第五章 数值微分与数值积分

在科学和工程技术问题中,经常要计算一些微分或积分, 它们的精确值无法算出或计算量太大,只能用数值方法给出 其近似值。本章介绍一些实用的数值微分、数值积分方法等。

§1 数值微分

根据函数在一些离散点上的函数值, 求该函数导数的近似值称为数值微分。

1.1 利用插值多项式构造数值微分公式

● 插值函数法

设 $P_n(x)$ 是f(x)的n次插值多项式,在插值区间[a,b]内,

一种直观的数值微分公式是:

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x), \ 1 \le k \le n, a \le x \le b$$
 (5.2)

称为**插值型求导公式**。

● 误差分析

由插值余项公式:

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

得**插值型求导公式余项**为 (k=1 时):

$$f'(x) - P'_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi)$$
 (5.3)

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

由此可知,**即使** $R_n(x)$ **比较小,** $f'(x) - P'_n(x)$ **也可能很大**。 当 $x = x_k$ 时,得**在插值结点处的插值型求导公式余项**为:

$$f'(x_k) - P'_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k)$$
 (5.5)

● 等距结点处的数值微分公式

(1) 两点公式

设 $x_0 < x_1$,则

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

于是

$$f'(x) \approx P_1'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}, \quad x_0 \le x \le x_1$$

其中 $h = x_1 - x_0$ 。

得到求导的两点公式:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}$$

$$f'(x_1) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}$$
(5.6)

由导数余项公式知,两点公式的余项为:

$$f'(x_0) - P_1'(x_0) = -\frac{h}{2} f''(\xi_0)$$

$$f'(x_1) - P_1'(x_1) = \frac{h}{2} f''(\xi_1), \quad x_0 < \xi_0, \xi_1 < x_1$$
(5.7)

(2) 三点公式

作 f(x) 关于 $x_0 < x_1 < x_2$ 三点的二次 Lagrange 插值多项式 $P_2(x)$ (其中 $x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$)

$$P_{2}(x) = \frac{(x - x_{1})(x - x_{2})}{(x_{0} - x_{1})(x_{0} - x_{2})} f(x_{0}) + \frac{(x - x_{0})(x - x_{2})}{(x_{1} - x_{0})(x_{1} - x_{2})} f(x_{1})$$

$$+ \frac{(x - x_{0})(x - x_{1})}{(x_{2} - x_{0})(x_{2} - x_{1})} f(x_{2})$$

两边关于x求导,得

$$f'(x) \approx P_2'(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2} f(x_0)$$
$$-\frac{2x - x_0 - x_2}{h^2} f(x_1) + \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2} f(x_2)$$

得到求导的三点公式:

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h} \\ f'(x_1) \approx \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} \\ f'(x_2) \approx \frac{f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)}{2h} \end{cases}$$
 (5.8)

余项为:

$$\begin{cases} f'(x_0) - P_2'(x_0) = \frac{h^2}{3} f'''(\xi_0) \\ f'(x_1) - P_2'(x_1) = -\frac{h^2}{6} f'''(\xi_1), & x_0 \le \xi_0, \xi_1, \xi_2 \le x_2 \\ f'(x_2) - P_2'(x_2) = \frac{h^2}{3} f'''(\xi_2) \end{cases}$$
 (5.9)

二阶数值微分公式为:

$$f''(x_i) \approx P_2''(x_i) = \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2}, i = 0,1,2$$
 (5.10)

注: 其余项见教材 p.118, (5.11)。

 χ

● 稳定性: 从数值微分公式及其余项来看,似乎h愈小精度愈高,但实际计算中并不这样简单。

例1
$$f(x) = e^x$$
, 给定数据如下表:

 0
 ...
 0.90
 ...
 0.99
 1.00
 1.01
 ...
 1.10
 2

 1.000
 ...
 2.460
 ...
 2.691
 2.718
 2.746
 ...
 3.004
 7.739

表1 数据表

现在用数值微分公式 (5.8) 来计算 f'(1) 的近似值,对几种不同的步长,计算结果见表 2:

h	f'(1) 的近似值	误差
1	3.195	0.477
0.1	2.72	0.002
0.01	2.75	0.032

表 2 数值微分近似值

从表 2 可见,当步长h 由 1 减小到 0.1 时,误差有了明显的改善,但当步长h 由 0.1 减小到 0.01 时,误差反而有所增加。

问题在于:在实际计算中,截断误差只是误差的一部分, 还有舍入误差存在。因为数值微分计算对舍入误差非常敏感,它随h的减小而增大,即计算的不稳定性。 假设用数值微分公式 (5.8) 计算 $f(x_0+h)$, $f(x_0-h)$ 有舍入误差 $e(x_0+h)$, $e(x_0-h)$, 即

$$\begin{cases} f(x_0 + h) = \tilde{f}(x_0 + h) + e(x_0 + h) \\ f(x_0 - h) = \tilde{f}(x_0 - h) + e(x_0 - h) \end{cases}$$

则近似的总误差

$$f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 - h)}{2h} = \frac{e(x_0 + h) - e(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$

由舍入误差和截断误差组成。设

$$|e(x_0 \pm h)| \le \varepsilon$$
, $\max |f'''(x)| \le M$

则

$$|f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0 + h) - \tilde{f}(x_0 - h)}{2h}| \le \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6}M$$

由此可知,为了减小截断误差 $\frac{h^2}{6}M$,必须减小h,但相应的舍入误差 $\frac{\varepsilon}{h}$ 增大,所以需要对h 进行控制。

1.2 利用三次样条插值函数构造数值微分公式

利用函数 f(x) 的三次样条插值函数 S(x) ,来建立数值 微分公式。

$$f^{(k)} \approx S^{(k)}(x), k = 1,2,3, x \in [a,b]$$
 若记 $S'(x_i) = m_i, i = 0,1,\dots,n, h_i = x_i - x_{i-1}.$ 当 $x \in [x_{i-1}, x_i]$ 时,微分公式为:

$$\begin{cases} f'(x) \approx m_{i-1} + 2 \frac{x - x_{i-1}}{h_i} \left(\frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - m_{i-1} \right) \\ + \frac{(x - x_{i-1})(3x - x_{i-1} - x_i)}{h_i^2} \left(m_{i-1} - 2 \frac{y_i - y_i - 1}{h_i} + m_i \right) \\ f''(x) \approx \frac{2}{h_i} \left(\frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - m_{i-1} \right) \\ + \frac{6x - 5x_{i-1} - x_i}{h_i^2} \left(m_{i-1} - 2 \frac{y_i - y_i - 1}{h_i} + m_i \right) \\ f'''(x) \approx \frac{6}{h_i^2} \left(m_{i-1} - 2 \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} + m_i \right) \end{cases}$$

余项有:

(*)**定理** 若 $f(x) \in C^4[a,b]$, S(x) 是 f(x) 的一型或二型边值插值三次样条函数,则成立

$$||f^{(k)}(x) - S^{(k)}||_{\infty} \le C_{\nu} ||f^{(4)}||_{\infty} h^{(4-k)}, \quad k = 1,2,3$$

$$\not\exists \quad \exists \quad h = \max_{1 \le i \le n} h_{i}, \quad C_{0} = \frac{5}{384}, \quad C_{1} = \frac{1}{24}, \quad C_{2} = \frac{3}{8},$$

$$C_{3} = \frac{1}{2} (\beta + \beta^{-1}), \quad \beta = h / \min_{1 \le i \le n} h_{i},$$

用样条插值求数值微分也有缺点,即需要解方程组得到 m_i 或 M_i 的值,当 h_i 很小时,计算量是很大的。

例2 见教材 p.120。

§ 2 构造数值积分公式的基本方法与有关概念

数值积分是一种利用被积函数在有限个点上函数值推

算积分近似值的数值方法, 其基本形式为

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_{k} f(x_{k})$$
 (5.15)

其中 A_k , $k=0,1,\cdots,n$ 是独立于函数 f(x) 的常数, 称为**求积系** 数, 结点 x_k , $k=0,1,\cdots,n$ 称为**求积结点**。

2.1 构造数值积分公式的基本方法

● 插值型求积公式

对给定求积结点 $a \le x_0 \le x_1 < \cdots < x_n \le b$,构造求积公式的一种简单方法是利用插值多项式的准确积分作为数值积分值。 设 $L_n(x)$ 是 f(x) 关于 x_0, x_1, \cdots, x_n 的 Lagrange 插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x)$$

其中 $l_i(x)=\prod_{j=0,j\neq i}^n\frac{x-x_j}{x_i-x_j}$, $i=0,1,\cdots,n$ 为 Lagrange 基函数。得

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{a}^{b} L_{n}(x)dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) \int_{a}^{b} l_{i}(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i})$$
(5.16)

其中:

$$A_{i} = \int_{a}^{b} l_{i}(x)dx = \int_{a}^{b} \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_{i})\omega'_{n+1}(x_{i})} dx, \quad i = 0,1,\dots,n \quad (5.17)$$

称求积公式(**5.16**)为**插值型的求积公式**。

2.2 数值积分公式的余项

数值积分公式余项 $R_n(f)$ 满足:

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

● 若 $f \in C^{(n+1)}[a,b]$,则插值型求积公式余项为:

$$R_n(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) dx$$
 (5.18)

其中
$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n), \ \xi(x) \in (a,b)$$
.

2.3 数值积分公式的代数精度

如何评价误差的精度?一个自然的想法是:数值求积公式对次数尽可能高的多项式精确成立。

定义1 若数值积分公式

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_{k} f(x_{k})$$

对任意不高于m次的代数多项式都精确成立,而对 x^{m+1} 不能精确成立,则称该数值积分公式具有m次代数精度。

一个求积公式的代数精度越高,就会对次数越高的代数多项 式精确成立。

例 确定求积公式

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

解 由
$$I_i = \int_{-1}^1 x^i dx = \frac{1 - (-1)^{i+1}}{i+1} = \begin{cases} 0, & i$$
为奇数
$$\frac{2}{i+1}, & i$$
为偶数

当
$$f(x) = 1$$
, $\frac{1}{3}(1+4\times1+1) = 2 = I_0$;

$$\underline{\sharp} f(x) = x^4, \quad \frac{1}{3}(1+0+1) = \frac{2}{3} \neq \frac{2}{5} = I_4$$

从而该求积公式的代数精度为m=3。

(参见教材 p. 123, 例 3)。

对给定结点 $a \le x_0 \le x_1 < \cdots < x_n \le b$, 如何选择求积系数 A_0, \cdots, A_n , 使求积公式代数精度尽可能高, 我们有

● 数值求积公式(5.15)是插值型的当且仅当它的代数精度 $m \ge n$ 。

由此可得:

定理 1 含有 n+1 个结点的插值型数值积分公式的代数精度至少是 n 。

(*) **证明** "⇒": 假设求积公式(5.15)是插值型,则

$$\int_{a}^{b} f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_{k} f(x_{k}) = \int_{a}^{b} [f(x) - L_{n}(x)]dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} (x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_n) dx$$

假设 $f(x) \in \mathbb{C}^{n+1}[a,b]$, 从而当 f(x) 为次数 $\leq n$ 的代数多项式时必精确成立, 故有 $m \geq n$ 。

" \leftarrow ": 假设 $m \ge n$. 注意到多项式 $l_k(x)(k=0,\cdots,n)$ 的次数为n, 对 $f(x) = l_k(x)$ 数值求积精确成立,从而

$$\int_{a}^{b} l_{k}(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_{i}l_{k}(x_{i}) = A_{k} \quad (k = 0, \dots, n)$$

即其求积系数为插值型求积公式系数。

由此得到:

● 对给定求积结点 $a \le x_0 \le x_1 < \cdots < x_n \le b$,代数精度最高的求积公式是插值型求积公式。

例 求插值型求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(-\frac{1}{2}) + A_1 f(\frac{1}{2})$$

并确定其代数精度。

$$\mathbf{R} \quad x_0 = -\frac{1}{2}, x_1 = \frac{1}{2}, l_0(x) = -x + \frac{1}{2}, l_1(x) = x + \frac{1}{2}.$$

$$A_0 = \int_{-1}^{1} (-x + \frac{1}{2}) dx = 1, \ A_1 = \int_{-1}^{1} (x + \frac{1}{2}) dx = 1$$

从而求积公式为:

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

且 $m \ge 1$ 。

对
$$f(x) = x^2$$
, $f(-\frac{1}{2}) + f(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \neq \int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3}$ 从 析 $m = 1$ 。

§ 3 牛顿-科茨 (Newton-Cotes) 公式

3.1 牛顿-科茨公式(等距结点)

将[a,b] n 等分,取 $x_i = a + ih$, $h = \frac{b-a}{n}$, $i = 0,1,\cdots,n$,令 x = a + th,则求积系数为

$$A_{i} = \int_{a}^{b} l_{i}(x)dx = h \int_{0}^{n} \left(\prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{t-j}{i-j} \right) dt = (b-a)C_{i}^{(n)}$$

其中

$$C_i^{(n)} = \frac{1}{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^n (t-j) dt, i = 0, \dots, n$$
 (5.20)

我们称

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx (b-a) \sum_{i=0}^{n} C_{i}^{(n)} f(x_{i})$$
 (5.21)

为**牛顿-科茨公式**,求积系数 $C_i^{(n)}$ 独立于区间[a,b],称为**牛顿**-**科茨系数**。

表 5-2 牛顿-科茨系数

n							
1	1/2	1/2					
2	<u>1</u> 6	<u>4</u> 6	<u>1</u> 6				
3	1/8	<u>3</u> 8	<u>3</u> 8	1/8			

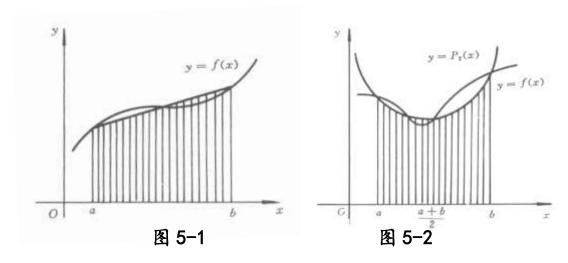
4	7 90	16 45	<u>2</u> 15	16 45	7 90				
5	<u>19</u> 288	<u>25</u> 96	25 144	25 144	25 96	19 288			
6	<u>41</u> 840	9/35	$\frac{9}{280}$	34 105	$\frac{9}{280}$	<u>9</u> 35	<u>41</u> 840		
7	751 17280	3577 17280	$\frac{1323}{17280}$	2989 17280	2989 17280	1323 17280	3577 17280	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	<u>5888</u> 28350	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	<u>5888</u> 28350	$\frac{989}{28350}$

n = 1, 2, 4 的**牛顿-科茨公式**是常用公式。

● 梯形公式

当n=1时,求积公式称为**梯形公式**,其几何意义是用直边梯形的面积 $\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$ 来近似曲边梯形面积 $\int_a^b f(x)dx$ (图 5-1),即

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$
 (5.19)



● 辛普森(Simpson)公式

当n=2时,牛顿-科茨公式称为辛普森(Simpson)公式:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$
 (5.22)

辛普森公式的几何意义: 用以插值抛物线

 $y = P_2(x)$ ($P_2(x_i) = f(x_i)$, i = 0,1,2) 为曲边的曲边梯形面积 来近似以 y = f(x) 为曲边的曲边梯形面积(如图 5-2), 因此**辛普 森求积公式也称为抛物线公式**。

● 科茨 (Cotes) 公式

当n=4时,**牛顿-科茨公式**称为**科茨公式**:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{b-a}{90} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$
(5.23)

其中
$$x_i = a + ih$$
 ($i = 0,1,2,3,4$), $h = \frac{b-a}{4}$ 。

例 试分别用梯形公式、辛普森公式和科茨公式计算积分:

$$\int_{1}^{5} \sin x dx$$

解 梯形公式:

$$\int_{1}^{5} \sin x dx \approx \frac{5-1}{2} (\sin 1 + \sin 5) \approx -0.2349$$

辛普森公式:

$$\int_{1}^{5} \sin x dx \approx \frac{5-1}{6} (\sin 1 + 4 \sin 3 + \sin 5) \approx 0.2980$$

科茨公式:

$$\int_{1}^{5} \sin x dx \approx \frac{5-1}{90} (7\sin 1 + 32\sin 2 + 12\sin 3 + 32\sin 4 + 7\sin 5) \approx 0.2566$$

原积分的准确值约为 **0.2566**, 可见三个求积公式得到的近似值与准确值之间的误差是逐渐减小的。

● 牛顿-科茨求积公式的余项

(1) 梯形求积公式

定理 2 若 $f \in C^2[a,b]$,则梯形求积公式的余项为

$$R_{T}(f) = -\frac{(b-a)^{2}}{12} f''(\eta), \eta \in [a,b]$$
 (5.24)

梯形求积公式具有1次代数精度。

证明 由插值型求积公式的余项得

$$R_{T}(f) = \int_{a}^{b} \frac{f''(\xi(x))}{2!} (x-a)(x-b)dx$$

因 $\omega_2(x) = (x-a)(x-b)$ 在 (a,b) 上不变号, 由积分中值定值得

$$R_{T}(f) = \frac{f''(\eta)}{2!} \int_{a}^{b} (x-a)(x-b) dx$$
$$= -\frac{(b-a)^{3}}{12} f''(\eta), \qquad a < \eta < b$$

对 $f(x)=1,x,x^2$ 代入梯形求积公式,可验证梯形求积公式具有 1 次代数精度。

(2) 辛普森求积公式

定理 2 若 $f \in C^4[a,b]$, 则辛普森公式的余项为

$$R_{S}(f) = -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{5} f^{(4)}(\eta), \ \eta \in [a,b] \quad (5.25)$$

辛普森公式具有3次代数精度。

(*) **证明** 可以验证. 当 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 时. 积分公式精

确成立;而当 $f(x)=x^4$ 时,积分公式不精确成立,所以辛普森公式具有3次代数精度。

令H(x)为f(x)的三次Hermite插值多项式,满足插值条件:

$$H_3(x) = f(a), \ H_3(\frac{a+b}{2}) = f(\frac{a+b}{2})$$

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

对多项式 $H_3(x)$,辛普森公式精确成立,即:

$$\int_{a}^{b} H_{3}(x)dx = \frac{b-a}{6} [H_{3}(a) + 4H_{3}(\frac{a+b}{2}) + H_{3}(b)]$$
$$= \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

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

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

利用 $\omega(x) = (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)$ 在 [a,b] 上小于等

于零,由积分中值定理得到:

$$R_{S}(f) = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_{a}^{b} (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^{2} (x-b) dx$$
$$= -\frac{1}{90} (\frac{b-a}{2})^{5} f^{(4)}(\eta), \qquad a < \eta < b$$

(3) 科茨求积公式

定理 2 若 $f \in C^{6}[a,b]$,则科茨公式的余项为

$$R_c(f) = -\frac{2(b-a)}{945} \left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \ \eta \in [a,b]$$
 (5.26)

科茨公式具有5次代数精度。

(4) 牛顿-科茨求积公式

定理 3 设 $f(x) \in C^{n+2}[a,b]$,则牛顿-科茨公式的余项:

$$R_{n}(f) = \begin{cases} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \int_{a}^{b} \omega_{n+1}(x) dx & (n 为奇数) \\ \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!} \int_{a}^{b} (x - \frac{a+b}{2}) \omega_{n+1}(x) dx & (n 为偶数) \end{cases}$$

其中 $\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$, $\xi \in (a,b)$ 。

● 当n为奇数时,牛顿-科茨公式具有n次代数精度;当n为偶数时,牛顿-科茨公式具有n+1次代数精度。

例 用 n = 1,2,3,4,5 的牛顿-科茨公式计算 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$.

解 n=1,2,3,4,5 相应的牛顿-科茨公式所得积分近似值见下表。

表	牛顿-科茨公式所得积分近似值

n	积分近似值
1	0. 9207354
2	0. 9461259
3	0. 9461109
4	0. 9460830
5	0. 9460830

积分的准确值是 0.9460831。容易发现n=2的结果比n=1有显著改进,但n=3与n=2相比较没有实质性的进展。对充分光滑的被积函数,为了既保证精度又节约时间,应尽量选用n是偶数的精形。

● ^(*) 牛顿-科茨公式的数值稳定性

求积公式(5.15)的数值稳定性是指 $f(x_i)$ 的误差对数值积分结果的影响,它是衡量数值积分公式的一个重要指标。若影响很大,就称该数值求积公式不稳定。

设 $f(x_i)$ 的近似值 $\bar{f}_i = f(x_i) + \varepsilon_i, |\varepsilon_i| \le \varepsilon, i = 0, \cdots, n$ 。由近似值 \bar{f}_i , $i = 0, \cdots, n$ 所得数值积分值为

$$\sum_{i=0}^{n} A_{i} \bar{f}_{i} = \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i}) + \sum_{i=0}^{n} A_{i} \varepsilon_{i}$$

所以,数值积分公式产生的误差为

$$e = \sum_{i=0}^{n} A_i \varepsilon_i$$

 $\left| \varepsilon_i \right| \leq \varepsilon$ 的前提下, $\left| e \right|$ 最大值可达

$$\left| e \right|_{\max} = \max_{|\varepsilon_i| \le \varepsilon} \left| \sum_{i=0}^n A_i \varepsilon_i \right| \le \varepsilon \sum_{i=0}^n \left| A_i \right|$$

对牛顿-科茨公式来说,有

$$|e|_{\max} \le \varepsilon(b-a) \sum_{i=0}^{n} |C_i^{(n)}|$$

当
$$n < 8$$
时,由 $C_i^{(n)} > 0$, $\sum_{i=0}^n C_i^{(n)} = 1$, 得

$$|e| \le \varepsilon(b-a)\sum_{i=0}^{n} |C_i^{(n)}| = \varepsilon(b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = \varepsilon(b-a)$$

由此地: 当 n < 8 时, 牛顿-科茨公式是数值稳定的。

当 $n \ge 8$ 时, $C_i^{(n)}$, $i = 0,1,\dots,n$ 有正有负, 而且有

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{i=0}^n \left|C_i^{(n)}\right| = +\infty$$

从而高阶 $(n \ge 8)$ 牛顿-科茨公式是数值不稳定的。

在实际计算中, 很少采用高阶牛顿-科茨求积公式。

3.2 复合低阶牛顿-科茨公式

为了提高数值积分精度必须增加求积结点数目。但当 n 增大时, 牛顿-科茨公式的数值稳定性变差, 故不能通过增加太多结点来提高计算精度。为此, 通常将积分区间分成若干个小区间, 在每个小区间上采用低阶求积公式(正如高次插值引起 Runge 现象, 而采用分段低次插值一样), 由此得到复合求积公式。

● 复合求积公式的原则

把求积区间[a,b]进行等距细分:

$$x_k = a + k \frac{b-a}{n}, \ k = 0, 1, \dots, n$$

在每个小区间 $[x_{k-1},x_k]$ 上用相同的"基本"求积公式计算出 $\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x) dx$ 的近似值 S_k , $k=0,1,\cdots,n$, 得到积分近似值: $\int_a^b f(x) dx \approx S_1 + S_2 + \cdots + S_n$ 。

● 常用复合求积公式

(1) 复合梯形公式

记 $h = \frac{b-a}{n}$ 在 $[x_{k-1}, x_k]$ 上采用梯形公式

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

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

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

即复合梯形求积公式为

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx - \frac{h}{2} [f(x_{k-1}) + f(x_k)] = \frac{-h^3}{12} f''(\eta_k), x_{k-1} < \eta_k < x_k$$

$$\iint_a f(x)dx - T_n = \frac{-h^3}{12} \sum_{k=1}^n f''(\eta_k)$$

定理 4 若 $f(x) \in C^2[a,b]$,则复合梯形公式(5.27)的余项

为
$$\int_{a}^{b} f(x)dx - T_{n} = -\frac{(b-a)h^{2}}{12} f''(\eta), a \le \eta \le b$$
 (5.30)

(2) 复合辛普森公式

在每个小区间 $[x_{k-1},x_k]$ 上采用辛普森公式,得**复合辛普森** 求积公式:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx S_{n} = \frac{h}{6} [f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k-1}) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}})]$$
(5.28)

定理 4 若 $f(x) \in C^{4}[a,b]$,则复合辛普森公式(**5.28**)的余

项为

$$\int_{a}^{b} f(x)dx - S_{n} = -\frac{(b-a)}{2880} h^{4} f^{(4)}(\eta), a \le \eta \le b$$
 (5.31)

注:复合科茨公式和余项见教材 p.128, (5.29) 和 (5.32)。

根据定理 4,可以判断计算时应取多大步长h才能达到需要的精度。

例 若用复合梯形公式计算积分 $\int_0^1 e^x dx$, 要求结果有 5 位有效数字, 问等分 [0,1] 区间数 n 应取多少?若用复合辛普森公式计算, n 应取多少?

M
$$f(x) = e^x$$
, $f''(x) = e^x$, $f^{(4)}(x) = e^x$

复合梯形公式的余项为

$$\left| \int_{a}^{b} f(x) dx - T_{n} \right| \le \frac{h^{2}}{12} \max_{x \in [0,1]} \left| f''(x) \right| = \frac{1}{12} e h^{2}$$

所以, 只要取

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

即

$$\lg \frac{1}{h} \ge \frac{4 + \lg e - \lg 6}{2} \approx 1.82807, \ n = \frac{1}{h} \ge 10^{1.82807} \approx 67.31$$

取 n=68 即可。所以把区间[0,1] 68 等分就能满足要求。

复合辛普森公式的余项为:

$$\left| \int_{a}^{b} f(x) dx - S_{n} \right| \le \frac{h^{4}}{2880} \max_{x \in [0,1]} \left| f^{(4)}(x) \right| = \frac{1}{2880} eh^{4}$$

所以, 只要取

$$\frac{1}{2880}eh^4 \le \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

即

$$\lg \frac{1}{h} \ge \frac{4 + \lg e - \lg 1440}{4} \approx 0.318983, \ n = \frac{1}{h} \ge 10^{0.318983} \approx 2.08$$

因此取 2n=6即可。所以把区间 $[0,1]_6$ 等分就能满足要求。

例 4 利用 9 点函数值,用复合梯形公式和复合辛普森公式 计算(参见教材 p.129):

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

解 $x_i = i/8$, $i = 0,1,\dots,8$, 经计算得:

$$T_8 = 0.9456909$$
, $S_4 = 0.9460832$, $C_2 = 0.9460829$

三种方法所用函数值个数一样多,与积分准确值 0.9460831···相比较,复合辛普森公式的结果与复合梯形公式的 结果相比,复合辛普森公式的结果要准确得多。故在实际使用中, 复合辛普森公式应用较广泛。

● (*) 复合求积公式的收敛阶

对 [a,b] 上的任何连续函数 f(x) ,都有 $\lim_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x) dx$,但对代数多项式 $f(x) = x^2$,有

$$\int_{a}^{b} f(x)dx - T_n \neq 0, \quad n = 1, 2, \dots$$

因此**复合求积公式不能用代数精度来决定其优劣**。对复合求积公式用**收敛阶**来刻画其收敛性。

定义 设 I_n 是将[a,b] n 等分, $h = \frac{b-a}{n}$,用某一基本积分 公式生成的复合求积公式,称该**复合求积公式具有收敛阶** p ,若对充分光滑的被积函数 f(x) ,有

$$\frac{\int_{a}^{b} f(x)dx - T_{n}}{h^{p}} \to C_{p} \quad (|C_{p}| < \infty), \quad h \to 0$$

其中 C_p 独立于n, 依赖于f(x)。

根据定义,复合梯形公式的收敛阶是 2(当 f'(a) = f'(b)时收剑阶大于 2);复合辛普森公式的收敛阶是 4(当 f'''(a) = f'''(b)时大于 4);复合科茨公式的收敛阶是 6。

收敛阶越高, 当区间划分加密时, 积分近似值就越精确。

3.3 误差的事后估计与步长的自动调整

若要计算 $\int_a^b f(x)dx$ 的误差不超过 \mathcal{E} ,可以用牛顿-科茨公式,复合求积公式等来实现。当 f(x) 充分光滑时,利用**余项公式**可以确定 n 或区间等分数。**不足之处**:高阶导数不易估计,且这样的估计是保守的,即估计式把误差放大到一个误差限;区间等分数事先很难确定。为此,引进逐次分半积分法。

逐次分半积分法的基本思想:在前次划分区间的基础上,再把每个小区间二等分,即将积分区间逐次分半,用前后两次计算结果之差来估计误差。缩小步长后,可以保留前一次的计算结果,以减少计算量。

(1) 复合梯形公式的逐次分半法

f(x)在区间[a,b]上的**复合梯形求积公式**为

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

其中
$$h = \frac{b-a}{n}$$
。

对该公式进行逐次分半处理:在前一次的基础上将区间对

分,分点加密一倍(步长由h变为 $\frac{h}{2}$,n变为2n),得

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

即

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

其中 $H_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^n f(a + \frac{2k-1}{2n}(b-a))$ 称为**复合中矩形求** 积公式。

分半后的复合梯形公式 T_{2n} : 只要计算 H_n 中的n个函数值的线性组合,而 T_n 是已经计算过的。

● 余项分析

记
$$I = \int_a^b f(x) dx$$

$$I - T_n \stackrel{\Delta}{=} R_{(f,T_n)} = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\eta_n), \quad a \le \eta_n \le b$$

$$I - T_{2n} \stackrel{\triangle}{=} R_{(f, T_{2n})} = -\frac{(b-a)}{12} (\frac{h}{2})^2 f''(\eta_{2n}), \quad a \le \eta_{2n} \le b$$

两式相减,得

$$T_{2n} - T_n = -\frac{(b-a)}{12} (\frac{h}{2})^2 [4f''(\eta_n) - f''(\eta_{2n})]$$

当 f''(x) 在区间 [a,b] 上连续,并假设当 n 充分大时 $f''(\eta_n) \approx f''(\eta_{2n})$,则有

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{4}(I - T_n)$$
 (5.33)

$$\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \approx R_{(f, T_{2n})} = I - T_{2n}$$
 (5.34)

所以, 若要求 $|I-T_{2n}|<\varepsilon$, 可以用

$$|T_{2n}-T_n|<3\varepsilon$$

来判断近似值是否已满足要求。若不满足,则继续对分区间,计 算 T_{4n} , . . . , 直到达到精度要求。

(2) 复合辛普森求积公式的逐次分半法

f(x)在区间[a,b]上的**复合辛普森求积公式**:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx S_{n} = \frac{H}{6} [f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k-1}) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}})]$$

或

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

其中 $h = \frac{b-a}{n}$, n 为偶数。(注: h 相当于 $\frac{1}{2}H$)

注:利用复合梯形公式 T_n 和复合中矩形公式 H_n 有

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

对该公式进行逐次分半处理:在前一次的基础上将区间对分,

分点加密一倍(步长由h变为 $\frac{h}{2}$, n变为2n), 得

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

● 余项分析

$$I - S_n \stackrel{\Delta}{=} R_{(f,S_n)} = -\frac{(b-a)H^4}{2880} f^{(4)}(\eta_n), \quad a \le \eta_n \le b$$

$$I - S_{2n} \stackrel{\triangle}{=} R_{(f, S_{2n})} = -\frac{(b-a)}{2880} (\frac{H}{2})^4 f^{(4)}(\eta_{2n}), \quad a \le \eta_{2n} \le b$$

两式相减,得

$$S_{2n} - S_n = -\frac{(b-a)}{2880} (\frac{H}{2})^4 [16f^{(4)}(\eta_n) - f^{(4)}(\eta_{2n})]$$

当 $f^{(4)}(x)$ 在区间 [a,b] 上连续, 并假设当 n 充分大时 $f^{(4)}(\eta_n) \approx f^{(4)}(\eta_{2n})$, 则有

$$\frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) \approx R_{(f, S_{2n})} = I - S_{2n}$$
 (5.35)

所以, 若要求 $|I-S_{2n}|<\varepsilon$, 可以用

$$|S_{2n} - S_n| < 15\varepsilon$$

来判断近似值是否已满足要求。若不满足,则继续对分区间,计算 S_{4n} ,...,直到达到精度要求。

注: 同理,可得到复合科茨公式的逐次分半法和余项估计(5.36).

3.4 变步长复合梯形法的递推算法

在逐次分半算法中,计算 T_{2n} : 只要计算 H_n 中的n个函数值的线性组合,而 T_n 是已经计算过的,可以避免重复计算。

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

计算 T_n 的递推公式如下:

$$\begin{cases}
T_{2^{0}} = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \\
T_{2^{k}} = \frac{1}{2} T_{2^{k-1}} + \frac{b-a}{2^{k}} \sum_{i=1}^{2^{k-1}} f(a + \frac{2i-1}{2^{k}} (b-a)) \\
k = 1, 2, \dots
\end{cases} (5.37)$$

直到 $\left|T_{2^k} - T_{2^{k-1}}\right| < \varepsilon$ 为止。

程序框图见教材图 5-4 (p. 134)。

例 5 分别用复合梯形求积公式和复合辛普森公式 (n=4) 计算积分

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

并在计算精度 $\varepsilon = 10^{-6}$ 下, 用复合梯形求积公式逐次分半法计算 I 的近似值。

解 记
$$f(x) = \frac{\sin x}{x}$$
,因为 $\lim_{x \to 0^+} \frac{\sin x}{x} = 1$,所以可以取 $f(0) = 1$ 。

把区间[0,1]8等份,函数数据如下表

表 函数表

х	0	1/8	1/4	3/8	1/2
f(x)	1	0.9973978	0.9896158	0.9767267	0.9588510
х	5/8	3/4	7/8	1	
f(x)	0.9361556	0.9088516	0.8771925	0.9414709	

由复合梯形求积公式和复合辛普森公式 (n=4), 得 $T_8=0.9456909$, $S_4=0.9460832$

应用复合梯形逐次分半公式:

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

和计算终止条件:

$$|T_{2n} - T_n| < 3 \times 10^{-6} = 0.000003$$

得k=8时,满足计算精度要求。计算结果如下表。

k	T_{2^k}	k	T_{2^k}
0	0.9207355	5	0.9460596
1	0.9397933	6	0.9460769
2	0.9445135	7	0.9460815
3	0.9456909	8	0.9460827
4	0.9459850	9	0.9460830

表 5-4 复合梯形求积公式的近似值

就如前面提到的,复合辛普森公式的结果与复合梯形公式的结果相比,复合辛普森公式的结果要准确得多(S_4 具有 6 位有效数字,而 T_8 只有 3 位有效数字,一直到 $T_{2^8}=T_{256}$ 才能达到 6 位有效数字)。故**在实际使用中,复合辛普森公式应用较广泛。**

§ 4 龙贝格(Romberg)算法

● 逐次分半积分法算法简单,但收敛速度缓慢。如何提高?

在复合梯形求积公式中,由:

$$\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \approx R_{(f, T_{2n})} = I - T_{2n}$$

可得

$$I \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$
 (5.34)

• 启发: 通过修正量 $\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$,用 $\widetilde{T}_n \triangleq \frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$ 代替 T_{2n} ,作为 I 的近似值。

事实上,我们有

$$S_n = \frac{1}{3}T_n + \frac{2}{3}H_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$
 (5.39)

得到

$$S_n = \widetilde{T}_n$$

即:通过复合梯形公式对半分区间前后产生的两个积分值 T_n, T_{2n} 的线性组合得到复合辛普森公式 S_n ,其数值结果的 精度得到显著提高。

同理推下去,可由复合辛普森公式的求积余项:

$$\frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) \approx R_{(f, S_{2n})} = I - S_{2n}$$

得

$$I \approx S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$$
 (5.35)

实际上,上式就是复合科茨公式:

$$C_n = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n \tag{5.40}$$

即:通过辛普森公式对半分区间前后产生的两个积分值

 S_n, S_{2n} 的线性组合得到复合科茨公式 C_n 。

类似地,由复合科茨公式对半分区间前后产生的两个积分值 C_n , C_{2n} 的线性组合可以得到**复合龙贝格公式** R_n :

$$R_n = \frac{64}{63} C_{2n} - \frac{1}{63} C_n \tag{5.41}$$

● 注:这种方法称为外推法。

在积分区间逐次分半过程中,利用外推算法(5.39)、(5.40)、(5.41),... 将近似值 T_n 逐步"加工"成越来越精确的近似值 S_n, C_n, R_n, \cdots ,即将收敛速度缓慢的梯形序列 $\{T_{2^k}\}$ 逐步"加工"成收敛速度越来越快的序列 $\{S_{2^k}\}, \{C_{2^k}\}, \{R_{2^k}\}, \cdots$ 。根据这种原理设计的计算积分近似值的方法称为**龙贝格算法**(属于外推法),也称数值积分**逐次分半加速收敛法**。

 $\{T_{2^k}\}, \{S_{2^k}\}, \{C_{2^k}\}, \{R_{2^k}\}$ 的计算流程和误差见表 5-5。

k	$\{T_{2^k}\}$	$\{S_{2^k}\}$	$\{C_{2^k}\}$	$\{R_{2^k}\}$	•••
0	T_1 ①	S_1 ③	C_1 (6)	R_1 (10)	
1	T_2	S_2 (5)	C_2	$R_2(14)$	
2	T_4	S_4	C_4 (13)	:	
3	T_8 7	$S_8(12)$	÷		•••
4	T_{16} (11)	:			
:	:				:
误差	$O(h^2)$	$O(h^4)$	$O(h^6)$	$O(h^8)$	

表 5-5 计算流程和误差表

例 6 用龙贝格算法重新计算积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$ 的近似值。

解 见教材 p.137。

记

$$T_{2^k}=T_0^{(k)}, S_{2^k}=T_1^{(k)}, C_{2^k}=T_2^{(k)}, R_{2^k}=T_3^{(k)}, \cdots, \quad n=2^k$$
则**龙贝格算法**如下:

$$\begin{cases}
T_0^{(0)} = \frac{b-a}{2} [f(a)+f(b)] \\
T_0^{(k)} = \frac{1}{2} T_0^{(k-1)} + \frac{b-a}{2^k} \sum_{i=1}^{2^{k-1}} f(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^k}), \quad k = 1, 2, \dots \\
T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}, \quad m = 1, 2, 3
\end{cases}$$
(5.42)

龙贝格算法是数值稳定的,且对任意连续函数,都能保证数值积分收敛到准确值。龙贝格算法程序简单,当 f(x)函数求值不太复杂时,龙贝格算法是常用的实用方法。

● (*) 外推方法

在数值计算中,经常会遇到类似情况:精确值 f(0) 是所要求的,但不能用有限计算量算出来,而对某些 h>0,f(h) 却可以很方便地计算出来。从已知的 $f(h_i)$, $i=1,2,\cdots n$, $h_i>0$ 推出f(0) 的近似值:外推方法。

定理 若 f(h) 逼近 f(0) 的余项能写成渐近形式

$$f(h) - f(0) = \sum_{k \ge 1} a_k h^{p_k}, 0 < p_1 < p_2 < \cdots$$

其中 $a_k \neq 0, k = 1, 2, \cdots$, p_k 是独立于h 的常数,则由

$$\begin{cases} f_1(h) = f(h) \\ f_{m+1}(h) = [f_m(qh) - f_m(h) \cdot q^{p_m}]/[1 - q^{p_m}] \\ m = 1, 2, \dots \end{cases}$$

定义的序列 $\{f_m(h)\}$ 随m增大以更快的速度收敛于f(0):

$$f_m(h) - f(0) = \sum_k a_{m+k}^{(m)} h^{p_{m+k}}$$

其中

$$\begin{cases} a_i^{(1)} = a_i, i \ge 1 \\ a_i^{(m+1)} = a_i^{(m)} \frac{q^{p_i} - q^{p_{mi}}}{1 - q^{p_m}}, & i \ge m + 1 \end{cases}$$

定理中的方法也称理查森(Richardson)外推法。

注:
$$f(h)-f(0) = a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + a_3 h^{p_3} + \cdots$$

$$f(qh)-f(0) = a_1 q^{p_1} h^{p_1} + a_2 q^{p_2} h^{p_2} + a_3 q^{p_3} h^{p_3} + \cdots$$

$$[f(qh)-f(0)]-q^{p_1}[f(h)-f(0)] = a_2 (q^{p_2}-q^{p_1})h^{p_2} + a_3 (q^{p_3}-q^{p_1})h^{p_3} + \cdots$$

$$\frac{f(qh)-q^{p_1}f(h)}{(1-q^{p_1})}-f(0)=a_2\frac{q^{p_2}-q^{p_1}}{(1-q^{p_1})}h^{p_2}+a_3\frac{q^{p_3}-q^{p_1}}{(1-q^{p_1})}h^{p_3}+\cdots$$

$$f_2(h) = \frac{f(qh) - q^{p_1} f(h)}{(1 - q^{p_1})}; \ a_i^{(2)} = a_i \frac{q^{p_i} - q^{p_1}}{(1 - q^{p_1})}, \ i = 2,3,\dots$$

● (*) 复合梯形公式余项的渐近展开

利用 Euler-Maclaurin 求和公式,可以证明复合梯形公式的余项渐近展开。

定理 若 $f(x) \in C^{(2m+2)}[a,b]$,则有

$$\int_{a}^{b} f(x)dx - T(h) = \sum_{l=1}^{m} \frac{B_{2l}}{(2l)!} [f^{(2l-1)}(a) - f^{(2l-1)}(b)]h^{2l} + \gamma_{m+1}$$

其中
$$B_2 = \frac{1}{6}$$
, $B_4 = -\frac{1}{30}$, $B_6 = \frac{1}{42}$, … 为贝努利(Bernoulli)数,而

$$\gamma_{m+1} = \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi)(b-a)h^{2m+2}, a < \xi < b$$

若记
$$C_l = \frac{B_{2l}}{(2l)!} [f^{(2l-1)}(a) - f^{(2l-1)}(b)], l = 1, 2, \dots, m$$

则有
$$\int_{a}^{b} f(x)dx - T(h) = \sum_{l=1}^{m} C_{l}h^{2l} + O(h^{2m+2})$$

从而可用 Richardson 外推法提高精度。

§ 5 高斯(Gauss)型求积公式简介

● 最高代数精度求积公式

插值型求积公式的代数精度由求积结点的分布所决定。结点数目固定后,结点分布不同,所达到的代数精度也不同。

问题: 能否给定结点数n之后,适当地选取结点位置和相应的系数,使求积公式

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_{k} f(x_{k})$$

具有更高或最大的代数精度?

例7 求结点 x_0 、 x_1 使插值型求积公式

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

具有尽可能高的代数精度。

解 首先有

$$A_0 = \int_{-1}^1 l_0(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \frac{2x_1}{x_1 - x_0},$$

$$A_{1} = \int_{-1}^{1} l_{1}(x) dx = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_{0}}{x_{1} - x_{0}} dx = -\frac{x_{0}}{x_{1} - x_{0}}$$

由于是插值型的,其代数精度 $m \ge 1$ 。

$$\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3}, \quad \mathcal{R} A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = -2x_1 x_0$$

故只要有 $x_0x_1 = -1/3$, 就有 $m \ge 2$ 。

进一步取
$$f(x) = x^3$$
,有

$$\int_{-1}^{1} x^3 dx = 0 , \quad \mathcal{A}_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = -2x_0 x_1 (x_0 + x_1) = \frac{2}{3} (x_0 + x_1)$$

故只要 x_0, x_1 满足

$$\begin{cases} x_0 x_1 = -\frac{1}{3} \\ x_0 + x_1 = 0 \end{cases}$$

就有 $m \ge 3$ 。

上述方程组的解为 $x_0 = -\sqrt{3}/3, x_1 = \sqrt{3}/3$, 对应的求积公

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

对于 $f(x) = x^4$, $f(-\frac{\sqrt{3}}{3}) + f(\frac{\sqrt{3}}{3}) = \frac{2}{9} \neq \int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5}$, 因此 两个结点的求积公式,代数精度最高为 m = 3。

● 对于任意求积结点 $a \le x_0 \le x_1 < \cdots < x_n \le b$,任意求积系数,带权 $\rho(x)(\ge 0)$ 的求积公式

$$\int_{a}^{b} \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_{k} f(x_{k})$$

的代数精度m必小于2n+2。这是因为对于

$$f(x) = [(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)]^2$$

有 $\int_{a}^{b} \rho(x)f(x)dx > 0$,而 $\sum_{k=0}^{n} A_{k}f(x_{k}) = 0$,f(x)是2n+2次 代数多项式,从而m < 2n+2。

在上例中, $m=2n+1=2\times 1+1=3$,这是最高能达到的代数精度了。

定义 2 (高斯型求积公式) 若一组结点 $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ 使插值型求积公式具有 2n+1 次代数精度,则称此组结点为高斯点,并称相应求积公式为带权 $\rho(x)$ 的高斯型求积公式。

定义 3 (正交多项式) 设 $\varphi_n(x)$ 是 [a,b]上首项系数 $a_n \neq 0$ 的 n 次多项式, $\rho(x)$ 为 [a,b]上的权函数 ($\rho(x) \geq 0$)。如果多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 满足关系式

$$\left(\varphi_{j},\varphi_{k}\right) = \int_{a}^{b} \rho(x) \,\varphi_{j}(x) \varphi_{k}(x) dx = \begin{cases} 0 \,, & j \neq k \\ A_{k} > 0, & j = k \end{cases}$$
 则称多项式序列 $\left\{\varphi_{n}(x)\right\}_{0}^{\infty}$ 为在 $\left[a,b\right]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交,并称
$$\varphi_{n}(x)$$
 为 $\left[a,b\right]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 \boldsymbol{n} 次正交多项式。

定理 5 设 $\{\varphi_n(x)\}_0^{\infty}$ 是在 [a,b]上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列,则 $\varphi_n(x)$ $(n \ge 1)$ 的 n 个根都是在区间 (a,b)内的单重实根。

下面**利用正交多项式的零点来构造最高代数精度**2n+1的求积公式——高斯型求积公式。

"" **引理** 若 $a < x_0 < x_1 < \dots < x_n < b$ 是 [a,b] 上关于权函数 $\rho(x)$ 的 n+1 次 正 交 多 项 式 $P_{n+1}(x)$ 的 根 (即 $P_{n+1}(x_i) = 0$, $i = 0,1,\dots,n$),则插值型求积公式

$$\int_{a}^{b} \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_{k} f(x_{k})$$

具有代数精度m = 2n + 1。

证明 设 f(x) 为任一次数 $\leq 2n+1$ 的代数多项式,则有 $f(x) = P_{n+1}(x)q(x) + r(x)$

其中q(x)和r(x)为次数 $\leq n$ 的多项式。于是

$$\int_{a}^{b} \rho(x)f(x)dx = \int_{a}^{b} \rho(x)P_{n+1}(x)q(x)dx + \int_{a}^{b} \rho(x)r(x)dx$$
$$= (P_{n+1}, q) + \int_{a}^{b} \rho(x)r(x)dx$$

其中 (P_{n+1},q) 表示 $P_{n+1}(x)$ 与q(x)在[a,b]上带权p(x)的内积。由于 $P_{n+1}(x)$ 是n+1次正交多项式,q(x)次数小于等于n,它们的内积为0;而r(x)次数不高于n,所以对于插值型求积公式

$$\int_{a}^{b} \rho(x)r(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_{k}r(x_{k}) = \sum_{k=0}^{n} A_{k}f(x_{k})$$

(注:
$$f(x_k) = P_{n+1}(x_k)q(x_k) + r(x_k) = r(x_k)$$
)
从而: $\int_a^b \rho(x)f(x)dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 对所有效数 $\leq 2n+1$ 的代

● 高斯点与正交多项式的关系

数多项式 f(x) 成立。

利用正交多项式零点作插值型求积公式,可使其代数精度达到最高。

定理 6(高斯点与正交多项式关系) x_0, x_1, \cdots, x_n 是 [a, b]上 带权 $\rho(x)$ 的高斯点 $\Leftrightarrow \omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$ 是 [a, b]上带权 $\rho(x)$ 的 n+1 次正交多项式。

(*) 证明 充分性即引理的结论,下证必要性。

任取次数 $\leq n$ 的多项式q(x)有

$$\int_{a}^{b} \rho(x)\omega_{n+1}(x)q(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_{k}\omega_{n+1}(x_{k})q(x_{k}) = 0$$

即 $(\omega_{n+1},q)=0$: 对一切次数不高于n 的代数多项式q 都成立,从而 $\omega_{n+1}(x)$ 是 [a,b] 上关于权 $\rho(x)$ 的 n+1 次正交多项式。所以,高斯点 x_0,x_1,\cdots,x_n 是n+1 次正交多项式 $\omega_{n+1}(x)$ 的根。

推论 在 [a,b]上的任一个n+1次正交多项式的零点就是高斯点。

● 高斯型求积公式的余项与稳定性

定理 7 (1) 若 $f(x) \in C^{(2n+2)}[a,b]$, 则高斯型求积公式的余项为

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

- (2) 高斯型求积公式具有良好的稳定性 (可证 $A_k > 0$);
- (3) 若 $f(x) \in C[a,b]$,那么当 $n \to \infty$,高斯型求积公式 $\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 收敛到积分值 $\int_a^b \rho(x) f(x) dx$ 。
- "证明 (1) 取 f(x) 的 Hermite 插值多项式 $H_{2n+1}(x)$,满足插值条件

$$H_{2n+1}(x_k) = f(x_k), H'_{2n+1}(x_k) = f'(x_k), \quad k = 0,1,\dots,n.$$
由
$$\int_a^b \rho(x) H_{2n+1}(x) dx = \sum_{k=0}^n A_k H(x_k) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$
得
$$R_{(f,G_{n+1})} = \int_a^b \rho(x) p[f(x) - H_{2n+1}(x)] dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} [(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)]^2 dx$$

因 $[(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)]^2 \ge 0$,由积分中值定理即可得。

(2)设 $l_k(x)$, $k=0,1,\cdots,n$ 为 Lagrange 基函数。 $l_k^2(x)\geq 0$ 为 2n 次代数多项式,于是

$$0 < \int_{a}^{b} \rho(x) l_{k}^{2}(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_{i} l_{k}^{2}(x_{i}) = A_{k}, k = 0, 1, \dots n$$

$$\pm \sum_{k=0}^{n} |A_k| = \sum_{k=0}^{n} A_k = \int_a^b \rho(x) dx$$

知,高斯型型求积公式是数值稳定的。

● 几个常用的 Gauss 型求积公式

常用高斯型型求积公式有:**高斯-勒让德求积公式**,**高斯-切比雪夫求积公式**,**高斯-拉盖尔求积公式**和**高斯-埃尔米特求**积公式等。

(1) 高斯-勒让德(Gauss-Legendre)求积公式

[-1,1] 上关于权 $\rho(x) \equiv 1$ 的高斯点和求积系数列在下表中:

n	X_k	$A_{_{\chi}}$	n	X_k	A_{x}
1	0	2		± 0.9061798459	0. 2369268851
2	± 0.5773502692	1		± 0.5384693101	0. 4786286705
				0	0. 5688888889
3	± 0.77459666920	0. 555555556		± 0.9324695142	0. 1713244924
		0. 888888889		± 0.6612093865	0. 3607615730
4	± 0.8611363116	0. 3478548451		± 0.2386191861	0. 4679139346
	± 0.3399810436	0. 62521451549			

对于一般区间 [a,b] 上带权 $\rho(x) \equiv 1$ 的高斯型求积公式, 可

通过变量变换, 由高斯-勒让德求积公式得到:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) dt$$
$$\approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^{n} A_{k} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t_{k}\right)$$

其中 A_k, t_k 为高斯-勒让德求积公式的求积系数和高斯点。

例 用二点、三点高斯型求积公式计算

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

解
$$\Rightarrow x = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}t, \quad I = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \frac{\sin(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}t)}{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}t} dt$$

用二结点、三结点计算结果列在下表中:

结点数	积分近似值
2	0. 946041136
3	0. 946083133

与牛顿-科茨公式相比较,近似值要精确得多。

例8 见教材 p. 142。

(2) 高斯-切比雪夫(Gauss-Chebyshev)求积公式

[-1,1] 上关于权函数 $\rho(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ (-1 < x < 1) 的高斯型求积公式。n 结点高斯-切比雪夫求积公式为:

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

(3) 高斯-拉盖尔(Gauss-Laguerre)求积公式

 $[0,\infty]$ 上关于权函数 $\rho(x) = e^{-x}$ 的高斯型求积公式的高斯 点和求积系数列在下表中:

n	\mathcal{X}_k	$A_{_{X}}$	n	X_k	$A_{_{\chi}}$
1	1	1		6. 2899450829	0. 0103892565
2	0. 5857864376	0.8535533906		0. 3225476896	0.6031541043
	3. 4142135624	0. 1464466091	4	1. 7457611012	0. 3574186924
3	0. 4157745568	0. 7110930099	4	4. 5366202969	0. 0388879085
	2. 2942803603	0. 2785177336		9. 3950709123	0.0005392947

(4) 高斯-埃尔米特(Gauss-Hermite)求积公式

 $[-\infty,\infty]$ 上关于权函数 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 的高斯型求积公式的高斯点和求积系数列在下表中:

n	\mathcal{X}_k	A_{x}	n	\mathcal{X}_k	$A_{_{\chi}}$
1	0	1. 7724538509	5	± 2.0201828705 ± 0.9585724646	0. 01995324206 0. 3936193232
2	± 0.707167812	0.8862269255		0	0. 9453087205
3	± 1.2247448714	0. 2954089752 1. 1816359006	G	± 2.3506049737 ± 1.3358490740	0. 0045300099 0. 1570673203
4	± 1.6506801239 ± 0.5246476233	0. 08131283545 0. 8049140900	6	± 0.4360774119	0. 7246295952

● 低阶高斯型求积公式构造方法

有时需要对一些不常用到的权函数 ho(x) 构造高斯型求积

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

当 n 较小时,除了例 7 的方法外,可用下述方法构造:

(1) 设*n* 次标准正交多项式为

$$\omega_n(x) = x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n$$

利用 $(\omega_n(x), x^k) = 0, k = 0, 1, \dots, n-1$, 建立线性方程组

$$B\begin{bmatrix} a_n \\ a_{n-1} \\ \vdots \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

其中, $B = (b_{ij})_{n \times n}$

$$\begin{cases} b_{ij} = \int_{a}^{b} \rho(x) x^{i+j-2} dx, & 1 \le i, j \le n \\ c_{i} = -\int_{a}^{b} \rho(x) x^{i+j-1} dx, & 1 \le i \le n \end{cases}$$

- (2) 解线性方程组得 a_1, a_2, \dots, a_n ;
- (3) 解 $\omega_n(x) = 0$ 得高斯点 $x_1 < x_2 < \dots < x_n$;

(4) 计算
$$A_k = \int_a^b \rho(x) \left[\prod_{\substack{i=1\\i\neq k}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \right] dx, \ k = 1, 2, \dots, n$$

例 求高斯型求积公式

$$\int_{0}^{1} \sqrt{x} f(x) dx \approx A_{1} f(x_{1}) + A_{2} f(x_{2})$$

解 设
$$\omega_2(x) = x^2 + ax + b$$
。

利用
$$(\omega_2(x), x^i) = 0$$
, $i = 0,1$, 得线性方程组:

$$(\omega_2(x),1) = \int_0^1 \sqrt{x}(x^2 + ax + b)dx = \frac{2}{7} + \frac{2}{5}a + \frac{2}{3}b = 0$$

$$(\omega_2(x), x) = \int_0^1 \sqrt{x} (x^2 + ax + b) x dx = \frac{2}{9} + \frac{2}{7}a + \frac{2}{5}b = 0$$

即

$$\begin{cases} \frac{2}{5}a + \frac{2}{3}b = -\frac{2}{7} \\ \frac{2}{7}a + \frac{2}{5}b = -\frac{2}{9} \end{cases}$$

解线性方程组得:

$$a = -\frac{10}{9}, b = \frac{5}{21}, \omega_2(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21};$$

$$\omega_2(x) = 0$$
的两个根为:

$$x_1 = 0.289949197, x_2 = 0.821161913$$

对应的求积系数为

$$A_{1} = \int_{0}^{1} \sqrt{x} \frac{x - x_{2}}{x_{1} - x_{2}} dx = \frac{2}{3} \frac{x_{2}}{x_{2} - x_{1}} - \frac{2}{5} \frac{1}{x_{2} - x_{1}} \approx 0.277555998$$

$$A_{2} = \int_{0}^{1} \sqrt{x} \frac{x - x_{1}}{x_{1} - x_{2}} dx = -\frac{2}{3} \frac{x_{1}}{x_{2} - x_{1}} + \frac{2}{5} \frac{1}{x_{2} - x_{1}} \approx 0.389110668$$

从而所求高斯型求积公式为:

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx \approx 0.277555998 f(0.289949197) + 0.389110668 f(0.821161913)$$

(*) § 6 自适应求积公式

将要计算的积分记为

$$I[a,b] = \int_{a}^{b} f(x)dx$$

同理, [a,a+h]上积分记为

$$I[a, a+h] = \int_{a}^{a+h} f(x)dx$$

在[a,a+h]上某一基本求积公式记为

$$\sum_{i=0}^{n} A_i f(a + ht_i), 0 \le t_0 < t_1 < \dots < t_n \le 1$$

设基本求积公式的代数精度为m,则有

$$I[a, a+h] - \sum_{1} [a, a+h] = C_1 f^{(m+1)}(a) h^{m+2} + O(h^{m+3})$$

其中 C_1 是独立于h和具体f的常数。将[a,a+h]等分成两个小区间,每个小区间上用上述同一基本求积公式,得 $\sum_{i,j} [a,a+h]$ 。其余项为

$$I[a,a+h] - \sum_{2} [a,a+h] = 2^{-m-1} C_1 f^{(m+1)}(a) h^{m+2} + O(h^{m+3})$$
 可得

$$|I[a,a+h] - \sum_{2} [a,a+h]|$$

$$|\sum_{n=1}^{\infty} [a,a+h]| \sum_{n=1}^{\infty} [a,a+h]|$$

$$\approx \frac{1}{2^{m+1}-1} \left| \sum_{1} [a, a+h] - \sum_{1} [a, a+h] \right|$$

记b-a=H, 设预先规定误差 ε 。m 阶代数精度基本求积公式的自适应算法从[a,b] 开始计算,分别计算出 $\sum_1[a,a+h]$ 和 $\sum_2[a,a+h]$,若 $\Big|\sum_2[a,a+h]-\sum_1[a,a+h]\Big|<(2^{m+1}-1)\varepsilon$,则作[a,a+H]左右两个区间分别计算,对于此长度为H/2的区

间,要求误差小于 $\varepsilon/2$ 。以左半区间 $[a,a+\frac{H}{2}]$ 为例,即检验

$$\left|\sum_{2}[a,a+\frac{H}{2}]-\sum_{1}[a,a+\frac{H}{2}]\right|<(2^{m+1}-1)\frac{\varepsilon}{2}$$
是否成立?若成立,

则 $[a,a+\frac{H}{2}]$ 区间计算通过,否则再将 $[a,a+\frac{H}{2}]$ 分成二个长度

H/4的二级子区间,重复上述过程。最后会得到一组划分。

$$a = a_0 < a_1 < \dots < a_n = b$$
 在每个小区间 $[a_{i-1}, a_i]$ 上都满足

$$\left| \sum_{i=1}^{n} [a_{i-1}, a_{i}] - \sum_{i=1}^{n} [a_{i-1}, a_{i}] \right| < (2^{m+1} - 1) \frac{a_{i} - a_{i-1}}{b - a} \varepsilon$$

我们取

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{2} [a_{0}, a_{1}] + \sum_{2} [a_{1}, a_{2}] + \dots + \sum_{2} [a_{n-1}, a_{n}]$$

为所求数值积分值。若取

$$I[a,b] = \frac{2^{m+1}}{2^{m+1}-1} \{ \sum_{1} [a_0, a_1] + \dots + \sum_{1} [a_{n-1}, a_n] \}$$
$$-\frac{1}{2^{m+1}-1} \{ \sum_{1} [a_0, a_1] + \dots + \sum_{1} [a_{n-1}, a_n] \}$$

结果更准确些。