{3,1} & T_{3,2} & T_{3,3} & \\
T_{4,1} & T_{4,2} & T_{4,3} & T_{4,4} \\
T_{5,1} & T_{5,2} & T_{5,3} & T_{5,4} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{array}$$

例：利用Romberg 积分法式计算积分 $I=\int_0^{1.5}\frac{1}{x+1}dx$

要求精确到小数点后面7位。

解：$f(x)=\frac{1}{x+1}$ 根据Romberg 积分法计算得

$$T_{1,1}=\frac{1.5}{2}[f(0)+f(1.5)]=1.05$$

$$T_{2,1}=\frac{1}{2}[T_{1,1}+1.5f(0.75)]\approx 0.953571429$$

$$T_{2,2}=\frac{4T_{2,1}-T_{1,1}}{3}\approx 0.921428571$$

$$T_{3,1} = \frac{1}{2}\{T_{2,1} + 0.75[f(0.75) + f(1.125)]\}$$

$$\approx 0.925983575$$

$$T_{3,2} = \frac{4T_{3,1} - T_{2,1}}{3} \approx 0.916787624$$

$$T_{3,3} = \frac{16T_{3,2} - T_{2,2}}{3} \approx 0.916478228$$

具体结果见下表

k	$T_{k,1}$	$T_{k,2}$	$T_{k,3}$	$T_{k,4}$
1	1.05			
2	0.953571429	0.921428571		
3	0.925983575	0.916787624	0.916478228	
4	0.918741799	0.916327874	0.916297224	0.916294351
5	0.916905342	0.916293190	0.916290077	0.916290776

$$I = 0.9162907318\cdots$$

$$T_{5,4} = 0.916290776$$

PART 4

高斯积分

一、 Gauss积分问题的提法

积分公式的一般形式：

$$\boxed{I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)}$$

➢前述Newton—Cotes求积公式中求积节点是取等距节点，求积系数计算方便，但代数精度要受到限制；

➢为了提高代数精度，需要适当选择求积节点：

①当求积节点个数确定后，不管这些求积节点如何选取，求积公式的代数精度最高能达到多少？

②具有最高代数精度的求积公式中求积节点如何选取？

- 具有(n+1)个求积节点的*Newton-Cotes*公式，

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

至少具有n阶代数精度

- 在确定求积公式求积系数A_k的过程中限定求积节点为等分节点，简化了处理过程，但也降低了求积公式的代数精度

去掉求积节点 为等分节点的限制条件，会有什么结果？？

Gauss型求积公式的定义

Newton-Cotes公式把积分区间的等分点作为求积节点，从而构造出的一类特殊的插值型求积公式。这种做法虽然简化了计算，但却降低了所得公式的代数精度。

例如，在构造形如

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

的两点公式时，如果限定求积节点 $x_0=-1$、$x_1=1$ 那么所得插值型求值公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-1) + f(1)$$

的代数精度仅为1。但是，如果我们对（**1**）中的系数 A_0，A_1 和节点 x_0, x_1 都不加限制，那么就可以适当选取 x_0, x_1 和 A_0、A_1，使所得公式的代数精度 $m>1$。事实上，若只要求求积公式（**1**）对函数 $f(x)=1, x, x^2, x^3$ 都准确成立，只要 x_0, x_1 和 A_0, A_1 满足方程组:

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0{}^2 + A_1 x_1{}^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0{}^3 + A_1 x_1{}^3 = 0 \end{cases} \qquad \textbf{(3)}$$

解之得

$$A_0 = A_1 = 1 \qquad x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3} \qquad x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

代入（1）即得

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-\frac{\sqrt{3}}{3}) + f(\frac{\sqrt{3}}{3}) \qquad \textbf{(4)}$$

容易验证，所得公式（4）是代数精度**m=3**的插值型求积公式。

同理，对于一般求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad \textbf{(5)}$$

只要适当选择$2n+2$个待定参数 x_k和 A_k（**k=0,1,…,n**）,使它的代数精度达到$2n+1$ 也是完全可能的。

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad \textbf{(5)}$$

定义 若形如（**5**）的求积公式代数精度达到了 $2n+1$，则称它为**Gauss型求积公式，**并称相应的求积节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a,b]$ 为**Gauss点**。

Gauss型求积公式的构造与应用

可以像构造两点Gauss型求积公式（4）那样，通过解形如（3）的方程组来确定Gauss点 x_k 和求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$，从而构造 $n+1$ 点Gauss型求积公式。但是，这种做法要解一个包含有$2n+2$个未知数的非线性方程组，其计算工量是想当大的。

一个比较简单的方法是：

（1）先用区间[a,b]上的 $n+1$ 次正交多项式确定**Gauss**点

$x_k \in [a,b](k=0,1,\cdots,n)$

（2）然后利用**Gauss**点确定求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$

当积分区间是[-1，1]时，两点至五点**Gauss**型求积公式的节点、系数T和余项见**表1**，其中 。

利用**表1**，可以方便地写出相应的**Gauss**型积公式。

表1

Gauss点数	节点x_k	系数A_k	余项$R[f]$
2	± 0.57735027	1	$f^{(4)}(\xi)/135$
3	± 0.77459667 0	0.55555556 0.88888889	$f^{(6)}(\xi)/15750$
4	± 0.86113631 ± 0.33998104	± 0.34785485 ± 0.65214515	$f^{(8)}(\xi)/34872875$
5	± 0.90617985 ± 0.53846931 0	± 0.23692689 ± 0.47862867 ± 0.56888889	$f^{(10)}(\xi)/1237732650$

例如，当N=2时，由表1知：

$$x_{0,1} = \pm 0.57735027,\ A_{0,1} = 1$$

故得两点Gauss型求积公式：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-0.57735027) + f(0.57735027)$$

Gauss型求积公式的明显缺点是: **当 n 改变大小时，系数和节点几乎都在改变。**同时，**由表1给出的余项，其表达式都涉及被积函数的高阶导数，要利用它们来控制精度也是十分困难的。**

为了克服这些缺点，在实际计算中较多采用复合求积的方法。

- 梯形求积公式和抛物线求积公式是低精度的方法，但对于光滑性较差的函数有时比用高精度方法能得到更好的效果。复化梯形公式和抛物线求积公式，精度较高，计算较简，使用非常广泛。

- Romberg求积方法，算法简单，当节点加密提高积分近似程度时，前面的计算结果可以为后面的计算使用，因此，对减少计算量很有好处。并有比较简单的误差估计方法。

- Gauss型求积，它的节点是不规则的，所以当节点增加时，前面的计算的函数值不能被后面利用。计算过程比较麻烦，但精度高，特别是对计算无穷区间上的积分和广义积分，则是其他方法所不能比的。

PART 4

数值微分

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**。

由导数的定义：

$$f'(x_0)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

自然会想到，当步长h很小时，可以用下式代替 $f(x_0)$ 。

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

但是，由于舍入误差的存在，用上述公式进行计算，往往达不到计算精度的要求。

传统的导数定义与方法

$$f'(a)=\lim_{h\to 0}\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

向前差商：$f'(a)\approx\dfrac{f(a+h)-f(a)}{h}$

向后差商：$f'(a)\approx\dfrac{f(a)-f(a-h)}{h}$

其中 h 为步长

中心差商：$f'(a)\approx\dfrac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$

中点方法

思想：用离散点上函数的信息求函数的导数

数值微分的误差估计

分别将$f(a \pm h)$在$x = a$处泰勒展开

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

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

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

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

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

$$f'(x)-\frac{f(x+h)-f(x)}{h}=-\frac{f''(x)}{2!}h+\cdots=O(h)$$

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

- 从截断误差的角度看，h越小，

  计算结果越准确；

➢从舍入误差的角度来看，h很小时，$f(a+h)$与$f(a-h)$很接近，直接相减会造成有效数字的严重损失。因而步长不宜太小.

希望在保证截断误差满足精度要求的前提下选取尽可能大的步长，但是事先给出合适的步长很困难，通常在变步长的过程中实现步长的自动选择

前面我们介绍了如何用易于计算的“简单函数”来逼近函数，比如多项式插值逼近，样条插值函数逼近等。

其实，我们可以利用这种思想计算函数的导数值，即用简单函数的导数逼近一个表达式复杂甚至表达式未知的函数的导数。下面介绍集中数值微分公式。

1、中点方法与误差分析

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，它其实是前两种方法的算术平均。但它的误差阶却由$O(h)$提高到$O(h^2)$.

较为常用的是中点公式。

为利用中点公式

$$G(h)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$$

计算导数的近似值，首先必须选取合适的步长，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：

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

代入中点公式得

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

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

再考察舍入误差.

按中点公式，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**.

因此，**从舍入误差的角度来看，步长是不宜太小**的.

例如，用中点公式求 $f(x)=\sqrt{x}$ 在 $x=2$ 处的一阶导数

$$G(h)=\frac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}.$$

取4位数字计算.

结果见表2（导数的准确值 $f'(2)=0.353553$ ）.

表 2

h	$G(h)$	h	$G(h)$	h	$G(h)$
1	0.3660	0.05	0.3530	0.001	0.3500
0.5	0.3564	0.01	0.3500	0.0005	0.3000
0.1	0.3535	0.005	0.3500	0.0001	0.3000

从表2中看到 $h=0.1$ 的逼近效果最好，如果进一步缩小步长，则逼近效果反而越差.

这是因为当 $f(a+h)$ 及 $f(a-h)$ 分别有差入误差 ε_1 及 ε_2.

若令 $\varepsilon=\max\{|\varepsilon_1|,|\varepsilon_2|\}$, 则计算 $f'(a)$ 的舍入误差上界为

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

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

$$E(h)=\frac{h^2}{6}M+\frac{\varepsilon}{h},$$

要使误差 $E(h)$最小，步长 h 应使$E'(h)=0$，由

$$E'(h)=\frac{h}{3}M-\frac{\varepsilon}{h^2}=0,$$

可得 $h=\sqrt[3]{3\varepsilon/M}$， 如果 $h<\sqrt[3]{3\varepsilon/M}$，有 $E'(h)<0$ ；如果 $h>\sqrt[3]{3\varepsilon/M}$ ，有 $E'(h)>0$. 由此得出 $h=\sqrt[3]{3\varepsilon/M}$ 时 $E(h)$ 最小.

当 $f(x)=\sqrt{x}$ 时，

$$f'''(x)=\frac{3}{8}x^{-5/2}, M=\max_{1.9\le x\le 2.1}\left|\frac{3}{8}x^{-5/2}\right|\le 0.07536$$

假定 $\varepsilon=\frac{1}{2}\times 10^{-4}$，则 $h=\sqrt[3]{\frac{1.5\times 10^{-4}}{0.07536}}\approx 0.125$. 与表2基本相符.

2、插值型的求导公式

对于列表函数 $y = f(x)$:

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

运用插值原理，可以建立插值多项式 $y = P_n(x)$作为它的近似.

由于多项式的求导比较容易，我们取$P_n'(x)$的值作为 $f'(x)$ 的近似值，这样建立的数值公式

$$f'(x) \approx P_n'(x)$$

统称**插值型的求导公式**.

即使 $f(x)$ 与 $P_n(x)$ 的值相差不多，导数的近似值 $P_n'(x)$ 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的分析.

依据插值余项定理，求导公式的余项为

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

$$+\frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi),$$

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

由于 ξ 是 x 的未知函数，所以对随意给出的点 x，误差是无法预估的.

但如果限定求某个节点 x_k 上的导数值，那么第二项中因式 $\omega_{n+1}(x_k)$ 变为零，这时余项公式为

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

下面仅考察节点处的导数值并假定所给节点是等距的.

（1）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

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

对上式两端求导，记 $x_1 - x_0 = h$ ，有

$$P_1'(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)],$$

于是有下列求导公式：

$$P_1'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)]; \quad P_1'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)].$$

利用余项公式知，带余项的两点公式是

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

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

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

（2）三点公式

设已给出三个节点 $x_0,\ x_1=x_0+h,\ x_2=x_0+2h$ 上的函数值，做二次插值

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

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

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

令 $x=x_0+th,$ 上式可表示为

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

两端对 t 求导，有

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)].$$

式中撇号（′ ）表示对变量 x 求导数.

分别取 $t=0,1,2$, 得到三种三点公式:

$$P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)];$$

$$P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)];$$

$$P_2'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)].$$

带余项的三点求导公式为

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

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

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

内容小结

但是在许多实际问题经常遇到下列情况：

（1）原函数存在但不能用初等函数表示；

（2）原函数可以用初等函数表示，但结构复杂；

（3）被积函数没有表达式，仅仅提供了一数表。

利用函数在有限个节点处的函数值去计算的积分！

数值积分

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

形如上式的求积公式称为机械求积公式。

其中 x_k 称为求积节点， A_k 称为求积系数。若中的求积系数 A_k 是由下式确定的，则称该求积公式为插值型求积公式。

$$\begin{aligned} A_k &= \int_a^b l_k(x)\,dx \\ &= \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}\,dx \end{aligned}$$

1、矩形公式

在[a,b]上任取一点 ξ ，做 $f(x)=f(\xi)$ 则：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b f(\xi)dx = (b-a)\cdot f(\xi)$$

矩形公式分为：

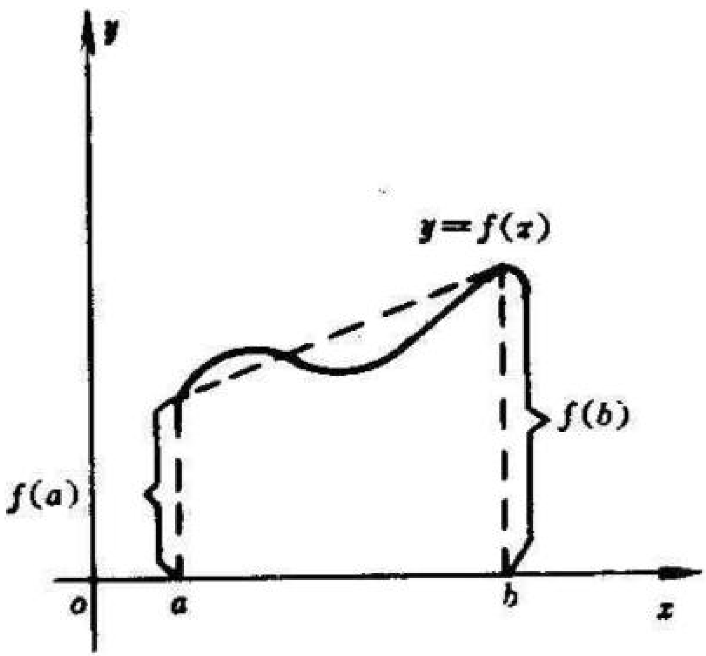
左矩形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\cdot \underline{f(a)}$

右矩形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\cdot \underline{f(b)}$

中矩形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\cdot \underline{f\left(\frac{a+b}{2}\right)}$

2、梯形公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_1(x)\,dx$$



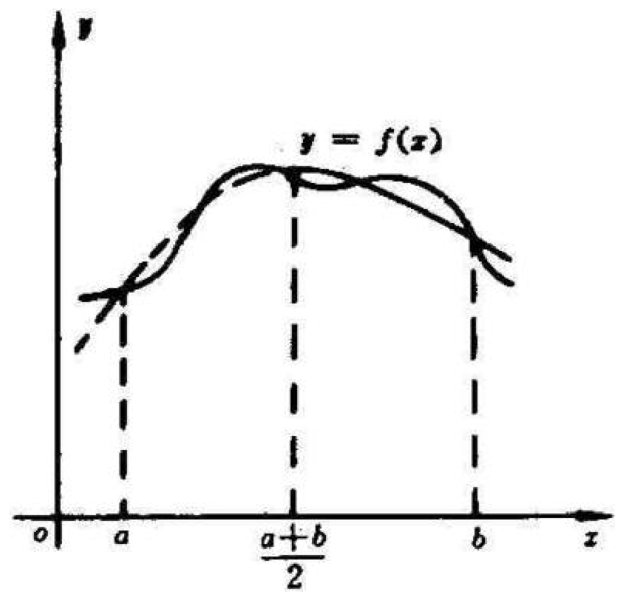
梯形求积公式

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

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

3、辛普森公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_2(x)dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$



抛物线求积公式

求积公式的代数精度

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

对任意不高于m 次的代数多项式都准确成立，而对于 x^{m+1}却不能准确成立，则称该公式的代数精度为m 。

Newton-Cotes公式

在实际应用时，考虑到计算的方便，常将积分区间等分之，并取分点为求积分节点。这样构造出来的插值型求积公式就称为Newton-Cotes公式。

低阶**Newton-Cotes**求积公式一般不能满足精度要求。为了提高计算精度，在实际计算时，通常采用它们的复化形式进行计算。

思路：将积分区间分成**n**个等长的小区间，在每个区间上应用梯形求积公式（辛普森求积公式），然后相加便得到复化梯形求积公式（复化辛普森求积公式）。

Romberg求积公式

利用辛普森公式的前后两次结果作新的线性组合，又得到精确度更高的求积公式。

若将$C_{2^{k+1}}$与 C_{2^k} 作如下线性组合，得

$$R_{2^k} = \frac{4^3}{4^3-1}C_{2^{k+1}} - \frac{1}{4^3-1}C_{2^k}$$

上式就称为**Romberg求积公式**。其求积精度更高。

4个积分值序列：

梯形值序列 $\left\{T_{2^k}\right\}$

Simpson值序列 $\left\{S_{2^k}\right\}$

Cotes值序列 $\left\{C_{2^k}\right\}$

Romberg值序列 $\left\{R_{2^k}\right\}$

$$\boxed{S_{2^k} = \frac{4T_{2^{k+1}} - T_{2^k}}{4-1}}$$

$$\boxed{C_{2^k} = \frac{4^2 S_{2^{k+1}} - S_{2^k}}{4^2-1}}$$

$$\boxed{R_{2^k} = \frac{4^3 C_{2^{k+1}} - C_{2^k}}{4^3-1}}$$

数值微分

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**。

中点公式： $G(h)=\dfrac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$

$$\text{插值型的求导公式}\begin{cases}\text{两点公式}\\ \\ \text{三点公式}\end{cases}$$

20XXPOWERPOINT

感谢观看 THANGKS!

单击此处添加您的副标题文字