第九章　数值积分与数值微分

9.1 数值积分的基本方法

在数学分析中，我们学习过微积分基本定理（**Newton-Leibniz** 公式）：

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a)$$

其中，$F(x)$ 是被积函数 $f(x)$ 的原函数。随着学习的不断深化，发现 **Newton- Leibniz** 公式有很大的局限性。

首先，遇到的是一类被积函数$f(x)$没有初等函数形式的原函数，如椭圆周长 $L=4\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{1-a^2\sin\theta}d\theta$; 积分$\int_0^1 e^{-x^2}dx$等。

其次，被积函数$f(x)$由表格形式给出，没有解析形式，也无法使用 **Newton- Leibniz** 公式;

第三，常常$f(x)$本身形式并不复杂，而原函数$F(x)$推导十分冗长，且表达式复杂，给计算带来不便。

为克服上述许多缺点，定积分计算的数值求解能弥补上述不足，并可带来令人满意的结果。

积分数值算法的思想是，首先求被积函数 $f(x)$ 的一个逼近函数 $p(x)$，即 $f(x)=p(x)+r(x)$，这里 $r(x)$ 为误差函数。如果 $p(x)$ 的积分容易求得，我们就用 $p(x)$ 的积分近似代替 $f(x)$ 的积分。

- 由定积分定义

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\|\Delta x\|\to 0}\sum_{i=0}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i$$

(1)分割 $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$

(2)近似 $\Delta s_i = f(\xi_i)\Delta x_i \quad \Delta x_i = x_i - x_{i-1}$

(3)求和 $S_n = \sum_{i=1}^{n}\Delta s_i = \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i$

(4)求极限 $\|\Delta x\| = \max_{1\le i\le n}\{|\Delta x_i|\}$

$$\lim_{\|\Delta x\|\to 0} S_n = \lim_{\|\Delta x\|\to 0}\sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i = \int_a^b f(x)dx$$

由此想到机械求积公式

$$\int_a^b f(x)dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \dots + A_n f(x_n) + R(f)$$

$$= \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R(f)$$

其中 $A_i\ (i=0,1,\cdots,n)$ 是权系数，$\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 是 $f(x_i)\ (i=0,1,\cdots,n)$ 的加权和，也是 $\int_a^b f(x)dx$ 的近似值。

我们的想法是用 $f(x)$ 的一个近似函数 $p(x)$ 来代替它，而 $p(x)$ 的积分容易求出，从而有

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

如果 $p(x)$ 是 $f(x)$ 的插值多项式，上式就是

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R(f) \qquad (9.1.1)$$

式（9.1.1）称为数值求积公式。其中 $A_k\ (k=0,1,\cdots,n)$ 称为求积系数，它仅与 $x_k\ (k=0,1,2,\cdots,n)$ 有关，与被积函数 $f(x)$ 无关，$x_k\ (k=0,1,2,\cdots,n)$ 称为求积节点，

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i) \qquad (9.1.2)$$

称为求积余项。

定义 9.1.1 若求积公式(9.1.1)对任意的次数不超过 m 的多项式 $p_m(x)$ 都能准确成立，即 $R(p_m)=0$，而至少对一个 $m+1$ 次的多项式 $p_{m+1}(x)$ 不能准确成立，即 $R(p_{m+1})\neq 0$，则称求积公式(9.1.1)具有 m 次代数精度.

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)+R(f) \qquad (9.1.1)$$

事实上，只要验证了 $R(x^k)=0\ (k=0,1,2,\cdots,m)$，而 $R(x^{m+1})\neq 0$，就知道公式(9.1.1)的代数精度为 m。

事实上，一个求积公式能对多大次数的多项式 $f(x)$ 成为准确等式，是衡量该公式的精确程度的重要指标

例 9.1. 1　求公式

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

的代数精度.

解：　因为

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

$$=\frac{1}{k+1}[b^{k+1}-a^{k+1}]-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$k=0$ 时，$f(x)\equiv 1$，有

$$R(x^k)=\frac{1}{0+1}[b-a]-\frac{b-a}{2}[1+1]=0$$

$k=1$ 时，$f(x)=x$，有

$$R(x^k)=\frac{1}{1+1}[b^2-a^2]-\frac{b-a}{2}[a+b]=0$$

而 $k=2$ 时，$f(x)=x^2$，有

$$R(x^k)=\frac{1}{2+1}[b^3-a^3]-\frac{b-a}{2}[a^2+b^2]=\frac{1}{6}(a-b)^3\neq 0$$

所以所给公式的代数精度为 1.

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

例 9．1．2：确定参数 x_1, x_2, A_1, A_2 使

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

具有最高的代数精度。

解　令 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$，代入求积公式得

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2 & (1) \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0 & (2) \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \dfrac{2}{3} & (3) \\ A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = 0 & (4) \end{cases}$$

由式(2)及式(4)可得

$$x_1^2 = x_2^2$$

由于$x_1 \neq x_2$，所以$x_1 = -x_2$。代人（2）得到$A_1 = A_2$，

再由（1）得到

$$A_1 = A_2 = 1$$

一起代人式(3)得到$x_1^2 = x_2^2 = \frac{1}{3}$。于是$x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2 & (1) \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0 & (2) \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \dfrac{2}{3} & (3) \\ A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = 0 & (4) \end{cases}$$

总之，我们得到

$$x_1=-\frac{1}{\sqrt{3}},x_2=\frac{1}{\sqrt{3}},A_1=1,A_2=1$$

于是有求积公式

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

当$f(x)=x^4$时

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5}$$

$$f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}}) = \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^4 + \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^4 = \frac{2}{9}$$

$$R(f) = \int_{-1}^{1} x^4 dx - \left[f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})\right] = \frac{2}{5} - \frac{2}{9} \neq 0$$

所以求积公式

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

具有 3 次代数精度。

例9．1．3：　求A,B,C使得

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx Af(-h)+Bf(0)+Cf(h)$$

达到最大代数精确度。并说明此公式能达到的最大代数精确度为几？

解：依次取$f(x)=1,x,x^2$得

$$\int_{-2h}^{2h} dx = A+B+C=4h \qquad (1)$$

$$\int_{-2h}^{2h} xdx = -Ah+Ch=0 \qquad (2)$$

$$\int_{-2h}^{2h} x^2dx = Ah^2+Ch^2=\frac{16}{3}h^3 \qquad (3)$$

解得： $A=C=\frac{8}{3}h$， $B=\frac{-4}{3}h$

当 $f(x)=x^3$ 时， $\int_{-2h}^{2h}x^3dx=0$，而

$$A(-h)^3+B0^3+Ch^3=0$$

当 $f(x)=x^4$ 时， $\int_{-2h}^{2h}x^4dx=\frac{64}{5}h^5$，而

$$A(-h)^4+B0^4+Ch^4=\frac{16}{3}h^5$$

最大代数精确度为 3。

例9.1.4 试确定求积公式中的系数 A, B, C

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx Af\left(-\frac{1}{2}\right)+Bf(0)+Cf\left(\frac{1}{2}\right),$$

使其代数精度尽量高，并确定代数精度。

解 $x_0=-\frac{1}{2},\ x_1=0,\ x_2=\frac{1}{2}$. 取 $f(x)=1,x,x^2$,我们有

$$\begin{cases} A+B+C=\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x=2 \\ -\frac{1}{2}A+0\times B+\frac{1}{2}C=\int_{-1}^{1}x\mathrm{d}x=0 \\ \frac{1}{4}A+0\times B+\frac{1}{4}C=\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x=\frac{2}{3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A=\frac{4}{3} \\ B=-\frac{2}{3} \\ C=\frac{4}{3} \end{cases}$$

$$\therefore \quad \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{4}{3}f\left(-\frac{1}{2}\right)-\frac{2}{3}f(0)+\frac{4}{3}f\left(\frac{1}{2}\right). \qquad (1)$$

取 $f(x)=x^3$, 左=右 $=0$; 取$f(x)=x^4$, 左 $=\frac{2}{5}$,右 $=\frac{1}{6}$,

它们不等，所以代数精度为3.

例9.1.5 试确定求积系数A, B, C 使

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx Af(-1) + Bf(0) + Cf(1)$$

具有最高的代数精度

解：分别取f(x)=1, x, x^2 使求积公式准确成立，即得如下方程组。

$$\begin{cases} A + B + C = 2 \\ -A + C = 0 \\ A + C = \dfrac{2}{3} \end{cases}$$

所得求积公式为：$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1)$

对于f(x)=1, x, x^2, x^3都准确成立，对于f(x)=x^4 就不准确了，所以此求积公式 3 次代数精度。

9.2 等距节点的求积公式

9.2.1 Newton-Cotes(牛顿—柯特斯)求积公式

一、公式的推导

设将积分区间$[a,b]$分成n等分，步长$h=\dfrac{b-a}{n}$，求积节点为

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

作$f(x)$的n次 Lagrange 插值多项式作为$f(x)$的近似

$$p_n(x)=\sum_{k=0}^{\mathrm{n}} l_k(x)f(x_k)$$

其中

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

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)$$

于是有等距节点的求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx Q_n(f) = \int_a^b p_n(x)dx$$

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

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

为计算 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx$，我们引进变换 $x=a+th$，则

$$x-x_j=(a+th)-(a+jh)=(t-j)h$$

$$x_k-x_j=(a+kh)-(a+jh)=(k-j)h$$

$$l_k(x)=l_k(a+th)=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{(t-j)h}{(k-j)h}=\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}$$

$$=\frac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{k(k-1)\cdots(k-(k-1))(k-(k+1))(k-(k+2))\cdots(k-n)}$$

$$=\frac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{[k(k-1)\cdots1][(-1)(-2)\cdots[-(n-k)]]}$$

$$=\frac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{k!(n-k)!(-1)^{n-k}}$$

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

我们引进变换 $x=a+th \qquad 0\le t\le n$，则

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx \overset{x=a+th}{=} \int_0^n l_k(a+th)hdt$$

$$=\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{k!(n-k)!(-1)^{n-k}}hdt$$

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

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

记 $C_n^{(k)}=\dfrac{A_k}{b-a}=\dfrac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n}\displaystyle\int_0^n t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)dt$

c_k称为Newton-Cotes系数，它与积分节点和积分区间无直接关系，只与插值的节点数有关。

则 $C_n^{(k)}$ 与 h 无关，可事先求出，并且

$$Q(f)=(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_n^{(k)} f(x_k) \qquad (9.2.1)$$

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

$l_k(x) \overset{x=a+th}{=} \dfrac{t(t-1)\cdots(t-k+1)(t-k-1)\cdots(t-n)}{k!(n-k)!(-1)^{n-k}}$

式(9.2.1)称为牛顿—柯特斯(Newton-Cotes)求积公式。A_k 为求积系数，$C_n^{(k)}$ 称为柯特斯系数。给定 n 即可求出 $C_n^{(k)}$。

注意：当 $f(x)=1$ 时，求积公式(9.2.1)精确成立，所以有：

$$b-a=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_n^{(k)}$$ 故对每一个 n 有：$$\sum_{k=0}^{n}C_n^{(k)}=1$$

当 $n=1$ 时，仅有两个节点：

$$C_1^{(0)}=\frac{(-1)^{1-0}}{1\times 0!\times(1-0)!}\int_0^1(t-1)dt=\frac{-1}{1}\frac{(t-1)^2}{2}\Big|_0^1=\frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)}=\frac{(-1)^{1-1}}{1\times 1!\times(1-1)!}\int_0^1(t-0)dt=\frac{1}{1}\frac{t^2}{2}\Big|_0^1=\frac{1}{2}$$

$$Q(f)=\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_n^{(k)}f(x_k)\quad(9.2.1)$$

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

当$n=2$时

$$C_2^{(0)}=\frac{(-1)^{2-0}}{2\times 0!\times(2-0)!}\int_0^2(t-1)(t-2)dt$$

$$=\frac{1}{4}\int_0^2[(t-2)^2+(t-2)]dt$$

$$=\frac{1}{4}[\frac{1}{3}(t-2)^3+\frac{1}{2}(t-2)^2]\Big|_0^2=\frac{1}{6}$$

同理可得

$$C_2^{(1)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6},\quad C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}$$

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

常用的牛顿—柯特斯系数

n	$C_n^{(k)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

几个常见的Newton-Cotes求积公式

（1）梯形求积公式（$n=1$）

这时

$$C_1^{(0)}=\frac{(-1)^{1-0}}{1\times 0!\times(1-0)!}\int_0^1 (t-1)dt=\frac{-1}{1}\frac{(t-1)^2}{2}\Big|_0^1=\frac{1}{2}$$

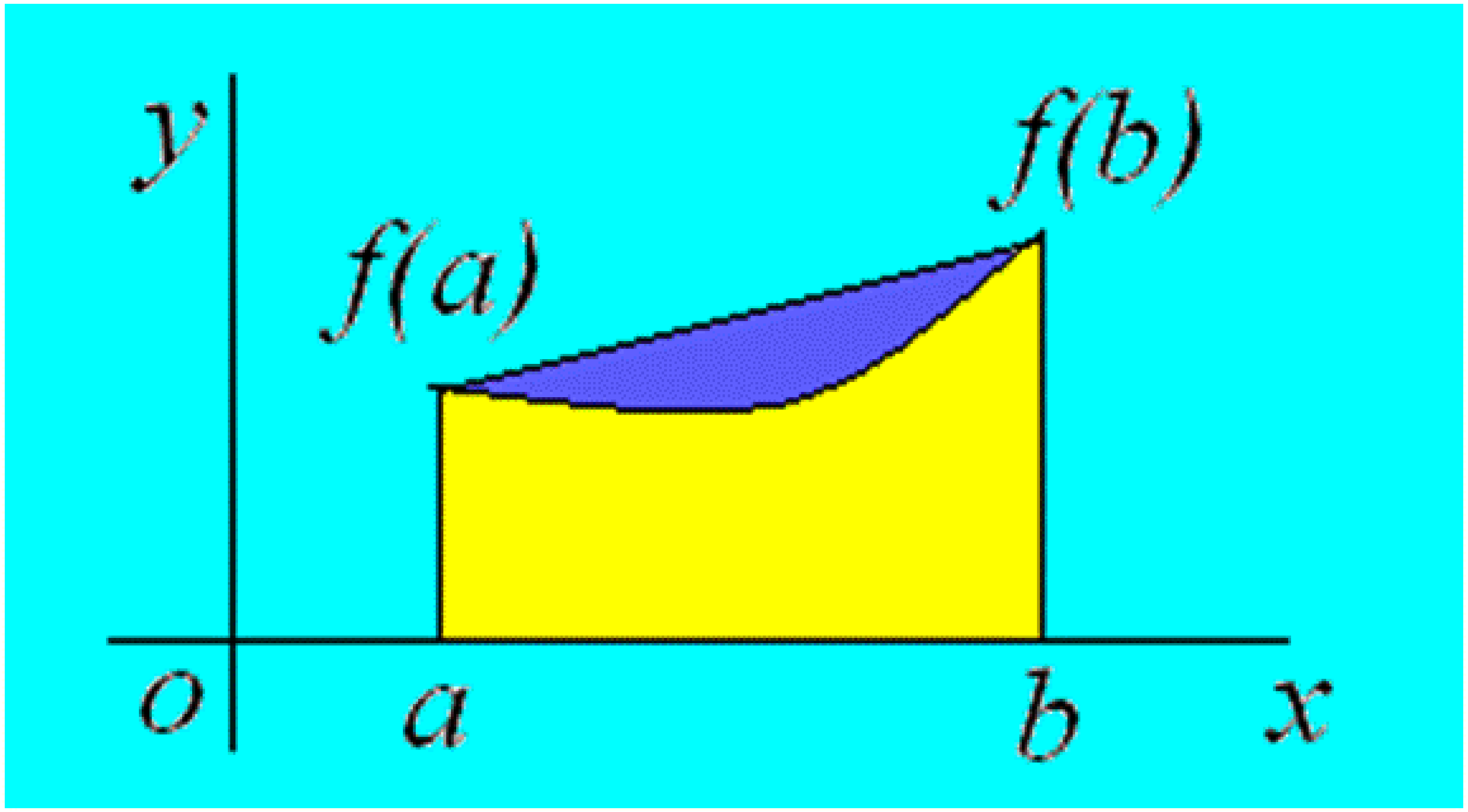
$$C_1^{(1)}=\frac{(-1)^{1-1}}{1\times 1!\times(1-1)!}\int_0^1 (t-0)dt=\frac{1}{1}\frac{t^2}{2}\Big|_0^1=\frac{1}{2}$$

$$Q_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$$Q(f)=\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_n^{(k)}f(x_k)\quad(9.2.1)$$

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

它的几何意义是用梯形面积代替曲边梯形的面积



（2）辛普生(Simpson)公式（$n=2$）：这时

$$C_2^{(0)} = \frac{(-1)^{2-0}}{2\times 0!\times(2-0)!}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6}$$

$$C_2^{(1)} = \frac{4}{6}，\quad C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$$

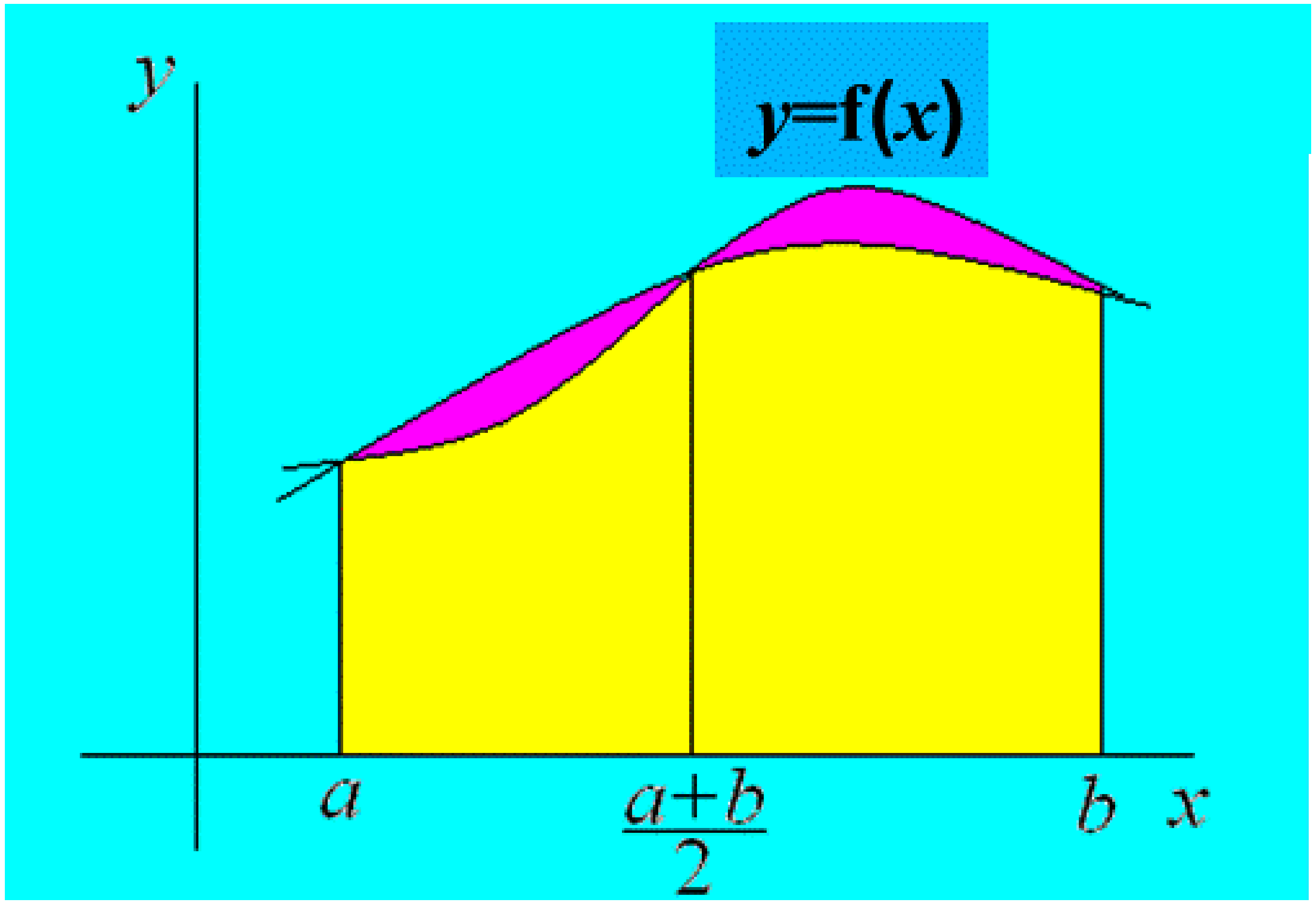
$$Q_2(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

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

$$Q(f) = \int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{\mathrm{n}} C_k f(x_k) \quad (9.2.1)$$

它的几何意义是用抛物线围成的曲边梯形面积代替

以 $y=f(x)$ 曲边梯形的面积



（3）辛普生(Simpson)的 $\dfrac{3}{8}$ 公式（$n=3$）

因为 $C_3^{(0)}=\dfrac{1}{8}, C_3^{(1)}=\dfrac{3}{8}, C_3^{(2)}=\dfrac{3}{8}$，$C_3^{(3)}=\dfrac{1}{8}$

所以 $Q_3(f)=\dfrac{b-a}{8}(f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3))$

$$=\frac{b-a}{8}(f(a)+3f(a+h)+3f(a+2h)+f(b))$$

其中 $h=\dfrac{b-a}{3}$。

常用的牛顿—柯特斯系数

n	$C_n^{(k)}$			
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$

（4）Cotes 公式（$n=4$）

$$因为 C_4^{(0)}=\frac{7}{90},C_4^{(1)}=\frac{32}{90},C_4^{(2)}=\frac{12}{90},\quad C_4^{(3)}=\frac{32}{90},C_4^{(4)}=\frac{7}{90}$$

$$所以 \int_a^b f(x)dx=Q_4(f)+R_C(f)$$

$$且\quad Q_4(f)=\frac{b-a}{90}(7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4))$$

$$=\frac{b-a}{90}(7f(a)+32f(a+h)+12f(a+2h)+32f(a+3h)+7f(b))$$

其中$h=\dfrac{b-a}{4}$。

常用的牛顿—柯特斯系数

n	$C_n^{(k)}$				
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$

9.2.2 Newton-Cotes公式的截断误差及代数精度

首先，由于 Lagrange 插值多项式 $p_n(x)$ 的余式有如下估计式

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

其中，$\xi \in (a,b)$，所以求积公式的余项为

$$R(f) = \int_a^b \left[f(x) - p_n(x) \right] dx$$

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

定理9.2.1 设

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-Q_n(f) \qquad (9.2.4)$$

为$Newton-Cotes$公式的余项，$h=\dfrac{b-a}{n}$,则有

$$R(f)=\begin{cases}\dfrac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为偶数）}\\ \dfrac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为奇数）}\end{cases}$$

其中$\eta\in[a,b]$ (*)

就是说，$n+1$个节点的 Newton-Cotes 公式至少有n次代数精度。若n为偶数，则求积公式的代数精度为$n+1$。

由于 $h=\dfrac{b-a}{n}$，所以上页公式即：

$$R(f)=\begin{cases}\left(\dfrac{b-a}{n}\right)^{n+3}\dfrac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt & （n\text{为偶数}） \\ \left(\dfrac{b-a}{n}\right)^{n+2}\dfrac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt & （n\text{为奇数}）\end{cases}$$

$$\boxed{R(f)=\begin{cases}\dfrac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & （n\text{为偶数}） \\ \dfrac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & （n\text{为奇数}）\end{cases}}$$

今在简单的情况下推导上面的公式。

$n=1$ 时，得到梯形公式。由于 $f(x)$ 的插值公式的余项为

$$\frac{f''(\xi)}{2!}\omega_2(x)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)$$ 所以

$$\int_a^b f(x)dx-\int_a^b p_1(x)dx=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx$$

即

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

$$\overset{令x=a+th}{=\!=\!=}\frac{f''(\eta)}{2!}\int_0^1 (th)(th-h)hdt=\frac{h^3 f''(\eta)}{2!}\int_0^1 t(t-1)dt=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

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

$$R(f)=\begin{cases}\dfrac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & （n为偶数） \\ \dfrac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & （n为奇数）\end{cases} \quad (*)$$

就是说，（*）式在 $n=1$ 时成立。当然，进一步计算得

$$R(f)=\frac{h^3 f''(\eta)}{2!}\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2}\right)=-\frac{h^3 f''(\eta)}{12}=-\frac{(b-a)^3 f''(\eta)}{12},\quad \eta\in[a,b]$$

$n=2$ 时，公式的推导见关治、陆金甫《数值分析基础》（高等教育出版社，1998）173-174 页。又见李庆扬等《数值分析基础》，一般情形的证明见 **Isaacson, E. and H. B. Keller, Analysis of Numerical Methods, John Wiley & Sons, New York, 1966.**

$$R(f)=\begin{cases}\dfrac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为偶数}) \\ \dfrac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为奇数})\end{cases}\quad (*)$$

（1）梯形积分公式的余项公式

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\qquad \eta\in[a,b]$$

（2）Simpson公式的余项公式（n=2）

$$R(f)=-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\qquad \eta\in[a,b]$$

$$h=\frac{b-a}{2}$$

（3）令$n=4$得$Cotes$求积公式的截断误差

$$R(f)=-\frac{8}{945}h^7f^{(6)}(\eta)=-\frac{8}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^7f^{(6)}(\eta)$$

$$=-\frac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\eta),\quad \eta\in[a,b]\qquad h=\frac{b-a}{4}$$

$$R(f)=\begin{cases}\left(\frac{b-a}{n}\right)^{n+3}\frac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt & (n\text{为偶数})\\ \left(\frac{b-a}{n}\right)^{n+2}\frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt & (n\text{为奇数})\end{cases}$$

$$R(f)=\begin{cases}\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为偶数})\\ \frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为奇数})\end{cases}\qquad (*)$$

（2）Simpson公式的余项公式（n=2）

$$R(f)=-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\eta\in[a,b],h=\frac{b-a}{2}$$

计算如下：

$$R(f)=\frac{h^{2+3}f^{(2+2)}(\eta)}{(2+2)!}\int_0^2 t^2(t-1)(t-2)dt=\frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{24}\int_0^2(t^4-3t^3+2t^2)dt$$

$$=\frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{24}\left(\frac{32}{5}-3\times\frac{16}{4}+2\times\frac{8}{3}\right)=\frac{h^5 f^{(4)}(\eta)}{24}\left(-\frac{4}{15}\right)=-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)$$

用 $h=\dfrac{b-a}{2}$ 代入得到

$$R(f)=-\frac{1}{90}\left(h=\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$$

$$R(f)=\begin{cases}\dfrac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)(t-2)...(t-n)dt & (n\text{为偶数}) \\ \dfrac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)(t-2)...(t-n)dt & (n\text{为奇数})\end{cases}\quad(*)$$

（3） Cotes 公式($n=4$)的截断误差

$$R(f)=-\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\eta)=-\frac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\eta)$$

计算如下：

$$R(f)=\frac{h^7 f^{(6)}(\eta)}{6!}\int_0^4 t^2(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)dt=$$

$$=\frac{h^7 f^{(6)}(\eta)}{720}\int_0^4 (t^6-10t^5+35t^4-50t^3+24t^2)dt$$

$$=\frac{h^7 f^{(6)}(\eta)}{720}\left(\frac{16384}{7}-\frac{40960}{6}+\frac{35840}{5}-\frac{12800}{4}+\frac{1536}{3}\right)$$

$$=\frac{h^7 f^{(6)}(\eta)}{720}\times\frac{(-640)}{105}=-\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\eta)$$

用 $h=\dfrac{b-a}{4}$ 代入得到最后结果。

$$R(f)=\begin{cases}\dfrac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\displaystyle\int_0^n t^2(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为偶数}) \\ \dfrac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\displaystyle\int_0^n t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)dt & (n\text{为奇数})\end{cases} \quad (*)$$

例题：分别用梯形公式、辛卜生公式和柯特斯公式计算定积分 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$ 的近似值 (计算结果取 5 位有效数字)

（1） 用梯形公式计算

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{2}[f(0.5)+f(1)] = 0.25\times[0.70711+1] = 0.4267767 = 0.426777$$

（2） 用辛卜生公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{6}[\sqrt{0.5}+4\times\sqrt{(0.5+1)/2}+\sqrt{1}]$$

$$= \frac{1}{12}\times[0.70711+4\times0.86603+1] = 0.43093403 = 0.43093$$

Simpson 公式: $\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)$

（3） 用柯特斯公式计算，系数为

$$\frac{7}{90},\frac{32}{90},\frac{12}{90},\frac{32}{90},\frac{7}{90}$$

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx \approx \frac{1-0.5}{90}[7\times\sqrt{0.5}+32\times\sqrt{0.625}+12\times\sqrt{0.75}+32\times\sqrt{0.875}+7\times\sqrt{1}]$$

$$=\frac{1}{180}\times[4.94975+25.29822+10.39223+29.93326+7]=0.43096$$

积分的准确值为

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx=\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\Big|_{0.5}^{1}=0.43096441$$

可见，三个求积公式的精度逐渐提高。

Cotes 公式: $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}\left[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\right]$

例题： 用辛卜生公式和柯特斯公式计算定积分

$$\int_1^3 (x^3-2x^2+7x-5)\mathrm{d}x$$

的近似值，并估计其误差（计算结果取5位小数）

解：辛卜生公式

$$S \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=\frac{3-1}{6}[1+4\times 9+25]=\frac{62}{3}=20\frac{2}{3}$$

由于 $f(x)=x^3-2x^2+7x-5 \quad f^{(4)}(x)=0$

由辛卜生公式余项

$$R(f)=\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta), \qquad \eta\in[a,b]$$

知其误差为 $R(f)=0$

解:柯特斯公式

$$C \approx \frac{3-1}{90}[7f(1)+32f(1.5)+12f(2)+32f(2.5)+7f(3)]$$

$$=\frac{1}{45}\left[7+32\times\frac{35}{8}+12\times 9+32\times\frac{125}{8}+7\times 9\right]=20\frac{2}{3}$$

知其误差为 $R(f)=0$

该定积分的准确值是$I=20\frac{2}{3}$，这个例子告诉我们，对于这个积分，当 n≥2 时，公式都是精确的，这是由于辛卜生公式具有三次代数精度，柯特斯公式具有五次代数精度，它们对被积函数为三次多项式当然是精确成立的。

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

9.2.3 Newton-Cotes公式的数值稳定性

算法的数值稳定性的概念：一个算法，如果在执行过程中，舍入误差在一定条件下能得到控制，则称为是数值稳定的，否则说其是不稳定的。具体来说，设给定的算法在执行某一步时产生的误差为ε，相继n步之后其引起的误差为ε_n，若 $|\varepsilon_n| \le C|\varepsilon|$，其中C是与n无关的常数，则称误差增长是线性级的，此时也称算法是数值稳定的。

现在来考察 Newton Cotes 求积公式的数值稳定性。设计算$f(x_k)$时产生的舍入误差为ε_k，假定计算$C_n^{(k)}$没有误差，则计算

$$(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_n^{(k)} f(x_k)$$

后所产生的误差为

$$\eta_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_n^{(k)} \varepsilon_k$$

于是 $$\left|\eta_n\right| \le (b-a)\sum_{k=0}^{n}\left|C_n^{(k)}\right|\left|\varepsilon_k\right|$$

若记 $$\delta_n = \sum_{k=0}^{n}\left|C_n^{(k)}\right| \;,\quad \varepsilon = \max\left|\varepsilon_k\right|$$

则有 $$\left|\eta_n\right| \le (b-a)\delta_n\varepsilon$$

显然若 Cotes 系数 $C_n^{(k)}$ 恒正,则有:

$$\delta_n = \sum_{k=0}^{n}\left|C_n^{(k)}\right| = \sum_{k=0}^{n}C_n^{(k)} = 1$$

从而 $$\left|\eta_n\right| \le (b-a)\varepsilon$$

即此时误差的增长是线性级的，从而当 Cotes 系数 $C_n^{(k)}$ 恒正时 Newton-Cotes 求积公式是数值稳定的。

从 Newton-Cotes 系数表可以看出，当 n≤7时，Cotes 系数 $C_n^{(k)}$ 恒正，当 n≥8时，Cotes 系数 $C_n^{(k)}$ 出现了负数，$\sum_{k=0}^{n}\left|C_n^{(k)}\right|$ 随 n 增大，从而舍入误差随 n 增大。所以，当 n≥8时算法不稳定。因此**当 n≥8时 Newton-Cotes 公式是不用的。**

n	$C_n^{(k)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$
$$\int_a^b f(x)dx \approx = \frac{b-a}{8}(f(a)+3f(a+h)+3f(a+2h)+f(b))$$
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}(7f(a)+32f(a+h)+12f(a+2h)$$
$$+32f(a+3h)+7f(b))$$

例： 计算$I=\int_1^2 \frac{1}{x}dx$ 。

解： 由$Newton-Leibniz$公式得

$$I=\int_1^2 \frac{1}{x}dx=\ln 2=0.69314718$$

由梯形公式 $I=\frac{2-1}{2}(\frac{1}{1}+\frac{1}{2})=0.\underline{7}5;$

由$Simpson$公式$I=\frac{2-1}{6}(\frac{1}{1}+4\frac{1}{\frac{3}{2}}+\frac{1}{2})=0.\underline{69}44;$

由$Newton$公式$I=\frac{2-1}{8}(1+3\frac{1}{\frac{4}{3}}+3\frac{1}{\frac{5}{3}}+\frac{1}{2})=0.\underline{693}75$

由$Cotes$公式得$I=0.\underline{6931}75$

$n=2$:

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

$n=3$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx = \frac{b-a}{8}(f(a)+3f(a+h)+3f(a+3h)+f(b))$$

例、用 n=2 和 n=3 的 Newton-Cotes 公式

求 $\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx$ 的近似值。

解：1. n=2时

$$\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx \approx \frac{2}{6}(e^{-\frac{1}{2}}+4e^{-\frac{2}{2}}+e^{-\frac{3}{2}}) = 0.766575505$$

2. n=3时

$$\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx \approx \frac{2}{8}(e^{-\frac{1}{2}}+3e^{-\frac{5}{6}}+3e^{-\frac{7}{6}}+e^{-\frac{3}{2}}) = 0.766916279$$

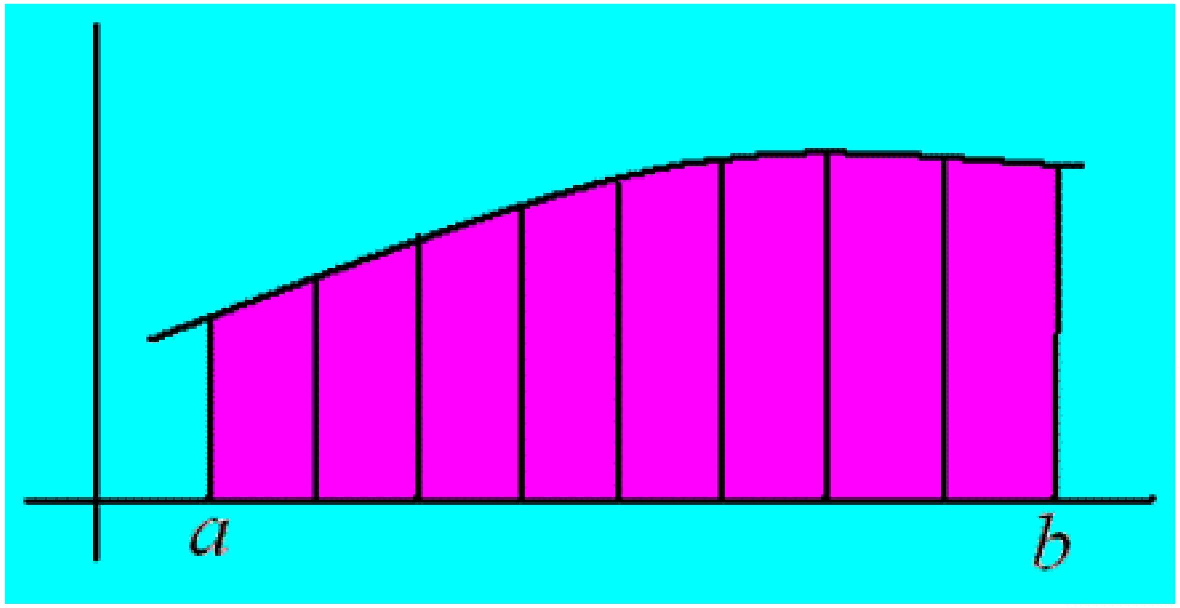
$\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx$ 的真实值为 0.7668010

9.2.4 复化求积公式

由梯形、辛卜生和柯特斯求积公式余项可知，随着求积节点数的增多，对应公式的精度也会相应提高。注意到$n \geq 8$时牛顿—柯特斯求积公式开始出现负值的柯特斯系数。而根据误差理论的分析研究，当积分公式出现负系数时，可能导致舍入误差增大，并且往往难以估计。因此不能用增加求积节点数的方法来提高计算精度。在实际应用中，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，然后把所有小区间上的计算结果加起来得到整个区间上的求积公式，这就是复化求积公式的基本思想。常用的复化求积公式有复化梯形公式和复化辛卜生公式。

复化求积公式克服了高次 Newton-Cotes 公式计算不稳定的问题，其运算简单且易于在计算机上实现.

常用的复化求积公式是复化梯形公式和复化抛物线公式.



（1）复化梯形公式

将积分区间$[a,b]$划分为n等分，节点$x_k=a+kh$，$k=0,1,\cdots,n$，步长$h=\dfrac{b-a}{n}$. 在每个小区间$[x_k,x_{k+1}]$上应用梯形公式

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

然后累加:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx T_n = \sum_{i=0}^{n-1}\left[\frac{x_{i+1}-x_i}{2}\left(f(x_i)+f(x_{i+1})\right)\right]$$

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

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

梯形公式余项：$R(f)=-\dfrac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

T_n 称为复化梯形求积公式。其余项研究如下。

当 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上有连续的二阶导数时，在子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上梯形公式的余项已知为

$$-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k) \qquad \xi_k\in\left[x_k,x_{k+1}\right]$$

在 $[a,b]$ 上的余项为

$$R_n(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_n=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(x)\mathrm{d}x-\frac{h}{2}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right]\right\}$$

$$=-\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)=-\frac{h^3}{12}n\left[\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)\right]=-\frac{h^3}{12}\bullet nf''(\xi)$$

$$=-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\xi)=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi), \qquad \xi\in[a,b]$$

（2）复化Simpson公式

将积分区间 $[a,b]$ 分成 $2n$ 等分，在 $[x_{2i-2},x_{2i}]$ 上用 Simpson 公式得到（$h=\dfrac{b-a}{2n}$）

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx S_{2n} = \frac{2h}{6}\sum_{i=1}^{n}[f(x_{2i-2})+4f(x_{2i-1})+f(x_{2i})]$$

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

S_{2n} 称为复化辛普生求积公式。其余项为

$$R_n(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - S_{2n} = -\frac{1}{90}h^5[f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)+\cdots+f^{(4)}(\xi_n)]$$

$$=-\frac{1}{90}nh^5 f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi\in[a,b]$$

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

$$R(f)=-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)$$

例题 对于积分$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin x dx$，如果用复化梯形公式计算，要使得截断误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-5}$，应该把区间分成$n$等分。问$n$至少应该取多少?

解：（用复化梯形公式）由截断误差

$$R_T(f)=-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\xi)=-\frac{\frac{\pi}{2}-0}{12}\left(\frac{\frac{\pi}{2}}{n}\right)^2(-\sin\xi)$$

即 $$|R_T(f)|=\left|\frac{\pi}{24}\frac{\pi^2}{4n^2}\sin\xi\right|\le\left|\frac{\pi^3}{96n^2}\right|\le\frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

得到 $$n>254$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-T_n=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\zeta)$$

例 9.2.1 对于积分 $I=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin x dx$，如果用复化辛卜生公式计算，要使得截断误差不超过 $\frac{1}{2}\times10^{-5}$，应该把区间分成 $2n$ 等分。问 n 至少应该取多少?

解:用复化Simpson公式

由 $R_S(f)=-\frac{(b-a)h^4}{180}f^{(4)}(\xi)=-\frac{\frac{\pi}{2}-0}{180}h^4(\sin^{(4)}x)_{x=\xi}$，令

$$|R_S(f)|=\left|\frac{\pi}{180\times2}\left(\frac{\frac{\pi}{2}}{2n}\right)^4\sin\xi\right|\le\left|\frac{\pi}{180\times2}\left(\frac{\frac{\pi}{2}}{2n}\right)^4\right|\le\frac{1}{2}\times10^{-5}$$

就得到 $n^4\ge\frac{\pi^5\times10^5}{16^4\times180}$，解之得到 $n\ge5.08$，因此应取 $n=6$

计算方法

复合抛物线求积公式不但容易编程序上机计算，而且精度也比较高，是一个较好的数值积分法，应用较广泛.

例题： 依次用n=8的复化梯形公式、n=4的复化辛卜生公式计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$

解：首先计算出所需各节点的函数值，n=8时，

$$h=\frac{1}{8}=0.125$$

由复化梯形公式可得如下计算公式：

$$T_8=\frac{1}{16}[f(0)+2f(0.125)+2f(0.25)+2f(0.375)+2f(0.5)$$

$$+2f(0.625)+2f(0.75)+2f(0.875)+f(1)]$$

$$=0.9456909$$

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

由复化辛卜生公式可得如下计算公式

$$S_4=\frac{1}{24}\Big[f(0)+f(1)+2(f(0.25)+f(0.5)+f(0.75))$$

$$+4(f(0.125)+f(0.375)+f(0.625)+f(0.875))\Big]$$

$$=0.9460832$$

（积分准确值I=0.9460831）

这两种方法都需要提供9个点上的函数值，计算量基本相同，然而精度却差别较大，同积分的准确值（是指每一位数字都是有效数字的积分值）比较，复化梯形法只有两位有效数字(T_8=0.9456909)，而复化辛卜生法却有六位有效数字。

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

例题 用复化梯形公式计算定积分

$$I=\int_0^1 e^x \mathrm{d}x$$ 问区间[0, 1]应分多少等份才能使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$

解：取 $f(x)=e^x$，则 $f''(x)=e^x$，又区间长度b−a=1，对复化梯形公式有余项

$$|R_T(x)|=\left|-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)\right|\le\frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 e\le\frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

即 $n^2\ge\frac{e}{6}\times 10^5$，n≥212.85，取n=213，即将区间[0, 1]分为213等份时，用复化梯形公式计算误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$ 。

例 **3.2** 分别用复合梯形公式与复合抛物线公式根据表 3-2 计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 的近似值. **并估计误差.**

表 **3-2** 已知函数值表

x	0	1/8	1/4	3/8	1/2
$f(x)$	1	0.997 397 8	0.989 615 8	0.976 726 7	0.953 851 0
x	5/8	3/4	7/8	1	
$f(x)$	0.936 155 6	0.908 851 6	0.877 192 5	0.841 470 9	

解　取 $n=8$，将$[0,1]$8 等分，$h=\frac{1}{8}$，由复合梯形公式(3.13)得

$$T_8=\frac{1}{8}\left[\frac{1}{2}f(0)+f\left(\frac{1}{8}\right)+f\left(\frac{1}{4}\right)+f\left(\frac{3}{8}\right)+f\left(\frac{1}{2}\right)+f\left(\frac{5}{8}\right)+f\left(\frac{3}{4}\right)+f\left(\frac{7}{8}\right)+\frac{1}{2}f(1)\right]$$

$$\approx 0.9456909.$$

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

若将积分区间 4 等分，用复合抛物线公式(3.15)得

$$S_4=\frac{1}{4\times 6}\left\{f(0)+4\left[f\left(\frac{1}{8}\right)+f\left(\frac{3}{8}\right)+f\left(\frac{5}{8}\right)+f\left(\frac{7}{8}\right)\right]+2\left[f\left(\frac{1}{4}\right)+f\left(\frac{1}{2}\right)+f\left(\frac{3}{4}\right)\right]+f(1)\right\}$$

$$\approx 0.9460832.$$

复合梯形公式

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

复合抛物线公式

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

为了利用余项公式估计误差，要求 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$ 的高阶导数，

由于

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos(xt)\,\mathrm{d}t,$$

所以有

$$f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}(\cos xt)\,\mathrm{d}t=\int_0^1 t^k\cos\left(xt+\frac{k\pi}{2}\right)\mathrm{d}t,$$

于是

$$\max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f^{(k)}(x)|\leqslant\int_0^1\left|\cos\left(xt+\frac{k\pi}{2}\right)\right|t^k\,\mathrm{d}t\leqslant\int_0^1 t^k\,\mathrm{d}t=\frac{1}{k+1}.$$

由(3.3)得复化梯形公式误差

$$|R_8(f)|=|I-T_8|\leqslant\frac{h^2}{12}\max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f''(x)|$$

$$\leqslant\frac{1}{12}\left(\frac{1}{8}\right)^2\frac{1}{3}=0.000434.$$

$$R_n(f)=-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta),h=\frac{b-a}{n}\quad(3.3)$$

$$R(f)=-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\eta),h=\frac{b-a}{2n}\quad(3.6)$$

对复化辛普森公式误差，由(3.6)得

$$|R_4(f)|=|I-S_4|\leqslant\frac{1}{2880}\left(\frac{1}{4}\right)^4\frac{1}{5}=0.271\times10^{-6}.$$

例 5.5 利用复化梯形公式计算积分

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

使其误差界为 10^{-4}, 应将积分区间 $[0,1]$ 多少等分?

解 设

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos(tx)\mathrm{d}t.$$

则

$$f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}[\cos(tx)]\mathrm{d}t=\int_0^1 t^k\cos\left(tx+\frac{k\pi}{2}\right)\mathrm{d}t.$$

从而

$$|f^{(k)}(x)| \leq \int_0^1 \left|t^k \cos\left(tx + \frac{k\pi}{2}\right)\right| \mathrm{d}t \leq \int_0^1 t^k \mathrm{d}t = \frac{1}{k+1}.$$

故由

$$|R[T_n]| = \left| -\frac{1-0}{12} h^2 f''(\xi) \right| \leq \frac{h^2}{12} \times \frac{1}{2+1} = \frac{h^2}{36} \leq 10^{-4},$$

得 $h \leq 6 \times 10^{-2}$, 即

$$n = \frac{1}{h} \geq \frac{1}{6} \times 10^2 \approx 16.67,$$

所以区间 $[0, 1]$ 应该 17 等分才能满足精度要求.

例题：取 $n=10$，利用复合梯形公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}\mathrm{d}x$$

解：程序如下

```
%用途：用复化梯形公式求积分。
%格式：fun 为被积函数，a,b 为积分区间的左右端点，
% n 为区间的等分数，s 为积分值
format long;
fun=inline('1./(1+x.^2)');a=0;b=1;n=10;
h=(b-a)/n;
s=0;
for k=1:n-1
    x=a+h*k;
    s=s+feval(fun,x);
end
s=h*(feval(fun,a)+feval(fun,b))/2.0+h*s
```

运行：

s = 0.784981497226790

例题：取 $n=10$，利用复合抛物线公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{1}{1+x^2}\mathrm{d}x$$

解：程序如下

```
%用复辛普生形公式求积分。
%fun 为被积函数，a,b 为积分区间的左右端点，
% n 为区间的等分数， s 为积分值
format long;
fun=inline('1./(1+x.^2)');a=0;b=1;n=10;
h=(b-a)/n;
s1=0; s2=0;
for k=1:(n-1)
    x=a+h*k;s1=s1+feval(fun,x);
end
for k=0:(n-1)
    x=a+h*(k+1/2);s2=s2+feval(fun,x);
end
s=h/6*(feval(fun,a)+feval(fun,b)+2*s1+4*s2)
```

运行： s = 0.785398163242446

9.3 外推法与Romberg求积公式

9.3.1　Richardson 外推算法

在数值计算中，常常用一个序列 $f_1, f_2, \cdots$ 去逼近一个 f^*，并在理论上估计误差（余项）。

一个有趣的问题是，能否在误差估计的基础上，从序列 $f_1, f_2, \cdots$ 产生一个新的序列 $\left\{f_i^{(1)}\right\}$，使它比 $\left\{f_i\right\}$ 更快地收敛到 f^*。这就是数值计算中的外推法，是加速收敛的一个重要技巧。

先用一个例子来说明

在科学实验中，有时 $f(0)$ 是无法求出的，只能通过实验，逐次求出 $f(h), f(\frac{h}{2}), \cdots$ 来逼近 $f(0)$。但 h 越小，实验的难度就越大。因此我们希望从已有数据 $f(h), f(\frac{h}{2}), \cdots$ 构造出一个新的序列，使它更快地收敛到 $f(0)$。做法如下：设 $f(h), f(\frac{h}{2})$ 的 Taylor 展式为

$$f(h)=f(0)+hf'(0)+\frac{h^2}{2!}f''(0)+\cdots$$

$$f\left(\frac{h}{2}\right)=f(0)+\frac{h}{2}f'(0)+\frac{h^2}{8}f''(0)+\cdots$$

如果 $f'(0)\neq 0$，则 $f(h), f(\frac{h}{2})$ 逼近 $f(0)$ 的阶均为 h。现在，若令

$$f_1(h)=2f(\frac{h}{2})-f(h)$$

$$f(h)=f(0)+hf'(0)+\frac{h^2}{2!}f''(0)+\cdots$$

$$f\left(\frac{h}{2}\right)=f(0)+\frac{h}{2}f'(0)+\frac{h^2}{8}f''(0)+\cdots$$

$$f_1(h)=2f(\frac{h}{2})-f(h)$$

则有

$$f_1(h)=f(0)-\frac{h^2}{4}f''(0)-\frac{h^3}{8}f'''(0)+\cdots$$

可见，$f_1(h)$ 以 h^2 阶逼近 $f(0)$。而 $f_1(h)$ 是由 $f(h)$ 得到的，但它收敛的阶却提高了。同样令

$$f_2(h)=\frac{4f_1(\frac{h}{2})-f_1(h)}{3}$$

则用 $f_2(h)$ 逼近 $f(0)$ 时阶为 h^3。这种加速收敛的方法是 Richardson 外推算法的一个特例。

再看一个稍微复杂一点的例子.

假设有一个量F^*，用一个步长为h的函数$F_1(h)$去逼近，F^*与h无关，当$h \to 0$时，$F_1(h) \to F^*$，用$F_1(h)$逼近F^*的截断误差有估计式:

$$R(F^*) = F^* - F_1(h) = a_1^{(1)} h^{P_1} + a_2^{(1)} h^{P_2} + \cdots + a_k^{(1)} h^{P_k} + \cdots \quad (9.3.1)$$

其中$0 < P_1 < P_2 < \cdots < P_k < \cdots$，$a_i^{(1)}$（$i = 1, 2, \cdots$）都是与$h$无关的常数，也就是说，$F_1(h)$逼近$F^*$的阶是$h^{P_1}$,现在提出的问题是能否通过构造出一个新的序列，它逼近F^*的阶要比h^{P_1}更高，如为h^{P_2}。

将(9.3.1)中的 h 用 qh 代替， $q \neq 0$， 则有

$$
\begin{aligned}
F^* - F_1(qh) &= a_1^{(1)}(qh)^{P_1} + a_2^{(1)}(qh)^{P_2} + \cdots + a_k^{(1)}(qh)^{P_k} + \cdots \\
&= a_1^{(1)} q^{P_1} h^{P_1} + a_2^{(1)} q^{P_2} h^{P_2} + \cdots + a_k^{(1)} q^{P_k} h^{P_k} + \cdots \qquad (9.3.2)
\end{aligned}
$$

现在用 q^{P_1} 乘(9.3.1)的两边后和上式相减,整理得

$$
\begin{aligned}
&(1 - q^{P_1})F^* - \left(F_1(qh) - q^{P_1} F_1(h)\right) \\
&= a_2^{(1)}(q^{P_2} - q^{P_1})h^{P_2} + \cdots + a_k^{(1)}(q^{P_k} - q^{P_1})h^{P_k} + \cdots
\end{aligned}
$$

因为 $(1-q^{P_1})$ 不等于零，用 $(1-q^{P_1})$ 除等式两边有

$$
F^* - \frac{F_1(qh) - q^{P_1} F_1(h)}{(1 - q^{P_1})} = a_2^{(2)} h^{P_2} + \cdots + a_k^{(2)} h^{P_k} + \cdots (9.3.3)
$$

$$
R(F^*) = F^* - F_1(h) = a_1^{(1)} h^{P_1} + a_2^{(1)} h^{P_2} + \cdots + a_k^{(1)} h^{P_k} + \cdots \quad (9.3.1)
$$

其中:

$$a_2^{(2)}=\frac{a_2^{(1)}(q^{P_2}-q^{P_1})}{1-q^{P_1}},\cdots,a_k^{(2)}=\frac{a_k^{(1)}(q^{P_2}-q^{P_1})}{1-q^{P_1}},\cdots$$

令

$$F_2(h)=\frac{F_1(qh)-q^{P_1}F_1(h)}{(1-q^{P_1})}$$

那么 $F_2(h)$ 逼近 F^* 的误差由(9.3.3)知道为 h^{P_2}．依次做下去,计算公式为

$$F_m(h)=\frac{F_{m-1}(qh)-q^{P_{m-1}}F_{m-1}(h)}{1-q^{P_{m-1}}},\ m=1,2,\cdots \quad (9.3.4)$$

而

$$F^*-F_m(h)=a_m^{(m)}h^{P_m}+\cdots\sim O(h^{P_m})$$

其中 $a_k^{(m)}$ 是与 h 无关的常数。用这种方法构造的函数

$F_m\left(h\right)$ 逼近 F^* 的阶是 h^{p_m} 。

上面的这种方法，称为 Richardson（理查森）外推法。

9.3.2 Romberg(龙贝格)求积公式

梯形法计算简单但收敛慢，如何提高收敛速度以节省计算量是本节要讨论的中心问题.

Romberg 算法是以复合梯形求积公式为基础，应用 Richardson 外推法构造的一种算法。由前讲过的复合求积公式知道，计算定积分$I=\int_a^b f(x)\,dx$的复合梯形公式为:

$$T(h)=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)\right]$$

其中$h=(b-a)/n, h>0$。通过比较复杂的推导可以证明，复合梯形求积公式的值 $T(h)$ 与定积分 $I=\int_a^b f(x)dx$ 之间存在 Euler-Maclaurin 求和公式:

$$I=\left\{\frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)\right]+h\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)\right\}$$

$$+a_2h^2+a_4h^4+a_6h^6+\cdots\cdots$$

就是说，复合梯形求积公式的误差可以表示为：

$$I-T(h)=a_2h^2+a_4h^4+a_6h^6+\cdots\cdots$$

其中 a_k 与 h 无关。

此余项表达式推导可以在李庆扬、王能超、易大义的《数值分析》中查到

记 $T_1(h)=T(h)$ 即 $$T_1(h)=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right]$$

将 h 缩小一半，则 $$I-T_1\left(\frac{h}{2}\right)=a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2+a_4\left(\frac{h}{2}\right)^4+a_6\left(\frac{h}{2}\right)^6+\cdots\cdots$$

其中

$$T_1\left(\frac{h}{2}\right)=\frac{h}{4}\sum_{i=1}^{n}\left[f\left(x_{i-1}\right)+2f\left(x_{i-1/2}\right)+f\left(x_i\right)\right]$$

$$=\frac{1}{2}T_1(h)+\frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n}f\left(x_{i-1/2}\right)$$

这里 $x_{i-1/2}=a+(i-\frac{1}{2})h$

$$I-T_1(h)=a_2h^2+a_4h^4+a_6h^6+\cdots\cdots$$

令 $$T_2(h)=\frac{4T_1(h/2)-T_1(h)}{3}$$

则有

$$I-T_2(h)=\tilde{a}_4h^4+\cdots\cdots$$

可见，利用$T_1(h)$和$T_1\left(\frac{h}{2}\right)$的线性组合得到$T_2(h)$，使得误差从

$O(h^2)$提高到$O(h^4)$。

$$I-T_1(h)=a_2h^2+a_4h^4+a_6h^6+\cdots\cdots$$

$$I-T_1\left(\frac{h}{2}\right)=a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2+a_4\left(\frac{h}{2}\right)^4+a_6\left(\frac{h}{2}\right)^6+\cdots\cdots$$

一般地有

$$I-T_k(h)=\tilde{a}_{2k}h^{2k}+\cdots\cdots,\quad I-T_k\left(\frac{h}{2}\right)=\tilde{a}_{2k}\left(\frac{h}{2}\right)^{2k}+\cdots\cdots$$

于是

$$I-T_{k+1}(h)-\frac{4^k T_k(h/2)-T_k(h)}{4^k-1}=\tilde{a}_{2(k+1)}h^{2(k+1)}+\cdots\cdots$$

注意到，从$T_1(h)$和$T_1\left(\frac{h}{2}\right)$可以求$T_2(h)$，从$T_2(h)$和$T_2\left(\frac{h}{2}\right)$可以求$T_3(h)$，但$T_2(h)$要通过$T_1\left(\frac{h}{2}\right)$和$T_1\left(\frac{h}{2^2}\right)$来计算，它们都要用复化梯形公式计算。一直做下去，即可得到要求的结果。

$$T_2(h)=\frac{4T_1(h/2)-T_1(h)}{3}\qquad T_2\left(\frac{h}{2}\right)=\frac{4T_1(h/2^2)-T_1(h/2)}{3}$$

利用外推法公式和此式，取 $q=1/2$，并注意到

$p_m=2m$，构造新序列 $\{T_m(h)\}$

$$\begin{cases} T_1(h)=T(h) \\ T_{m+1}(h)=\dfrac{T_m(h/2)-4^{-m}T_m(h)}{1-4^{-m}}=\dfrac{4^m T_m(h/2)-T_m(h)}{4^m-1}, \end{cases}$$

$$m=1,2,\cdots,$$

则 $T_m(h)$ 逼近 I 的阶是 h^{2m}。这个算法称为 Romberg 算法。

由于Romberg求积过程是每次将区间缩小一半，所以Romberg求积算法也叫做逐次分半加速收敛法。 直接计算可知，$T_2(h)$恰为复合 Simpson 公式，$T_3(h)$恰为复合 Cotes 公式。为了便于机器实现，我们引入符号 $T_m^{(k)}, m=1,2,\cdots$，称为 Romberg 序列。其中k表示将区间2^k等分，$T_1^{(k)}$表示步长为$\dfrac{b-a}{2^k}$的复合梯形求积公式。

在 Romberg 求积中，h 取为 $\dfrac{b-a}{2^j}$, $j=0,1,2,\cdots$，因此可以用 j 来表明 h 的大小。例如 $j=0$ 表示 $h=b-a$，$j=1$ 表示 $h=\dfrac{b-a}{2}$ 等等。外推指标用 k 表示。令

$$T_1^{(0)}=T(b-a)$$

$$T_1^{(j)}=T(\frac{b-a}{2^j})\quad (j=0,1,\cdots)$$

$$T_2^{(0)}=T_{1+1}^{(0)}=\frac{4^1T_1^{(1)}-T_1^{(0)}}{4^1-1}$$

$$T_2^{(j)}=T_{1+1}^{(j)}=\frac{4^1T_1^{(j+1)}-T_1^{(j)}}{4^1-1}$$

$$T_{k+1}^{(j)}=\frac{4^kT_k^{(j+1)}-T_k^{(j)}}{4^k-1}$$

其中，$T_1^{(j)}=T(\frac{b-a}{2^j})$ 是复合梯形公式。$n=2^j$，

$h=\frac{b-a}{2^j}=\frac{b-a}{n}$（$j$ 从 0 开始）。由 $T_1^{(j+1)}$ 向外推得 $T_2^{(j)}$，

等等这样可以建立三角形数表。

l	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	$T_1^{(0)}$			
1	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$		
2	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$	
3	$T_1^{(3)}$	$T_2^{(2)}$	$T_3^{(1)}$	$T_4^{(0)}$
4	$T_1^{(4)}$	$T_2^{(3)}$	$T_3^{(2)}$	$T_4^{(1)}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

$$T_{k+1}^{(j)} = \frac{4^k T_k^{(j+1)} - T_k^{(j)}}{4^k - 1}, T_1^{(k)} = T\left(\frac{b-a}{2^k}\right)$$

Romberg 求积算法综述如下：

第一步，在$[a,b]$区间上，应用梯形公式得

$$T_1^{(0)} = T(b-a) = \frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$$

第二步，将$[a,b]$区间对分，应用复合梯形公式求$T_1^{(1)}$，并按

$$T_2^{(0)} = \frac{4T_1^{(1)} - T_1^{(0)}}{4-1}$$

求得 Sinpson 公式的值，置$i=1$，转第四步；

l	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	$T_1^{(0)}$			
1	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$		
2	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$	
3	$T_1^{(3)}$	$T_2^{(2)}$	$T_3^{(1)}$	$T_4^{(0)}$
4	$T_1^{(4)}$	$T_2^{(3)}$	$T_3^{(2)}$	$T_4^{(1)}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

第三步，将$[a,b]$区间2^i等分，记用相应的复合梯形公式求得的值为$T_1^{(i)}$，然后构造新序列：

$$T_{m+1}^{(k-1)}=\frac{4^m T_m^{(k)}-T_m^{(k-1)}}{4^m-1},\quad m=1,2,3,\cdots,i;k=i-m+1$$

由此求得$T_{i+1}^{(0)}$；

第四步，若$\left|T_i^{(0)}-T_{i+1}^{(0)}\right|\le\varepsilon$（$\varepsilon$是事先给定的精度），则计算停止，输出$T_i^{(0)}$，否则用$i+1$代替$i$，转第三步。

$$T_1^{(j)}=T\left(\frac{b-a}{2^j}\right)$$

l	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	$T_1^{(0)}$			
1	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$		
2	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$	
3	$T_1^{(3)}$	$T_2^{(2)}$	$T_3^{(1)}$	$T_4^{(0)}$
4	$T_1^{(4)}$	$T_2^{(3)}$	$T_3^{(2)}$	$T_4^{(1)}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

例题：

试验证：对 Romberg 算法，$T_2(h)$恰好是复合 Simpson 公式

解：注意到

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

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

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

$$T_2(h)=\frac{4T\left(\frac{h}{2}\right)-T(h)}{4-1}=\frac{1}{3}\left[4T\left(\frac{h}{2}\right)-T(h)\right]$$

所以

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

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

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

$$=\frac{h}{2}\left[f(a)+f\left(x_1\right)+\cdots+f\left(x_{n-1}\right)+4\sum_{k=1}^{n}f\left(x_{k-1/2}\right)+f\left(x_1\right)+\cdots+f\left(x_{n-1}\right)+f(b)\right]$$

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

其中， $x_{k-1/2}=a+(k-\frac{1}{2})h$ ，

计算方

复合 Simpson 公式：将积分区间$[a,b]$分成$2n$等分，在$[x_{2i-2},x_{2i}]$上用Simpson 公式得到（$h=(b-a)/(2n)$）

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

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

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

所以

$$T_2(h)=\frac{1}{3}\left[4T\left(\frac{h}{2}\right)-T(h)\right]$$

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

这恰好是复合 Simpson 公式。

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

例1： 取ε=0. 001, 用龙贝格方法计算积分

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

解：按照龙贝格积分法，依次计算得：

$$T_1^{(0)}=T(\frac{b-a}{2^0})=\frac{1}{2}\left[f(0)+f(1)\right]=\frac{1}{2}[4+2]=3$$

$$T_1^{(1)}=T(\frac{b-a}{2^1})=\frac{1}{4}\left[f(0)+f(1)+2f\left(\frac{1}{2}\right)\right]=3.100000$$

$$T_2^{(0)}=\frac{4T_1^{(1)}-T_1^{(0)}}{4-1}=\frac{4\times 3.1-3}{3}\approx 3.133333$$

k	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$
0	3	
1	3.1	3.133333

$$T_1^{(2)} = T\left(\frac{b-a}{2^2}\right) = \frac{1}{8}\left[f(0) + f(1) + 2\left(f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{2}{4}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right)\right)\right]$$

$$= 3.131176$$

$$T_2^{(1)} = \frac{4T_1^{(2)} - T_1^{(1)}}{4-1} = \frac{4 \times 3.131176 - 3.100000}{3}$$

$$\approx 3.141568$$

$$T_3^{(0)} = \frac{4^2 T_2^{(1)} - T_2^{(0)}}{4^2 - 1} = \frac{16 \times 3.141568 - 3.133333}{15}$$

$$\approx 3.142118$$

$$T_{k+1}^{(j)} = \frac{4^k T_k^{(j+1)} - T_k^{(j)}}{4^k - 1}$$

k	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$
0	3		
1	3.1	3.133333	
2	3.131176	3.141569	3.142118

$$T_1^{(3)}=T(\frac{b-a}{2^3})=\frac{1}{2}\left[T_1^{(2)}+\frac{1}{4}\sum_{i=1}^{4}f\left(\frac{2i-1}{8}\right)\right]=3.138988$$

$$T_2^{(2)}=\frac{4T_1^{(3)}-T_1^{(2)}}{4-1}=3.141592$$

$$T_3^{(1)}=\frac{4^2T_2^{(2)}-T_2^{(1)}}{4^2-1}=3.141594$$

$$T_4^{(0)}=\frac{4^3T_3^{(1)}-T_3^{(0)}}{4^3-1}=3.14159$$

$$T_{k+1}^{(j)}=\frac{4^kT_k^{(j+1)}-T_k^{(j)}}{4^k-1}$$

k	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	3			
1	3.1	3.133333		
2	3.131176	3.141569	3.142118	
3	3.138988	3.141593	3.141594	3.141586

k	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	**3**			
1	**3.1**	**3.133333**		
2	**3.131176**	**3.141569**	**3.142118**	
3	**3.138988**	**3.141593**	**3.141594**	**3.141586**

```
%用途：用龙贝格公式求积分
%fun是被积函数，a, b是积分下、上限
%tol允许误差，s：积分近似值
clear;format long;
fun=inline('4./(1+x.^2)');
a=0;b=1;
i=1;j=1;h=b-a;tol=1e-3;
T(1,1)=h*(feval(fun,a)+feval(fun,b))/2;
T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
while abs(T(i+1,i+1)-T(i,i))>tol
    i=i+1;h=h/2;
    T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
    for j=1:i
        T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
    end
end
T,s=T(i+1,j+1);s
xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')
```

程序

```
function Lomberg_Integration
%用途：用龙贝格公式求积分
%fun是被积函数，a, b是积分下、上限
%tol允许误差 s：积分近似值
format long;clear;
a=0;b=1;i=1;j=1;h=b-a;tol=1e-3;
T(1,1)=JiFen(@fun,a,b,1);
T(i+1,1)=JiFen(@fun,a,b,i+1);
T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
while abs(T(i+1,i+1)-T(i,i))>tol
    i=i+1;h=h/2; T(i+1,1)=JiFen(@fun,a,b,i+1);
    for j=1:i, T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1); end
end
T,s=T(i+1,j+1);s, xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')

function fun=fun(x)  %被积函数
fun=4./(1+x^2);

function JiFen=JiFen(fun,a,b,i)  %用复化梯形公式求积分
n=2^(i-1);h=(b-a)/n;s=0;
for k=1:n-1, x=a+h*k; s=s+fun(x);end
JiFen=h*(fun(a)+fun(b))/2.0+h*s;
```

条理特别清楚的程序：

```
function Lomberg_JF
%用龙贝格方法,求fun从a到b的积分，tol为允许误差， s为积分近似值
format long;clear;
a=0;b=1;h=b-a;tol=1e-3;T(1,1)=JiFen(@fun,a,b,h);
for i=2:100
  for j=1:i
    if j==1
        h=h/2; T(i,j)=JiFen(@fun,a,b,h);
    else
        T(i,j)=(4^(j-1)*T(i,j-1)-T(i-1,j-1))/(4^(j-1)-1);
    end
  end
  if abs(T(i,i)-T(i-1,i-1))<tol,break;end
end
T,s=T(i,i), xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')
function fun=fun(x)  %被积函数
fun=4.0/(1+x*x);
function JiFen=JiFen(fun,a,b,h)  %用复化梯形公式求积分
n=(b-a)/h;s=0;
for k=1:n-1, x=a+h*k; s=s+fun(x);end
JiFen=h*(fun(a)+fun(b))/2.0+h*s;
```

```
T =

   3.00000000000000
   3.10000000000000   3.13333333333333
   3.13117647058824   3.14156862745098   3.14211764705882
   3.13898849449109   3.14159250245871   3.14159409412589   3.14158578376187


积分 = 3.14158578376187
```

例 1：取 $\varepsilon=10^{-6}$，用龙贝格方法编程计算积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

解：程序如下

```
%用途：用龙贝格公式求积分
%fun是被积函数，a, b是积分下、上限
%tol允许误差，s：积分近似值
clear;fun=inline('4./(1+x.^2)');
a=0;b=1;i=1;j=1;h=b-a;tol=1e-6;
T(1,1)=h*(feval(fun,a)+feval(fun,b))/2;
T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
while abs(T(i+1,i+1)-T(i,i))>tol
    i=i+1;h=h/2;
    T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
    for j=1:i
        T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
    end
end
T,s=T(i+1,j+1);s
xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')
```

结果如下：

k	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	$T_5^{(k)}$	$T_6^{(k)}$
0	3					
1	3.1	3.133333				
2	3.131176	3.141569	3.142118			
3	3.138988	3.141593	3.141594	3.141586		
4	3.140942	3.141593	3.141593	3.141593	3.141593	
5	3.14143	3.141593	3.141593	3.141593	3.141593	3.141593

I = 3.141593

例 2： 取 $\varepsilon = 10^{-6}$，用龙贝格方法编程计算积分

$$s = \int_1^2 \frac{\sin x}{x} dx$$

解：

```
fun=inline('sin(x)/x');
a=1;b=2;i=1;j=1;h=b-a;tol=1e-6;
T(1,1)=h*(feval(fun,a)+feval(fun,b))/2;
T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
while abs(T(i+1,i+1)-T(i,i))>tol
    i=i+1;h=h/2;
    T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
    for j=1:i
        T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
    end
end
T
s=T(i+1,j+1);
s, xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')
```

```
s =

  5.9032e-007
```

例 9.5 使用 Romberg 算法求积分 $s=\int_0^1\sqrt{1-\sin t}dt$，精确到 1e−8.

解：程序如下

```
clear;format long
fun=inline('sqrt(1-sin(x))');
a=0;b=1;i=1;j=1;h=b-a;tol=1e-8;
T(1,1)=h*(feval(fun,a)+feval(fun,b))/2;
T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
while abs(T(i+1,i+1)-T(i,i))>tol
    i=i+1;h=h/2;
    T(i+1,1)=T(i,1)/2+sum(feval(fun,a+h/2:h:b-h/2))*h/2;
    for j=1:i
        T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
    end
end
T
s=T(i+1,j+1);
s , xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')
```

结果如下：

```
T =

   0.69907851164308                  0                  0                  0
   0.71029348704960   0.71403181218511                  0                  0
   0.71308625019239   0.71401717123999   0.71401619517698                  0
   0.71378375870701   0.71401626154521   0.71401620089890   0.71401620098972


s =

   0.71401620098972
```

例 2：取 $\varepsilon=10^{-6}$，用龙贝格方法编程计算积分

$$s=\int_0^1 x^{3/2}\,dx$$

解：

```
function Lomberg_Integration   %用龙贝格公式求积分
format long;clear;
a=0;b=1;  %a, b是积分下、上限
i=1;j=1;h=b-a;tol=1e-6; %tol允许误差 s：积分近似值
T(1,1)=h*(fun(a)+fun(b))/2;
T(i+1,1)=JiFen(@fun,a,b,i+1);
T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1);
while abs(T(i+1,i+1)-T(i,i))>tol
    i=i+1;h=h/2; T(i+1,1)=JiFen(@fun,a,b,i+1);
    for j=1:i, T(i+1,j+1)=(4^j*T(i+1,j)-T(i,j))/(4^j-1); end
end
T,s=T(i+1,j+1);s, xlswrite('d:\\1.xls', T,'sheet1', 'b2')
function fun=fun(x)  %被积函数
fun=x^(3/2);
function JiFen=JiFen(fun,a,b,i)   %用复化梯形公式求积分
n=2^(i-1);h=(b-a)/n;s=0;
for k=1:n-1, x=a+h*k; s=s+fun(x);end
JiFen=h*(fun(a)+fun(b))/2.0+h*s;
```

s=0.40004965

计算

9.5 数值微分

9.5.1 用差商代替导数

1、差商型求导公式

由导数定义

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

$$=\lim_{h\to 0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

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

(1) 向前差商公式

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} \qquad (9.5.1)$$

(2) 向后差商公式

$$f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h} \qquad (9.5.2)$$

(3) 中心差商公式（中点方法）

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \qquad (9.5.3)$$

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

差商型求导公式的余项

由泰勒展开式

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2!}f''(x)+\frac{h^3}{6}f'''(\xi),\quad x\le\xi\le x+h$$

$$f(x-h)=f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2!}f''(x)-\frac{h^3}{6}f'''(\eta),\quad x-h\le\eta\le x$$

由Taylor公式

$$f'(x)-\frac{f(x+h)-f(x)}{h}=-\frac{f''(x+\theta_1 h)}{2}h=O(h)$$

$$f'(x)-\frac{f(x)-f(x-h)}{h}=\frac{f'''(x-\theta_2 h)}{2}h=O(h)$$

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

$$=-\frac{f^{(3)}(x+\theta_1 h)+f^{(3)}(x-\theta_2 h)}{12}h^2=O(h^2)$$

$$0<\theta_1,\theta_2<1$$

从截断误差的角度看，步长越小计算结果越准确；

从舍入误差的角度来看，步长不宜太小。

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(\xi),\quad x_0\le\xi\le x_0+h$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(\eta),\quad x_0-h\le\eta\le x_0$$

对于高阶导数，可用高阶差商近似。例如用二阶中心差商近似 $f''(x)$，便得到 $f''(x)$ 的数值微分公式：

$$f''(x_0) \approx \frac{\delta^2}{h^2} f(x)\Big|_{x=x_0}$$

$$= \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2} \tag{9.5.4}$$

记 $\varphi(x_0)=f'(x_0)\approx\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$， 则

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

$$=\frac{\dfrac{[f(x_0+h)-f(x_0)]}{h}-\dfrac{[f(x_0)+f(x_0-h)]}{h}}{h}$$

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

$$f''(x_0)=\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

例 1　设函数 $f(x)=\ln x, x_0=2, h=0.1$，试用数值微分公式计算 $f'(2)$ 的值。

解　由式(9.5.1)、式(9.5.2)和式(9.5.3)分别计算结果为

$$f'(2)\approx\frac{\ln 2.1-\ln 2}{0.1}\approx 0.4879$$

$$f'(2)\approx\frac{\ln 2-\ln 1.9}{0.1}\approx 0.5129$$

$$f'(2)\approx\frac{\ln 2.1-\ln 1.9}{0.2}\approx 0.5004$$

与真值 $f'(2)=0.5$ 相比，式(9.5.3)计算的结果精度较高。

$$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \qquad (9.5.1)$$

$$f'(x)\approx\frac{f(x)-f(x-h)}{h} \qquad (9.5.2)$$

$$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \qquad (9.5.3)$$

9.5.2 数据的数值微分

插值型求导公式

对于给定的 $f(x)$ 的函数表，建立插值函数 $P_n(x)$，可以用插值函数 $P_n(x)$ 的导数近似函数 $f(x)$ 的导数.

设 $x_i, i=0,1,\cdots,n$ 为 $[a,b]$ 上的结点，给定 $(x_i, f(x_i)), i=0,1,\cdots,n$，以 $(x_i, f(x_i))$ 为插值点构造插值多项式 $P_n(x)$，以 $P_n(x)$ 的各阶导数近似 $f(x)$ 的相应阶的导数。

由 $$R_n(x)=f(x)-P_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

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

对任意 $x\in[a,b]$，因为 ξ 未知，所以根据上式很难估计误差。

但在节点处有

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

因此，插值型导数公式通常用于求节点处导数的近似值。

下面考虑在等距节点时节点上的导数值。

两点公式

设给出两个节点$(x_0, f(x_0)),(x_1, f(x_1))$，记$x_1 - x_0 = h$，有

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

从而 $$P_1'(x) = \frac{1}{h}\left[-f(x_0) + f(x_1)\right]$$

$$P_1'(x_0) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right],\ P_1'(x_1) = \frac{1}{h}\left[f(x_1) - f(x_0)\right]$$

带余项的两点公式是

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

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

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

三点公式

设已给出三个节点x_0， $x_1=x_0+h$， $x_2=x_0+2h$上的函数值

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

令$x=x_0+th$,则

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

上式对t求导：$P_2'(x_0+th)=\dfrac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)$

$-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)].$

在上式中令$t=0,1,2$得到

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

$$P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)];\quad \text{（中点公式）}$$

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

带余项的三点求导公式：

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

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi);\quad \text{（中点公式）}$$

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

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

注意 中点公式少用了一个函数值 $f(x_1)$

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

可利用插值多项式，建立高阶数值微分公式：

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

例：对 $P_2'(x_0 + th) = \frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)$
$-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)]$. 再对$t$求导，

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

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

带余项的二阶三点公式：

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

同样，可以得到五点公式。

(3)五点公式（n=4）

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{1}{12h}(-25y_0+48y_1-36y_2+16y_3-3y_4) & R'(x_0)=\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{1}{12h}(-3y_0-10y_1+18y_2-6y_3+y_4) & R'(x_1)=-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_2)=\dfrac{1}{12h}(y_0-8y_1+8y_3-y_4) & R'(x_2)=-\dfrac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_3)=\dfrac{1}{12h}(-y_0+6y_1-18y_2+10y_3+3y_4) & R'(x_3)=-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_4)=\dfrac{1}{12h}(3y_0-16y_1+36y_2-48y_3+25y_4) & R'(x_0)=\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \end{cases}$$

(4)七点公式（n=6）

$$f'(x_3)=\frac{1}{60h}(-y_0+9y_1+45y_2+45y_4-9y_5+y_6) \qquad R'(x_3)=-\frac{h^6}{140}f^{(7)}(\xi)$$

但应注意：当插值多项式 $P_n(x)$ 收敛于 $f(x)$ 时，不能保证 $P_n'(x)$ 一定收敛于 $f'(x)$，而且当节点间的距离缩小时，虽然截断误差缩小了，但舍入误差却可能增大．因此，缩小步长不一定都能提高计算结果的精确度．

例 **3.8**　已知函数 $f(x)=e^x$ 的下列数值

x	0	0.90	0.99	1.00	1.01	1.10	2
$f(x)=e^x$	1.000	2.460	2.691	2.718	2.746	3.004	7.389

试用三点数值微分公式(3.54)中的第二式计算 $f'(1)$ 的近似值并比较步长 h 分别取 1，0.1，0.01 的计算结果．

分别取 $x=x_0, x_1$ 和 x_2，即得带余项的三点数值微分公式：

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]+\dfrac{h^2}{3}f'''(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\dfrac{h^2}{6}f'''(\xi) \\ f'(x_2)=\dfrac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]+\dfrac{h^2}{3}f'''(\xi) \end{cases}$$

$\xi\in(x_0, x_2)$　(3.54)

解　(1) $h=1$ 时，取 $x_0=0$，$x_1=1$，$x_2=2$

$$f'(1)\approx\frac{1}{2}(-e^0+e^2)=3.195$$

(2) $h=0.1$ 时，取 $x_0=0.90$，$x_1=1.00$，$x_2=1.10$

$$f'(1)\approx\frac{1}{2\times0.1}(-e^{0.90}+e^{1.10})=2.720$$

(3) $h=0.01$ 时，取 $x_0=0.99$，$x_1=1.00$，$x_2=1.01$

$$f'(1)\approx\frac{1}{2\times0.01}(-e^{0.99}+e^{1.01})=2.750$$

容易求得 $f'(1)$ 的真值为 $e^1=2.7182818$.

上面的计算结果表明，当步长由 1 减少到 0.1 时，计算精度明显提高，但是当步长由 0.1 减少到 0.01 时，精度反而有所降低．问题的根源在于在实际计算中，不但有截断误差，还有舍入误差，而数值微分恰好对舍入误差非常敏感，它随 h 的缩小而增大，这就是造成计算不稳定性的原因．故使用数值微分公式时，要特别注意误差的分析．

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$
$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$
$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

x	0	0.90	0.99	1.00	1.01	1.10	2
$f(x)=e^x$	1.000	2.460	2.691	2.718	2.746	3.004	7.389

8.5.3 数值微分的外推法

根据 Taylor 公式，我们得到：

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

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

两式相减，除以 $2h$，移项得到：

$$f'(x)-\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}=-\sum_{i=1}^{\infty}\frac{f^{(2i+1)}(x)}{(2i+1)!}h^{2i} \qquad (9.5.5)$$

记

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

（9．5．5）就是

$$f'(x)-G(h)=\alpha_1 h^2+\alpha_2 h^4+\alpha_3 h^6+\cdots \qquad (9.5.5)$$

利用 Richardon 外推法（这里 $G(h)$ 相当于那里的 $T(h)$）中，取 $q=\dfrac{1}{2}$，

则有如下外推公式：

$$\begin{cases} G_1(h)=G(h) \\ G_{m+1}(h)=\dfrac{G_m(h/2)-4^{-m}G_m(h)}{1-4^{-m}} \\ \qquad =\dfrac{4^m G_m(h/2)-G_m(h)}{4^m-1}, \quad m=1,2,\cdots \end{cases} \qquad (9.6.11)$$

其中

$$f'(x)-G_{m+1}(h)=O\left(h^{2(m+1)}\right)$$

例题：利用外推法求 $f(x)=e^{x}$ 在 $x=1$ 处的一阶导数值。

解：见课本

$$
\begin{cases}
G_1(h) = G(h), \\
G_{m+1}(h) = \dfrac{4^m G_m\left(\dfrac{h}{2}\right) - G_m(h)}{4^m - 1}, m = 1,2,\cdots.
\end{cases}
\tag{8.8}
$$

公式 (9.6.11) 的计算过程见表 4.16，表中ⓘ为外推步骤.

表 4.16

$G(h)$						
$G\left(\frac{h}{2}\right)$	① $\rightarrow$	$G_2(h)$				
$G\left(\frac{h}{2^2}\right)$	② $\rightarrow$	$G_2\left(\frac{h}{2}\right)$	③ $\rightarrow$	$G_3(h)$		
$G\left(\frac{h}{2^3}\right)$	④ $\rightarrow$	$G_2\left(\frac{h}{2^3}\right)$	⑤ $\rightarrow$	$G_3\left(\frac{h}{2}\right)$	⑥ $\rightarrow$	$G_4(h)$
$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$ $\ddots$

例题：利用 Richardon 外推法（$h=0.2$）求 $f(x)=xe^x$ 在 $x=2$ 处的一阶导数的近似值。

解：令

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

我们有

$$G(h)=G_1(h)=22.414160\ ,\quad G_1\left(\frac{h}{2}\right)=22.228786\ ,$$

于是

$$G_2(h)=\frac{4G_1(h/2)-G_1(h)}{4-1}=22.166995$$

$$\begin{cases} G_1(h)=G(h) \\ G_{m+1}(h)=\dfrac{G_m(h/2)-4^{-m}G_m(h)}{1-4^{-m}}, \quad m=1,2,\cdots \end{cases} \qquad (9.5.6)$$

从 $G_1\left(\frac{h}{2}\right)=22.228786$， $G_1\left(\frac{h}{4}\right)=22.182564$

又得 $G_2\left(\frac{h}{2}\right)=22.167157$

再从 $G_2(h)=22.166995$， $G_2\left(\frac{h}{2}\right)=22.167157$

得 $G_3\left(h\right)=22.167168$

即 $f'\left(2\right)\approx 22.167168$

而真值为 $f'\left(2\right)=22.167168$

有 8 位有效数字

同样，根据 Taylor 公式

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

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

两式相加，除以 h^2，移项得到：

$$f''(x)-\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=-\sum_{i=1}^{\infty}\frac{2f^{(2i+2)}(x)}{(2i+2)!}h^{2i}$$

令$G(h)=\dfrac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}\approx f''(x)$，上式就是

$$f''(x)-G(h)=\beta_1h^2+\beta_2h^4+\beta_3h^6+\cdots \qquad (9.5.5')$$

再利用 Richardon 外推法（这里$G(h)$相当于那里的$T(h)$）中，取$q=\dfrac{1}{2}$，则

有如下二阶导数外推公式：

$$\begin{cases} G_1(h)=G(h) \\ G_{m+1}(h)=\dfrac{G_m(h/2)-4^{-m}G_m(h)}{1-4^{-m}}, \quad m=1,2,\cdots \end{cases}$$

其中

$$f''(x)-G(h)=\beta_1h^2+\beta_2h^4+\beta_3h^6+\cdots \qquad (9.5.5')$$

例 9　用外推法计算 $f(x)=x^2e^{-x}$ 在 $x=0.5$ 的导数.

解　令 $G(h)=\frac{1}{2h}\left[\left(\frac{1}{2}+h\right)^2e^{-\left(\frac{1}{2}+h\right)}-\left(\frac{1}{2}-h\right)^2e^{-\left(\frac{1}{2}-h\right)}\right]$,

当 $h=0.1,0.05,0.025$ 时，由外推法表 4-10 可算得

$$G(0.1)=0.4516049081$$

$$G(0.05)=0.4540761693 \downarrow \xrightarrow{1} G_1(h)=0.4548999231$$

$$G(0.025)=0.4546926288 \downarrow \xrightarrow{2} G_1\left(\frac{h}{2}\right)=0.4548981152$$

$$\downarrow \xrightarrow{3} G_2=0.454897994$$

$f'(0.5)$ 的精确值为 0.454897994，可见当 $h=0.025$ 时用中点微分公式只有 3 位有效数字，外推一次达到 5 位有效数字，外推两次达到 9 位有效数字.

例题：求 $f(x)=x^2e^{-x}$ 在 $x=0.5$ 处的导数。

解：令 $G(h)=\frac{1}{2h}\left[f(1+\frac{h}{2})-f(1-\frac{h}{2})\right]=\frac{1}{2h}\left[(1+\frac{h}{2})^2e^{1+h/2}-(1-\frac{h}{2})^2e^{1-h/2}\right]$

```
function Lomberg_Daoshu
%用途：用外推法求导数
%fun是待求导函数，要求x处的导数
%tol允许误差 s：导数近似值
format long;clear;
a=0;b=1;h=(b-a)/10;x=0.5;
G(1,1)= DaoShu(@fun,h,x);
for i=2:3
for j=1:i
  if j==1, G(i,j)= DaoShu(@fun,h/2^(i-1),x);
 else, G(i,j)=(4^(j-1)*G(i,j-1)-G(i-1,j-1))/(4^(j-1)-1); end
end
end
G,s=G(3,3);s, xlswrite('d:\\1.xls', G,'sheet1', 'b2')
function fun=fun(x)  %被积函数
fun=x^2*exp(-x);
function DaoShu=DaoShu(fun,h,x)  %求差分
DaoShu=1/(2*h)*(fun(1/2+h)-fun(1/2-h));
```

结果：

G =

0.45160490814074	0	0
0.45407616936688	0.45489992310893	0
0.45469262877367	0.45489811524259	0.45489799471817

s =

0.45489799471817