# 9 数值积分与数值微分

(Numerical Integration and Numerical Differentiation

- 9.1 引言
- 9.2 插值型求积公式
- 9.3 外推法与Romberg求积公式
- 9.4 Gauss求积公式
- 9.6 数值微分

#### 9.1 引言

•在实际问题中,往往会遇到被积函数f(x)的原函数无法用初等函数来表示,或函数只能用表格表示,或有的虽然能用初等函数表示,但过分复杂,所有这些情形都需要去建立定积分的近似计算公式。

# 将定积分近似表为 f<sup>b</sup> f

P283-284

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

4 1

的公式,称为数值求积公式(numerical quadrature formula).  $a_i$  (i=0,1,...,n)称为求积系数, $x_i$  (i=0,1,...,n) 称为求积结点。

$$R_n(f) = \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$$

称为求积余项。

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

插值型求积公式

# 9.2 插值型求积公式

•设 $x_0,x_1,\cdots,x_n\in[a,b],p_n(x)$ 是f(x)的n次Lagrange插值多项式。

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_{n,i}(x),$$

$$f^{(n+1)}(\xi(x))$$

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

$$W_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n), a < \xi(x) < b$$

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a}^{b} p_{n}(x)dx + \int_{a}^{b} \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx$$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) l_{n,i}(x), \quad f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} w_{n+1}(x)$$

$$W_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n), a < \xi(x) < b$$

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a}^{b} p_{n}(x)dx + \int_{a}^{b} \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx$$

$$= \underbrace{\int_{a}^{b} \sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) l_{n,i}(x) dx}_{n+1} + \frac{1}{(n+1)!} \int_{a}^{b} f^{(n+1)}(\xi(x)) w_{n+1}(x) dx$$

$$= \underbrace{\sum_{i=0}^{n} a_{i} f(x_{i}) + R_{n}(f)}_{n}$$

$$a_i = \int_{-b}^{b} l_{n,i}(x) dx \quad i = 0, 1, \dots, n$$

插值型求积公式(Interpolating quadrature formula)

$$I(f) = \int_{a}^{b} f(x)dx = I_{n}(f) + R_{n}(f)$$
 P284

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$$
 (1) 其中,求积系数为 
$$a_i = \int_a^b I_{n,i}(x) dx \quad i = 0,1,\cdots,n \quad (2)$$

$$l_{n,i}(x)$$
为Lagrange插值基函数:  $l_{nj}(x) = \prod_{i=0}^{n} \frac{x - x_i}{x_i - x_i}$ 

求积余项为  $R(f) = \int_{a}^{b} f(x) - n(x)$ 

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

$$= \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x)) w_{n+1}(x) dx$$
 (3)

★★(1) 代数精度(degree of accuracy) ★★

P285

定义1 若求积公式  $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$  (1),

对 $f(x)=1, x, x^2, x^3...x^m$ ,都等号成立,即 $R_n(x^i)=0$ ;而对于 $x^{m+1}$  等号不成立,则称此公式的代数精度为 $\mathbf{m}$ .

定义2 若求积公式(1)对一切不高于m次的多项式p(x)都等号成立,即 $R_n(p)=0$ ;而对于m+1次多项式等号不成立,则称此公式 的代数精度为m.

代数精度越高,公式越精确。

求法  $M_f(x)=I_{,x,x^2,x^3}...$ 依次验证求积公式是否成立,若第一个不成立的等式是 $x^m$ ,则其代数精度是m-1.

例1: 求积公式的代数精度.

$$\int_0^h f(x)dx \approx h(f(0) + f(h))/2$$

解: 取f(x)=1,则上述公式 左=h,右=h(1+1)/2=h,故左=右;

取f(x)=x,则 左= $h^2/2$ ,右= $h(0+h)/2=h^2/2$ ,故左=右;

取 $f(x)=x^2$ ,则左= $h^3/3$ ,右= $h(0+h^2)/2=h^3/2$ 

左≠右,所以求积公式具有1 次代数精度。

定理1 n+1个结点的求积公式  $I_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$  (1) 至少具有n次代数精度的充分必要条件是它是插值型的. 证明: (1) 充分性 P285

若 求积公式 (1) 是插值型的,

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \sum_{j=0}^{n} a_{j} f(x_{j}) + R_{n}(f)$$

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

当f(x)是任何一个不超过n次的多项式时,余项 $R_{x}(f)=0$ .

即, (n+1)个结点的插值型求积公式至少具有n次代数精度。

定理1 求积公式  $I_n(f) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$  (1)

至少具有n次代数精度的充分必要条件是它是插值型的.

(2) 必要性

若 求积公式 (1) 至少具有n次代数精度,

则对任意 $\leq$ n次多项式f都有  $I(f) = I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$ 

特别

$$I(l_{n,k}(x)) = I_n(l_{n,k}(x)) = \sum_{i=0}^n a_i l_{n,k}(x_i) = \sum_{i=0}^n a_i \delta_{ik} = a_k$$

 $\triangleleft$ 

即

$$a_k = I(l_{n,k}(x)) = \int_a^b l_{n,k}(x) dx$$

所以求积公式 (1) 是插值型求积公式.

# (2) 牛顿—柯特斯(Newton-Cotes) 积分

插值型求积公式  $I(f) = \int_a^b f(x)dx = I_n(f) + R_n(f)$ 

其中,求积系数为 
$$I_n(f) = \sum_{i=0}^n a_i f(x_i)$$

$$a_i = \int_a^b l_{n,i}(x) dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \ j\neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j} dx$$
,  $i = 0,1,\dots,n$ 

求积余项为

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

当求积节点等距分布时,插值型求积公式称为 (n+1)点-牛顿——柯特斯(Newton-Cotes) 求积公式。

将积分区间[a,b] n等分,节点 $x_i$ 为  $x_i=a+ih$ , i=0,1,2,...,n

其中h=(b-a)/n。引进变换 x=a+th , $0 \le t \le n$  由公式 (1) ,有

 $\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_{i} f(x_{i}) \quad (4)$ 

$$a_{i} = \int_{a}^{b} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_{j}}{x_{i} - x_{j}} dx = h \int_{0}^{n} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} \frac{t - j}{i - j} dt = (b - a) c_{i}^{(n)}$$

$$c_i^{(n)} = \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j \neq i}}^n \frac{t-j}{i-j} dt = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j \neq i}}^n (t-j) dt$$
 (5)

 $c_i^{(n)}$ 称为柯特斯系数。

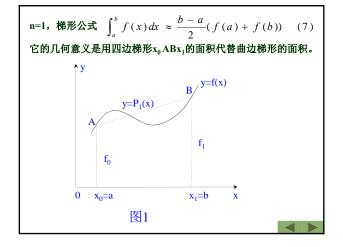
$$c_i^{(n)} = \frac{1}{n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j \neq i}}^n \frac{t-j}{i-j} dt = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\j \neq i}}^n (t-j) dt$$
 (5)

 $i=0,1,\cdots,n$   $c_i^{(n)}$  称为柯特斯系数。 于是 $(\mathbf{n+1})$ 点牛顿—柯特斯求积公式为

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_{i} f(x_{i}) = (b-a) \sum_{i=0}^{n} c_{i}^{(n)} f(x_{i}) \quad (6)$$

常用公式: 1) 梯形公式(Trapezoidal Rule)(n=1)  $x_0 = a$ ,  $x_1 = b$ , h = b - a,  $c_0^{(1)} = c_1^{(1)} = 1/2$ 

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{b - a}{2} (f(a) + f(b)) \quad (7)$$



#### 梯形公式的误差

$$R_1(f) = \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$$
  
=  $-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta), \quad a < \eta < b.$ 

所以,带误差项的梯形公式是(n=1)

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)) - \frac{(b-a)^{3}}{12} f''(\eta), a < \eta < b$$

## 2) 辛普森公式(Simpson's Rule) (n=2)

 $x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = b, h = (b - a)/2,$   $c_0^{(2)} = 1/6, c_1^{(2)} = 2/3, c_2^{(2)} = 1/6,$  代入(6)式,可得

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

$$R_{2}(f) = -\frac{1}{90} h^{5} f^{(4)}(\eta), \quad a < \eta < b$$
(8)

P287

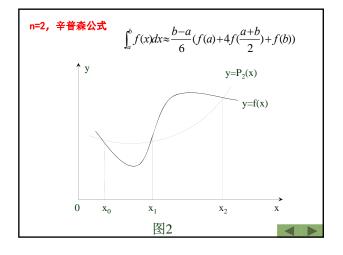
 $\triangleleft$ 

P287

带误差项的辛卜生公式是

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3} (f_0 + 4 f_1 + f_2) - \frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\eta)$$

$$x_0 < \eta < x_1 \qquad (9)$$



#### 3) 3/8 辛普森公式 (n=3)

(Simpson's Three-Eighths Rule)

 $x_0 = a, x_1 = a + h, x_2 = a + 2h, x_3 = b, h = (b-a)/3$ 

带余项的3/8辛普森公式为:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{3h}{8} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) - \frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi)$$

4) Cotes 公式 (n=4)

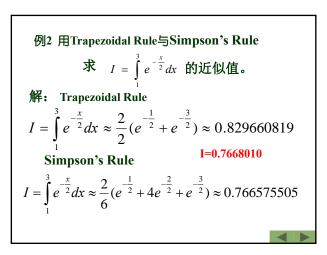
 $x_0=a, x_1=a+h, x_2=a+2h, x_3=a+3h, x4=b$  , h=(b-a)/4 带余项的Cotes公式为:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \frac{2h}{45} (7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4) - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi)$$

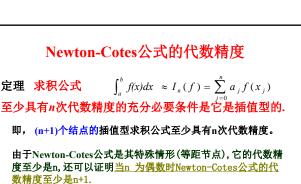
$$x_0 < \xi < x_4 \qquad (11)$$

# 

梯形公式(n=1) 
$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} (f(a)+f(b))$$
 抛物线公式(n=2) 
$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{b-a}{6} (f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b))$$
 3/8辛普森公式(n=3) 
$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{3h}{8} (f_{0}+3f_{1}+3f_{2}+f_{3})$$
 Cotes 公式 (n=4) 
$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \frac{2h}{45} (7f_{0}+32f_{1}+12f_{2}+32f_{3}+7f_{4})$$







由于Newton-Cotes公式是其特殊情形(等距节点),它的代数精 度至少是n,还可以证明当n 为偶数时Newton-Cotes公式的代 数精度至少是n+1.

当n=1时,梯形公式的求积余项:  $R_{\rm l}(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi), \ a<\xi< b$ 

当n=2时, h=(b-a)/2, 辛普森公式的求积余项:

$$R_2(f) = -\frac{1}{90}h^5f^{(4)}(\eta), \quad a < \eta < b$$
 它的代数精度为3.

当n=3时, 3/8辛普森公式的求积余项:

$$R_3(f) = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi), a < \xi < b, h = \frac{b-a}{3}$$

它的代数精度为3.

当n=4时, Cotes公式的求积余项:

$$R_4(f) = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi), h = \frac{b-a}{4}, a < \xi < b$$

它的代数精度为5.

例3: 选择常数a, 使求积公式

$$\int_0^h f(x)dx \approx h(f(0) + f(h))/2 + ah^2(f'(0) - f'(h))$$

的代数精度尽量高,并求代数精度次数.

求法 从 $f(x)=1,x,x^2,x^3...$ 依次验证求积公式是否成立,若第一个不成立的等式是 $x^m$ ,则其代数精度是 $\mathbf{n}=1$ .

解: 取f(x)=1,则上述公式 左=h,右=h(1+1)/2=h,故左=右; 取f(x)=x,则 左= $h^2/2$ ,右= $h(0+h)/2=h^2/2$ ,故左=右;

取 $f(x)=x^2$ , 则 左= $h^3/3$ , 右= $h(0+h^2)/2+ah^2(-2h)=h^3/2-2ah^3$ 令  $h^3/2-2ah^3=h^3/3$ , 得 a=1/12

**4** Þ

 $\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(0) + f(h)) + \frac{h^2}{12}(f'(0) - f'(h))$ 

取 $f(x)=x^3$ ,则左= $h^4/4$ ,右= $h(h^3)/2+h^2(-3h^2)/12=h^4/4=左$ ;

再取f(x)=x<sup>4</sup>时, 左=h<sup>5</sup>/4,右= h<sup>5</sup>/2+h<sup>2</sup>(-4h<sup>3</sup>)/12= h<sup>5</sup>/6

左≠右,所以当 a = 1/12时,求积公式具有最高3次代数精度。

(3) Newton-Cotes公式的数值稳定性

初步看来似乎n值越大,精确度越大。是不是n越大越好呢?

答案是否定的,可以证明: 当求积系数  $c_i^{(n)} \ge 0$ 时,

舍入误差可以得到控制,从而求积公式是稳定性的。

但是、当n=8时、The closed Newton-Cotes公式的系数为:

989/28350, ..., -928/28350, ...-4540/28350, ......

已出现负数,说明当n≥8时,稳定性将得不到保证,另一 方面 $R_n(f)$  中有高阶导数,一般地说,难以进行误差估计。因此,在实际计算中,不用高阶的牛顿—柯特斯求 积公式,一般我们只取n=1,2,4。

复合求积 (4)

(Composite Numerical Integration)

- 从余项的讨论看到,积分区间缩小,也可使求积公式 的截断误差变小。因此,我们经常把积分区间分成若 干小区间,在每个小区间上采用次数不高的插值公式, 如梯形公式或抛物线公式,构造出相应的求积公式, 然后再把它们加起来得到整个区间上的求积公式,这 就是复合求积公式的基本思想。
- · 复合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。
- 常用的复合求积公式是复合梯形公式和复合抛物线公

# 复合梯形公式、复合抛物线公式 $I=\int_a^b f(x)dx$

- 复合梯形公式(Composite Trapezoidal rule) P290
- 把区间[a,b] n等分,取节点 $x_k=a+kh$ ,k=0,1,...n,h=(b-a)/n,对每个小区间[ $x_k$ , $x_{k+1}$ ]用梯形求积公式,再累加起来得:

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

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

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

#### 复合抛物线公式(Composite Simpson rule)

•令n=2m,m为正整数, h=(b-a)/n,在小区间 $[x_{2k-2},x_{2k}]$ 上 •用辛普森求积公式,有:

$$I = \int_{a}^{b} f(x)dx = \sum_{k=1}^{m} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{m} \frac{h}{3} (f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}))$$

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

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

# 复合积分的误差与收敛阶

定理3 (复合梯形求积公式的误差)设 $f(x) \in C^2[a,b]$ ,则

$$R(f,T_n) = \int_a^b f(x) dx - T_n = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta)$$
 其中h=(b-a)/n,  $x_k$ =a+kh,k=0,1,...,n  $a \le \eta \le b$ 

定理4(复合抛物线求积公式的误差)设 $f(x) \in C^4[a,b]$ ,则

$$R(f, S_n) = \int_a^b f(x) dx - S_n = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\eta)$$

$$a \le \eta \le b, \quad \text{ if } n = 2m, h = (b-a)/n$$

## 复合积分的收敛阶

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

定义 3 (收敛阶数)如果一种复合求积公式  $I_n$  当  $h \to 0$  时成立渐进关系式

$$\lim_{n\to\infty} \frac{I-I_n}{I_nP} = C \quad .$$
 P291

其中 $C \neq 0$ 为常数,则称此求积公式是p阶收敛.

收敛阶数反映复化求积公式收敛到准确值的快慢程度.

• 复合梯形公式 :  $x_k=a+kh$ , k=0,1,...n, h=(b-a)/n,

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

$$R(f, T_n) = I - T_n = -\frac{(b-a)}{12}h^2f''(\eta) = O(h^2)$$

复化梯形公式是2阶收敛.

定义 3 (收敛阶数)如果一种复合求积公式  $I_n$  当  $h \to 0$  时成立渐进关系式

$$\lim_{h\to 0} \frac{I-I_n}{h^p} = C . \qquad I = \int_0^b f(x) dx$$

其中 $C \neq 0$ 为常数,则称此求积公式是p阶收敛.

• 复合抛物线公式:  $x_k=a+kh$ , k=0,1,...n, h=(b-a)/n,

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

$$R(f, S_n) = \int_a^b f(x) dx - S_n = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\eta) = O(h^4)$$

复化Simpson公式是4阶收敛的。

# 例4 用复合抛物线公式计算 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$ ,误差小于 $0.5 \times 10^4$ 。解

$$f(x) = \frac{\sin x}{x} = \int_0^1 \cos tx \, dt, \quad f^{(k)}(x) = \int_0^1 \frac{d^k (\cos tx)}{dx^k} \, dt = \int_0^1 t^k \cos(tx + \frac{k\pi}{2}) \, dt$$

$$\Rightarrow \quad \max_{0 \le x \le 1} \left| f^{(k)}(x) \right| \le \max_{0 \le x \le 1} \int_0^1 t^k \cos(tx + \frac{k\pi}{2}) \, dt \le \int_0^1 t^k \, dt = \frac{1}{k+1}$$

$$∴ |R(f, S_n)| = \frac{1}{180} h^4 |f^{(4)}(\eta)|, \quad \text{这里} \quad h = 1/n, \quad 0 < \eta < 1$$

$$\left| : \left| R(f, S_n) \right| \le \frac{1}{180} \left( \frac{1}{n} \right)^4 \left( \frac{1}{5} \right) \le \frac{1}{2} \times 10^{-6}, \Rightarrow n \ge 6.866$$

$$R(f, S_n) = \int_a^b f(x) dx - S_n = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\eta)$$

$$a \le n \le b. \quad \text{ iff } n = 2m, h = (b-a)/n$$

因为n取偶数,所以n=2m=8, h=1/8, x<sub>i</sub>=i/8

$$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx S_8$$

$$S_8 = \frac{h}{3} [f(0) + 4\sum_{i=1}^4 f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^3 f(x_{2i}) + f(1)]$$

$$S_8 = \frac{h}{3} [f(0) + 4\sum_{i=1}^4 f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^3 f(x_{2i}) + f(1)]$$

$$= \frac{1}{24} [1 + 4\sum_{i=1}^4 \frac{8\sin(\frac{2i-1}{8})}{2i-1} + 2\sum_{i=1}^3 \frac{4\sin(\frac{i}{4})}{i} + \sin 1] = 0.9460833$$

下面采用同样的节点,按复合梯形公式计算

$$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx T_8 = \frac{h}{2} [f(0) + 2 \sum_{i=1}^7 f(x_i) + f(1)]$$
 可证: 复化抛物 线公式,复化梯 形公式是数值稳 定的。 要达到相同的精度,即满足 |  $R(f,T_n)$  |  $< 0.5 \times 10^{-6}$ 

$$= \frac{1}{2} \left[ 1 + 2 \sum_{i=1}^{7} \frac{8 \sin \frac{i}{8}}{i} + \sin 1 \right] = 0.9456911$$

需要 
$$|R(f,T_n)| = \frac{1}{12}h^2|f^{(2)}(\eta)| \le \frac{1}{12}(\frac{1}{n})^2(\frac{1}{3}) \le \frac{1}{2} \times 10^{-6},$$

显然,要达到相同的精度,复合梯形公式比复合抛物线公式 计算量大得多。

复化<mark>抛物线</mark>公式是实际问题中,较常用的公式。

作业

习题 9

P324:

1(2), 2, 3(2), 4, 5

上机作业6:

数值实验: 9-1