第四章 数值积分与数值微分

§1 数值微分

§2 Newton－Cotes求积公式

§3 复化求积公式

§5 Gauss型求积公式

§1 数值微分

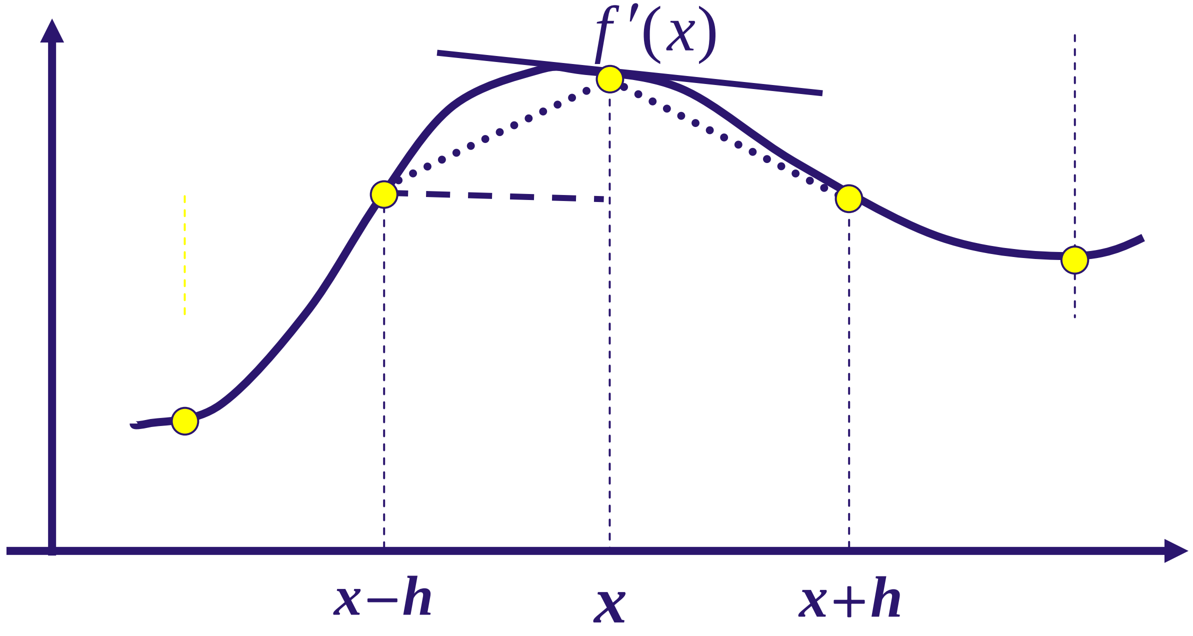
1 差商型求导公式

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

向前差商公式

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

向后差商公式



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

中心差商公式

$$f''(x)\approx\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}\qquad f''(x\pm h)\approx\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$$

§1 数值微分

由 *Taylor* 公式可知上述公式的误 差分别为 $O(h), O(h), O(h^2)$

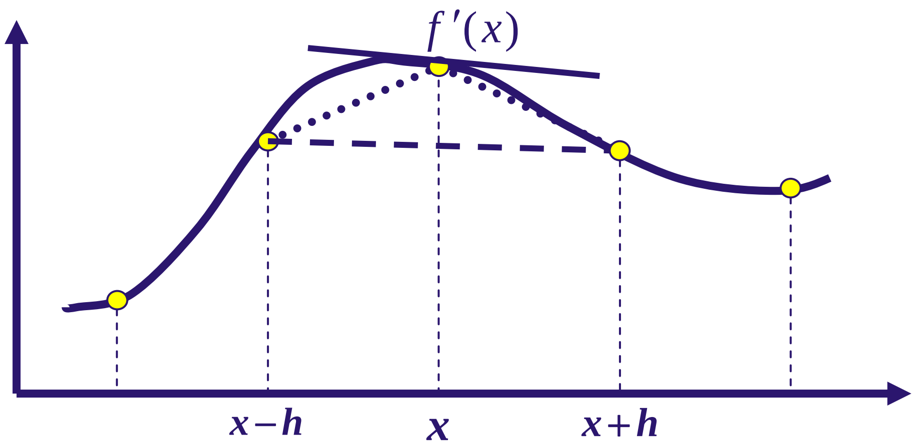
$$\begin{cases} f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \dfrac{h^2}{2!} f''(x) + \dfrac{h^3}{3!} f'''(x) + \cdots \\ f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \dfrac{h^2}{2!} f''(x) - \dfrac{h^3}{3!} f'''(x) + \cdots \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{向前}: f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h} - \dfrac{h}{2} f''(\eta_1) & O(h) \\ \text{向后}: f'(x) = \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h} + \dfrac{h}{2} f''(\eta_2) & O(h) \\ \text{中心}: f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \dfrac{h^2}{6} f'''(\eta) & O(h^2) \end{cases}$$

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

2 插值型求导公式

以插值多项式的导数作为函数导数的近似，即



$$f'(x_i)\approx\varphi_n'(x_i)$$

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

$$R'(x)=f'(x)-\varphi_n'(x)=\frac{1}{(n+1)!}\left[\omega_{n+1}(x)\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)+f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}'(x)\right]$$

适用于求节点处的导数值，

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

§1 数值微分

常用公式

(1).两点公式

$x_0,\ x_1=x_0+h$

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}\qquad R_1'(x_0)=-\frac{h}{2}f''(\xi_0)$$

$$f'(x_1)\approx\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}\qquad R_1'(x_1)=\frac{h}{2}f''(\xi_1)$$

$\xi_0,\xi_1\in(a,b)$

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

$$f'(x_i)\approx L_1'(x_i)=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{h},\qquad i=0,1$$

$$R_1'(x_0)=f'(x_0)-\varphi_n'(x_0)=\frac{f''(\xi_0)}{2!}(x_0-x_1)=-\frac{h}{2}f''(\xi_0)$$

$$R_1'(x_1)=f'(x_1)-\varphi_n'(x_1)=\frac{f''(\xi_1)}{2!}(x_1-x_0)=\frac{h}{2}f''(\xi_1)$$

(2).三点公式

$$x_i = x_0 + ih \quad (i = 0,1,2)$$

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

$$f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_2)\right]$$

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

$$R_2'(x_0) = \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0)$$

误差分别为 $R_2'(x_1) = -\frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$ $\qquad \xi_i \in (a,b) \quad (i = 0,1,2)$

$$R_2'(x_2) = \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

$$f''(x_i) \approx \varphi_2''(x_i) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)\right]$$

$$f(x) \approx L_2(x)$$

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

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

$$L_2'(x) = f(x_0)\frac{2x-x_1-x_2}{2h^2} - f(x_1)\frac{2x-x_0-x_2}{h^2} + f(x_2)\frac{2x-x_0-x_1}{2h^2}$$

$$L_2''(x) = f(x_0)\frac{2}{2h^2} - f(x_1)\frac{2}{h^2} + f(x_2)\frac{2}{2h^2}$$

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2} \qquad i = 0,1,2$$

§1 数值微分

$$L_2'(x) = f(x_0)\frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2} - f(x_1)\frac{2x - x_0 - x_2}{h^2} + f(x_2)\frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2}$$

$$f'(x_0) \approx L_2'(x_0) = f(x_0)\frac{2x_0 - x_1 - x_2}{2h^2} - f(x_1)\frac{2x_0 - x_0 - x_2}{h^2} + f(x_2)\frac{2x_0 - x_0 - x_1}{2h^2}$$

$$= \frac{-3h}{2h^2} f(x_0) + \frac{2h}{h^2} f(x_1) + \frac{-h}{2h^2} f(x_2) = \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h}$$

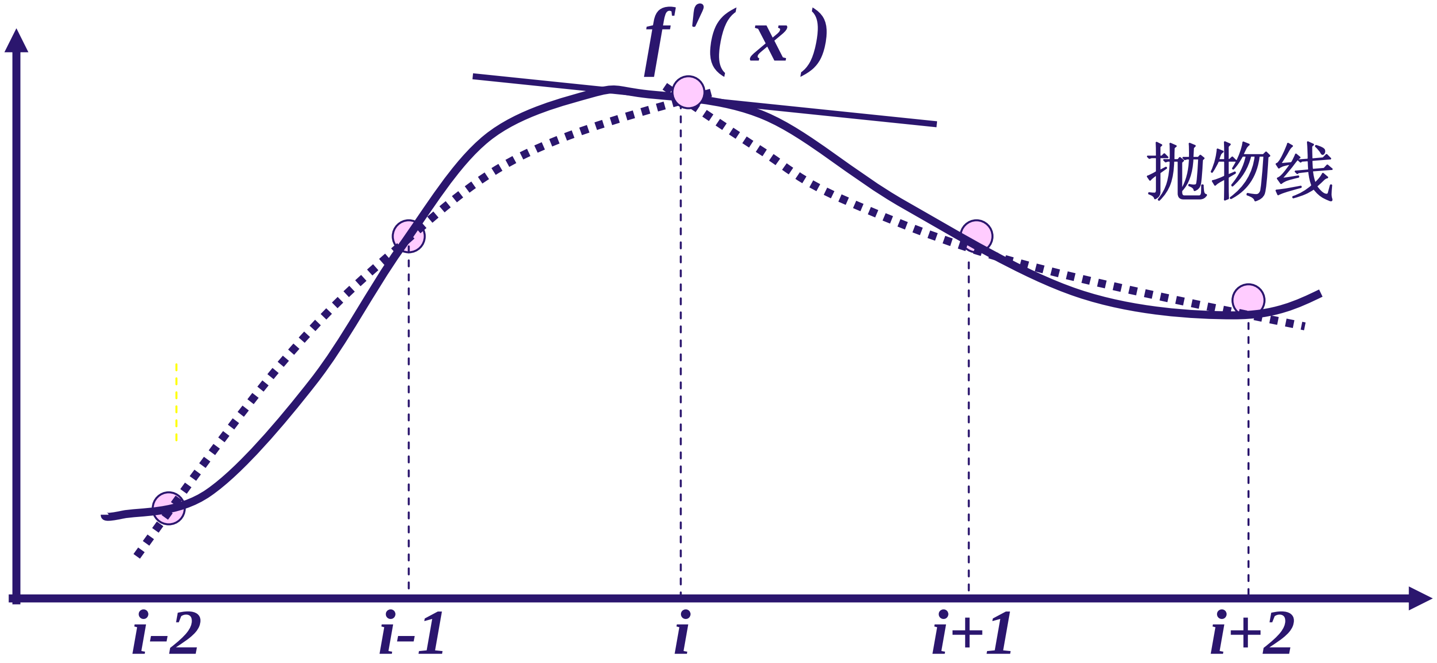
$$f'(x_1) \approx L_2'(x_1) = f(x_0)\frac{2x_1 - x_1 - x_2}{2h^2} - f(x_1)\frac{2x_1 - x_0 - x_2}{h^2} + f(x_2)\frac{2x_1 - x_0 - x_1}{2h^2}$$

$$= \frac{-h}{2h^2} f(x_0) + \frac{h}{2h^2} f(x_2) = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h}$$

$$f'(x_2) \approx L_2'(x_2) = f(x_0)\frac{2x_2 - x_1 - x_3}{2h^2} - f(x_1)\frac{2x_2 - x_0 - x_2}{h^2} + f(x_2)\frac{2x_2 - x_0 - x_1}{2h^2}$$

$$= \frac{h}{2h^2} f(x_0) - \frac{2h}{h^2} f(x_1) + \frac{3h}{2h^2} f(x_2) = \frac{f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)}{2h}$$

§1 数值微分



$$f'(x_i) \approx \frac{-3f(x_i)+4f(x_{i+1})-f(x_{i+2})}{x_{i+2}-x_i}$$

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-2})-4f(x_{i-1})+3f(x_i)}{x_i-x_{i-2}}$$

3 利用样条插值函数求数值微分

设$S(x)$为$f(x)$的三次样条插值函数， 由三次样条插值函数的 性质(定理5.5)，可用三次样条插值函 数的导数或二阶导数， 近似函数的导数或二阶导数。

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

$$f''(x) \approx S''(x) \qquad x \in (a,b)$$

且有误差估计 $R^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x) = O(h^{4-k}) \qquad (k=1,2)$

数值微分公式

$$\begin{cases} f'(x) \approx \dfrac{f(x+h)-f(x)}{h} \\ f'(x) \approx \dfrac{f(x)-f(x-h)}{h} \end{cases}$$

$O(h)$

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

$$f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}\left[-f(x_0)+f(x_2)\right]$$

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

$O(h^2)$

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

$O(h^2)$

§2 Newton—Cotes求积公式

1 数值积分的基本思想：

用插值多项式的积分近似函数的积分：

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \varphi_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)dx\right) f(x_k)$$

插值型求积公式：

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

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx \ (k=0,1,\cdots,n)$$与f无关，

求积公式的截断误差为

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

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

2 Newton－Cotes公式

设等距节点 $x_k = a + kh \quad (k = 0,1,\cdots,n),\ h = \dfrac{b-a}{n}$

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

令 $x = a + th$

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

$$= (b-a)C_k^{(n)}$$

令 $C_k^{(n)} = \dfrac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n} \displaystyle\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t-j)dt$

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

此求积公式称为n阶Newton-Cotes公式

§2 Newton—Cotes求积公式

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

称为Cotes系数，它与积分区间、被积函数均无关，只与积分区间的等分数n有关.

n阶N-C公式的截断误差为

$$R_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)dx$$

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

§2 Newton—Cotes求积公式

Cotes 系数表

n	$C_k^{(n)}$				
1	$1/2$	$1/2$			
2	$1/6$	$4/6$	$1/6$		
3	$1/8$	$3/8$	$3/8$	$1/8$	
4	$7/90$	$16/45$	$2/15$	$16/45$	$7/90$

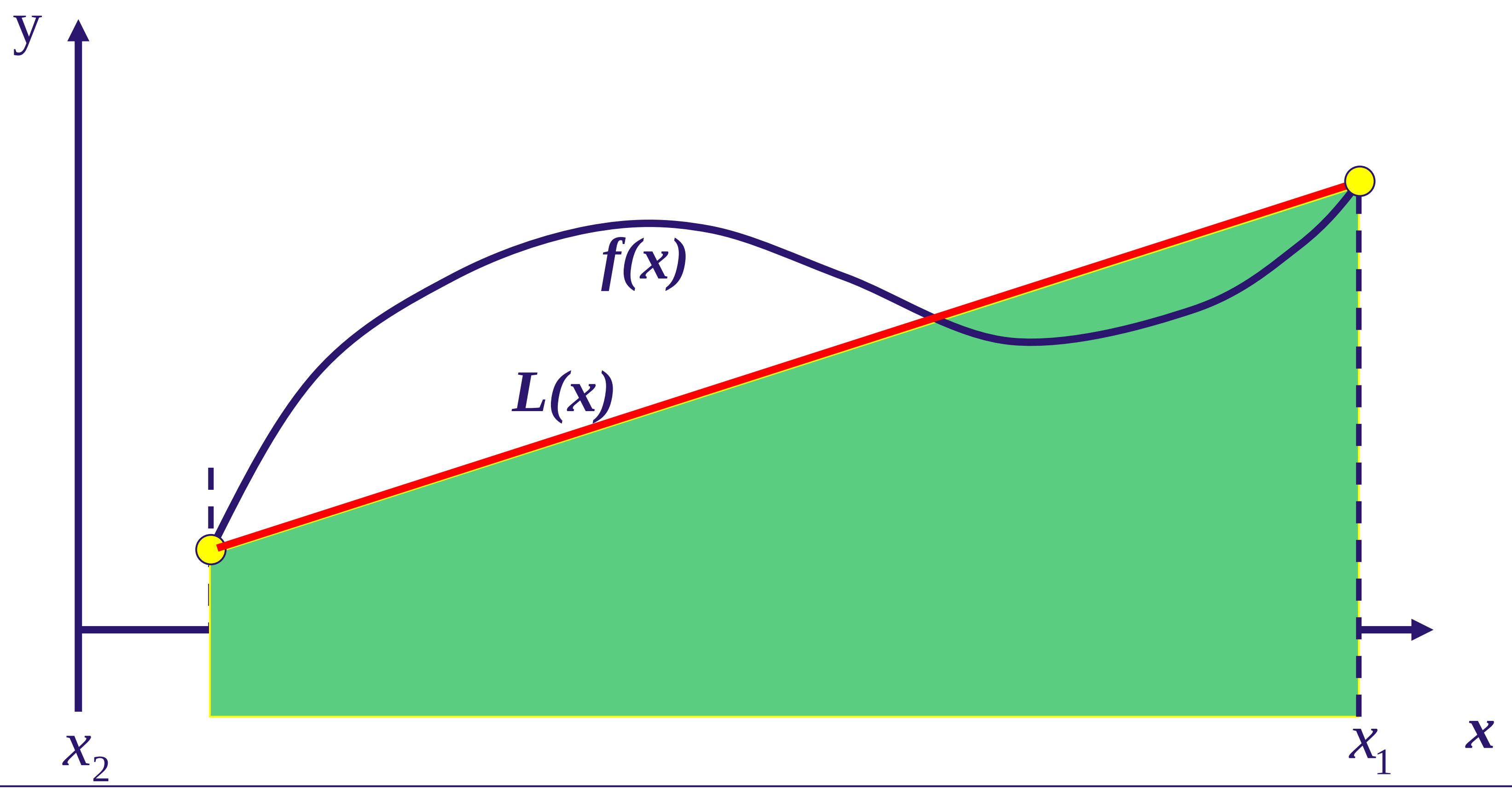
$n=1$ 梯形公式

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

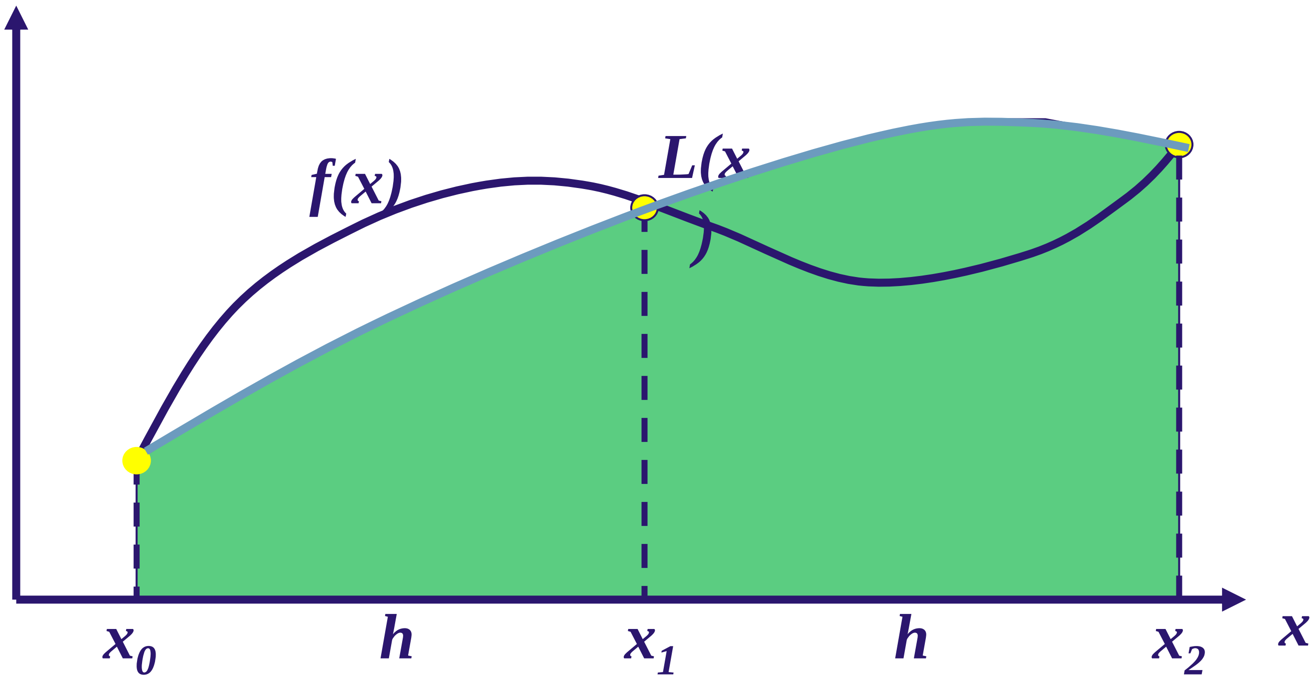
$n=2$ 抛物线公式 (Simpson 公式)

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

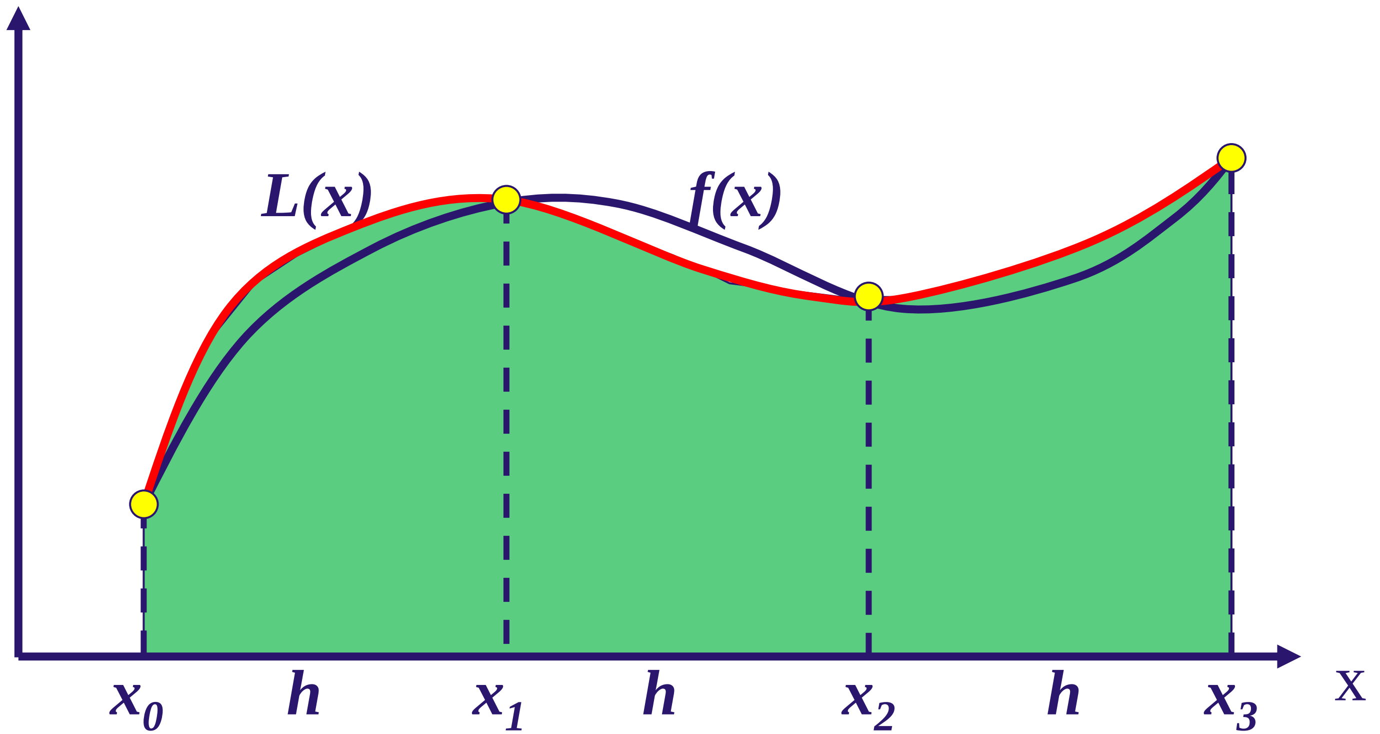
梯形公式： $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_1)]$



$$\textit{Simpson}\text{公式：}\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right]$$



Simpson's $\frac{3}{8}$ 公式： $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8}\left[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)\right]$



3 误差估计

(一) 求积公式的代数精确度

定义：设求积公式

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

当$f(x)$为次数不超过 m的多项式时，精确成立

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

存在某个 $m+1$次多项式 $P_{m+1}(x)$, 有

$$\int_a^b P_{m+1}(x)dx \neq \sum_{k=0}^{n} A_k P_{m+1}(x_k)$$

则称该求积公式具有m次代数精确度。

结论：

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

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \int_a^b x^l dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^l & (l = 0,1,\cdots m) \\ \int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1} \end{cases}$$

2.由n次插值导出的求积公式 至少具有 n次代数精度 .

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

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

$$\Rightarrow R_n(x^l) = 0 \qquad (l = 0,1,\cdots,n)$$

3. $2n$阶$N-C$公式至少具有 $2n+1$次代数精度 .

§2 Newton—Cotes求积公式

例：求抛物线公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$ 的代数精度

解：记 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$ $\quad \tilde{I}(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$

$$I(1)=b-a \qquad \tilde{I}(1)=\frac{b-a}{6}(1+4+1)=b-a$$

$$I(x)=\frac{1}{2}(b^2-a^2) \qquad \tilde{I}(x)=\frac{b-a}{6}(a+2a+2b+b)=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$$

$$I(x^2)=\frac{1}{3}(b^3-a^3) \qquad \tilde{I}(x^2)=\frac{b-a}{6}\left[a^2+4(\frac{a+b}{2})^2+b^2\right]=\frac{1}{3}(b^3-a^3)$$

$$I(x^3)=\frac{1}{4}(b^4-a^4) \qquad \tilde{I}(x^3)=\frac{b-a}{6}\left[a^3+4(\frac{a+b}{2})^3+b^3\right]=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$$

$$I(x^4)=\frac{1}{5}(b^5-a^5) \qquad \tilde{I}(x^4)=\frac{b-a}{6}\left[a^4+4(\frac{a+b}{2})^4+b^4\right]$$

$$=\frac{b-a}{24}(5a^4+4a^3b+6a^2b^2+4ab^3+5b^4)$$

∴ 抛物线公式具有3次代数精度

例：确定系数使得下列求积 公式代数精确度尽可能 高

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

解：有3个待定系数，为使代数精确度尽可能 高，

令$f(x)=1, x, x^2$时，公式等号成立得

$$\begin{cases} A_{-1}+A_0+A_1=2 \\ -A_{-1}+A_1=0 \\ A_{-1}+A_1=\dfrac{2}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_{-1}=\dfrac{1}{3} \\ A_0=\dfrac{4}{3} \\ A_1=\dfrac{1}{3} \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} A_{-1} = \dfrac{1}{3} \\ A_0 = \dfrac{4}{3} \\ A_1 = \dfrac{1}{3} \end{cases}$$

上述公式对$f(x) = 1, x, x^2$精确成立,

当$f(x) = x^3$时,

左边 = 右边 = 0

当$f(x) = x^4$

左边 $= \dfrac{2}{5} \neq$ 右边 $= \dfrac{2}{3}$,

所以上述公式具有3次代数精确度.

（二）梯形公式与Simpson公式的误差估计

定理：若$f(x)\in C^{(2)}[a,b]$,则梯形公式的误差为

$$R_1(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$$=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)\qquad\qquad \xi\in(a,b)$$

证明：$R_1(f)=\int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}(x-a)(x-b)dx$

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

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

§2 Newton—Cotes求积公式

定理： 若 $f(x)\in C^{(4)}[a,b]$, 则Simpson公式的误差为

$$R_2(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

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

证明：可以由$R_2(f)=\int_a^b \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)dx$推得

已知 *Simpson* 公式的代数精度为 **3**

作$f(x)$的三次插值多项式 ，

使得在 $a,\frac{a+b}{2},b$点的值等于函数值，

且是 三次多项式。

取$f(x)$的三次 *Hermite* 插值多项式 $H_3(x)$满足

$$H_3(a)=f(a), \qquad H_3(b)=f(b)$$

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

则 $$f(x)-H_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi_x)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$$

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

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

$$R_2(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

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

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

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

$$=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx \qquad 令x=\frac{a+b}{2}+t\frac{b-a}{2}$$

$$=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(\frac{b-a}{2})^5\int_{-1}^{1}(t+1)t^2(t-1)dt$$

$$=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(\frac{b-a}{2})^5(\frac{2}{5}-\frac{2}{3}) \quad =-\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}(\frac{b-a}{2})^5$$

$$=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi) \qquad 或=-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \qquad \xi\in(a,b)$$

h为两个节点之间的距离

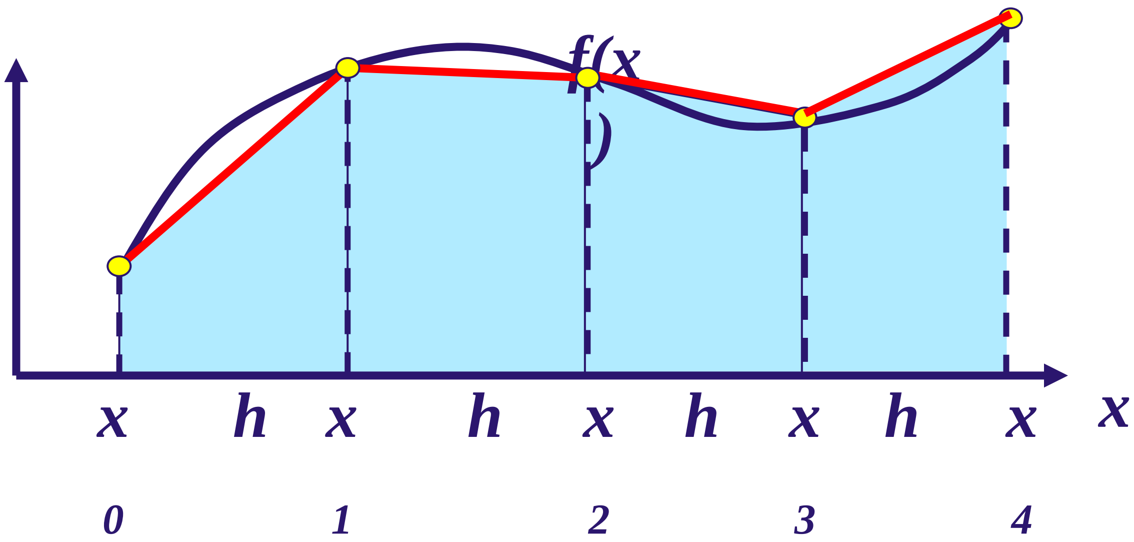
§3　复化求积公式

基本思想：高次插值有Runge 现象，
用分段低次插值函数近似被积函数求积分近似值。

1.复化梯形公式

被积函数 $f(x)$用分段线性插值函数代　替

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



§3 复化求积公式

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

在每个$[x_{k-1}, x_k]$上用梯形公式：

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n=1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

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

§3 复化求积公式

复合梯形公式:

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

如果 $f(x)\in C^{(2)}[a,b]$, 其截断误差为

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

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

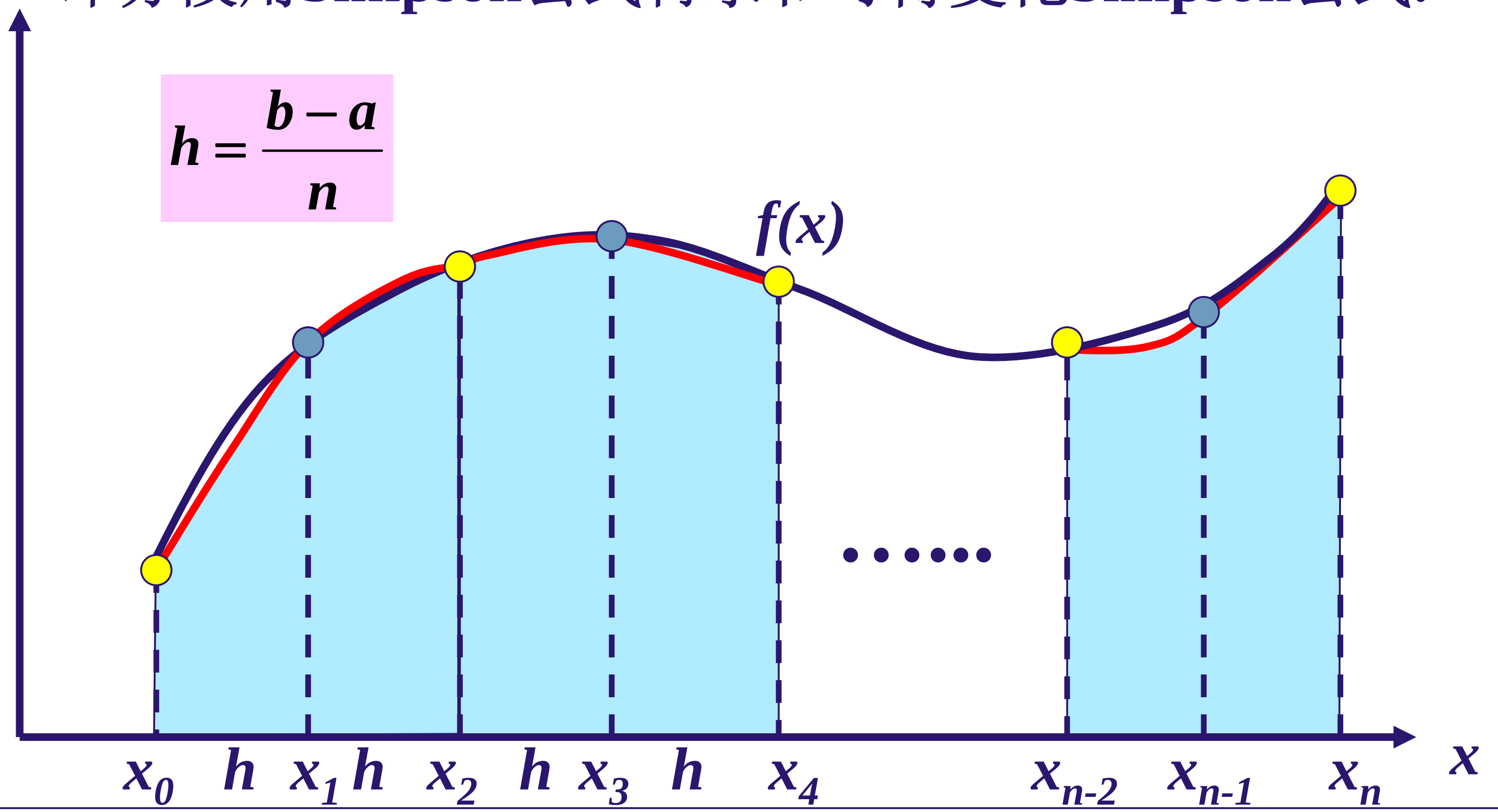
$$=\sum_{k=1}^{n}[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)] \quad =-\frac{h^2}{12}(b-a)\frac{\sum_{k=1}^{n} f''(\xi_k)]}{n} \qquad \xi_k\in(x_k,x_{k+1})$$

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

2. 复化Simpson公式

用分段二次插值函数代替$f(x)$

即分段用Simpson公式再求和可得复化Simpson公式.



§3　复化求积公式

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

$$\int_{x_{2k}}^{x_{2k-2}} f(x)\,dx \approx \frac{2h}{6}[f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})]$$

x_{2k-2}　　x_{2k-1}　　x_{2k}

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=1}^{m}\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx\approx\sum_{k=1}^{m}\frac{2h}{6}\left[f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})\right]$$

$$=\frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{m-1}f(x_{2k})+4\sum_{k=1}^{m}f(x_{2k-1})\right]$$

§ 3 复化求积公式

复化Simpson公式：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k})+4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1})\right]$$

若 $f(x) \in C^{(4)}[a,b]$，则截断误差为

$$R_s(f) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi), \qquad \xi \in (a,b)$$

$$R_s(f) = \int_a^b f(x)dx - \frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k})+4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1})\right]$$

$$= -\frac{h^5}{90}\sum_{k=1}^{m} f^{(4)}(\xi_k) \quad = -\frac{h^5}{90}\frac{b-a}{2h}\frac{\sum_{k=1}^{m} f^{(4)}(\xi_k)}{m} \quad = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi)$$

$\xi_k \in (x_{2k-2}, x_{2k})$ $\qquad$ $\xi \in (a,b)$

例：若用复化Simpson公式计算积分 $\int_0^1 e^{-x^2}dx$

问积分区间要等分为多少份才能保证计算结果有4位有效数字？

解： $0.3 \le e^{-x^2} \le 1 \quad x \in [0,1] \quad \therefore \quad 0.3 \le \int_0^1 e^{-x^2} < 1$

取 $\varepsilon = \frac{1}{2}\times 10^{-4}$, $\quad f(x)=e^{-x^2}$, $\quad f'(x)=-2xe^{-x^2}$

$f''(x)=(4x^2-2)e^{-x^2}$, $\quad f'''(x)=(-8x^3+12x)e^{-x^2}$

$f^{(4)}(x)=(16x^4-48x^2+12)e^{-x^2}$

$$|R_s(f)| = \frac{h^4}{180}\left|f^{(4)}(\xi)\right| \le \frac{h^4}{180}\max_{0\le x\le 1}\left|f^{(4)}(x)\right| = \frac{20}{180}h^4 \le \frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

$n^4 \ge \frac{2}{9}\times 10^4, \quad n \ge 6.87$

取 $n=8$ 即可．

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \approx \frac{1}{3\times 8}(1+4e^{-(0.125)^2}+2e^{-(0.25)^2}+4e^{-(0.375)^2}+2e^{-(0.5)^2}$$
$$+2e^{-(0.625)^2}+4e^{-(0.75)^2}+2e^{-(0.875)^2}+4e^{-1})\approx 0.7468$$

如果用复化梯形公式计算，则由误差公式

$$f''(x)=(4x^2-2)e^{-x^2} \quad f'''(x)=(-8x^3+12x)e^{-x^2}$$

$$|R_T(f)|=\frac{h^2}{12}|f''(\xi)| \le \frac{h^2}{12}\max_{0\le\xi\le1}|f''(\xi)|$$

$$=\frac{h^2}{12}\times 2\le\frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow n\ge 57.75 \qquad n=58$$

§3 复化求积公式

$$R_{T_n}(f) = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=1}^{n} f''(\xi_k) = -\frac{h^2}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

$$\approx -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx = -\frac{h^2}{12}[f'(b)-f'(a)]$$

注意到区间再次对分时

$$R_{T_{2n}}(f) \approx -\frac{1}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2[f'(b)-f'(a)] \approx \frac{1}{4}R_{T_n}(f)$$

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

$$R_{S_n}(f) = -\frac{h^5}{90}\sum_{k=1}^{m} f^{(4)}(\xi_k) = -\frac{h^4}{180}\sum_{k=1}^{m} 2hf^{(4)}(\xi_k)$$

$$\approx -\frac{h^4}{180}\int_a^b f^{(4)}(x)dx = -\frac{h^4}{180}(f'''(b) - f'''(a))$$

注意到区间再次对分时

$$R_{S_{2n}}(f) \approx -\frac{f'''(b) - f'''(a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \approx \frac{1}{16}R_{S_n}(f)$$

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

通常采取将区间不断对分的方法,即取$n = 2^m$

3 逐次分半算法

（1）梯形公式的逐次分半算法

取 $n = 2^m (m = 0,1,2,\cdots),\quad h_m = \dfrac{b-a}{2^m}$

$$x_k = a + kh_m \qquad (k = 0,1,\cdots,2^m)$$

$$T_{2^m} = \frac{h_m}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{2^m-1} f(x_k) \right] \qquad (m = 0,1,2,\cdots)$$

递推公式

$$T_{2^m} = \frac{1}{2}T_{2^{m-1}} + h_m \sum_{k=1}^{2^{m-1}} f(a + (2k-1)h_m) \qquad (m = 1,2,\cdots)$$

§3　复化求积公式

即 T_{2^m} 是前次计算的近似值 $T_{2^{m-1}}$ 的一半

与新分点处函数值之和乘以新步长 h_m 之和．

$\{T_{2^m}\}$ 称为梯形值序列．

若 $f \in C^2[a,b]$

$$I - T_{2^m} = R(f, T_{2^m}) \approx \frac{1}{3}(T_{2^m} - T_{2^{m-1}})$$

（2）Simpson公式的逐次分半算法

$$S_{2^m}=\frac{h_m}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{2^{m-1}-1}f(a+2kh_m)+4\sum_{k=1}^{2^{m-1}}f(a+(2k-1)h_m)\right]\qquad(m=1,2,\cdots)$$

$\{S_{2^m}\}$称为 *Simpson* 序列.

若$f(x)\in C^{(4)}[a,b]$,则有

$$I-S_{2^m}=R(f,S_{2^m})\approx\frac{1}{15}(S_{2^m}-S_{2^{m-1}})$$

为Simpson公式的逐次分半算法的事后误差估计公式，实际计算时常以

$$\left|S_{2^m}-S_{2^{m-1}}\right|<\varepsilon$$

为停步准则。

§ 3 复化求积公式

例：计算椭圆 $\dfrac{x^2}{4}+y^2=1$的周长，使结果具有 5位有效数字．

解：令$x=2\cos\theta, y=\sin\theta$

$$l=\int_L ds=4\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{4\sin^2\theta+\cos^2\theta}d\theta=4\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{3\sin^2\theta+1}d\theta$$

令$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{3\sin^2\theta+1}d\theta$，　　则$\dfrac{\pi}{2}<I<\pi$，

使其有5位有效数字，需$|e(l)|<\dfrac{1}{2}\times10^{-4}$　　$|e(I)|<\dfrac{1}{8}\times10^{-4}$

利用分半梯形公式计算 I的近似值，令$f=\sqrt{1+3\sin^2\theta}$

$$T_1=\frac{\pi}{2}(1+2)=2.3561945,$$

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{\pi}{4}f\left(\frac{\pi}{4}\right)=2.4192078,\qquad \frac{1}{3}|T_1-T_2|=0.0212421$$

$$T_1 = \frac{\pi}{2}(1+2) = 2.3561945,$$

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{\pi}{4}f(\frac{\pi}{4}) = 2.4192078, \quad \frac{1}{3}|T_1 - T_2| = 0.0212421$$

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{\pi}{8}(f(\frac{\pi}{8}) + f(\frac{3\pi}{8})) = 2.42210310$$

$$\frac{1}{3}|T_4 - T_2| = 0.00072744$$

$$T_8 = \frac{1}{2}T_4 + \frac{\pi}{16}(f(\frac{\pi}{16}) + f(\frac{3\pi}{16}) + f(\frac{5\pi}{16}) + f(\frac{7\pi}{16})) = 2.42211206$$

$$\frac{1}{3}|T_4 - T_8| = 0.000002986 \quad < \frac{1}{8}\times 10^{-4}$$

$$4T_9 \approx 4\times 2.42211 \ = 9.68844$$

$$I \approx 4T_9 \approx 9.6884$$

利用逐次分半 *Simpson* 公式计算 $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{3\sin^2\theta+1}\,d\theta$

$$S_2=\frac{\pi}{12}(f(0)+4f(\frac{\pi}{4})+f(\frac{\pi}{2}))=2.4411628,$$

$$S_4=\frac{\pi}{24}(f(0)+4f(\frac{\pi}{8})+2f(\frac{\pi}{4})+4f(\frac{3\pi}{8})+f(\frac{\pi}{2}))=2.42283053$$

$$\frac{1}{15}|S_4-S_2|=0.0012$$

$$S_8=\frac{\pi}{48}[f(0)+4f(\frac{\pi}{16})+2f(\frac{\pi}{8})+4f(\frac{3\pi}{16})$$

$$+2f(\frac{\pi}{4})+4f(\frac{5\pi}{16})+2f(\frac{3\pi}{8})+4f(\frac{7\pi}{16})+f(\frac{\pi}{2})]$$

$$=2.4221150$$

$$\frac{1}{15}|S_4-S_8|<\frac{1}{8}\times 10^{-4} \qquad l=4I\approx 4\times 2.42211\approx 9.6884$$

§5　Gauss型求积公式

基本思想：

在节点数 n 固定时，适当选取 $\{x_k\}$ 和求积系数 $\{A_k\}$，使求积公式

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

具有最高的代数精确度，其中 $\rho(x) \geq 0$ 为权函数．

1　一般理论

问题：

(1).n个节点的求积公式最高代数精确度是多大？

(2).怎样选取节点与求积系数，使求积公式具有最高的代数精确度？

§5 Gauss型求积公式

1. Gauss型求积公式

设求积公式 $\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$具有 m次代数精度 ，

则节点 $\{x_k\}$和求积系数 $\{A_k\}$应满足方程组

$$\begin{cases} A_1 + A_2 + \cdots + A_n = \mu_0 \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_n x_n = \mu_1 \\ \quad \cdots \\ A_1 x_1^m + A_2 x_2^m + \cdots + A_n x_n^m = \mu_m \end{cases}$$

其中 $\mu_l = \int_a^b \rho(x) x^l dx \qquad (l = 0,1,\ldots,m)$

由此得 $m + 1 \leq 2n$

即n个节点的代数精度至少 为$2n-1.$

§5 Gauss型求积公式

设$P_{2n}(x)=(x-x_1)^2(x-x_2)^2\cdots(x-x_n)^2\geq 0,$

则 $$\int_a^b \rho(x)P_{2n}(x)dx > 0$$

而 $$\sum_{k=1}^{n} A_k P_{2n}(x_k)=0$$

所以,n个节点的求积公式的最 高代数精度为 $2n-1$.

定义：

如果一组节点 $x_1, x_2, \cdots, x_n \in [a,b]$能使求积公式

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

具有 $2n-1$次代数精度 ,则称这组节点为 *Gauss* 点,

上述求积公式为带权函 数$\rho(x)$的*Gauss* 型求积公式 .

§5 Gauss型求积公式

例：试确定求积公式 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx af(-\sqrt{0.6}) + bf(0) + cf(\sqrt{0.6})$

中的待定系数 a, b和c，使其代数精度尽量高，

并指出公式有几次代数 精度，判断是否为 *Gauss* 型公式.

解：记$I(f)=\int_{-1}^{1} f(x)dx \quad \tilde{I}(f)=af(-\sqrt{0.6})+bf(0)+cf(\sqrt{0.6})$

取$f(x)=1, x, x^2$，使$I(f)=\tilde{I}(f)$

$$I(1)=\int_{-1}^{1} 1dx = 2 \qquad \tilde{I}(1)=a+b+c$$

$$I(x)=\int_{-1}^{1} xdx = 0 \qquad \tilde{I}(x)=-\sqrt{0.6}a+\sqrt{0.6}c$$

$$I(x^2)=\int_{-1}^{1} x^2dx = \frac{2}{3} \qquad \tilde{I}(x^2)=0.6a+0.6c$$

要使公式具有尽可能高 的代数精度，

系数a,b,c必须满足方程组

$$\begin{cases} a+b+c=2 \\ -\sqrt{0.6}a+\sqrt{0.6}c=0 \\ 0.6a+0.6c=\dfrac{2}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a=c=\dfrac{5}{9} \\ b=\dfrac{8}{9} \end{cases}$$

当$a=c=\dfrac{5}{9}, b=\dfrac{8}{9}$时，求积公式的代数精度最 高.

§5 Gauss型求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9} f(-\sqrt{0.6}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(\sqrt{0.6})$$

$$I(x^3) = \int_{-1}^{1} x^3 dx = 0 \qquad \tilde{I}(x^3) = \frac{5}{9}\left[(-\sqrt{0.6})^3 + (\sqrt{0.6})^3\right] = 0$$

$$I(x^4) = \int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5} \qquad \tilde{I}(x^4) = \frac{5}{9}(0.6^2 + 0.6^2) = 0.4 = \frac{2}{5}$$

$$I(x^5) = \int_{-1}^{1} x^5 dx = 0 \qquad \tilde{I}(x^5) = \frac{1}{9}\left[(-\sqrt{0.6})^5 + (\sqrt{0.6})^5\right] = 0$$

$$I(x^6) = \int_{-1}^{1} x^6 dx = \frac{2}{7} \qquad \tilde{I}(x^6) = \frac{5}{9}(0.6^3 + 0.6^3) = \frac{2.16}{9} \neq \frac{2}{7}$$

$\therefore$ 此求积公式有5次代数精确度

是Gauss型求积公式。

§5 Gauss型求积公式

例：用高斯求积公式计算 $\int_0^4 xe^{2x}dx = 5216.926477$.

解：通过坐标变换化为[-1，1]上的积分

令 $x = 2t + 2;$

$$I = \int_0^4 xe^{2x}dx = \int_{-1}^1 (4t+4)e^{4t+4}dt$$

记$f(t) = (4t+4)e^{4t+4}$

两点高斯公式：

$$I = \int_{-1}^1 f(x)dx = f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$$

$$I = \int_{-1}^1 f(t)dt = f(\frac{-1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}}) = (4 - \frac{4}{\sqrt{3}})e^{4-\frac{4}{\sqrt{3}}} + (4 + \frac{4}{\sqrt{3}})e^{4+\frac{4}{\sqrt{3}}}$$

$$= 9.167657324 + 3468.376279 = 3477.543936 \qquad (\varepsilon_r = 33.34\%)$$

$$\int_0^4 xe^{2x}dx = 5216.926477.$$ 记$f(t)=(4t+4)e^{4t+4}$

三点高斯公式:

$$I=\int_{-1}^{1} f(x)dx=\frac{5}{9}f(-\sqrt{\frac{3}{5}})+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f(\sqrt{\frac{3}{5}})$$

$$I=\int_{-1}^{1} f(t)dt=\frac{5}{9}f(-\sqrt{0.6})+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f(\sqrt{0.6})$$

$$=\frac{5}{9}(4-4\sqrt{0.6})e^{4-\sqrt{0.6}}+\frac{8}{9}(4)e^{4}+\frac{5}{9}(4+4\sqrt{0.6})e^{4+\sqrt{0.6}}$$

$$=\frac{5}{9}(2.221191545)+\frac{8}{9}(218.3926001)+\frac{5}{9}(8589.142689)$$

$$=4967.106689 \qquad (\varepsilon_r=4.79\%)$$

2. Gauss型求积公式的误差

(1). $f(x)\in C^{(2n)}[a,b]$, 则 $\exists\xi\in(a,b)$, 使得

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

$$=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)dx$$

(2). 若 $f(x)\in C(a,b)$, $Gauss$ 型求积公式

当 $n\to\infty$ 时收敛于定积分值

3 几种常用的Gauss型求积公式

(一) Gauss－Legendre求积公式

$[-1,1]$ 上带权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 的 *Gauss* 型求积公式

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

*Gauss*点 $\{x_k\}$ 为 n 次 *Legendre*多项式

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right]$$ 的 n 个零点。

求积系数为 $$A_k=\frac{2}{(1-x_k)^2\left[P_n'(x_k)\right]^2} \qquad (k=1,2,\cdots,n)$$

其截断误差为 $$R(f)=\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)\left[(2n)!\right]^3} f^{(2n)}(\xi) \qquad \xi\in(-1,1)$$

§5 Gauss型求积公式

（二）Gauss－Chebyshev求积公式

$[-1,1]$上带权函数 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的 *Gauss* 型求积公式

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

*Gauss*点$x_k=\cos\dfrac{2k-1}{2n}\pi \ (n=1,2,\cdots,n)$ 为n次*Chebyshev*多项式

$T_n(x)=\cos(n\arccos x)$的n个零点

求积系数为：$A_k=\dfrac{\pi}{n} \quad (k=1,2,\cdots,n)$

Gauss－Chebyshev求积公式为 $\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n} f(\cos\frac{2k-1}{2n}\pi)$

其余项为 $\quad R(f)=\dfrac{\pi}{2^{2n-1}(2n)!}f^{(2n)}(\xi) \qquad \xi\in(-1,1)$

（三）Gauss－Laguerre求积公式

$[0,+\infty)$上带权函数 $\rho(x)=e^{-x}$的$Gauss$型求积公式

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

$\{x_k\}$为n次$Laguerre$ 多项式 $L_n(x)=e^{x}\dfrac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n)$的零点 .

求积系数为 $A_k=\dfrac{(n!)^2}{x_k\left[L_n'(x_k)\right]^2}$ $(k=1,2,\cdots,n)$

截断误差为 $R(f)=\dfrac{(n!)^2}{(2n)!}f^{(2n)}(\xi)$ $\xi\in(0,+\infty)$