第4章 数值积分与数值微分

张利军
zlj@nju.edu.cn
http://cs.nju.edu.cn/zlj

目录

积分计算面临的挑战

Newton-Leibniz公式

- 对于积分$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$，其中$f(x)$的原函数为$F(x)$，则有：

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

实际使用中的问题

- 大量的被积函数$f(x)$很难找到用初等函数表示的原函数，例如 $\frac{\sin x}{x}$，$\sin x^2$等
- $f(x)$是由测量或数值计算给出的一张数据表，Newton-Leibniz公式无法直接使用

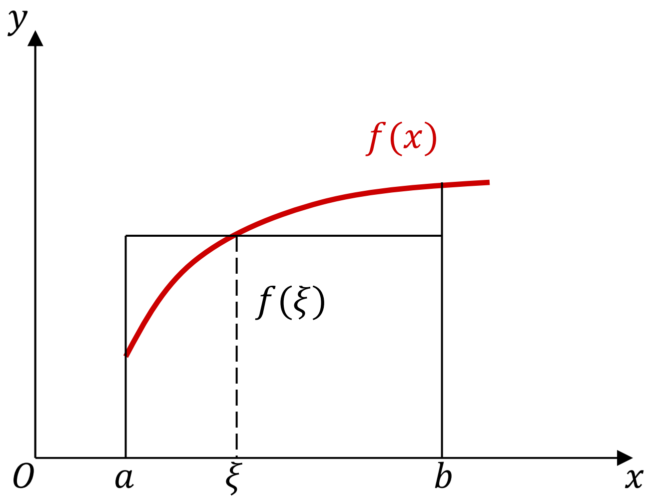
数值求积的基本思想

积分中值定理

- 在积分区间(a, b)内存在一点ξ，有下式成立：

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

- 底为$b-a$，高为$f(\xi)$的矩形面积等于所求曲边梯形的面积I
- ξ的具体位置一般不知道，难以准确算出$f(\xi)$
- $f(\xi)$称为区间$[a, b]$上的平均高度



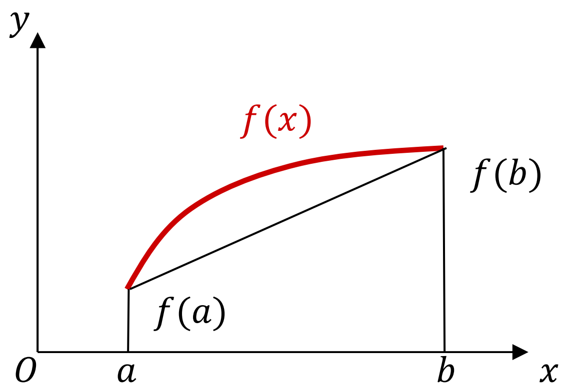
近似平均高度$f(\xi)$

梯形公式

- 用两端点的高度$f(a)$与$f(b)$取算术平均近似$f(\xi)$

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

$$T = (b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \qquad (4.1.1)$$



近似平均高度$f(\xi)$

- 梯形公式
  - 用两端点的高度$f(a)$与$f(b)$取算术平均近似$f(\xi)$

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

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

- 中矩形公式（矩形公式）
  - 用区间中点$c=\frac{a+b}{2}$的高度$f(c)$近似$f(\xi)$

$$R=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{4.1.2}$$

近似平均高度$f(\xi)$

□ 机械求积

- 在区间(a,b)上适当选取某些节点x_k，用$f(x_k)$的加权平均来近似$f(\xi)$，得到如下形式的公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.1.3}$$

- x_k被称为求积节点
- A_k被称为求积系数，亦称伴随节点x_k的权
- 权A_k仅仅与节点x_k的选取有关，而不依赖于被积函数$f(x)$的具体形式

将积分求值问题归结为函数值的计算，避免寻找原函数

代数精度

- **定义4.1** 如果某个求积公式对于次数不大于m的多项式均能准确地成立，但对于$m+1$次多项式就不一定准确，则称该求积公式具有m次代数精度
  - 梯形公式具有1次代数精度

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

  - 矩形公式具有1次代数精度

$$R=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{4.1.2}$$

一般算法

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \quad (4.1.3)$$

- 欲使求积公式(4.1.3)具有m次代数精度，只要令它对于$f(x)=1,x,x^2,\dots,x^m$都能成立，即

$$\begin{cases} \sum A_k = b-a \\ \sum A_k x_k = \frac{1}{2}(b^2-a^2) \\ \quad\vdots \\ \sum A_k x_k^m = \frac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1}) \end{cases} \qquad (4.1.4)$$

  - 是一个确定参数x_k和A_k的代数问题
  - $m+1$个方程，$2n+2$个变量

- 如果事先选定求积节点x_k，这时取$m=n$求解方程组(4.1.4)即可确定求积系数A_k

插值型的求积公式

- 设给定一组节点

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

且已知函数$f(x)$在这些节点上的值，作插值函数$L_n(x)$。依据

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

则积分I可以近似表示为

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

- 机械求积

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.1.3)$$

插值型的求积公式（续）

- Lagrange插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x), \qquad (2.2.11)$$

  - 其中$l_k(x)$为n次插值基函数

$$l_k(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} (k = 0,1,\dots,n)$$

- 化简

$$I_n = \int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x$$

插值型的求积公式（续）

- 设给定一组节点

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

且已知函数$f(x)$在这些节点上的值。则积分I可以近似表示为

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.1.5)$$

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{k \ne j} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)}\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.6)$$

- 称为插值型的求积公式

插值余项

- **定理2.2** 设$f^{(n)}(x)$在$[a,b]$上连续，$f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内存在，节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，$L_n(x)$是满足条件式(2.2.8)的插值多项式，则对于任何$x \in [a,b]$，插值余项

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (2.2.14)$$

  - 这里$\xi \in (a,b)$且依赖于x
  - $\omega_{n+1}(x)$定义为

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad (2.2.12)$$

具有n次代数精度的充分性

- 对于插值型求积公式(4.1.5)，根据定义

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

知其余项

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

$$=\int_a^b\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.7)$$

- 公式 (4.1.5)至少具有n次代数精度
  - 次数不大于n的多项式$f(x)$，$R[f]$等于零

具有n次代数精度的必要性

- 反之，如果求积公式(4.1.5)至少具有n次代数精度，则必定是插值型

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.1.5)$$

  - 上式对插值基函数$l_k(x)$准确成立，则

$$\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j) = A_k$$

  - 得到插值型的求积公式(4.1.6)中定义的A_k

- **定理4.1** 形如式(4.1.5)的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

Cotes（柯特斯）系数

□ Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式

- 将积分区间$[a,b]$划分为n等份，步长$h=\frac{b-a}{n}$，取等距节点$x_k=a+kh$构造的插值型求积公式

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \tag{4.2.1}$$

□ $C_k^{(n)}$被称为Cotes系数

- 根据(4.1.6)，引进变换$x=a+th$

$$A_k=\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x=\int_a^b\prod_{k\neq j}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}\mathrm{d}x \tag{4.1.6}$$

Cotes（柯特斯）系数

- Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式
  - 将积分区间$[a,b]$划分为n等份，步长$h=\frac{b-a}{n}$，取等距节点$x_k=a+kh$构造的插值型求积公式

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \tag{4.2.1}$$

- $C_k^{(n)}$被称为Cotes系数
  - 根据(4.1.6)，引进变换$x=a+th$，可得

$$C_k^{(n)}=\frac{h}{b-a}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{(t-j)}{(k-j)}\mathrm{d}t=\frac{(-1)^{n-k}}{nk!\,(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t \tag{4.2.2}$$

特例

- 当$n=1$时

$$C_0^{(1)}=C_1^{(1)}=\frac{1}{2}$$

  - 得到梯形公式

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \qquad (4.1.1)$$

- 当$n=2$时

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

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

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

特例（续）

- 当$n = 2$时
  - 得到Simpson（辛普森）公式

$$S = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

- 当$n = 4$时
  - 得到Cotes（柯特斯）公式

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

$$x_k = a + kh, \qquad h = \frac{b-a}{4} \qquad (4.2.4)$$

- 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负，稳定性得不到保证

求积公式的代数精度

- **定理4.1** 形如式(4.1.5)的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的
  - 作为插值型的求积公式，n阶的Newton-Cotes公式至少具有n次的代数精度
- Simpson公式（$n=2$）

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

  - 用$f(x)=x^3$进行验证，发现

$$S=\frac{b-a}{6}\left[a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right]=I=\int_a^b x^3\,\mathrm{d}x=\frac{b^4-a^4}{4}$$

求积公式的代数精度

- **定理4.1** 形如式(4.1.5)的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的
  - 作为插值型的求积公式，n阶的Newton-Cotes公式至少具有n次的代数精度
- Simpson公式（$n = 2$）

$$S = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

Simpson公式实际上具有$3 = 2 + 1$次代数精度

偶阶求积公式的代数精度

- **定理4.2** 当阶n为偶数时，Newton-Cotes公式至少有$n+1$次代数精度
  - 只需证明当n为偶数时，Newton-Cotes公式对$f(x)=x^{n+1}$的余项为零
  - 积分余项为

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \tag{4.1.7}$$

  - 由于$f^{(n+1)}(x)=(n+1)!$，因此

$$R[f]=\int_a^b \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\,\mathrm{d}x$$

偶阶求积公式的代数精度（续）

- 引进变换$x=a+th$，并注意到$x_j=a+jh$

$$R[f]=h^{n+2}\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t$$

- 若n为偶数，则$\frac{n}{2}$为整数，令$t=u+\frac{n}{2}$

$$R[f]=h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)\mathrm{d}u$$

- 可以得到$R[f]=0$，因为被积函数

$$H[u]=\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)=\prod_{j=-n/2}^{n/2}(u-j)$$

是奇函数

几种低阶求积公式的余项

梯形公式（$n=1$）

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

- 根据积分余项公式

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \tag{4.1.7}$$

- 可得

$$R_T=I-T=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

- 注意到，$(x-a)(x-b)$在区间$[a,b]$上保号（非正），可应用加权积分中值定理

几种低阶求积公式的余项（续）

加权积分中值定理

- 假设$f \in C[a,b]$，并且函数$g(x)$在区间$[a,b]$不变号，那么存在一个常数$c \in [a,b]$，使得

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

梯形公式（$n = 1$）

- 余项

$$\begin{aligned} R_T &= \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x \\ &= -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \end{aligned} \tag{4.2.5}$$

其中$\eta \in [a,b]$

几种低阶求积公式的余项（续）

- Simpson公式（$n=2$）

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

1. 直接应用积分余项公式

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.7)$$

2. 利用定理4.2，得到更紧的上界

- 构造次数不大于3的多项式$H(x)$，使之满足

$$H(a)=f(a), H(b)=f(b), H(c)=f(c), \qquad H'(c)=f'(c)$$

其中$c=\frac{a+b}{2}$

几种低阶求积公式的余项（续）

- 由于Simpson公式具有3次代数精度，它对于这样构造出的3次式$H(x)$是准确的：

$$\int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6}[H(a)+4H(c)+H(b)]$$

- 根据$H(x)$的插值条件

$$\int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(c)+f(b)] = S$$

- 因此积分余项

$$R_S = I - S = \int_a^b [f(x)-H(x)]\,\mathrm{d}x$$

几种低阶求积公式的余项（续）

- 对于满足下面插值条件的$H(x)$

$$H(a)=f(a), H(b)=f(b), H(c)=f(c), \qquad H'(c)=f'(c)$$

- 可以证明，插值余项满足（详见例2.5）

$$f(x)-H(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4}(x-a)(x-c)^2(x-b)$$

- 因此，积分余项可以写成

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

- 注意到，$(x-a)(x-c)^2(x-b)$在区间$[a,b]$上保号（非正），可应用加权积分中值定理

几种低阶求积公式的余项（续）

- Simpson公式（$n=2$）
  - 余项

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$
$$= -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad (4.2.7)$$

其中$\eta \in [a,b]$

- Cotes公式（$n=4$）

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

余项 $R_C = I - C = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (4.2.8)$

复化求积法

等价于首先采用“分段低次插值”，再算积分

- 在使用Newton-Cotes公式时，提高阶的途径并不总能取得满意的效果
  - 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负

- 复化求积法

1. 设将积分区间$[a, b]$划分为n等份，步长$h = \frac{b-a}{n}$，分点为$x_k = a + kh$，$k = 0,1,\dots,n$
2. 先用低阶Newton-Cotes公式求得每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$的积分值I_k
3. 然后再求和，将$\sum_{k=0}^{n-1} I_k$作为积分I的近似值

特例

复化后仍然是形如式
(4.1.3)的机械求积公式

□ 梯形公式

$$T = (b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

余项 $$R_T = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \tag{4.2.5}$$

□ 复化梯形公式

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

■ 余项 (4.2.9)

$$I - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right] = -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\eta) \tag{4.2.10}$$

特例（续）

复化后仍然是形如式(4.1.3)的机械求积公式

- Simpson公式

$$S = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

- 复化Simpson公式
  - 记子区间$[x_k, x_{k+1}]$的中点为$x_{k+\frac{1}{2}}$

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

$$= \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \qquad (4.2.11)$$

特例（续）

- Simpson公式
  - 余项 $$R_S = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad (4.2.7)$$
- 复化Simpson公式
  - 余项
  $$I - S_n = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad (4.2.13)$$
  - h的阶数更高，同样的间距下误差更小

特例（续）

复化后仍然是形如式(4.1.3)的机械求积公式

- Cotes公式

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

- 复化Cotes公式
  - 记子区间$[x_k,x_{k+1}]$的4等分点$x_{k+\frac{1}{4}}$，$x_{k+\frac{1}{2}}$，$x_{k+\frac{3}{4}}$

$$C_n=\frac{h}{90}\left[7f(a)+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{4}})+12\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})\right.$$

$$\left.+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{3}{4}})+14\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+7f(b)\right] \quad (4.2.12)$$

特例（续）

- Cotes公式
  - 余项 $$R_C = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (4.2.8)$$
- 复化Cotes公式
  - 余项
  $$I - C_n = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (4.2.14)$$
  - h的阶数更高，同样的间距下误差更小

例4.1

- 对于函数$f(x)=\frac{\sin x}{x}$，试利用表4.2计算积分$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
  - 比较两种方法：它们都需要提供9个点上的函数值，计算量基本相同
  - 将积分区间[0,1]划分为8等份，应用复化梯形法求得$T_8=0.9456909$

x	$f(x)$
0	1.0000000
1/8	0.9973978
1/4	0.9896158
3/8	0.9767267
1/2	0.9588510
5/8	0.9361556
3/4	0.9088516
7/8	0.8771925
1	0.8414709

例4.1（续）

- 对于函数$f(x)=\frac{\sin x}{x}$，试利用表4.2计算积分$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
  - 将积分区间[0,1]划分为4等份，应用复化Simpson法求得$S_4=0.9460832$
  - 同准确值$I=0.9460831$比较，T_8只有两位有效数字，S_4有六位有效数字

x	$f(x)$
0	1.0000000
1/8	0.9973978
1/4	0.9896158
3/8	0.9767267
1/2	0.9588510
5/8	0.9361556
3/4	0.9088516
7/8	0.8771925
1	0.8414709

误差的渐近性

- 复化的梯形法、Simpson法和Cotes法当步长$h \to 0$时均收敛到所求的积分值I
  - 根据余项公式可得
- 复化梯形公式
  - 余项

$$I - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12} f''(\eta_k)\right] \tag{4.2.10}$$

  - 可得

$$\frac{I - T_n}{h^2} = -\frac{1}{12}\sum_{k=0}^{n-1} h f''(\eta_k) \to -\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx$$

误差的渐近性（续）

- 复化的梯形法

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

- 复化的Simpson法

$$\frac{I-S_n}{h^4} \to -\frac{1}{180\times 2^4}[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)]$$

- 复化的Cotes法

$$\frac{I-C_n}{h^6} \to -\frac{1}{945\times 4^6}[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)]$$

p阶收敛

- **定义4.2** 如果一种复化求积公式I_n，当 $h \to 0$时成立渐进关系式

$$\frac{I - I_n}{h^p} \to C, \qquad (C \neq 0)$$

则称求积公式I_n是p阶收敛的

  - 复化梯形法具有2阶收敛精度
  - 复化Simpson法具有4阶收敛精度
  - 复化Cotes法分别具有6阶收敛精度

误差估计（*h*很小时）

- 复化的梯形法

$$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \qquad (4.2.15)$$

  - h减半，误差变为1/4

- 复化的Simpson法

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 [f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)] \qquad (4.2.16)$$

  - h减半，误差变为1/16

- 复化的Cotes法

$$I - C_n \approx -\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 [f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)] \qquad (4.2.17)$$

  - h减半，误差变为1/64

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

研究动机

- 复化求积方法
  - 优点：对提高精度是行之有效的
  - 缺点：在使用求积公式之前必须给出合适的步长
    - ✓ 步长太大，精度难以保证
    - ✓ 步长太小，又会导致计算量的增加

- 实际计算中常常采用变步长的计算方案
  - 在步长逐次分半（即步长二分）的过程中，反复利用复化求积公式进行计算
  - 直至所求得的积分值满足精度要求为止

梯形法的递推化

- 设将求积区间$[a,b]$分成n等份，则一共有$n+1$个分点，按梯形公式(4.2.9)计算积分值T_n，需要提供$n+1$个函数值

$$T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \tag{4.2.9}$$

- 如果将求积区间再二分一次，则分点增至$2n+1$个
  - 每个子区间$[x_k,x_{k+1}]$经过二分只增加了一个分点$x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x_k+x_{k+1})$

梯形法的递推化（续）

- 子区间$[x_k, x_{k+1}]$上的积分值为

$$\frac{h}{4}\left[f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right]$$

这里$h = \frac{b-a}{n}$代表二分前的步长

- 将每个子区间上的积分值相加，得

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

能够增量计算

□ 递推公式

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \qquad (4.3.1)$$

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

例4.2

- 计算积分$I=\int_0^1\frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
  - 先对整个区间 [0, 1] 使用梯形公式，对于函数 $f(x)=\frac{\sin x}{x}$，定义$f(0)=1$，计算$f(1)=0.8414709$，根据梯形公式可得

$$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=0.9207355$$

  - 然后将区间二等分，再求出中点的函数值 $f\left(\frac{1}{2}\right)=0.9588510$，利用递推公式可得

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right)=0.9397933$$

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

例4.2 （续）

- 进一步二分求积区间，计算新分点上的函数值

$$f\left(\frac{1}{4}\right) = 0.9896158 \qquad f\left(\frac{3}{4}\right) = 0.9088516$$

- 再次利用递推公式可得

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

- 这样不断二分下去，得到下面的结果

例4.2 （续）

- 积分I的准确值为0.9460831，用变步长方法二分10次得到了这个结果

k	$T_{n=2^k}$	k	$T_{n=2^k}$
1	0.9397933	6	0.9460769
2	0.9445135	7	0.9460815
3	0.9456909	8	0.9460827
4	0.9459850	9	0.9460830
5	0.9460596	10	0.9460831

误差的事后估计

- 梯形法算法简单，但精度差、收敛速度缓慢
  - 递推化实现了增量计算，并不能直接提升精度
- 梯形法的误差公式

$$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \qquad (4.2.15)$$

  - T_n的截断误差大致与h^2成正比，因此当步长二分后，截断误差将减至原有误差的1/4，即有

$$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4} \quad \Rightarrow I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \qquad (4.3.2)$$

  - **用计算结果估计误差**：二分前后的两个积分值T_n与T_{2n}相当接近，就可以保证 T_{2n}的误差很小

Romberg（龙贝格）公式

- 积分近似值 T_{2n} 的误差大致等于$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$

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

- 用这个误差值作为T_{2n}的一种补偿

$$\bar{T}=T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \qquad (4.3.3)$$

  - 可能是更好的结果

- 例4.2中， T_4= 0.9445135和T_8 = 0.9456909的精度都很差（只有两三位有效数字）
  - $\bar{T}=\frac{4}{3}T_8-\frac{1}{3}T_4=0.9460833$却有6位有效数字

提升精度的分析

S_n的截断误差大致与h^4成正比

- 复化梯形公式

$$T_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{4.2.9}$$

- 复化Simpson公式

$$S_n = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{4.2.11}$$

- 可以得到关系式

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \tag{4.3.4}$$

Romberg公式（续）

Simpson法的误差公式

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right] \quad (4.2.16)$$

- S_n的截断误差大致与h^4成正比，因此，若将步长折半，则误差将减至原有误差的1/16，即有

$$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16} \quad \Rightarrow I \approx \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$$

- 改进方案

$$\bar{S} = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$$

Romberg公式（续）

C_n的截断误差大致与h^6成正比

□ Simpson法的误差公式

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right] \quad (4.2.16)$$

- S_n的截断误差大致与h^4成正比，因此，若将步长折半，则误差将减至原有误差的1/16，即有

$$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16} \quad \Rightarrow I \approx \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n$$

- 改进方案等价于Cotes法的积分值C_n
  - ✓ 更小的误差

$$\bar{S} = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n = C_n \quad (4.3.5)$$

Romberg公式（续）

- 重复同样的推导，得到Romberg公式

$$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n \qquad (4.3.6)$$

- 在变步长的过程中运用式(4.3.4)、(4.3.5)和式(4.3.6)，就能将粗糙的梯形值T_n，逐步加工成精度较高的Simpson值S_n、Cotes值C_n和Romberg值R_n

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (4.3.4)$$

$$C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n \qquad (4.3.5)$$

例4.3

- 用加速公式(4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)加工例4.2得到的梯形值
  - 变步长方法二分10次得到准确值

k	$T_{n=2^k}$	k	$T_{n=2^k}$
1	0.9397933	6	0.9460769
2	0.9445135	7	0.9460815
3	0.9456909	8	0.9460827
4	0.9459850	9	0.9460830
5	0.9460596	10	0.9460831

例4.3

- 用加速公式(4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)加工例4.2得到的梯形值

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	0.9207355			
1	0.9397933			
2	0.9445135			
3	0.9456909			

例4.3

加速效果十分显著

- 用加速公式(4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)加工例4.2得到的梯形值
  - 计算结果如下所示（k表示二分次数）

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	0.9207355			
1	0.9397933	0.9461459		
2	0.9445135	0.9460869	0.9460830	
3	0.9456909	0.9460833	0.9460831	0.9460831

  - 准确值$I = 0.9460831$

Richardson（理查森）外推加速法

- (4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)的加速过程可以再继续下去
  - 梯形法的余项可展开成下列级数形式
- 定理4.3 设 $f(x) \in C^{\infty}[a,b]$，则成立

$$T(h) = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \cdots + a_k h^{2k} + \cdots \qquad (4.3.7)$$

其中系数$a_k (k = 1,2,\ldots)$与h无关

  - 保留更多的h高阶项
- 对比复化梯形公式的余项

$$I - T_n = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta) \qquad (4.2.10)$$

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (4.3.4)$$

Richardson外推加速法（续）

$$T(h) = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \cdots + a_k h^{2k} + \cdots \qquad (4.3.7)$$

- 根据式(4.3.7)，可得到

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = I + \frac{a_1}{4}h^2 + \frac{a_2}{16}h^4 + \frac{a^3}{64}h^6 + \cdots \qquad (4.3.8)$$

- 将上述两式按照以下方式作线性组合

$$T_1(h) = \frac{4}{3}T\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}T(h) \qquad (4.3.9)$$

则可以从余项展开式中消去h^2项，从而得到

$$T_1(h) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots \qquad (4.3.10)$$

- $\{T_1(h)\}$其实就是Simpson值序列

$$C_n = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n \quad (4.3.5)$$

Richardson外推加速法（续）

$$T_1(h) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots \qquad (4.3.10)$$

- 根据式(4.3.10)，有

$$T_1\left(\frac{h}{2}\right) = I + \frac{\beta_1}{16} h^4 + \hat{\beta}_2 h^6 + \hat{\beta}_3 h^8 + \cdots$$

- 若令

$$T_2(h) = \frac{16}{15} T_1\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{15} T_1(h)$$

则又可进一步消去h^4项，从而有

$$T_2(h) = I + \gamma_1 h^6 + \gamma_2 h^8 + \cdots$$

- $\{T_2(h)\}$其实就是Cotes值序列

Richardson外推加速法（续）

- 如此继续下去，每加速一次，误差量级提高2阶
  - 一般地，将$T_0(h) = T(h)$，按公式

$$T_m(h) = \frac{4^m}{4^m - 1} T_{m-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{4^m - 1} T_{m-1}(h) \qquad (4.3.11)$$

经过$m(m = 1, 2, \ldots)$次加速后，余项便取下列形式

$$T_m(h) = I + \delta_1 h^{2(m+1)} + \delta_2 h^{2(m+2)} + \cdots \qquad (4.3.12)$$

- 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$\{T_0^{(k)}\}$的m次加速值，可得

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m}{4^m - 1} T_{m-1}^{(k+1)} - \frac{1}{4^m - 1} T_{m-1}^{(k)} \qquad (4.3.13)$$

Richardson外推加速法（续）

- 可以逐行构造出下列三角形数表——T数表

$$\begin{array}{llll} T_0^{(0)} & & & \\ T_0^{(1)} & T_1^{(0)} & & \\ T_0^{(2)} & T_1^{(1)} & T_2^{(0)} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}$$

- 可以证明，如果$f(x)$充分光滑，那么T数表的每一列元素及对角线元素均收敛到所求积分值I

$$\lim_{k\to\infty} T_m^{(k)} = I \ (m固定) \qquad \lim_{m\to\infty} T_m^{(0)} = I$$

Romberg算法流程

- 在二分过程中逐步形成T数表的具体方法

1. 准备初值：计算下式，且令$1 \longrightarrow k$（k 记录二分的次数）

$$T_0^{(0)} = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

2. 求梯形值：按照式(4.3.1)计算梯形值$T_0^{(k)}$

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \qquad (4.3.1)$$

Romberg算法流程（续）

3. 求加速值：按照式(4.3.13)逐个求出T数表第$k+1$行其余个元素$T_j^{(k-j)}$ $(j=1,2,\ldots,k)$

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)} - \frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)} \qquad (4.3.13)$$

4. 精度控制：对于指定精度ε，若$\left|T_k^{(0)} - T_{k-1}^{(0)}\right| < \varepsilon$，则终止计算，并取$T_k^{(0)}$作为所求的结果；否则令$k+1 \longrightarrow k$（意即二分一次），转步2继续计算

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

Gauss公式

- 形如下式的机械求积公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.4.1)$$

  - 含有$2n+2$个待定参数 $x_k, A_k\ (k=0,1,\ldots,n)$

- Gauss公式
  - 适当选择x_k, A_k，使求积公式具有$2n+1$次代数精度

- **定义4.3** 如果求积公式(4.4.1)具有$2n+1$次代数精度，则称节点$x_k(k=0,1,\ldots,n)$是Gauss点

Gauss公式的构造

- 插值型求积公式
  - 求积系数A_k通过插值基函数$l_k(x)$积分得出

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x$$

- **定理4.4** 对于插值型求积公式(4.4.1)，其节点$x_k\ (k=0,1,\cdots,n)$是Gauss点的充分必要条件，是以这些点为零点的多项式$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$与任意次数不超过$n$的多项式 $P(x)$ 均正交，即

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{4.4.2}$$

定理4.4证明

必要性

- 设$P(x)$是任意次数不超过n的多项式，则 $P(x)\omega(x)$ 的次数不超过$2n+1$
- 如果$x_0, x_1, \ldots, x_n$是Gauss点，则求积公式对于$P(x)\omega(x)$能准确成立，即有

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k P(x_k)\omega(x_k)$$

- 但$\omega(x_k) = 0\ (k = 0, 1, \ldots, n)$，故下式成立

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{4.4.2}$$

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = 0 \quad (4.4.2)$$

定理4.4证明（续）

充分性

- 对于任意给定次数不超过$2n+1$的多项式$f(x)$，用$\omega(x)$除$f(x)$，记商为$P(x)$，余式为$Q(x)$，$P(x)$与$Q(x)$都是次数不超过n的多项式：

$$f(x) = P(x)\omega(x) + Q(x)$$

- 利用式(4.4.2)，可得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b Q(x)\,\mathrm{d}x \quad (4.4.3)$$

- 由于所给求积公式是插值型的，它对于$Q(x)$能准确成立（定理4.1）

定理4.4证明（续）

$$f(x) = P(x)\omega(x) + Q(x)$$

$$\int_a^b Q(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k Q(x_k)$$

- 注意到$\omega(x_k) = 0$，因此

$$Q(x_k) = P(x_k)\omega(x_k) + Q(x_k) = f(x_k)$$

- 从而有

$$\int_a^b Q(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

- 结合(4.4.3)，得到

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

- 知式(4.4.1)对次数不超过$2n+1$的多项式均成立

Gauss-Legendre公式

- $a=-1,b=1$，考察区间$[-1,1]$的Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.4.4)$$

- Legendre多项式
  - 当区间为$[-1,1]$、权函数$\rho(x)\equiv 1$时，由$\{1,x,x^2,\dots,x^n\}$正交化得到的多项式

$$P_0(x)=1 \qquad P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n] \quad (n=1,2,\cdots)$$

  - $P_{n+1}(x)$与任一次数不超过n的多项式正交
  - $P_{n+1}(x)$在区间$(-1,1)$内有$n+1$个不同实零点

Gauss-Legendre公式（续）

- Legendre多项式$P_{n+1}(x)$的零点就是求积公式(4.4.4)的Gauss点
  - 被称为Gauss-Legendre公式
- 取$P_1(x) = x$的零点$x_0 = 0$作节点构造求积公式

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

  - 令上式对$f(x) = 1$准确成立，即可定出$A_0 = 2$
  - 得到中矩形公式

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

Gauss-Legendre公式（续）

- 再取$P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$的两个零点$\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$构造求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+A_1 f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

  - 令上式对 $f(x)=1,x$ 准确成立，有

$$\begin{cases} A_0+A_1=2 \\ A_0\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+A_1\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)=0 \end{cases}$$

  - 解出$A_0=A_1=1$，得到两点Gauss-Legendre公式

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

Gauss-Legendre公式（续）

- 继续推导，得到三点Gauss-Legendre公式

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

- 四点、五点Gauss-Legendre公式见表4.5

- 拓展到任意求积区间$[a, b]$
  - 通过变换$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}$可以化到区间$[-1,1]$

$$\int_{a}^{b} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}\right) \mathrm{d}t$$

Gauss公式的余项

- **定理4.5** 对于Gauss公式 (4.4.1)，其余项

$$R(x)=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b\omega^2(x)\,\mathrm{d}x$$

这里$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$

- 以$x_0,x_1,\ldots,x_n$为节点构造次数不大于$2n+1$的多项式$H(x)$，使其满足条件

$$H(x_i)=f(x_i)\qquad H'(x_i)=f'(x_i)\qquad (i=0,1,\ldots)$$

这里的$H(x)$称为Hermite插值多项式

- 由于Gauss公式具有$2n+1$次代数精度，它对于$H(x)$能准确成立

Gauss公式的余项（续）

$$\int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k H(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

- 因此余项

$$R(x) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

$$= \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b [f(x) - H(x)]\,\mathrm{d}x$$

- Hermite插值余项

$$R(x) = f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x) \qquad (2.6.6)$$

Gauss公式的余项（续）

- 因此

$$R(x) = \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\omega^2(x)\,\mathrm{d}x$$

- 由于$\omega^2(x)$在$[a,b]$上保号，再次使用加权积分中值定理可得

$$R(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega^2(x)\,\mathrm{d}x$$

Gauss公式的稳定性

- Newton-Cotes公式不稳定
  - 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负
- Gauss公式不但是高精度的，而且数值稳定
  - 求积系数具有非负性

- 定理**4.6** Gauss公式(4.4.1) 求积系数$A_k(k = 0,1, \dots, n)$全是正的

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.4.1)$$

定理4.6证明

- 考察

$$l_k(x) = \prod_{j=0(j\neq k)}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)}$$

  - 它是n次多项式，因而$l_k^2(x)$是$2n$次多项式

- Gauss公式对于$l_k^2(x)$能准确成立，即有

$$0 < \int_a^b l_k^2(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} A_i\, l_k^2(x_i) = A_k$$

Gauss公式稳定的原因

- 求积公式

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

- 实际计算时，通常不一定能提供准确的数据$f_k = f(x_k)$，而只是给出含有误差（例如舍入误差）的数据f_k^*，故实际求得的积分值为

$$I_n^* = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k^*$$

- I_n和I_n^*之间的差异有多大？

Gauss公式稳定的原因（续）

$$|I_n^* - I_n| = \left|\sum_{k=0}^{n} A_k (f_k^* - f_k)\right| \le \sum_{k=0}^{n} |A_k (f_k^* - f_k)|$$

- 由于Gauss公式的求积系数具有非负性

$$|I_n^* - I_n| \le \sum_{k=0}^{n} A_k |f_k^* - f_k| \le \left(\sum_{k=0}^{n} A_k\right) \max_{0 \le k \le n} |f_k^* - f_k|$$

- 根据式(4.1.4)，可得

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a \quad \Rightarrow |I_n^* - I_n| \le (b-a) \max_{0 \le k \le n} |f_k^* - f_k|$$

带权的Gauss公式

- 考察积分

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

  - $\rho(x) \geq 0$为权函数，当$\rho(x) \equiv 1$时即为普通积分

- 仿照普通积分的处理方式，考察求积公式

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

  - 如果它对于任意次数不超过 $2n+1$ 的多项式均能准确地成立，则称之为Gauss型的
  - 上述Gauss公式的求积节点x_k仍称为Gauss点

带权Gauss公式的构造

- $x_k(k=0,1,\dots,n)$是Gauss点的充要条件，下式是区间$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)$的正交多项式

$$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$$

- 若$a=-1,b=1$，且取权函数$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，则所建立的Gauss公式为

$$\int_a^b \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.4.6)$$

  - 称为Gauss-Chebyshev公式

带权Gauss公式的构造（续）

- 区间$[-1,1]$上关于权函数$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的正交多项式是Chebyshev多项式

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x)\,,|x|\le 1$$

  - 求积公式的Gauss点是$n+1$次Chebyshev多项式的零点，即

$$x_k=\cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right)\qquad(k=0,1,\dots,n)$$

- 运用正交多项式的零点构造Gauss求积公式，只是针对某些特殊的权函数才有效
  - 一般权函数的正交化很复杂

带权Gauss公式的构造（续）

- 一般方法，借鉴4.1.2节的待定系数法
  - 欲使求积公式(4.1.3)具有m次代数精度，只要令它对于$f(x)=1,x,x^2,\dots,x^m$都能成立

$$
\begin{cases}
\sum A_k = b-a \\
\sum A_k x_k = \dfrac{1}{2}(b^2-a^2) \\
\quad\vdots \\
\sum A_k x_k^m = \dfrac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1})
\end{cases}
\tag{4.1.4}
$$

  - 是一个确定参数x_k和A_k的代数问题

举例

- 设要构造下列形式的Gauss公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \qquad (4.4.7)$$

- 令它对于 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 准确成立，得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = \dfrac{2}{5} \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{7} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = \dfrac{2}{9} \end{cases} \qquad (4.4.8)$$

举例（续）

- 经过一系列解方程步骤，可得

$$x_0 = 0.821162 \qquad x_1 = 0.289949$$
$$A_0 = 0.389111 \qquad A_1 = 0.277556$$

- 因此

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x$$
$$\approx 0.389111 f(0.821162) + 0.277556 f(0.289949)$$

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

中点方法

- 按照数学分析的定义，导数是差商的极限

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

- 如果精度要求不高，则可以取差商作为倒数的近似值，即

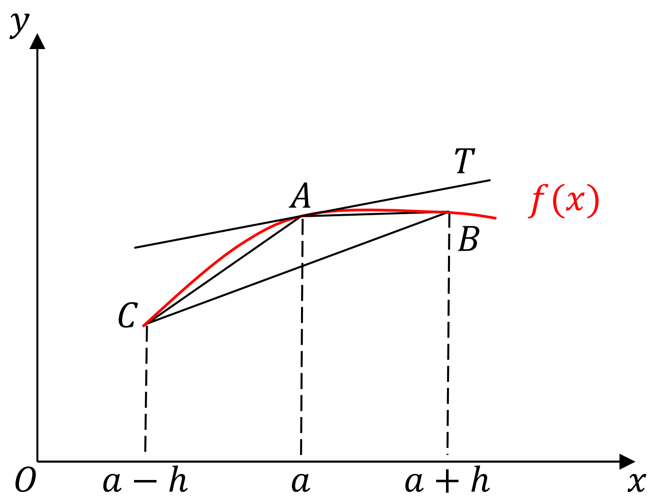
$$f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a)}{h} \quad \text{或} \quad f'(a)\approx\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$$

- 中点方法（两者取平均）

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

中点方法（续）

- 三种导数的近似值对应于向前差商、向后差商、中心差商
  - 分别分表示弦AB、AC和BC的斜率
  - BC的斜率更接近切线AT的斜率
  - 中点方法更为可取



- 机械求导方法
  - 将导数的计算归结为计算f在若干节点上的函数值

误差分析

- 要利用中点公式

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

计算导数$f'(a)$的近似值，需要选择合适的步长，为此需要进行误差分析

- 分别将$f(a\pm h)$在$x=a$处作Taylor展开

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

误差分析（续）

- 代入中点公式，化简

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

  - 从截断误差的角度看，步长越小，计算结果越准确

- 再考察舍入误差，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
  - 从舍入误差的角度看，步长不宜太小

举例

- 中点公式求$f(x)=\sqrt{x}$在$x=2$处的一阶导数

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

  - 取四位数字计算，结果如下表所示

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

  - 导数的准确值 $f'(2)=0.353553$
  - $h=0.1$的逼近效果最好，如果进一步缩小步长，则逼近效果会越来越差

插值型的求导公式

- 对于列表函数$y=f(x)$，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，取$P_n'(x)$的值作为$f'(x)$的近似值，即

$$f'(x) \approx P_n'(x) \qquad (4.5.1)$$

  - 统称为插值型的求导公式
- 即使$f(x)$与$P_n(x)$的相差不多，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(4.5.1)时应特别注意误差的分析

误差分析

- 差值余项

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (2.2.14)$$

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) \qquad (2.2.12)$$

- 求导公式(4.5.1)的余项

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

  - ξ是x的未知函数，无法对第二项进一步化简
  - 对于随意给出的点x，误差$f'(x) - P_n'(x)$是无法预估的

误差分析（续）

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) \qquad (2.2.12)$$

- 如果限定求某个节点x_k 的导数值，那么上面第二项因$\omega_{n+1}(x_k) = 0$而变为零，这时余项公式为

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k) \qquad (4.5.2)$$

- 下面仅仅考察节点处的导数值
  - 为简化讨论，假定所给的节点是等距的

两点公式

- 已给出两个节点x_0, x_1上的函数值$f(x_0), f(x_1)$，作线性插值公式

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

- 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

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

两点公式（续）

- 利用余项公式

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k) \qquad (4.5.2)$$

- 带余项的两点公式

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

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

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，作二次插值

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

- 令$x = x_0 + th$，上式可表示为

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

三点公式（续）

- 两端对t求导，可以推导出

$$P_2'(x_0+th) = \frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)] \quad (4.5.3)$$

  - 这里撇号表示对变量x求导数

- 分别取$t=0,1,2$，得到以下三种三点公式

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

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

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

三点公式（续）

- 利用余项公式

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k) \qquad (4.5.2)$$

- 带余项的三点求导公式

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

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) \qquad (4.5.4)$$

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

- 式(4.5.4)是中点公式，它少用了一个函数值

高阶数值微分公式

- 用插值多项式$P_n(x)$作为$f(x)$的近似函数

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x) \qquad (k = 0, 1, \dots)$$

- 将式(4.5.3)再对t求导一次，可以推导出

$$P_2'(x_0 + th) = \frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)] \qquad (4.5.3)$$

得到

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

高阶数值微分公式（续）

- 二阶三点公式

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

- 带余项的二阶三点公式

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \tag{4.5.5}$$

五点公式

- 设已给出五个节点$x_i = x_0 + ih,\ i = 0,1,2,3,4$上的函数值，重复同样的手续，得到

$$m_0 = \frac{1}{12h}[-25f(x_0) + 48f(x_1) - 36f(x_2) + 16f(x_3) - 3f(x_4)]$$

$$m_1 = \frac{1}{12h}[-3f(x_0) - 10f(x_1) + 18f(x_2) - 6f(x_3) + f(x_4)]$$

$$m_2 = \frac{1}{12h}[f(x_0) - 8f(x_1) + 8f(x_3) - f(x_4)]$$

$$m_3 = \frac{1}{12h}[-f(x_0) + 6f(x_1) - 18f(x_2) + 10f(x_3) + 3f(x_4)]$$

$$m_4 = \frac{1}{12h}[3f(x_0) - 16f(x_1) + 36f(x_2) - 48f(x_3) + 25f(x_4)]$$

  - m_i代表一阶导数$f'(x_i)$的近似值

五点公式（续）

- 二阶五点公式如下

$$M_0 = \frac{1}{12h^2}[35f(x_0) - 104f(x_1) + 114f(x_2) - 56f(x_3) + 11f(x_4)]$$

$$M_1 = \frac{1}{12h^2}[11f(x_0) - 20f(x_1) + 6f(x_2) + 4f(x_3) - f(x_4)]$$

$$M_2 = \frac{1}{12h^2}[-f(x_0) + 16f(x_1) - 30f(x_2) + 16f(x_3) - f(x_4)]$$

$$M_3 = \frac{1}{12h^2}[-f(x_0) + 4f(x_1) + 6f(x_2) - 20f(x_3) + 11f(x_4)]$$

$$M_4 = \frac{1}{12h^2}[11f(x_0) - 56f(x_1) + 114f(x_2) - 104f(x_3) + 35f(x_4)]$$

  - M_i表示二阶导数$f''(x_i)$的近似值

五点公式（续）

- 对于给定的一张数据表，用五点公式求节点上的导数值往往可以获得满意的结果

- 五个相邻节点的选择原则，一般是在所考察的节点的两侧各取两个邻近的节点

- 如果一侧的节点数不足两个（即一侧只有一个节点或没有节点），则用另一侧的节点补足

举例

- 利用$f(x)=\sqrt{x}$ 的一张数据表，按五点公式求节点上的导数值m_i,M_i，并与准确值比较

x_i	$f(x_i)$	m_i	$f'(x_i)$	$M_i/\times 10^3$	$f''(x_i)\ /\times 10^3$
100	10.000000	0.050000	0.050000	-0.24758	-0.25000
101	10.049875	0.049751	0.049752	-0.24591	-0.24630
102	10.099504	0.049507	0.049507	-0.24191	-0.24268
103	10.148891	0.049267	0.049266	-0.23958	-0.23916
104	10.198039	0.049029	0.049029	-0.23691	-0.23572
105	10.246950	0.048795	0.048795	-0.23666	-0.23236

样条求导

- 样条函数$S(x)$作为$f(x)$的近似函数，不但彼此的函数值很接近，导数值也很接近
  - 对于三次样条$S_3(x)$，有

$$\left|f^{(a)}(x) - S_3^{(a)}(x)\right| = O(h^{4-a}) \qquad (a = 0,1,2,3)$$

  - 用样条函数建立数值微分公式是很自然的，即

$$f^{(a)}(x) \approx S_3^{(a)}(x) \qquad (a = 0,1,2,3) \qquad (4.5.6)$$

- 与前述插值型微分公式(4.5.1)不同，样条微分公式(4.5.6)可以用来计算插值范围内任何一点x(不仅是节点x_k)上的导数值

$$\lambda_j m_{j-1} + 2m_j + \mu_j m_{j+1} = g_j \ (j = 1,2,\cdots,n-1) \quad (2.8.9)$$

样条求导（续）

- 对于等距划分

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b \qquad x_{k+1} - x_k = h$$

- 三次样条$S_3(x)$在节点上的导数值$S_3'(x_k) = m_k$满足下列连续性方程

$$m_{k-1} + 4m_k + m_{k+1} = 3(y_{k+1} - y_{k-1})/h \qquad (4.5.7)$$

$$(k = 0, 1, \ldots, n-1)$$

  - 与三转角方程中的公式(2.8.9)一致
  - 设已给出端点处一阶导数值$m_0 = y_0', m_n = y_n'$，则求解方程组(4.5.7)得出的m_k即可作为导数$f'(x_k)$的近似值

总结

- 引言
  - 积分中值定理、梯形公式、矩形公式
  - 机械求积、代数精度、插值型求积公式
- Newton-Cotes公式
  - 定义、Cotes系数、Newton-Cotes公式的稳定性
  - 偶阶求积公式的代数精度、低阶求积公式的余项
  - 复化求积法、误差的渐近性
- Romberg算法
  - 梯形法的递推化、误差的事后估计法
  - Romberg公式、Richardson外推加速法

总结

- Gauss公式
  - 定义、Gauss点、充分必要条件
  - Gauss-Legendre公式
  - Gauss公式的余项和稳定性、带权的Gauss公式
  - 构造加权Gauss公式的一般方法

- 数值微分
  - 中点方法、机械求导方法
  - 插值型的求导公式、误差分析、样条求导