第六章 数值微分与数值积分

§6.1 引言

§6.2 数值微分公式

§6.3 Newton Cotes求积公式

§6.4 复化求积法

§6.5 Romberg求积法

§6.6 Gauss型求积公式

§6.1 引言

由积分学基本定理知 $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$

但应用中常碰到如下情况：

①$f(x)$的原函数无法用初等函数给出.

②虽然$f(x)$的原函数能用初等函数表示,但表达式过于复杂.

③ $f(x)$用表格形式给出。

这时积分与求导都必须使用数值的方法。

§6.2 数值微分公式

重点精讲6.1
数值微分

以离散数据$(x_k,f(x_k))(k=0,1,\dots,n)$近似表达$y=f(x)$在节点$x_k$处的微分,通常称这类问题为**数值微分**。

一、Taylor展开法

根据Taylor展开式可得

$$f(x_k+h)=f(x_k)+f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(\xi_1)\quad \xi_1\in(x_k,x_k+h)$$

$$f(x_k-h)=f(x_k)-f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(\xi_2)\quad \xi_2\in(x_k-h,x_k)$$

则有：

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k+h)-f(x_k)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi_1)\qquad \xi_1\in(x_k,x_k+h)$$

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k)-f(x_k-h)}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi_2)\qquad \xi_2\in(x_k-h,x_k)$$

类似地，由

$$f(x_k+h)=f(x_k)+f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(x_k)+\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1)\qquad \xi_1\in(x_k,x_k+h)$$

$$f(x_k-h)=f(x_k)-f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(x_k)-\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2)\qquad \xi_2\in(x_k-h,x_k)$$

可得下面的中点公式：

中点公式:

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k+h)-f(x_k-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_3)$$

$$\xi_3\in(x_k-h,x_k+h)$$

展开到3阶可得:

$$f''(x_k)=\frac{f(x_k+h)-2f(x_k)+f(x_k-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_4)$$

$$\xi_4\in(x_k-h,x_k+h)$$

二、插值法

给出列表函数$y=f(x)$，可建立插值多项式$p_n(x)$，取$p_n'(x)$作为$f'(x)$的近似函数，则称$f'(x) \approx p_n'(x)$为**插值型求导公式**。

$$由\, f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \quad \xi \in [x_0, x_n]$$

$$得\, f'(x) - p_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)$$

确定节点，x_k 上的导数值，有余项

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

为讨论方便，假定所给节点是等距的。

1. 一阶两点公式

$$\begin{cases} f'(x_0) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \dfrac{hf''(\xi_1)}{2!} \\ f'(x_1) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \dfrac{h}{2}f''(\xi_2) \end{cases} \qquad \xi_1, \xi_2 \in (x_0, x_1)$$

2. 一阶三点公式

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_1)$$

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

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}\{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)\}+\frac{h^2}{3}f'''(\xi_3)$$

$$\xi_i\in(x_0,x_2)\qquad i=1,2,3$$

三、Richardson外推法

重点精讲6.2
Richardson外推法

假设利用某种数值方法得到某一量S与步长h有关的近似值 $S^*(h)$ ，截断误差为

$$S - S^*(h) = a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \cdots a_k h^{p_k} + \cdots$$

式中$p_1<p_2<\ldots$，系数$a_1,a_2,\ldots$非零，且p_i,a_i均是与步长h无关的常数.

用$h/2$代替上述公式中的步长h，可得

$$S - S^*\left(\frac{h}{2}\right) = a_1\left(\frac{h}{2}\right)^{p_1} + a_2\left(\frac{h}{2}\right)^{p_2} + \cdots + a_k\left(\frac{h}{2}\right)^{p_k} + \cdots$$

将上述两式进行加权平均，消去误差级数中的第一项，可得到精度更高的数值计算公式.

Richardson外推法（续）

取 $S = f'(x),\quad S^*(h) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$

根据

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

可得

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

用$h/2$代替上式中的步长h，有

$$S - S^*\left(\frac{h}{2}\right) = f'(x) - \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h} = -\frac{f'''(x)}{3!}\left(\frac{h}{2}\right)^2 - \frac{f^{(5)}(x)}{5!}\left(\frac{h}{2}\right)^4 - \cdots$$

Richardson外推法（续）

将以上两式线性组合，并消去h^2的系数得

$$f'(x) = \frac{4}{3}\frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h} - \frac{1}{3}\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^4)$$

$$= \frac{4}{3}S^*(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}S^*(h) + O(h^4)$$

这是Richardson外推算法的第一步．若有必要，还可以对上式继续进行外推运算.

Remark1：在数值微分计算中，并非步长越小精度越高。这是因为数值微分对舍入误差非常敏感，它随步长h的缩小而增大，导致计算不稳定。

Remark2：在数值微分计算中，当插值多项式收敛到函数$f(x)$时，P_n'（x）不一定收敛到$f'(x)$。

Remark3：为了避免上述问题，可以用样条插值函数的导函数来代替$f(x)$的导函数。

§ 6.3 Newton Cotes 公式

在积分区间[a,b]上取一系列点 $x_k(k=0,1,2,\cdots,n)$，设

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

用被积函数在这些点的函数值的线性组合作为积分近似值

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+E[f]=I_n+E[f]$$

其中$E[f]$称为求积公式的余项。$x_k(k=0,1,2,\cdots n)$ 称为求积节点。$A_k(k=0,1,2,\cdots n)$称为求积系数。A_k 仅与求积节点 x_k 的选取有关，而不依赖与被积函数$f(x)$的具体形式。

数值积分需研究的问题：

- 求积公式的具体构造；
- 求积公式的精确程度衡量标准；
- 求积公式的误差估计。

一、插值型求积公式

寻找一个足够精度的简单函数$p(x)$代替$f(x)$，于是有 $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$, 把$p(x)$取成插值多项式，则可得到插值型求积公式。

设给定节点 $a \le x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$

并已知这些节点上的函数值 $f(x_k)$ $(k = 0,1,\cdots,n)$

插值型求积公式（续）

由 $f(x)=\sum_{k=0}^{n} l_k(x)f(x_k)+\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x)f(x_k)dx+\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$$

$$=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$$

其中，系数 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)}dx$

截断误差

$$E[f]=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi)\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)dx$$

当求积系数由 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx$

所唯一确定时，所得的求积公式称为插值型求积公式。

二、Newton-Cotes求积公式

将$[a,b]$分为n等份， $h=(b-a)/n$

取节点 $x_k=a+kh$（$k=0,1,\ldots,n$）

由Lagrange插值公式，可得

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}dx$$

系数 A_k 可以进一步表示：

$$\because x_k = a + kh \quad (k = 0,1,\cdots,n)$$

令$x=a+th$即有 $dx=hdt$ $[a,b]\leftrightarrow[0,n]$

$$x - x_k = (t-k)h$$

故$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n) = h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n)$

$$\omega'_{n+1}(x_k) = (x_k - x_0)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)$$

$$= h^n k(k-1)\cdots 1\cdot(-1)(-2)\cdots(-(n-k))$$

$$= h^n k!(-1)^{n-k}(n-k)!$$

故

$$A_k=\int_0^n \frac{h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n)}{(t-k)h\cdot h^n k!(-1)^{n-k}(n-k)!}\cdot h dt$$

$$=\frac{(-1)^{n-k}h}{k!(n-k)!}\int_0^n t(t-1)\cdots[t-(k-1)][t-(k+1)]\cdots(t-n)dt$$

$$=(b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)dt$$

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

故求积公式可写为

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f(a+kh)$$

其中 $c_k^{(n)}$ 称为柯特斯系数，上式称Newton-Cotes公式。

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

称为Newton-Cotes公式的截断误差。

当n=1时，

$$c_0^{(1)} = \frac{(-1)^{1-0}}{1\cdot 1!\cdot 0!}\int_0^1 (t-1)dt = (-1)\times\frac{(t-1)^2}{2}\Big|_0^1 = \frac{1}{2}$$

$$c_1^{(1)} = \frac{(-1)^{1-1}}{1\cdot 1!\cdot 0!}\int_0^1 t\,dt = \frac{1}{2}t^2\Big|_0^1 = \frac{1}{2}$$

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

该公式称为梯形公式。

n=2可计算 得到

$$c_0^{(2)} = 1/6 \quad c_1^{(2)} = 4/6 \quad c_2^{(2)} = 1/6$$

故有$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)[\frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)]$

它称为辛浦生（Simpson）公式或抛物线公式。

n=4 Newton-Cotes公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)[\frac{7}{90}f(x_0)+\frac{32}{90}f(x_1)$$

$$+\frac{12}{90}f(x_2)+\frac{32}{90}f(x_3)+\frac{7}{90}f(x_4)]$$

其中, $x_k = a_0 + kh \quad (k=0,1,\cdots,4)$

这个公式特别称为柯特斯公式。

类似地我们可以求出n=5,6,…时的柯特斯系数，从而建立相应的求积公式。

下面我们来看一个数值算例：

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

求解

重点精讲6.4
代数精度

三、代数精度

衡量一个求积公式好坏的标准。

若某个求积公式对尽可能多的被积函数都准确成立，那么这个公式就具有比较好的使用价值。对此，有如下定义：

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

对于一切不高于m次的代数多项式准确成立，

而对于某个$m+1$次多项式并不准确成立，

则称上述求积公式具有m次代数精度。

Remark1：求积公式具有m次代数精度的充要条件是它对于 $f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$ 都能准确成立，而对于

$f(x)=x^{m+1}$不准确成立。

Remark2：梯形公式、辛浦生公式、柯特斯公式分别具有1，3，5次代数精度。

Remark3：Newton-Cotes公式是基于n+1个节点的插值公式导出的，因而其代数精度不低于n次。

Remark4：n为偶数的Newton-Cotes公式具有n+1次代数精度，n为奇数的Newton-Cotes公式具有n次代数精度。

四、Newton-Cotes求积公式的截断误差

重点精讲6.5
Newton-Cotes求积公式的截断误差

引理（广义积分中值定理）：如果$f(x),g(x)$在区间$[a,b]$连续，且$g(x)$在区间(a,b)不变号，则存在$\xi\in(a,b)$,使得$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx$

定理：若$f(x)$在$[a,b]$上有二阶连续导数，则梯形求积公式的截断误差为：

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

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

Newton-Cotes求积公式的截断误差（续）

证：由$R[f]=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx$, ξ依赖于x。

由于 $f''(\xi)$ 是倚赖于x的函数，且在$[a, b]$上连续, $(x-a)(x-b)\le 0$, 故运用积分 中值定理，在 $[a, b]$上存在一点 η, 使得：

$$\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx = f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

$$=-\frac{1}{6}f''(\eta)(b-a)^3 \quad (a<\eta<b)$$

$$\therefore E_T[f]=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

证毕

Newton-Cotes求积公式的截断误差（续）

定理：若*f(x)*在[*a*,*b*]上有四阶连续导数，则Simpson求积公式的截断误差为：

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

$$=-\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^4(\eta) \qquad a<\eta<b$$

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

Newton-Cotes求积公式的截断误差（续）

证明：由于Simpson公式的代数精度为3，为此构造次数不超过3次的多项式 $H_3(x)$ ，使满足：

$$H_3(a) = f(a) \quad H_3(b) = f(b)$$

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

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

$$f(x) = H_3(x) + \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)$$

Newton-Cotes求积公式的截断误差（续）

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

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

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

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

由于$f^{(4)}(\xi)$ 是依赖于x的函数，在$[a,b]$上连续，故 $(x-a)(x-c)^2(x-b)\le 0$, 可运用积分中值定理，在$[a,b]$上存在一点η，使

Newton-Cotes求积公式的截断误差（续）

$$c=\frac{a+b}{2}$$

$$\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-b)(x-c)^2\,dx$$

$$=f^{(4)}(\eta)\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)\,dx$$

$$E_S[f]=-\frac{1}{180}f^{(4)}(\eta)(b-a)\left(\frac{b-a}{2}\right)^4$$

$$=-\frac{1}{2880}f^{(4)}(\eta)(b-a)^5\quad (a<\eta<b)$$

证毕

Newton-Cotes求积公式的截断误差（续）

定理：若$f(x)$在$[a,b]$上有六阶连续导数，则Cotes求积公式的截断误差为：

$$E_C[f] = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

$$a < \eta < b$$

五、Newton-Cotes求积公式的稳定性和收敛性

如果 $\lim\limits_{n\to\infty}\sum\limits_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=\int_a^b f(x)dx \quad (\lim\limits_{\substack{h\to 0\\ n\to\infty}} R[f]=0)$，

其中 $h=\max\limits_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1})$，则称该求积公式是收敛的。

如果求积公式对舍入误差不敏感（误差能够控制），则称该求积公式是稳定的。

一个求积公式首先应该是收敛的，其次应该是稳定的。

Newton-Cotes求积公式的稳定性和收敛性（续）

设计算 $f(x_k)$ 时有绝对误差 ε_k ， 即 $f^*(x_k) - f(x_k) = \varepsilon_k$.

则 $$|e(I_n)| = \left|\sum_{k=0}^{n} A_k f^*(x_k) - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\right|$$

$$= \left|\sum_{k=0}^{n} A_k \varepsilon_k\right| \le \sum_{k=0}^{n} |A_k||\varepsilon_k|$$

取 $\varepsilon = \max\limits_{0\le k\le n} |\varepsilon_k|$ 若 $A_k > 0(k = 0,1,\cdots,n)$

则 $$|e(I_n)| \le \varepsilon \sum_{k=0}^{n} A_k = (b-a)\varepsilon$$

故当系数 A_k 全为正时，求积公式是稳定的。

§6.4 复化求积法

重点精讲6.6
复化求积法

当$n\le 7$时，*Newton-Cotes*系数均为正，但从n=8 开始，*Newton-Cotes*系数有正有负，这会使计算误差得不到控制，稳定性得不到保证。

因此，实际计算时，一般不采用n较大的*Newton-Cotes*公式，而是将区间$[a,b]$等分为n个小区间，其长度为$h=(b-a)/n$，在每个小区间上应用低阶的公式，然后对所有小区间上的计算结果求和，这样得出的求积公式称为复化求积公式。

一、复化梯形公式

将[a,b]等分为n个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ $k=0,1,\cdots,n-1$

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

$$=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)$$

$$=T_n+E_{T_n} \qquad \eta_k\in(x_k,x_{k+1})$$

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

当$n\to\infty$时，
$$T_n=\frac{1}{2}\left[\sum_{k=0}^{n-1}f(x_k)h+\sum_{k=1}^{n}f(x_k)h\right]\to$$
$$\frac{1}{2}\left[\int_a^b f(x)dx+\int_a^b f(x)dx\right]=\int_a^b f(x)dx$$

即T_n收敛于 $\int_a^b f(x)dx$ 。

复化梯形公式（续）

关于复化梯形公式的余项有如下定理：

定理 设$f(x)$在区间$[a,b]$上有连续的二阶导数，则复化梯形公式的截断误差为：

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

证明： $$E_{T_n} = I - T_n = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)$$

若$f''(x)$在$[a,b]$连续，设m为$f''(x)$的最小值，M为$f''(x)$的最大值，则

$$m \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \le M$$

复化梯形公式（续）

故由介值定理，一定在(a,b)有一点 η 使

$$f''(\eta)=\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)$$

$$\text{故}E_{T_n}=-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=-\frac{nh}{12}h^2f''(\eta)\qquad \eta\in(a,b)$$

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

证毕

Remark：若 $|f''(x)|\le M_2$，则有误差估计式

$$|E_{T_n}|\le\frac{b-a}{12}h^2M_2$$

二、复化Simpson公式

(将$[a,b]$ n等分，子区间长度 $h=\dfrac{b-a}{n}$).

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

$$=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}[f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})]-\frac{h^5}{2880}\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k)$$

$$=\frac{h}{6}[f(a)+4f(x_{\frac{1}{2}})+f(x_1)+f(x_1)+4f(x_{\frac{3}{2}})+f(x_2)+\cdots$$

$$+f(x_{n-1})+4f(x_{n-\frac{1}{2}})+f(b)]-\frac{h^5}{2880}\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k)$$

复化Simpson公式（续）

$$=\frac{h}{6}[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)]-\frac{h^4}{2880}\frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k)$$

$$=S_n+E_{S_n}$$

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

复化辛浦生（ Simpson ）公式 。

余项 $$E_{S_n}=I-S_n=-\frac{h^4}{2880}\frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k)$$

设在 $f^{(4)}(x)$ 在$[a,b]$上连续,设m为 $f^{(4)}(x)$ 的最小值,M为 $f^{(4)}(x)$ 的最大值,则

$$m \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k) \le M$$

故由介值定理,一定在(a,b)中有一 η 使

$$f^{(4)}(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k)$$

故：

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

例1

若取9个节点，用复化梯形公式、复化Simpson公式计算积分，其步长以及与9个节点所对应的求积系数分别是多少？

- 解：复化梯形公式：n=8，h=(b-a)/8，对应的求积系数为1、2、2、2、2、2、2、2、1。
- 复化Simpson公式：n=4，h=(b-a)/4，对应的求积系数为1、4、2、4、2、4、2、4、1。 #

例2

用积分 $\int_2^8 \frac{1}{x}dx = 2\ln 2,$ 计算ln2, 要使所得近似值具有5位有效数字。问用复化梯形公式，复化Simpson公式时，至少要取多少个节点?

解： 由 $\ln 2 = \frac{1}{2}\int_2^8 \frac{1}{x}dx$ 且 $\frac{1}{2}\int_2^8 \frac{1}{x}dx > \frac{1}{2}\int_2^8 \frac{1}{8}dx = \frac{3}{8} = 0.375$

即 $0.375 < \ln 2 < \ln e$

故 计算ln2时，要使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$,

也即计算2ln2，其误差不超过 10^{-5}。

例2（续）

（1）由$\left|E_{T_n}\right| \le \dfrac{(b-a)}{12}h^2 M_2 = \dfrac{(b-a)^3}{12n^2}M_2$

其中 $M_2 = \max\limits_{a\le x\le b}\left|f''(x)\right|$

$$\left|f'(x)\right| = \left|\frac{1}{x^2}\right| \quad \left|f''(x)\right| = \left|\frac{2}{x^3}\right| \qquad M_2 = \max_{2\le x\le 8}\left|\frac{2}{x^3}\right| = \frac{2}{2^3} = \frac{1}{4}$$

令$\left|E_{T_n}\right| \le \dfrac{(b-a)^3}{12n^2}M_2 = \dfrac{6^3}{12n^2}\times\dfrac{1}{4} \le 10^{-5}$

$$n \ge \sqrt{\frac{6^3}{12\times 4}\times 10^5} = 670.8203933....$$

故区间应取671个，节点至少应取672。

例2（续）

$$(2)\text{由}\left|E_{S_n}\right| = \left|\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta)\right| \le \frac{b-a}{2880}h^4 M_4 = \frac{(b-a)^5}{2880n^4}M_4$$

其中 $M_4 = \max\limits_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right|$ 由

$$f'(x) = \frac{-1}{x^2},\ f''(x) = \frac{2}{x^3},\ f'''(x) = \frac{-6}{x^4},\ f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}$$

$$M_4 = \max_{2\le x\le 8}\left|\frac{24}{x^5}\right| \le \left|\frac{24}{2^5}\right| = \frac{3}{4}$$

例2（续）

$$令\left|E_{S_n}\right|=\frac{(b-a)^5}{2880}\times\frac{M_4}{n^4}=\frac{6^5}{2880n^4}\times\frac{3}{4}\leq 10^{-5}$$

$$n\geq\{\frac{6^5\times 3}{2880\times 4}\times 10^5\}^{\frac{1}{4}}=\sqrt[4]{\frac{6^5\times 3\times 10}{2880\times 4}}\times 10=21.2132034$$

故区间应取22，即45个节点 。 #

例3

下面我们来看一个数值算例：

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

求解

重点精讲6.7

区间逐次分半求积法

三、区间逐次分半求积法

1.误差的事后估计法

- 复化求积公式是提高精度的一种有效方法，但在使用复化求积公式之前，必须根据复化求积公式的余项进行先验估计，以确定节点数目，从而确定合适的等分步长。因为余项表达式中包含了被积函数的导数，而估计各阶导数的最大值往往是很困难的，且估计的误差上界往往偏大。所以实际中，常常使用“事后估计误差”的方法，通过区间的逐次分半，在步长逐次分半的过程中，反复利用复化求积公式进行计算，查看相继两次计算结果的差值是否达到要求，直到所求得的积分值满足精度要求。
- 该法也称为步长自动选择的变步长求积法。

误差的事后估计法（续）

对梯形公式，假定区间分为n等份时，由公式

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

其中 $x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,n)$ 算出的积分近似值为T_n,因而有

$$I=T_n-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta_1)\qquad \eta_1\in(a,b)$$

再把各个小区间分别对分，得积分的近似值为T_{2n}，则积分值为

$$I=T_{2n}-\frac{b-a}{12}(\frac{h}{2})^2 f''(\eta_2)\qquad \eta_2\in(a,b)$$

假定$f''(x)$在$[a,b]$上变化不大，即有$f''(\eta_1)\approx f''(\eta_2)$，

$$\frac{I-T_n}{I-T_{2n}}\approx\frac{\frac{-(b-a)}{12}h^2}{\frac{-(b-a)}{12}(\frac{h}{2})^2}\approx 4$$

上式可改写为

$$I\approx T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=T_{2n}+\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)$$

计算时只需检验 $|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$ 是否满足？若不满足，则再把区间分半进行计算，直到满足要求为止 。

类似的，还可以得到下面的结论：

对于Simpson公式，假定 $f^{(4)}(x)$ 在[a,b]上变化不大，则有

$$I \approx S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) = S_{2n} + \frac{1}{4^2 - 1}(S_{2n} - S_n)$$

对于Cotes公式，假定 $f^{(6)}(x)$ 在[a,b]上变化不大，则有

$$I \approx C_{2n} + \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n) = C_{2n} + \frac{1}{4^3 - 1}(C_{2n} - C_n)$$

2.区间逐次分半的梯形公式

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

$$T_{2n} = \frac{h}{4}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{2n-1} f(x_0 + k\frac{h}{2}) + f(b)]$$

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

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

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

区间逐次分半的梯形公式（续）

据此我们得到复化梯形公式区间逐次分半时的递推计算公式：

$$\begin{cases} T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2n} = \dfrac{1}{2}T_n + \dfrac{b-a}{2n}\sum_{j=1}^{n} f\left(a+(2j-1)\dfrac{b-a}{2n}\right) \end{cases}$$

$$(n = 2^{k-1}; k = 1, 2, \cdots)$$

计算时只需检验 $|T_{2n} - T_n| < \varepsilon$ 是否满足？若不满足，则再把区间分半进行计算，直到满足要求为止 。

算例求解

§6.5 Romberg求积法

一、对低精度公式经过组合构造高精度公式

从S_n及T_{2n},T_n的计算公式可验证得到:

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

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

$$= \frac{h}{6}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) +$$

$$\cdots + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})]$$

对低精度公式经过组合构造高精度公式（续）

$$=\frac{h}{6}[2f(x_0)+4f(x_1)+4f(x_2)+4f(x_3)+\cdots+4f(x_{2n-1})+2f(x_{2n})]$$

$$-\frac{h}{6}[f(x_0)+2f(x_2)+2f(x_4)+\cdots+2f(x_{2n-2})+f(x_{2n})]$$

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

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

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

对低精度公式经过组合构造高精度公式（续）

类似地，可以证明：

$$C_n = S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) = \frac{4^2}{4^2 - 1} S_{2n} - \frac{1}{4^2 - 1} S_n \qquad （2）$$

$$R_n = C_{2n} + \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n) = \frac{4^3}{4^3 - 1} C_{2n} - \frac{1}{4^3 - 1} C_n \qquad （3）$$

这个公式（3）称为Romberg公式。

由（1）、（2）、（3）组成的方法称为Romberg算法。

序列$\{T_n\},\{S_n\},\{C_n\}$和$\{R_n\}$分别称为梯形序列，Simpson序列，Cotes序列和Romberg序列。

对低精度公式经过组合构造高精度公式（续）

上述用若干个积分近似值推算出更为精确的积分近似值的方法，称为外推算法。得到Romberg序列后还可以继续外推，得到新的求积序列，称为Richardson外推算法。但由于在新的求积序列中，其线性组合的系数分别为：

$$\frac{4^m}{4^m-1}\approx 1 \qquad \frac{1}{4^m-1}\approx 0$$

因此，新的求积序列与前一个序列结果相差不大，故通常外推到Romberg序列为止。

可以证明，梯形序列，Simpson序列，Cotes序列和Romberg序列均收敛到积分值，且每次外推可使误差阶提高二阶。

二、Romberg算法的实现

T数表：

区间等分数 $n=2^k$	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
1	T_1			
2	T_2	S_1		
4	T_4	S_2	C_1	
8	T_8	S_4	C_2	R_1
16	T_{16}	S_8	C_4	R_2
32	T_{32}	S_{16}	C_8	R_4
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Romberg算法的实现（续）

对上面的T数表作计算，一直到Romberg序列中前后两项之差的绝对值不超过给定的误差限为止。

Remark:Romberg算法具有占用内存少，精确度高的优点，是实际中最常用的算法之一。

算例求解

§6.6 Gauss型求积公式

问题： 若求积公式

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

中含有2n+2个待定参数 $x_k, A_k \quad (k=0,1,2,\cdots,n)$

我们能否通过节点的选择将求积公式的代数精度从n 或者n+1提高到2n+1？

一、Gauss型求积公式

定义：把具有$n+1$个节点的具有$2n+1$次代数精确度的插值型求积公式

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

称为Gauss型求积公式，其求积节点 x_k（$k=0,1,\ldots,n$）称为Gauss点，系数A_k称为Gauss系数。

Remark：构造Gauss型求积公式的关键在于确定Gauss点，再由$n+1$个Gauss点构造基函数，从而得到Gauss系数。

定理：插值型求积公式中的节点$x_k (k=0,1,\cdots,n)$ 是Gauss点的充要条件是，在$[a,b]$上，以这些点为零点的n+1次多项式

$$\omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$$

与任意次数不超过n的多项式$P(x)$正交，即

$$\int_a^b \omega_{n+1}(x)P(x)dx=0$$

证明: 必要性：

设 $x_k (k = 0,1,\cdots,n)$ 是Gauss点，于是对任意次数不超过n的多项式$P(x)$，

$f(x) = P(x)\omega_{n+1}(x)$的次数不超过$2n+1$。

故有

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

Gauss型求积公式（续）

充分性：

设 $\int_a^b \omega_{n+1}(x)P(x)dx = 0$ 对于任意次数不超过 $2n+1$的多项式$f(x)$, 设$\omega_{n+1}(x)$除$f(x)$的商为$p(x)$, 余项为$q(x)$。

即$f(x) = P(x)\omega_{n+1}(x) + q(x)$

其中$P(x), q(x)$的次数$\leq n$

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)dx + \int_a^b q(x)dx$$

由条件$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)dx = 0,$

所给的求积公式是插值型的，其代数精度至少为n。

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

所以求积公式至少具有2n＋1次代数精确度。对于2n+2次多项式 $f(x) = \omega_{n+1}^2(x)$ 有

$$\int_a^b f(x)dx > 0 \quad 而 \quad \sum_{k=0}^{n} A_k \omega_{n+1}^2(x_k) = 0$$

故求积公式的代数精确度是2n+1。

证毕

两条结论：

①．Gauss型求积公式一定是插值型求积公式，其系数由Gauss点唯一确定。

②．Gauss型求积公式是代数精度最高的求积公式（$2n+1$次）。

当Gauss点确定以后，Gauss系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$

即可由线性方程组
$$\begin{cases} \int_a^b dx = \sum_{k=0}^{n} A_k \\ \int_a^b x dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k \\ \vdots \\ \int_a^b x^n dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^n \end{cases}$$
确定.

也可以由插值型求积公式中的系数公式 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ 确定。

二、Gauss-Legendre求积公式

$n+1$次Legendre多项式为：

$$P_{n+1}(x)=\frac{1}{(n+1)!2^{n+1}}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(x^2-1)^{n+1}\quad (x\in[-1,1];n=0,1,2,\cdots)$$

其性质有

•1、n+1次Legendre多项式与任意不超过n次的多项式在区间[-1,1]上正交。

•2、n+1次Legendre多项式的n+1个零点都在区间[-1,1]内。

Gauss-Legendre求积公式（续）

例：一次Legendre多项式及其零点为：

$$P_1(x) = x, \qquad x_0 = 0$$

二次Legendre多项式及其零点为：

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \qquad x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

三次Legendre多项式及其零点为：

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad x_0 = -\sqrt{0.6}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{0.6}$$

Gauss-Legendre求积公式（续）

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

$x_k(k=0,1,\cdots,n)$为$P_{n+1}(x)=\dfrac{1}{(n+1)!2^{n+1}}\dfrac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(x^2-1)^{n+1}$的零点 。

$$A_k=\frac{2}{(1-x_k^2)\left[P'_{n+1}(x_k)\right]^2}\quad(k=0,1,\cdots,n)$$

一点Gauss-Legendre求积公式为：

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

两点Gauss-Legendre求积公式为：

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

三点Gauss-Legendre求积公式为：

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

实际上我们可以给出任意次Gauss-Legendre求积公式在任意区间上的节点与系数，从而得到任意区间上的Gauss-Legendre求积公式。

事实上，作变换 $x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t$

即可将区间[a,b]变换到[-1,1]上：

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t\right)dt = \int_{-1}^{1} \varphi(t)dt$$

三、Gauss型求积公式的截断误差及稳定性

定理:

设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 内只有2n+2阶导数，则

Gauss型求积公式的余项为:

$$R[f]=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx \quad \xi\in(a,\ b)$$

证明:

设$H_{2n+1}(x)$为满足$\begin{cases} H_{2n+1}(x_k)=f(x_k) \\ H_{2n+1}'(x_k)=f'(x_k) \end{cases}$ $(k=0,1,\cdots,n)$

的Hermite插值多项式，则 $H_{2n+1}(x)$的次数$\leq 2n+1$。

Gauss型求积公式的截断误差（续）

且$f(x)-H_{2n+1}(x)=\dfrac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\ \xi\in(a，\ b)$

由于Gauss型求积公式的代数精度为2n+1，故

$$R[f]=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)\quad =\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k H_{2n+1}(x_k)$$

$$=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b H_{2n+1}(x)dx\ =\int_a^b \frac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)dx$$

$$=\frac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega_{n+1}^2(x)dx \qquad \xi\in(a,b)$$

证毕

Gauss型求积公式的截断误差（续）

Gauss型求积公式具有代数精度高、且总是收敛、稳定的优点。但当求积节点数增加时，前面的函数值不能在后面利用。因此，有时也可以将区间分化成若干个小区间，在每个小区间上应用低阶的Gauss型求积公式，即复化Gauss求积公式。