

计算方法

第2章 数值积分

胡 敏

合肥工业大学 计算机与信息学院

jsjxhumin@hfut.edu.cn

uhnim@163.com

第 2 章 数值积分

2.1 机械求积

2.2 牛顿-柯特斯公式

2.3 龙贝格算法

2.4 高斯公式

2.5 数值微分



2.4 高斯公式

1、高精度的求积公式

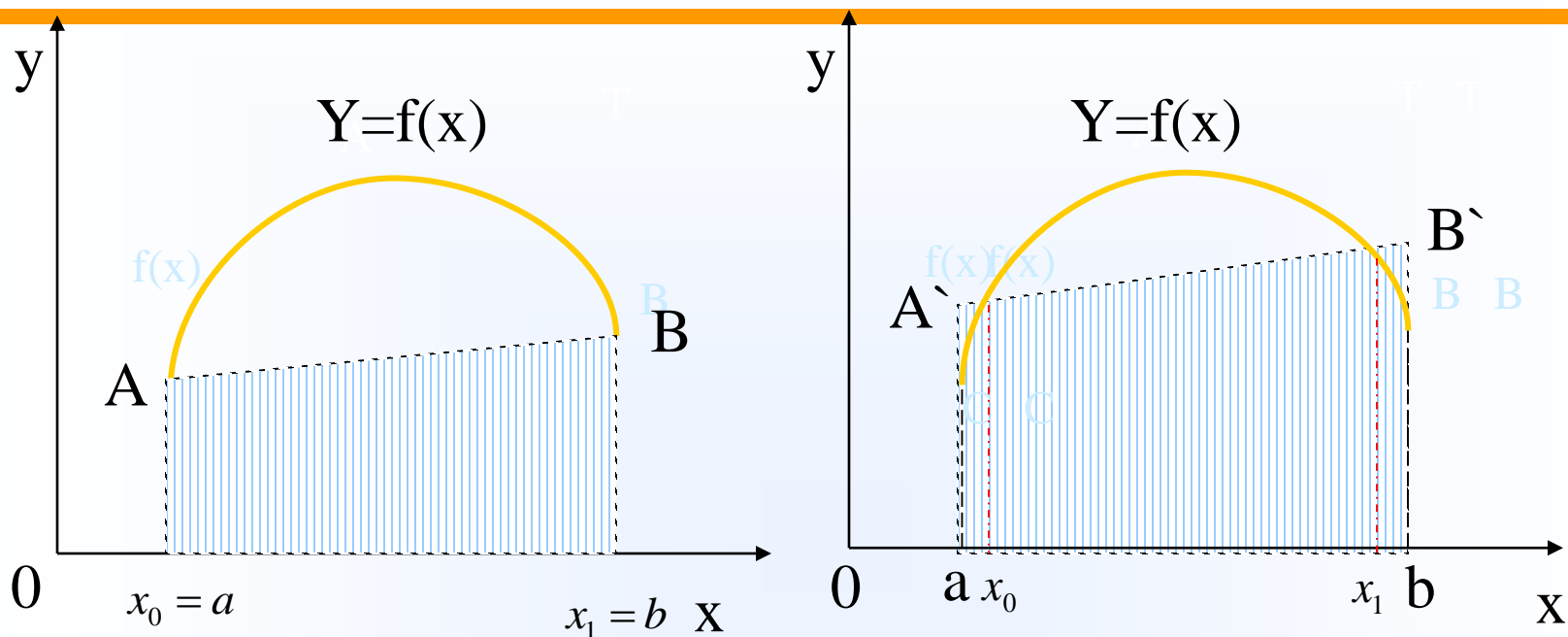
在构造 $Newton-Cotes$ 公式时，限定用积分区间的等分点作为求积节点，这样做虽然使问题的处理过程得以简化，但同时也限制了精度。

在节点数目固定为 n 的条件下，能否通过适当选取求积节点 x_k 的位置以及相应的求积系数 A_k ，使求积公式

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

具有尽可能高(最高)的代数精度？





左图用梯形AabB的面积作为积分的近似值；

右图适当地选取 x_0, x_1 的位置，用梯形 $A'abB'$ 的面积作为积分的近似值

可以看出，适当地选取 x_0, x_1 的位置，可以提高求积的精度。



不失一般性，设 $a = -1, b = 1$ ，考虑下列求积公式

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \quad (30)$$

我们将会看到，适当的选取求积节点 $x_k (k=1, 2, \dots, n)$ 求积公式具有 $2n-1$ 次代数精度，这种高精度求积公式称为 **高斯 (Gauss) 公式**，高斯公式的求积节点称为 **高斯点**。

定义1: 在 $[a, b]$ 上的 n 个节点合理选取，可使求积公式 (30) 的代数精度达到 $2n-1$ 次，此时，求积公式 (30) 称为 **高斯求积 (Gauss) 公式**，节点 $x_k (k=1, 2, \dots, n)$ 称为 **高斯点**， A_k 称为 **高斯系数**。



2.4 高斯求积公式

一点高斯公式:

我们所熟悉的中矩形公式:

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

高斯点 $x_1=0$



两点高斯公式:

两点高斯公式的推导:

$$\int_{-1}^1 \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \mathbf{A}_1 \mathbf{f}(\mathbf{x}_1) + \mathbf{A}_2 \mathbf{f}(\mathbf{x}_2)$$

令它对于 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 1, \mathbf{x}, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3$ 准确成立, 有: 由其中的2,4知, $x_1^2 = x_2^2$

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 = 2 \\ \mathbf{A}_1 \mathbf{x}_1 + \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2 = 0 \\ \mathbf{A}_1 \mathbf{x}_1^2 + \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2^2 = \frac{2}{3} \\ \mathbf{A}_1 \mathbf{x}_1^3 + \mathbf{A}_2 \mathbf{x}_2^3 = 0 \end{cases} \quad (31)$$

再由1,3得: $x_1^2 = x_2^2 = \frac{1}{3}$

所以: $x_2 = -x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

代回1,2得 $A_1 = A_2 = 1$

两点高斯公式的具体形式: $\int_{-1}^1 \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \mathbf{f}\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \mathbf{f}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$



对于任意积分区间[a,b],

$$\text{通过变换: } \mathbf{x} = \frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{2} \mathbf{t} + \frac{\mathbf{a} + \mathbf{b}}{2}$$

可以变到区间[-1,1]上, 这时:

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

因而, 相应的两点高斯公式是:

$$\int_a^b \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{2} \left[\mathbf{f}\left(-\frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{2\sqrt{3}} + \frac{\mathbf{a} + \mathbf{b}}{2}\right) + \mathbf{f}\left(\frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{2\sqrt{3}} + \frac{\mathbf{a} + \mathbf{b}}{2}\right) \right] \quad (32)$$

高斯公式的精度很高, 例如, 用两点高斯公式 (32) 计算

$$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \quad \text{得近似值} 0.9460411, \text{ 有四位有效数字 } (0.9460831)$$



例：求 $\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx$ 的 2 点 Gauss 公式。

解：设 $\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$ ，应有 3 次代数精度。

代入 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$

$$\begin{cases} \frac{2}{3} = A_0 + A_1 & x_0 \approx 0.8212 \\ \frac{2}{5} = A_0 x_0 + A_1 x_1 & x_1 \approx 0.2899 \\ \frac{2}{7} = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 & A_0 \approx 0.3891 \\ \frac{2}{9} = A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 & A_1 \approx 0.6109 \end{cases} \quad (2)$$

不是线性方程组，不易求解。

由插值型公式构造知，关键求 x_k ，

从例中可看到求解非线性方程组(2)较复杂，通常 $n \geq 2$ 就很难求解。故一般不通过解方程(2)求 x_k 及 A_k ($k=0,1,\dots,n$)。而从研究高斯点的基本特性来着手解决 Gauss 求积公式的构造问题。



2、高斯点的基本特性

正交多项式

定义2 若

(1) $\int_a^b f(x)g(x)dx = 0$,则称函数f(x)和g(x)在区间[a,b]上正交.

(2) $\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx = 0$,则称函数f(x)和g(x)在区间[a,b]上带权 $\rho(x)$ 正交.



设 \mathbf{x}_k ($k=1,2,\dots,n$) 是求积公式(30)中的高斯点, 令

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

对于任意次数 $\leq n-1$ 的多项式 $p(x)$, $p(x)\omega(x)$ 是次数 $\leq 2n-1$ 的多项式, 因而**高斯公式** (30) 对于它是准确成立的:

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

由于 $\omega(x_k) = 0 \quad (k=1,2,\dots,n)$

$$\text{故有: } \int_{-1}^1 p(x)\omega(x)dx = 0 \quad (33)$$

可见, 以高斯点为零点的 n 次多项式 $\omega(x)$ 与任意次数 $\leq n-1$ 的多项式 $p(x)$ 正交。



反之，如果 $\omega(x)$ 与任意次数 $\leq n-1$ 的多项式正交，则其零点必为**高斯点**。

实际上，对于任意次数 $\leq 2n-1$ 的多项式 $f(x)$ ，用 $\omega(x)$ 去除 $f(x)$ ，则可表示成：

$$f(x) = p(x)\omega(x) + q(x)$$

其中， $p(x)$ 为商， $q(x)$ 为余， $p(x)$ ， $q(x)$ 均为不超过 $n-1$ 次的多项式，于是有

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \int_{-1}^1 p(x)\omega(x)dx + \int_{-1}^1 q(x)dx$$

由正交性条件 $\int_{-1}^1 p(x)\omega(x)dx = 0$

得： $\int_{-1}^1 f(x)dx = \int_{-1}^1 q(x)dx$



以 $\omega(x)$ 的零点 \mathbf{x}_k ($k=1,2,\dots,n$)作插值型求积公式:

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

则它必有 $n-1$ 次代数精度, 因而对 $q(x)$ 准确成立, 即:

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

$$\text{而 } f(x_k) = p(x_k)\omega(x_k) + q(x_k) = q(x_k)$$

所以

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

由 $f(x)$ 的任意性知上述求积公式必是高斯公式, 故 \mathbf{x}_k ($k=1,2,\dots,n$)必为**高斯点**。



定理2 节点 x_k ($k=1,2,\dots,n$) 是Gauss点的充分必要条件

是, $\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$ 与所有次数小于等于 $n-1$ 的

多项式正交。即下列公式成立

求 Gauss 点
 \Leftrightarrow 求 $w(x)$ 的零点

$$\int_{-1}^1 x^k \omega(x) dx = 0 \quad (k = 0, 1, \dots, n-1) \quad (35)$$



我们可以按正交性条件来得出高斯点 x_k ($k=1,2,\dots,n$)

如对两点高斯公式

按正交性条件得 $\int_{-1}^1 f(x)dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$

$$\int_{-1}^1 (x - x_1)(x - x_2)dx = 0$$

$$\int_{-1}^1 x(x - x_1)(x - x_2)dx = 0$$

由此得

$$x_1 x_2 = -\frac{1}{3}, \quad x_1 + x_2 = 0$$

故所求高斯点为:

$$x_1 = -x_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$



3、勒让德(Legendre)多项式

定义 以高斯点 x_k ($k=1,2,\dots,n$) 为零点的 n 次多项式

$$P_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$$

称为**勒让德 (Legendre) 多项式**

1. 勒让德 (Legendre) 多项式:

定义 在 $[-1,1]$ 上 n 次勒让德 (Legendre) 多项式

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2-1)^n] \\ n = 1, 2, \dots \end{cases}$$

是正交的函数系，其 $n+1$ 次勒让德多项式 $P_{n+1}(x)$ 与任何次数不超过 n 的多项式 $P(x)$ 在 $[-1,1]$ 上均正交，

即
$$\int_{-1}^1 P_{n+1}(x) P(x) dx = 0$$



据上述所述，可逐步构造出**勒让德多项式**：

$$p_1(x) = x$$

$$p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

$$p_4(x) = x^4 - \frac{30}{35}x^2 + \frac{3}{35}$$

据**勒让德多项式**的定义，取它的零点作为求积节点便可构造出相应的高斯公式。



例

取 $p_1(x) = x$

其零点为: $x=0$

求积公式为:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = Af(0)$$

由于它有2-1次代数精度, 故令它对 $f(x)=1$ 准确成立, 有:

$$A = 2$$

故一点**高斯-勒让德积分公式**为:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = 2 f(0)$$

其**高斯点** $x_1=0$



例

取 $p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$ 其零点为: $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

求积公式为:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx A_1 f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + A_2 f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

由于它具有 $2n-1=3$ 次代数精度,
故令它对 $f(x)=1, f(x)=x$ 准确成立, 有

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2 \\ A_1\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + A_2\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = 0 \end{cases}$$

得: $A_1 = 1, \quad A_2 = 1$

故二点**高斯-勒让德积分公式**为:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx A_1 f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + A_2 f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

其**高斯点**

$$x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$



例

取 $p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$ 其零点为: $x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $x_2 = 0$, $x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$

求积公式为:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx A_1 f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + A_2 f(0) + A_3 f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

由于它具有 $2n-1=5$ 次代数精度

令它对 $f(x) = 1, x, x^2$ 准确成立, 有

$$\begin{cases} A_1 + A_2 + A_3 = 2 \\ A_1\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + A_2(0) + A_3\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = 0 \\ A_1\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)^2 + A_2(0)^2 + A_3\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)^2 = \frac{2}{3} \end{cases}$$



解此线性方程组得：

$$A_1 = \frac{5}{9}, \quad A_2 = \frac{8}{9}, \quad A_3 = \frac{5}{9}$$

故三点**高斯-勒让德积分公式**为：

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

其**高斯点**

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$$



例:分别用不同方法计算如下积分,并做比较

$$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

各种做法比较如下:

1、用Newton-Cotes公式

当n=1时, 即用梯形公式, $I \approx 0.9270354$

当n=2时, 即用Simpson公式,

$$I \approx 0.9461359$$

当n=3时, $I \approx 0.9461090$

当n=4时, $I \approx 0.9460830$

当n=5时, $I \approx 0.9460830$

$$I_{\text{准}} = 0.9460831$$



2:用复化梯形公式

令 $h=1/8=0.125$

$I_{\text{准}}=0.9460831$

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx \frac{h}{2} \{ f(0) + 2[f(h) + \cdots + f(7h)] + f(1) \} \\ = 0.94569086$$

3: 用复化辛甫生公式

令 $h=1/8=0.125$

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \\ \approx \frac{h}{3} \{ f(0) + 4[f(h) + \cdots + f(7h)] + 2[f(2h) + \cdots + f(6h)] + f(1) \} \\ = 0.9460833$$



4、用Romberg公式

K	T_n	S_n	C_n	R_n
0	0.9207355			
1	0.9397933	0.9461459		
2	0.9445135	0.9460869	0.9400830	
3	0.9456906	0.9460833	0.9460831	0.9460831

$$I_{\text{准}} = 0.9460831$$



(1) 用2个节点的Gauss公式

$$I = \int_{-1}^1 \frac{\sin x}{x} dx$$
$$\approx \left[1 \times \frac{\sin(-0.5773503)}{-0.5773503} + 1 \times \frac{\sin(0.5773503)}{0.5773503} \right] = 0.9460411$$

(2) 用3个节点的Gauss公式

解：令 $x=(t+1)/2$,

$$I = \int_{-1}^1 \frac{\sin(t+1)/2}{t+1} dt$$

$$I \approx 0.5555556 \times \frac{\sin \frac{1}{2}(0.7745907+1)}{0.7745907+1} + 0.8888889 \times \frac{\sin \frac{1}{2}}{0+1}$$
$$+ 0.5555556 \times \frac{\sin \frac{1}{2}(0.7745907+1)}{0.7745907+1} = 0.9460831$$



算法比较

- 此例题的精确值为**0.9460831...**
- 由例题的各种算法可知：
- 对**Newton-cotes**公式，当 **$n=1$** 时只有**1**位有效数字，当 **$n=2$** 时有**3**位有效数字，当 **$n=5$** 时有**7**位有效数字。
- 对复化梯形公式有**2**位有效数字，对复化辛甫生公式有**6**位有效数字。
- 用复化梯形公式，对积分区间 **$[0, 1]$** 二分**11**次用**2049**个函数值，才可得到**7**位准确数字。
- 用**Romberg**公式对区间二分**3**次，用了**9**个函数值，得到同样的结果。
- 用**Gauss**公式仅用了**3**个函数值，就得到结果。



2.5 数值微分

- 数值微分的概念
- 数值微分的计算方法
 - ★ 原始概念近似: 中点法及外推法
 - ★ 函数近似: 插值型的求导公式
- 数值微分的误差分析
 - ★ 泰勒展开式估计
 - ★ 事后误差估计
 - ★ 基本关系转化



引言

- **例:**已知自变量和函数值如下，求各点的导数值。

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$f(x)$	0.48	0.38	0.31	0.33	0.36	0.41	0.51	0.43	0.35	0.29	0.28

1. 函数 $f(x)$ 以离散点列给出时，而要求我们给出导数值，
2. 函数 $f(x)$ 过于复杂

这两种情况都要求我们用数值的方法求函数的导数值
微积分中，关于导数的定义如下：

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x) - f(x-h)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

自然，而又简单的方法就是，取极限的近似值，即差商。
根据离散点上的函数值求取某点导数近似值的方法。

当 h 足够小，
作为近似的导数值。

- 1) 差商代替导数
- 2) 插值型数值求导



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。

一、差商公式

由导数定义，得

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

$$f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h} \quad \text{向后差商}$$

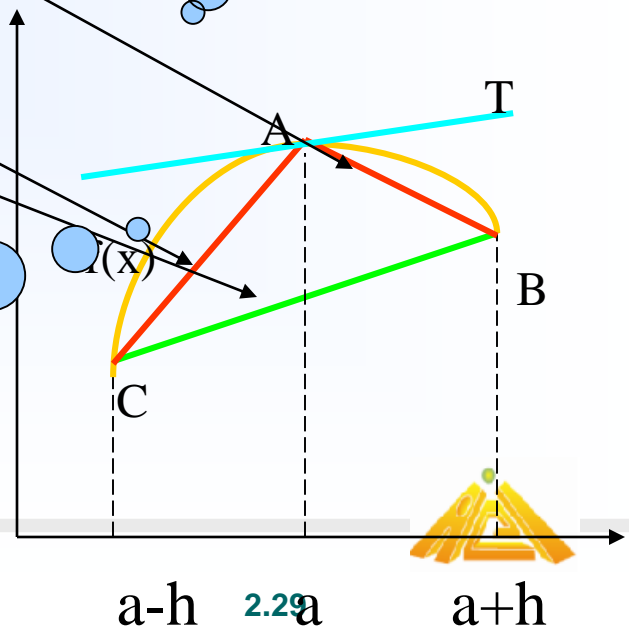
$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \quad \text{中心差商}$$

用弦AB的斜率
近似代替f'(x)
在a点的导数

用弦AC的斜率

显然，BC的斜率更接近a点切线AT的斜率，因此，中点方法更为可取。

$$G(h) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \quad \text{在a点的导数} \quad (41)$$



■差商型求导公式的误差分析

分别将 $f(a \pm h)$ 在 $x=a$ 处做Taylor展开有

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

代入 $G(h)$ 得
$$\mathbf{G}(h) = \mathbf{f}'(\mathbf{a}) + \frac{h^2}{3!} \mathbf{f}'''(\mathbf{a}) + \frac{h^4}{5!} \mathbf{f}^{(5)}(\mathbf{a}) + \dots \quad (42)$$

所以截断误差
$$\mathbf{G}(h) - \mathbf{f}'(\mathbf{a}) = \frac{h^2}{3!} \mathbf{f}'''(\mathbf{a}) + \frac{h^4}{5!} \mathbf{f}^{(5)}(\mathbf{a}) + \dots$$

从截断误差的角度来看，步长 h 越小，计算结果越准确。且

$$|\mathbf{f}'(\mathbf{a}) - \mathbf{G}(h)| \leq \frac{h^2}{6} \mathbf{M}, \text{ 其中 } \mathbf{M} \geq \max_{|x-a| \leq h} |\mathbf{f}'''(x)| \quad (6)$$

但从计算角度看， h 越小， $f(a+h)$ 与 $f(a-h)$ 越接近，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 h 不宜太小。



几点说明

- ✓ 理论上, 步长 h 越小, 数值微分的精度越高;
- ✓ 实际使用时, 若 h 太小, 则 $f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$ 的误差就会增加.
- 例. 计算 $f(x)=e^x$ 的导数 $f'(1.15)$ ——取8位有效数字

h	x	f(x)	向前差商 D_+	中心差商D	$ f'(1.15)-D_+ $	$ f'(1.15)-D $
0.01	1.14	3.1267684	3.17404	3.158245	1.5847E-02	5.2100E-05
	1.15	3.1581929				
	1.16	3.1899333				
0.001	1.149	3.1550363	3.1598	3.1582	1.6071E-03	7.1000E-06
	1.150	3.1581929				
	1.151	3.1613527				
0.0001	1.1499	3.1578771	3.158	3.158	1.9290E-04	1.9290E-04
	1.1500	3.1581929				
	1.1501	3.1585087				
1.00E-06	1.149999	3.1581897	3.2	3.2	4.1807E-02	4.1807E-02
	1.150000	3.1581929				
	1.150001	3.1581961				

可以看出, 当步长 h 缩小到 10^{-6} 时, 计算误差出现增加;



所以，在**实际计算时**，通常采用**二分步长及误差事后估计法**，在变步长的过程中实现步长的自动选择，在保证截断误差满足的精度要求的前提下选取尽可能大的步长。

例5 用**变步长**的中点方法求 e^x 在 $x=1$ 处的导数值, 设取 $h=0.8$ 起算。

解 这里采用的计算公式是

$$G(h) = \frac{e^{1+h} - e^{1-h}}{2h}$$

计算结果见表2.5, 表中 k 代表二分的次数, 步长 $h = \frac{0.8}{2^k}$ 。二分 9 次得结果 $G = 2.71828$, 它的每一数字都是有效数字 (所求导数的准确值为 $e = 2.7182818\dots$)。

表2.5 计算结果

k	$G(h)$
0	3.01765
1	2.79135
2	2.73644
3	2.72281
...	...
9	2.71828
10	2.71828

$$\left. \begin{aligned} G(h) - f'(x_0) &\approx \alpha_1 h^2 \\ G\left(\frac{h}{2}\right) - f'(x_0) &\approx \frac{1}{4} \alpha_1 h^2 \end{aligned} \right\}$$

$$\frac{G(h) - f'(x_0)}{G\left(\frac{h}{2}\right) - f'(x_0)} \approx 4$$

事后误差估计

$$f'(x_0) - G(h) \approx \frac{4}{3} \left(G\left(\frac{h}{2}\right) - G(h) \right)$$

计算方法---- 数值积分

2.32

二、中点方法的加速

我们看到，中点公式具有如下形式

$$G(h) = f'(a) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \alpha_3 h^6 + \dots \quad (43)$$

式中的系数均与步长无关。若将步长二分，则有

$$G\left(\frac{h}{2}\right) = f'(a) + \frac{1}{4} \alpha_1 h^2 + \frac{1}{16} \alpha_2 h^4 + \frac{1}{64} \alpha_3 h^6 + \dots \quad (44)$$

取(43)与(44)加权平均

$$\mathbf{G}_1(h) = \frac{4}{3} \mathbf{G}\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3} \mathbf{G}(h) \quad (45)$$

则可消去误差主项 $\frac{1}{4}\alpha_1 h^2$ ，得 $G_1(h) = f'(a) + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \dots$

若令

$$\mathbf{G}_2(h) = \frac{16}{15} \mathbf{G}_1\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{15} \mathbf{G}_1(h) \quad (46)$$

则进一步消去误差主项 $\beta_1 h^4$ ，有 $G_2(h) = f'(a) + \gamma_1 h^6 + \dots$
重复同样的手续，再导出下列加速公式

$$\mathbf{G}_3(h) = \frac{64}{63} \mathbf{G}_2\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{63} \mathbf{G}_2(h) \quad (47)$$

这种加速过程还可继续下去。这种加速方法通常称作 **Richardson (李查逊) 外推加速法**。



例6 运用加速公式加工例5的结果。

解 计算结果

表2-6 Richardson外推加速法计算结果

见表2-6。这里，加速的效果同样是相当显著的。

h	$G(h)$	$G_1(h)$	$G_2(h)$	$G_3(h)$
0.8	3.01765	2.715917	2.718285	2.71828
0.4	2.79135	2.718137	2.718276	
0.2	2.73644	2.718267		
0.1	2.72281			

当 $f(a+h)$ 及 $f(a-h)$ 分别有舍入误差 ε_1 及 ε_2 时，若令 $\varepsilon = \max\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|\}$ 则计算 $f'(a)$ 的舍入误差上界为

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

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 不宜太大，也不宜太小。其最优步长应为

$$h_{\text{opt}} = \sqrt[3]{3\varepsilon / M}$$

注: 中心公式及其加速方法适合用表达式表示的函数。对于列表函数, 则宜使用插值方法等导出数值求导公式。

三、插值型的求导公式

对于列表函数

$y = f(x)$:

x	x_0	x_1	x_2	\dots	x_n
y	y_0	y_1	y_2	\dots	y_n

插值多项式 $y = P_n(x)$ 作为它的近似, 我们取 $P'_n(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似值, 建立的数值公式

$$f'(x) \approx P'_n(x) \quad (48)$$

统称**插值型的求导公式**。

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^n (x - x_k)$$

依据插值余项定理, 求导公式(48)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 $\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$.



我们限定:求某个节点 x_k 上的导数值, 上面的第二项变为零, 这时有余项公式

$$f'(x_k) - P'_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k) \quad (49)$$

下面我们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.



1. 两点公式

已给两节点 x_0, x_1 上的函数值 $f(x_0), f(x_1)$, 做线性插值

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

记 $x_1 - x_0 = h$, 对上式两端求导, 有 $P'_1(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$

于是有下列求导公式:

$$P'_1(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] \quad P'_1(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)]$$

而利用余项公式知, 带余项的两点公式是:

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



2. 三点公式

设已给出三节点 $x_0, x_1=x_0+h, x_2=x_0+2h$ 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 $x = x_0 + th$,
则

$$P_2(x_0 + th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$
$$P'_2(x_0 + th) = \frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)] \quad (50)$$

上式分别取 $t = 0, 1, 2$, 得到三种三点公式:

而带余项的三点求导公式如下:

$$P'_2(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)]; \quad f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi); \quad (51)$$

$$P'_2(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)]; \quad f'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi); \quad (52)$$

$$P'_2(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)]; \quad f'(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi). \quad (53)$$

公式(52)是我们所熟悉的**中点公式**。在三点公式中,它由于少用了一个函数值 $f(x_1)$ 而引人注目。



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

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

例如, 将式(50)再对 t 求导一次, 有

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

于是有

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

于是带余项的二阶三点公式如下:

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2} [f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi) \quad (54)$$

$$f''(x) - P_n''(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}''(x) + \frac{2\omega'_{n+1}(x)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} \frac{d^2}{dx^2} f^{(n+1)}(\xi)$$



例 已知函数 $y = e^x$ 的下列数值:

x	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y	12.1825	13.4637	14.8797	16.4446	18.1741

试用二点、三点微分公式计算 $x=2.7$ 处的一阶、二阶导数值.

本题没有明确指出用哪些点处的函数值来求 $f'(2.7)$ 和 $f''(2.7)$.因此, 随着步长 h 不同, 导数值有可能不同. 另外, 用两点函数值时, 只能求一阶导数值.

解: 方法1: 取 $h=0.1$ 时, 两点公式有两种取法当 $x_0=2.6$, $x_1=2.7$ 时,

$$\begin{aligned} f'(2.7) &\approx \frac{1}{0.1}[f(2.7)-f(2.6)] = \frac{1}{0.1}[14.8797-13.4637] \\ &= 14.1600 \end{aligned}$$

当 $x_0=2.7$, $x_1=2.8$ 时,

$$f'(2.7) \approx \frac{1}{0.1}[f(2.8)-f(2.7)] = 15.6490.$$



三点公式取 $x_0=2.6$, $x_1=2.7$, $x_2=2.8$, 得

$$f'(2.7) \approx \frac{1}{2 \times 0.1} [f(2.8) - f(2.6)] = 14.9045.$$

$$f''(2.7) \approx \frac{1}{0.1^2} [f(2.8) - 2f(2.7) + f(2.6)] = 14.8900.$$

方法2: 取 $h=0.2$ 时, 两点公式有两种取法当 $x_0=2.5$, $x_1=2.7$ 时,

$$f'(2.7) \approx \frac{1}{0.2} [f(2.7) - f(2.5)] = 13.4860$$

当 $x_0=2.7$, $x_1=2.9$ 时,

$$f'(2.7) \approx \frac{1}{0.2} [f(2.9) - f(2.7)] = 16.4720$$

三点公式取 $x_0=2.5$, $x_1=2.7$, $x_2=2.9$, 得

$$f'(2.7) \approx \frac{1}{2 \times 0.2} [f(2.9) - f(2.5)] = 14.9790.$$

$$f''(2.7) \approx \frac{1}{0.2^2} [f(2.9) - 2f(2.7) + f(2.5)] = 14.9300.$$



注： $f'(2.7)$ 和 $f''(2.7)$ 的真值都是 **14.87973...**，上面的计算表明：

- 1) 当使用两点公式时，应取步长较小的函数值；
- 2) 一般情况下，同样步长的两点公式没有三点公式准确，步长越小越精确，但如果高阶导数无界或舍入误差超过截断误差时，这个结论就不一定对了。

附注：与积分相比，数值微分比较困难。

积分描述了一个函数的整体或宏观性质，而微分则描述一个函数在一点处的斜率，这是函数的微观性质。因此积分对函数的形状在小范围内的改变不敏感。而微分却很敏感。**一个函数小的变化，容易产生相邻点的斜率的大的改变。**

由于微分这个固有的困难，所以应尽可能避免数值微分，特别是对实验获得的数据进行微分。在这种情况下，最好用最小二乘曲线拟合这种数据，然后对所得到的多项式进行微分。或用另一种方法，对该数据进行三次样条拟合，然后寻找该样条函数的微分；等等。**一般是先拟合（或逼近），再微分。**



例题选讲2.1 机械求积

例：试检验下列求积公式的代数精度 $\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{2}{3} f(\frac{1}{4}) - \frac{1}{3} f(\frac{1}{2}) + \frac{2}{3} f(\frac{3}{4})$

令 $f(x) = 1$, 左边 $= \int_0^1 1 dx = x \Big|_0^1 = 1$, 右边 $= \frac{2}{3} - \frac{1}{3} + \frac{2}{3} = 1$

令 $f(x) = x$, 左边 $= \int_0^1 x dx = \frac{1}{2} x^2 \Big|_0^1 = \frac{1}{2} (1^2 - 0^2) = \frac{1}{2}$, 右边 $= \frac{2}{3} \times \frac{1}{4} - \frac{1}{3} \times \frac{1}{2} + \frac{2}{3} \times \frac{3}{4} = \frac{1}{6} - \frac{1}{6} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$

令 $f(x) = x^2$, 左边 $= \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3} x^3 \Big|_0^1 = \frac{1}{3} (1^3 - 0^3) = \frac{1}{3}$, 右边 $= \frac{2}{3} \times \frac{1}{16} - \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} + \frac{2}{3} \times \frac{9}{16} = \frac{1}{24} - \frac{2}{24} + \frac{9}{24} = \frac{1}{3}$

令 $f(x) = x^3$, 左边 $= \int_0^1 x^3 dx = \frac{1}{4} x^4 \Big|_0^1 = \frac{1}{4} (1^4 - 0^4) = \frac{1}{4}$

右边 $= \frac{2}{3} \times \frac{1}{64} - \frac{1}{3} \times \frac{1}{8} + \frac{2}{3} \times \frac{27}{64} = \frac{1}{96} - \frac{4}{96} + \frac{27}{96} = \frac{24}{96} = \frac{1}{4}$

令 $f(x) = x^4$, 左边 $= \int_0^1 x^4 dx = \frac{1}{5} x^5 \Big|_0^1 = \frac{1}{5} (1^5 - 0^5) = \frac{1}{5}$

右边 $= \frac{2}{3} \times \frac{1}{256} - \frac{1}{3} \times \frac{1}{16} + \frac{2}{3} \times \frac{81}{256} = \frac{1}{384} - \frac{8}{384} + \frac{81}{384} = \frac{74}{384} \neq \frac{1}{5}$

例题选讲2.2 求积公式的设计

■ 主要方法：代数精度方法

■ 要求：

所设计的公式应具有“尽可能高”的代数精度

■ 技巧：利用对称性

利用对称性可以显著地减少待定参数的数目，某些具有对称性的结构的求积公式，其代数精度可能会获得额外的好处



题一：试设计求积公式 $\int_0^1 f(x)dx \approx A_0 f(\frac{1}{4}) + A_1 f(\frac{1}{2}) + A_2 f(\frac{3}{4})$

解：令原式对于 $f=1, x, x^2$ 准确成立，可列出方程组：

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 1 \\ \frac{1}{4}A_0 + \frac{1}{2}A_1 + \frac{3}{4}A_2 = \frac{1}{2} \\ \frac{1}{16}A_0 + \frac{1}{4}A_1 + \frac{9}{16}A_2 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

用对称性
令 $A_0 = A_2$

$$\begin{cases} 2A_0 + A_1 = 1 \\ A_0 + \frac{1}{2}A_1 = \frac{1}{2} \\ \frac{5}{8}A_0 + \frac{1}{4}A_1 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

解得： $A_0 = A_2 = \frac{2}{3}, A_1 = -\frac{1}{3}$

构造的插值公式为：

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

具有3次代数精度



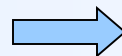
题二：试设计求积公式： $\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx h[A_{-1}f(-h) + A_0f(0) + A_1f(h)]$

解：令 $h=1$,或者作变换 $x=ht$,将原式化为：

$$\int_{-2}^2 \mathbf{f}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \mathbf{A}_{-1}\mathbf{f}(-1) + \mathbf{A}_0\mathbf{f}(0) + \mathbf{A}_1\mathbf{f}(1)]$$

用对称性
令 $\mathbf{A}_{-1}=\mathbf{A}_1$

对奇函数 $\mathbf{f}=\mathbf{x}, \mathbf{x}^3$
自然准确成立,
令 $\mathbf{f}=1, \mathbf{x}^2$ 准确成立



$$\begin{cases} 2\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_0 = 4 \\ 2\mathbf{A}_1 = \frac{16}{3} \end{cases}$$

解得： $\mathbf{A}_{-1} = \mathbf{A}_1 = \frac{8}{3}, \mathbf{A}_0 = -\frac{4}{3}$

构造的插值公式为：

$$\int_{-2h}^{2h} \mathbf{f}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx h[\frac{8}{3}\mathbf{f}(-h) - \frac{4}{3}\mathbf{f}(0) + \frac{8}{3}\mathbf{f}(h)]$$

具有3次代数精度



题三：试设计求积公式 $\int_0^1 f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + B_0 f'(0)$

解：令原式对于 $f=1, x, x^2$ 准确成立，可列出方程组：

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 1 \\ A_0 + \frac{1}{2} B_0 = \frac{1}{2} \\ A_1 = \frac{1}{3} \end{cases}$$

$$\text{解得： } A_0 = \frac{2}{3}, A_1 = \frac{1}{3}, B_0 = \frac{1}{6}$$

构造的插值公式为：

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{2}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1) + \frac{1}{6} f'(0)$$

具有2次代数精度



题四：试设计求积公式

$$\int_0^h \mathbf{f}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx h[\mathbf{a}_0\mathbf{f}(0) + \mathbf{a}_1\mathbf{f}(1)] + h^2[\mathbf{b}_0\mathbf{f}'(0) + \mathbf{b}_1\mathbf{f}'(1)]$$

解：令 $h=1$,或者作变换 $x=ht$,将原式化为：

$$\int_0^1 \mathbf{f}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \mathbf{a}_0\mathbf{f}(0) + \mathbf{a}_1\mathbf{f}(1) + \mathbf{b}_0\mathbf{f}'(0) + \mathbf{b}_1\mathbf{f}'(1)$$

令原式对于 $f=1, x, x^2, x^3$ 准确成立，可列出方程组：

$$\text{解得： } \mathbf{a}_0 = \mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}, \mathbf{b}_0 = -\mathbf{b}_1 = \frac{1}{12}$$

构造的插值公式为：

$$\int_0^h \mathbf{f}(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx \frac{h}{2}[\mathbf{f}(0) + \mathbf{f}(h)] + \frac{h^2}{12}[\mathbf{f}'(0) - \mathbf{f}'(h)]$$

具有3次代数精度



题五：试设计求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx$

$$A_0 f(A) + A_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + A_2 f(b) + B_0 f'(a) + B_1 f'\left(\frac{a+b}{2}\right) + B_2 f'(b)$$

解：引进变换 $x = (b+a)/2 + (b-a)t/2$, 将原式化为：

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1) + B_0 f'(-1) + B_1 f'(0) + B_2 f'(1)$$

利用对称性：

再令原式对于 $f=1, x^2, x^4$ 准确成立，可列出方程组：

$$\text{解得： } A_0 = A_2 = \frac{7}{15}, A_1 = \frac{16}{15}, B_0 = -B_2 = \frac{1}{15}, B_1 = 0$$

构造的插值公式为 $\int_a^b f(x)dx \approx$

$$\frac{b-a}{30} \left[7f(a) + 16f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 7f(b) \right] + \frac{(b-a)^2}{60} [f'(a) - f'(b)]$$

$$\begin{cases} 2A_0 + A_1 = 2 \\ 2A_0 - 4B_0 = \frac{2}{3} \\ 2A_0 - 8B_0 = \frac{2}{5} \end{cases}$$

具有5次代数精度



题6: 试设计求积公式 $\int_{-h}^h f(x)dx \approx A_0 f(-h) + A_1 f(x_1)$

解: 有一未知求积节点, 令原式对于 $f=1, x, x^2$ 准确成立, 可列出方程组:

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2h \\ -hA_0 + x_1A_1 = 0 \\ h^2A_0 + x_1^2A_1 = \frac{2}{3}h^3 \end{cases} \quad \text{解得: } A_0 = \frac{h}{2}, A_1 = \frac{3}{2}h, x_1 = \frac{h}{3}$$

构造的插值公式为:

$$\int_{-h}^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}f(-h) + \frac{3}{2}hf\left(\frac{h}{3}\right)$$

具有2次代数精度



题7: 试设计求积公式 $\int_0^1 f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(1)$

解: 令原式对于 $f=1, x, x^2, x^3$ 准确成立, 可列出方程组:

考虑求积公式的内在
对称性, 令

$$x_1 = 1/2, A_0 = A_2$$

可列出方程组:

$$\text{解得: } A_0 = A_2 = \frac{1}{6}, A_1 = \frac{2}{3}h$$

构造的插值公式为:

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{6} [f(0) + 4f(\frac{1}{2}) + f(1)]$$

$$\begin{cases} 2A_0 + A_1 = 1 \\ A_0 + \frac{1}{2}A_1 = \frac{1}{2} \\ A_0 + \frac{1}{4}A_1 = \frac{1}{3} \\ A_0 + \frac{1}{8}A_1 = \frac{1}{4} \end{cases}$$

具有3次代数精度



题8: 试设计求积公式 $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A[f(x_0) + f(x_1) + f(x_2)]$, $x_0 < x_1 < x_2$

解: 考虑求积公式的内在对称性, 令 $x_0 = -x_2, x_1 = 0$, 原式可化为:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A[f(x_0) + f(0) + f(-x_0)]$$

对于奇函数 $f=x, x^3, x^5$ 均准确成立, 再令 $f=1$ 准确成立, 可列出方程组:

$$3A = 2 \quad \text{解得: } A = \frac{2}{3}$$

再令 $f=x^2$ 准确成立, 有

$$\text{解得: } x_2 = -x_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{2}{3} (2x_0^2) = \frac{2}{3}$$

构造的插值公式为:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{2}{3} \left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right) + f(0) + f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right]$$

具有3次代数精度



例题选讲2.3 高斯求积公式

题1 利用代数精度设计如下形式的的一点高斯公式

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

解：令原式对于 $f = 1, x$ 准确成立，

可列出方程：

$$\begin{cases} A_0 = 2 \\ A_0 x_0 = 0 \end{cases}$$

解得： $A_0 = 2, x_0 = 0,$

∴ 一点高斯公式为：

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



■ 题2 利用代数精度设计如下形式的的两点高斯公式

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

解 由对称性原理令 $A_0 = A_1, x_0 = -x_1$, 则所有设计的求积公式具

有形式

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

由于它对于 $f = x, x^3$ 自然准确, 故对称性原理是正确的。再令它对于 $f = 1, x^2$ 准确成立, 可列方程组

$$\begin{cases} 2A_0 = 2 \\ 2A_0 x_0^2 = \frac{2}{3} \end{cases}$$

据此知 $A_0 = 1, x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, 因而有两点高斯公式

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



■ 题3 利用代数精度设计如下形式的三点高斯公式

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

解 对称性原理令 $A_0 = A_2, x_0 = -x_2, x_1 = 0$, 则所要设计的求积公式具有形式

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx A_0 [f(x_0) + f(-x_0)] + A_1 f(0)$$

由于它对于 $f = x, x^3, x^5$ 自然准确, 故对称性原理是正确的。再

令它对 $f = 1, x^2, x^4$ 准确的成立, 可列出方程



$$\begin{cases} 2A_0 + A_1 = 2 \\ 2A_0 x_0^2 = \frac{2}{3} \\ 2A_0 x_0^4 = \frac{2}{5} \end{cases}$$

将其中第 2 与第 3 两式相除，即可定出 x_0 ，从而有

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, A_0 = \frac{5}{9}, A_1 = \frac{8}{9}$$

因而有三点高期公式

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



题4 套用三点高斯公式计算积分

$$I = \int_1^3 \frac{1}{x} dx$$

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

解：作变换 $x = 2 + t$ 将积分区间变到 $[-1, 1]$,

$I = \int_{-1}^1 \frac{1}{2+t} dt$, 然后套用三点高斯公式:

$$I = \int_{-1}^1 \frac{1}{2+t} dt \approx \frac{5}{9} \times \frac{1}{2 - \sqrt{\frac{3}{5}}} + \frac{8}{9} \times \frac{1}{2} + \frac{5}{9} \times \frac{1}{2 + \sqrt{\frac{3}{5}}}$$



题5 证明下列求积公式具有5阶代数精度

$$\int_1^3 f(x) \approx \frac{5}{9} \times f(2 - \sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9} f(2) + \frac{5}{9} \times f(2 + \sqrt{\frac{3}{5}})$$

证：这个公式有 3个节点 $x_0 = 2 - \sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 2, x_2 = 2 + \sqrt{\frac{3}{5}}$,

为要使它具有 5阶精度，它必须是高斯 公式：

而它的三个系数 $\frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{5}{9}$ ，确实是高斯公式的求积 系数

引进变换 $x = t + 2$ ，可将公式变换为：

$$I = \int_{-1}^1 f(t) dt \approx \frac{5}{9} \times f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9} \times f(0) + \frac{5}{9} \times f(\sqrt{\frac{3}{5}})$$

可见 3个节点确实是高斯点



例题选讲 2.4 龙贝格加速算法

题1: 证明梯形公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$ 具有一阶精度

证: 梯形公式对于 $f = 1, x$ 准确成立,

当 $f = x^2$ 时, 左边 $= \frac{1}{3}(b^3 - a^3)$

右边 $= \frac{b-a}{2}[a^2 + b^2] \neq$ 左边

\therefore 梯形公式具有一阶精度



■ 验证辛普森公式和柯特思公式分别具有3阶精度和5阶精度

证：作变换 $x = \frac{b+a}{2} + t \frac{b-a}{2}$ ，则辛普森公式和柯特斯公式化为：

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

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \frac{1}{45} [7f(-1) + 32f(-\frac{1}{2}) + 12f(0) + 32f(\frac{1}{2}) + 7f(1)]$$

运用对称性：

辛普森公式对于 $f = x, x^3$ 准确成立

柯特斯公式对于 $f = x, x^3, x^5$ 准确成立



例题选讲2.5 数值微分

题1: 证明下列数值微分公式具有4阶代数精度

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{12h} [f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)]$$

证: 设 $x_0 = 0, h = 1$, 或者作变换 $x = x_0 + th$,

$$f'(0) \approx \frac{1}{12} [f(-2) - 8f(-1) + 8f(1) - f(2)]$$

由对称性: 上式对于偶函数 $f = 1, x^2, x^4$, 准确成立

再用直接验证方法, 验证对于 $f = x, x^3$, 也准确成立,

但对于 $f = x^5$ 不成立, 所以, 上式具有4阶精度



题2: 验证下列数值微分公式是插值型的

$$f'(a) \approx \frac{1}{6h} [-11f(a) + 18f(a+h) - 9f(a+2h) + 2f(a+3h)]$$

证: 令 $a = 0, h = 1$, 或者作变换 $x = a + th$, 将原式化为 :

$$f'(0) \approx \frac{1}{6} [-11f(0) + 18f(1) - 9f(2) + 2f(3)]$$

设以 $x = 0, 1, 2, 3$ 为节点构造拉格朗日插值多项式

$$p(x) = l_0(x)f(0) + l_1(x)f(1) + l_2(x)f(2) + l_3(x)f(3)$$

$$l_0(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)} = -\frac{1}{6}(x^3 - 6x^2 + 11x - 6)$$

$$l_0'(0) = -\frac{1}{6}\left(\frac{1}{3}x^2 - 3x + 11\right) = -\frac{11}{6}$$

$$\text{同理: } l_1'(0) = \frac{18}{6}, \quad l_2'(0) = -\frac{9}{6}, \quad l_3'(0) = \frac{2}{6}$$

$$\Rightarrow p'(0) = \frac{1}{6} [-11f(0) + 18f(1) - 9f(2) + 2f(3)] \approx f'(0)$$

\therefore 该公式是插值型的



题3: 验证数值微分公式: $f'(x_0) \approx \frac{1}{12h^2} [-f(x_0 - 2h) + 16f(x_0 - h) - 30f(x_0) + 16f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)]$ 具有5阶代数精度。

证: 令 $x_0 = 0, h = 1$, 或作变换 $x = x_0 + th$, 可得:

$$f''(0) \approx \frac{1}{12} [-f(-2) + 16f(-1) - 30f(0) + 16f(1) - f(2)]$$

由对称性: 上式对于奇函数 $f = x, x^3, x^5$, 准确成立

再通过直接验证的方法知:

其对于 $f = 1, x^2, x^4$, 准确成立, 但对于 $f = x^6$ 不成立

\Rightarrow 该式具有5阶代数精度



习题二

2. 试判定下列求积公式的代数精度: $\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{3}{4}f(\frac{1}{3}) + \frac{1}{4}f(1)$

解: 直接验证:

当 $f = 1$ 时, 左边 = 1, 右边 = 1, 准确成立

当 $f = x$ 时, 左边 = $\frac{1}{2}x^2 \Big|_0^1 = \frac{1}{2}$, 右边 = $\frac{3}{4} \times \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \times 1 = \frac{1}{2}$, 准确成立

当 $f = x^2$ 时, 左边 = $\frac{1}{3}x^3 \Big|_0^1 = \frac{1}{3}$, 右边 = $\frac{3}{4} \times \frac{1}{9} + \frac{1}{4} \times 1 = \frac{1}{3}$, 准确成立

当 $f = x^3$ 时, 左边 = $\frac{1}{4}x^4 \Big|_0^1 = \frac{1}{4}$, 右边 = $\frac{3}{4} \times \frac{1}{27} + \frac{1}{4} \times 1 = \frac{5}{18}$, 不成立

\therefore 具有2阶代数精度



3.确定下列求积公式中的待定参数,使其代数精度尽量的高,并指明求积公式所具有的代数精度。

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

解:

考虑对称性: 有 $A_0 = A_2$, 且上式对于奇函数 $f = x, x^3$ 准确成立
再令其对 $f = 1, x^2$ 准确, 可得方程组

$$\begin{cases} 2A_0 + A_1 = 2h \\ 2A_0 h^2 = \frac{2}{3} h^3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = A_2 = \frac{1}{3} h \\ A_1 = \frac{4}{3} h \end{cases}$$

$$\therefore \text{构造的求积公式为: } \int_{-h}^h f(x) dx \approx \frac{1}{3} h f(-h) + \frac{4}{3} h f(0) + \frac{1}{3} h f(h)$$

具有3阶精度



$$(2) \int_0^1 f(x) dx \approx A_0 f\left(\frac{1}{4}\right) + A_1 f\left(\frac{1}{2}\right) + A_2 f\left(\frac{3}{4}\right)$$

解：由对称性，令 $A_0 = A_2$ ，令原式对于 $f = 1, x, x^2$ 准确成立，

$$\begin{cases} 2A_0 + A_1 = 1 \\ A_0 + \frac{1}{2}A_1 = \frac{1}{2} \\ \frac{5}{8}A_0 + \frac{1}{4}A_1 = \frac{1}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = A_2 = \frac{2}{3} \\ A_1 = -\frac{1}{3} \end{cases}$$

插值公式为：
$$\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{2}{3} f\left(\frac{1}{4}\right) - \frac{1}{3} f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{3} f\left(\frac{3}{4}\right)$$

具有3次代数精度



练习: (3) $\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{4} f(0) + A_0 f(x_0)$

解: 令原式对于 $f = 1, x$ 准确成立, 得

$$\begin{cases} \frac{1}{4} + A_0 = 1 \\ A_0 x_0 = \frac{1}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = \frac{3}{4} \\ x_0 = \frac{2}{3} \end{cases}$$

求积公式为: $\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{4} f(0) + \frac{3}{4} f(\frac{2}{3})$

当 $f = x^2$ 时, 左边 = $\frac{1}{3} x^3 \Big|_0^1 = \frac{1}{3}$, 右边 = $\frac{3}{4} \times \frac{4}{9} = \frac{1}{3}$, 准确成立

当 $f = x^3$ 时, 左边 = $\frac{1}{4} x^4 \Big|_0^1 = \frac{1}{4}$, 右边 = $\frac{3}{4} \times \frac{8}{27} = \frac{2}{9}$, 不成立

\therefore 具有2阶代数精度



■ 4. 下列求积公式称作辛甫生3/8公式:

$$\int_0^3 f(x) dx \approx \frac{3}{8} [f(0) + 3f(1) + 3f(2) + f(3)]$$

试判定这一求积公式的代数精度

解: 当 $f = 1$ 时, 左边 = 3, 右边 = $\frac{3}{8} [1 + 3 + 3 + 1] =$ 左边, 准确成立

当 $f = x$ 时, 左边 = $\frac{9}{2}$, 右边 = $\frac{3}{8} [0 + 3 + 6 + 3] =$ 左边, 准确成立

当 $f = x^2$ 时, 左边 = 9, 右边 = $\frac{3}{8} [0 + 3 + 12 + 9] =$ 左边, 准确成立

当 $f = x^3$ 时, 左边 = $\frac{81}{4}$, 右边 = $\frac{3}{8} [0 + 3 + 24 + 27] =$ 左边, 准确成立

当 $f = x^4$ 时, 左边 = $\frac{243}{5}$, 右边 = $\frac{3}{8} [0 + 3 + 48 + 81] = \frac{99}{2} \neq$ 左边, 不成立

所以, 原式具有**3**次代数精度



题5：证明上述3/8辛普森公式是插值型的

证：设以 $x = 0, 1, 2, 3$ 为节点构造拉格朗日插值多项式

$$p(x) = l_0(x)f(0) + l_1(x)f(1) + l_2(x)f(2) + l_3(x)f(3)$$

$$l_0(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)} = -\frac{1}{6}(x^3 - 6x^2 + 11x - 6)$$

$$\int_0^3 l_0(x) dx = -\frac{1}{6} \left(\frac{1}{4} x^4 - 2x^3 + \frac{11}{2} x^2 - 6x \right) \Big|_0^3$$

$$= -\frac{1}{6} \left[\frac{81}{4} - 54 + \frac{99}{2} - 18 \right] = -\frac{1}{6} \times \left(-\frac{9}{4} \right) = \frac{3}{8}$$

$$\text{同理: } \int_0^3 l_1(x) dx = \frac{9}{8}, \int_0^3 l_2(x) dx = \frac{9}{8}, \int_0^3 l_3(x) dx = \frac{3}{8}$$

∴ 该公式是插值型的



16. 验证求积公式是三点高斯公式:

$$\int_1^3 f(x) dx \approx \frac{5}{9} f\left(2 - \sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(2) + \frac{5}{9} f\left(2 + \sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

证: 作变换, $x = 2 + t$, 将原式化为:

$$\int_{-1}^1 f(2 + t) dt \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

$-\sqrt{\frac{3}{5}}, 0, \sqrt{\frac{3}{5}}$ 为高斯点, 所以, 原式 为三点高斯公式



本章要点:

- 1、掌握求积公式的设计方法
- 2、学会判断求积公式的代数精度
- 3、学会运用求积公式的对称性
- 4、熟练掌握梯形公式、辛普森公式、柯特斯公式
- 5、会使用复化求积法解决问题
- 6、掌握龙贝格算法
- 7、学会用高斯公式的特性解决问题（如代数精度）
- （掌握高斯一点、两点、三点高斯公式，并能用它们来判断一个求积公式是否高斯公式）

