第四章　数值积分与数值微分

1　介绍

首先来看一个例子. **例1**　在电磁学中, 可以证明一个环形线圈电流产生的磁场的强度为

$$H(x)=\frac{4Ir}{r^2-x^2}\int_0^{\pi/2}[1-(x/r)^2sin^2(\theta)]^{0.5}d\theta,$$

其中I是电流强度, r环形线圈的半径, x是该点到环形线圈中心点的距离. 如果I, r和x已知, 那么需要计算一个定积分来得到磁场强度. 但是这个被积函数的原函数不能用初等函数表示, 因此只能近似计算.

当被积函数的原函数不能用初等函数表示或者很难计算时, 就需要数值积分. 基本的近似计算$\int_a^b f(x)dx$的方法是用

$$\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

来近似$\int_a^b f(x)dx$. 一类数值积分公式(牛顿-柯特斯Newton-Cotes公式)是基于多项式插值的, 即利用被积函数在某些点的取值来构造一个插值多项式, 然后用这个插值多项式的积分来近似要求的定积分. 一般来说, 为了计算简单, 这些点都是均匀分布的. 另一类数值积分公式(高斯Gauss公式)则是在某种优化的意义下选取插值点, 而不是等分点.

我们将会用到下面的定理.

定理1(积分中值定理)　设$g(x)$是$[a,b]$上的非负或非正可积函数, 如果$f(x)$在$[a,b]$上连续, 则至少存在$[a,b]$上的一个点ξ, 满足

$$\int_a^b f(x)g(x)dx=f(\xi)\int_a^b g(x)dx.$$

定理2(介值定理)　设$f(x)$在$[a,b]$上连续, K是介于$f(a)$和$f(b)$之间的一个值, 则存在$c\in(a,b)$, 使得$f(c)=K$.

2　插值型求积公式

选定区间$[a,b]$上的点$\{x_0,\ldots,x_n\}$, 则可以对插值多项式

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

进行积分, 则有

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)dx+\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))\psi(x)}{(n+1)!}dx\\ &= \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)+\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\psi(x)dx,\end{aligned}$$

其中$\xi(x) \in [a,b]$, $a_i = \int_a^b l_i(x)dx, i = 0, 1, \ldots, n$. 因此可以得到如下的求积公式

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

其误差估计为

$$E(f) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\psi(x)dx.$$

2.1 梯形公式

梯形公式是利用一阶拉格朗日插值多项式得到的. 设$p_1(x)$是满足

$$p_1(a) = f(a) \quad \text{and} \quad p_1(b) = f(b)$$

的一阶拉格朗日插值多项式, 即

$$\begin{aligned} p_1(x) &= \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b) \\ &= \frac{1}{b-a}[(b-x)f(a) + (x-a)f(b)], \end{aligned}$$

从而有

$$\begin{aligned} I(f) := \int_a^b f(x)dx &= \int_a^b \frac{(b-x)f(a) + (x-a)f(b)}{(b-a)} dx + E_1(f) \\ &= \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] + E_1(f), \end{aligned}$$

其中

$$E_1(f) = \frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi(x))(x-a)(x-b)dx.$$

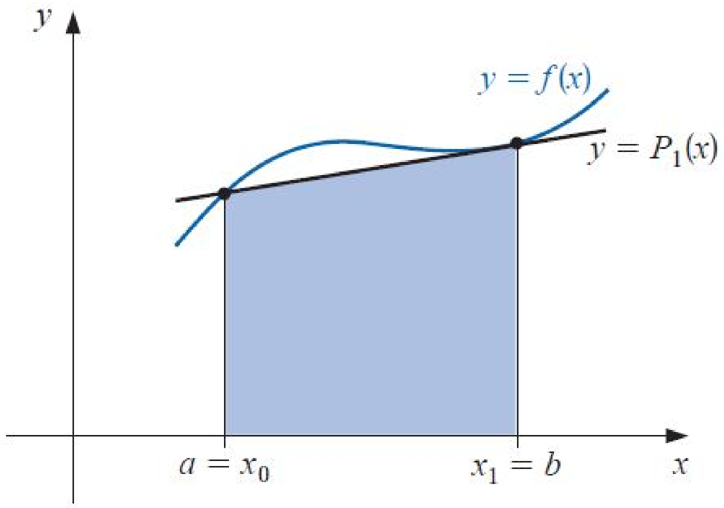
利用积分中值定理可得

$$E(f) = \frac{1}{2} f''(\xi) \int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{h^3}{12} f''(\xi).$$

因此就有

$$I(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$$

其中$\xi \in [a,b]$. 这个公式称作**梯形公式**, 因为这相当于用梯形的面积来近似曲边梯形$f(x)$的面积.



因为梯形公式的误差中包含f'', 因此当被积函数的二阶导数恒为零时, 即被积函数是不超过一次的多项式, 梯形公式得到的就是精确值.

定义1 如果对于所有的次数不超过m的多项式$f(x)$, 某个求积公式$I_n(f)$能得到$I(f)$的精确值, 并且对某个$m+1$阶多项式, $I_n(f) \neq I(f)$, 则称求积公式$I_n(f)$具有**m次代数精度**.

对于梯形公式, 其代数精度$m = 1$.

2.2 辛普生Simpson's公式

辛普生公式是利用函数$f(x)$在三个点$x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = a + 2h = b$ ($h = \frac{b-a}{2}$)上的值构造二阶拉格朗日插值多项式$p_2(x)$, 然后对其积分得到的.

$$f(x) = p_2(x) + E_2(x),$$

其中

$$\begin{aligned} p_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) \\ &\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2) \\ &= \frac{1}{2h^2}[(x-x_1)(x-x_2)f(x_0) - 2(x-x_0)(x-x_2)f(x_1) \\ &\quad + (x-x_0)(x-x_1)f(x_2)], \end{aligned}$$

$$E_2(x) = (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)f[x, x_0, x_1, x_2],$$

这里

$$f[x, x_0, x_1, x_2] = \frac{f'''(\xi)}{3!}.$$

因此就有

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_2(x)dx + \int_a^b E_2(x)dx,$$

这样得到的辛普生求积公式为:

$$I_2(f) := \int_a^b p_2(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)].$$

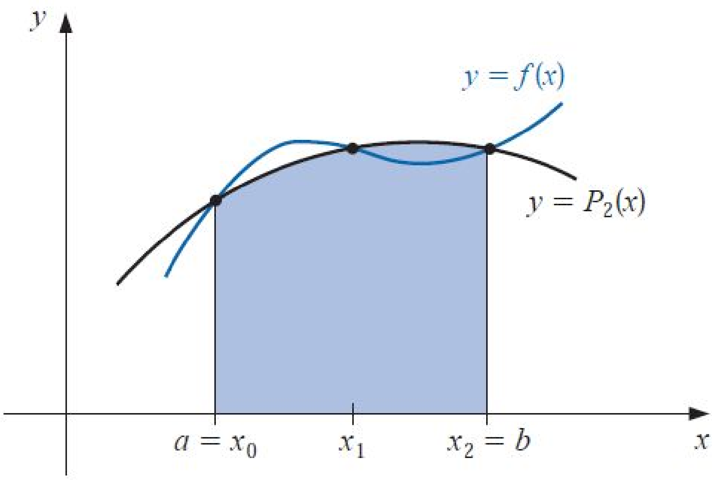
这样可以得到辛普生公式的误差

$$E_2(f) := \int_a^b E_2(x)dx$$

是$O(h^4)$. 但实际上, 可以有更高阶的误差估计

$$E_2(f) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$

其中$\xi \in [x_0, x_2] = [a, b]$.



辛普生公式的代数精度为$m = 3$.

例2 利用梯形公式和辛普生公式近似计算

$$\int_1^2 ln(x)dx$$

并给出误差估计.

解 利用梯形公式有

$$\int_1^2 ln(x)dx \approx \frac{1}{2}(ln(1) + ln(2)) = \frac{ln(2)}{2} = 0.3466.$$

梯形公式的误差为

$$-h^3 f''(\eta)/12,$$

其中$1 \leq \eta \leq 2$. 由于

$$f''(x) = -1/x^2,$$

因此误差上界为

$$\frac{1^3}{12\eta^2} \leq \frac{1}{12} = 0.0834.$$

这样就有

$$\int_1^2 ln(x)dx = 0.3466 \pm 0.0834.$$

利用分步积分可以得到积分的精确值为

$$\int_1^2 ln(x)dx = xln(x)|_1^2 - \int_1^2 dx = 2ln(2) - 1ln(1) = 0.386294.$$

这和梯形公式的近似值与误差界是吻合的.

而利用辛普生公式有

$$\int_1^2 ln(x)dx \approx \frac{0.5}{3}[ln(1) + 4ln(\frac{3}{2}) + ln(2)) = 0.3858.$$

辛普生公式的误差为

$$-h^5 f^{(4)}(\eta),\ 1 \le \eta \le 2.$$

由于

$$f^{(4)}(x) = -6/x^4,$$

因此误差上界为

$$\frac{6 \times (0.5)^5}{90\eta^4} \le \frac{6 \times (0.5)^5}{90} = \frac{1}{480} = 0.0021.$$

于是就有

$$\int_1^2 ln(x)dx = 0.3858 \pm 0.0021,$$

可以看出辛普生公式比梯形公式更精确.

例3 函数$f(x)$在[0, 2]区间上的梯形积分公式为

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

辛普生公式为

$$\int_0^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(0) + 4f(1) + f(2)].$$

对于一些常见函数的计算结果如下:

$f(x)$	x^2	x^4	$1/(x+1)$	$\sqrt{1+x^2}$	$sin(x)$	e^x
Exact Value	2.667	6.400	1.099	2.958	1.416	6.389
Trapezoidal	4.000	16.000	1.333	3.326	0.909	8.389
Simpson′s	2.667	6.667	1.111	2.964	1.425	6.421

可以看出辛普生公式比梯形公式更精确.

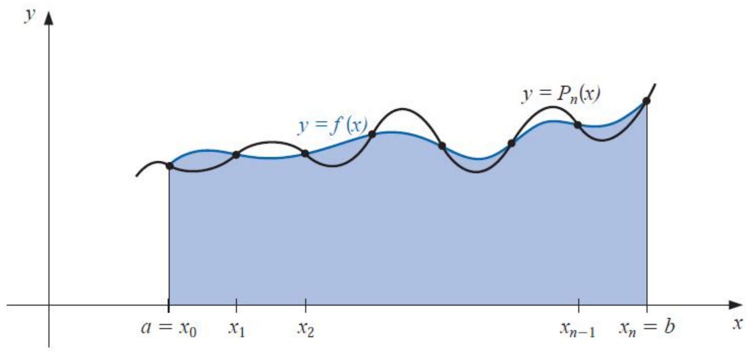
2.3 高阶牛顿-柯特斯Newton-Cotes公式

梯形公式和辛普生公式都是牛顿-柯特斯公式的特例牛顿-柯特斯公式可以类似的得到. 取区间$[a, b]$ 上的等分点$x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, \cdots, n$, 其中$x_0 = a$, $x_n = b$,$h = (b-a)/n$. 这样可以得到牛顿-柯特斯公式如下:

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

其中

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



下表给出一些具体的例子, 这里$h = (b-a)/n$, $f_i = f(x_i)$, $x_0 = a$, $x_n = b$, $x_i = a + ih$.

n	$I_n(f)$	$E_n(f)$	求积公式	代数精度
1	$\frac{h}{2}(f_0 + f_1)$	$-\frac{h^3}{12}f''(\xi)$	梯形公式	1
2	$\frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$	$-\frac{h^5}{90}f^{iv}(\xi)$	辛普生公式	3
3	$\frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$	$-\frac{3h^5}{80}f^{iv}(\xi)$	$\frac{3}{8}$ 公式	3
4	$\frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$	$-\frac{8h^7}{945}f^{vi}(\xi)$	Boole's 公式	5

例4 计算$\frac{3}{8}$公式的代数精度.

解 $\frac{3}{8}$公式为:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3).$$

容易验证

$$
\begin{aligned}
\int_a^b dx &= \frac{3h}{8}(f_0+3f_1+3f_2+f_3), \quad (f(x)=1)\\
\int_a^b xdx &= \frac{3h}{8}(f_0+3f_1+3f_2+f_3), \quad (f(x)=x)\\
\int_a^b x^2dx &= \frac{3h}{8}(f_0+3f_1+3f_2+f_3), \quad (f(x)=x^2)\\
\int_a^b x^3dx &= \frac{3h}{8}(f_0+3f_1+3f_2+f_3), \quad (f(x)=x^3)\\
\int_a^b x^4dx &\neq \frac{3h}{8}(f_0+3f_1+3f_2+f_3), \quad (f(x)=x^4),
\end{aligned}
$$

因此$\frac{3}{8}$公式的代数精度为3.

可以看出, 辛普生公式与$\frac{3}{8}$公式的代数精度相同. 一般的有如下的结论:

定理4 设

$$\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

是$(n+1)$个点的牛顿-柯特斯公式, 其中

$$x_0=a,\ x_n=b,\ h=(b-a)/n.$$

则存在$\xi\in(a,\ b)$, 使得当n是偶数时,

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)+\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt,$$

而当n是奇数时,

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)+\frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt.$$

从上面的定理可知, 当n是偶数时, 虽然插值多项式的次数是n, 但代数精度却是$n+1$; 而当n是奇数时, 代数精度就是n.

例5 利用牛顿-柯特斯公式近似计算积分

$$\int_0^{\pi/4} sin(x)dx = 1-\sqrt{2}/2 \approx 0.29289322$$

的结果如下:

n	1	2	3	4
近似值	0.27768018	0.29293264	0.29291070	0.29289318
误差	0.01521303	0.00003942	0.00001748	0.00000004

3 复化求积公式

牛顿-柯特斯公式一般不适合用来计算较长区间的积分. 因为为了提高精度, 需要用较多的点来构造插值多项式. 而我们在上一章介绍过了, 高次的插值多项式会震荡的很厉害. 我们可以考虑把积分区间化为几个较小的区间, 然后在每个小区间上用低阶的牛顿-柯特斯公式. 这就是所谓的复化求积公式.

例如考虑近似计算

$$\int_0^4 e^x dx = e^4 - e^0 = 53.59815.$$

利用辛普森公式, 就有$h = 2$,

$$\int_0^4 e^x dx \approx \frac{2}{3}(e^0 + 4e^2 + e^4) = 56.76958.$$

其误差为

$$|53.59815 - 56.76958| = 3.17143.$$

这显然是比较大的误差.

考虑用复化技巧, 把区间划分为两个小区间

$$[0,\ 4] = [0,\ 2] \cup [2,\ 4],$$

然后在每个小区间上用辛普生公式, 则$h = 1$,

$$\begin{aligned}
\int_0^4 e^x dx &= \int_0^2 e^x dx + \int_2^4 e^x dx \\
&= \frac{1}{3}[e^0 + 4e + e^2] + \frac{1}{3}[e^2 + 4e^3 + e^4] \\
&= 53.86385,
\end{aligned}$$

这样误差降低到0.26570!

如果把区间$[0,\ 4]$分成4个小区间, 那么$h = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned}
\int_0^4 e^x dx &= \int_0^1 e^x dx + \int_1^2 e^x dx + \int_2^3 e^x dx + \int_3^4 e^x dx \\
&= \frac{1}{6}[e^0 + 4e^{1/2} + e] + \frac{1}{6}[e + 4e^{3/2} + e^2] \\
&\quad + \frac{1}{6}[e^2 + 4e^{5/2} + e^3] + \frac{1}{6}[e^3 + 4e^{7/2} + e^4] \\
&= 53.61622.
\end{aligned}$$

现在误差是0.01807!!

3.1 复化梯形公式

令

$$h = \frac{b-a}{n},\ n \geq 1,\ x_i = a + ih,\ i = 0, 1, 2, \cdots, n.$$

则

$$\begin{aligned}I(f): &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \\ &= \sum_{i=1}^{n}\{\frac{h}{2}[f(x_{i-1})+f(x_i)] - \frac{h^3}{12}f''(\xi_i)\} = T_n(f)+E_{T_n}(f)\end{aligned}$$

其中$\xi_i \in [a,b]$. 记$f_i := f(x_i)$, 则可得到复化梯形公式如下:

$$\begin{aligned}T_n(f) &= \frac{h}{2}[(f_0+f_1)+(f_1+f_2)+\ldots+(f_{n-2}+f_{n-1})+(f_{n-1}+f_n)] \\ &= \frac{h}{2}[f_0+2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n]\end{aligned}$$

而误差为

$$\begin{aligned}E_{T_n}(f) &= I(f)-T_n(f) = \sum_{i=1}^{n} -\frac{h^3}{12}f''(\xi_i) \\ &= -\frac{nh^3}{12}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)\right] = -\frac{(b-a)}{12}h^2\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)\right].\end{aligned}$$

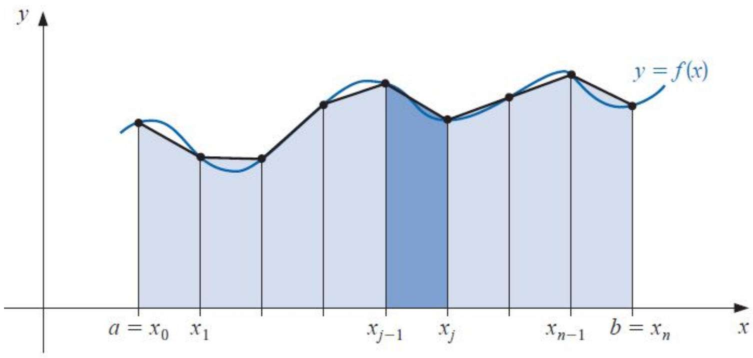
对于中括号里的部分, 可以有如下的估计

$$\min_{a\le x\le b} f''(x) \le \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \le \max_{a\le x\le b} f''(x).$$

由于$f''(x)$在$[a,b]$上连续, 利用介值定理可知, 存在$\eta\in[a,b]$使得$f''(\eta)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)$. 因此可知复化梯形公式的误差为

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

其中$\eta\in[a,b]$.



3.2 复化辛普生公式

给定$n \geq 2$ (n是偶数), 定义$h = \frac{b-a}{n}$, $x_i = a + ih$, $f_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \ldots, n$, 则

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx \\ &= \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \left[\frac{h}{3}(f_{2i-2} + 4f_{2i-1} + f_{2i}) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_i)\right], \end{aligned}$$

其中$\xi_i \in [x_{2i-2}, x_{2i}]$.

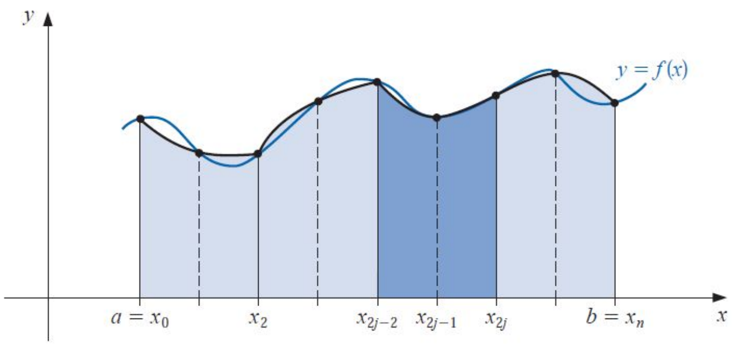
由此可以得到复化辛普生公式$I_{S_n}(f)$如下:

$$I_{S_n}(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \ldots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n),$$

其误差$E_{S_n}(f)$为

$$E_{S_n}(f) = I(f) - I_{S_n}(f) = -\frac{h^4(b-a)}{180} f^{(4)}(\eta),$$

其中$\eta \in [a, b]$.



例6 利用四个小区间的复化梯形公式和复化辛普生公式来计算

$$\int_1^2 ln(x)dx.$$

解 利用复化梯形公式就有$h = 1/4$, 近似值为

$$\begin{aligned} \int_1^2 ln(x)dx &\approx \frac{1/4}{2}[f_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n] \\ &= \frac{1}{8}[ln(1) + 2(ln(5/4) + ln(6/4) + ln(7/4)) + ln(2)] \\ &= 0.3837. \end{aligned}$$

误差估计为

$$\frac{(b-a)}{12} h^2 |f''(\eta)| = \frac{1}{12}\frac{1}{16}\frac{1}{\eta^2} \leq \frac{1}{12 \times 16 \times 1} = \frac{1}{192} = 0.0052.$$

而利用复化辛普生公式就有$h=1/8$, 近似值为

$$\begin{aligned}
&\int_1^2 ln(x)dx\\
\approx\ & \frac{\frac{1}{8}}{3}[f_0+4\sum_{i=1}^{4}f_{2i-1}+2\sum_{i=1}^{3}f_{2i}+f_8]\\
=\ & \frac{1}{24}[ln(1)+4(ln(9/8)+ln(11/8)+ln(13/8)+ln(15/8))\\
& \quad +2(ln(5/4)+ln(6/4)+ln(7/4))+ln(2)]\\
=\ & 0.386292.
\end{aligned}$$

这与精确值0.386294的小数点后四位完全相同. 实际上这个误差估计为

$$\frac{(b-a)}{180}h^4|f^{(4)}(\eta)|=\frac{1}{180}(\frac{1}{8})^4\frac{6}{\eta^4}\leq\frac{6}{180\times 8^4\times 1^4}=0.000008.$$

例7 如果要用复化辛普生公式得到

$$\int_0^\pi sin^2(x)dx$$

的六位近似值, n需要取多大?

解 即误差要满足

$$\frac{(\pi-0)}{180}h^4|f^{(4)}|<0.5\times 10^{-6}.$$

注意到$f^{(4)}(\eta)=-8cos(2x)$, 因此就是要求

$$\frac{\pi}{180}h^4 8<0.5\times 10^{-6},$$

即

$$h<0.0435.$$

由于

$$h=\pi/(2n),$$

因此就有

$$n\geq 36.1103,$$

也就是说取$n=37$就可以了.

例8 利用复化辛普生公式来计算

$$\int_0^\pi sin(x)dx$$

要求绝对误差不超过0.00002.

解 由于

$$\int_0^\pi sin(x)dx$$

$$= \frac{h}{3}\sum_{i=1}^{n/2}[sin(x_{2i-2}) + 4sin(x_{2i-1}) + sin(x_{2i})] - \frac{h^4\pi}{180}sin^{(4)}(\eta)$$

其中$\eta \in (0, \pi)$, 因此由不等式

$$|-\frac{h^4\pi}{180}sin^{(4)}(\eta)| \le \frac{h^4\pi}{180} = \frac{\pi^5}{180n^4} < 0.00002$$

可以得到$n \ge 18$. 如果取$n = 18$, 则$h = \pi/18$, 对应的公式为

$$\int_0^\pi sin(x)dx = \frac{\pi}{54}\sum_{i=1}^{9}[sin(x_{2i-2}) + 4sin(x_{2i-1}) + sin(x_{2i})] =?$$

(留作练习!)

作为对比, 如果要用复化梯形公式达到同样的精度, 那么就要求

$$|\frac{h^2\pi}{12}sin''(\eta)| \le \frac{h^2\pi}{12} = \frac{\pi^3}{12n^2} < 0.00002,$$

这样$n \ge 360$. 显然这需要的运算量比复化辛普生公式多得多.

4 龙贝格Romberg求积公式

复化梯形公式有时还是不够有效, 可以有一种方法来加速. 令

$$h_k = \frac{b-a}{2^{k-1}},\ n_k = 2^{k-1},\ k = 1, 2, \cdots$$

把用h_k使用复化梯形公式计算的结果记为$R_{k,1}$, 即

$$R_{k,1} = \frac{h_k}{2}\sum_{i=1}^{2^{k-1}}[f(a + (i-1)h_k) + f(a + ih_k)].$$

则有

$$\begin{aligned}
R_{1,1} &= \frac{h_1}{2}[f(a) + f(b)] = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)],\\
R_{2,1} &= \frac{h_2}{2}[f(a) + 2f(a+h_2) + f(b)]\\
&= \frac{b-a}{2^2}[f(a) + f(b) + 2f(a + \frac{b-a}{2})]\\
&= \frac{1}{2}[R_{1,1} + h_1 f(a+h_2)],\\
R_{3,1} &= \frac{1}{2}\{R_{2,1} + h_2[f(a+h_3) + f(a+3h_3)]\}.
\end{aligned}$$

一般的

$$R_{k,1} = \frac{1}{2}[R_{k-1,1} + h_{k-1}\sum_{i=1}^{2^{k-2}} f(a + 2i - 1)h_k)].$$

利用上面的关系式可以用较小的运算量由$R_{k-1,1}$来计算$R_{k,1}$.

可以证明

$$\int_a^b f(x)dx - R_{k,1} = \sum_{i=1}^{\infty} K_i h_k^{2i} = K_1 h_k^2 + \sum_{i=2}^{\infty} K_i h_k^{2i},$$

其中$K_i\ (i=1,2,\cdots)$是与h_k无关的常数.

为了加速复化梯形公式的收敛, 我们可以用$R_{k,1}$和$R_{k+1,1}$的线性组合消掉h_k^2项. 注意到

$$\int_a^b f(x)dx - R_{k+1,1} = \sum_{i=1}^{\infty} K_i h_{k+1}^{2i} = \frac{K_1 h_k^2}{4} + \sum_{i=2}^{\infty} \frac{K_i h_k^{2i}}{4^i},$$

则有

$$\int_a^b f(x)dx - \frac{4R_{k+1,1} - R_{k,1}}{3} = \sum_{i=2}^{\infty} \frac{K_i}{3}\left(\frac{1-4^{i-1}}{4^{i-1}}\right) h_k^{2i} \quad (= O(h_k^4)!).$$

类似的, 可以得到更高精度的计算公式$O(h_k^6)$, $O(h_k^8)$, $\cdots$. 具体的公式如下:

$$R_{k,j} = \frac{4^{j-1}R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1}-1},\ j=1,2,\cdots,n,\ k=j,j+1,\cdots,n.$$

这就是龙贝格求积公式, 或者Richardson外推. 有如下的表格

$$\begin{array}{cccccc}
O(h_k^2) & O(h_k^4) & O(h_k^6) & O(h_k^8) & \cdots & O(h_k^{2n}) \\
\end{array}$$

$$\begin{bmatrix}
R_{1,1} & & & & & \\
R_{2,1} & R_{2,2} & & & & \\
R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} & & & \\
R_{4,1} & R_{4,2} & R_{4,3} & R_{4,4} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
R_{n,1} & R_{n,2} & R_{n,3} & R_{n,4} & \cdots & R_{n,n}
\end{bmatrix}$$

例9 对于$\int_0^{\pi} sin(x)dx$, 构造如上的表格如下.

$$\begin{bmatrix}
0 & & & & & \\
1.57079633 & 2.09439511 & & & & \\
1.89611890 & 2.00455976 & 1.99857073 & & & \\
1.97423160 & 2.00026917 & 1.99998313 & 2.00000555 & & \\
1.99357034 & 2.00001659 & 1.99999975 & 2.00000001 & 1.99999999 & \\
1.99839336 & 2.00000103 & 2.00000000 & 2.00000000 & 2.00000000 & 2.00000000
\end{bmatrix}.$$

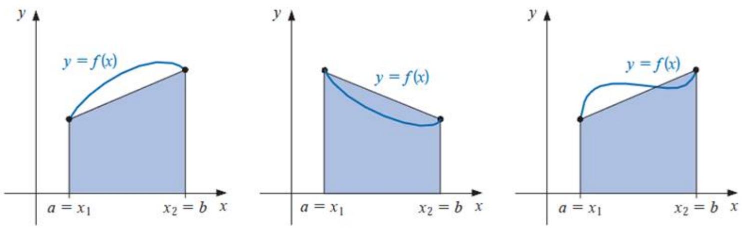
上表的21个数据中只有第一列的6个数字是用复化梯形公式得到的, 而其他的数据都是利用Richardson外推得到的. 由于$\int_0^{\pi} sin(x)dx$的精确值为2, 显然$R_{4,4}$已经是一个非常好的近似. 这表明利用Richardson外推技巧可以得到非常好的加速收敛效果.

5 高斯求积公式

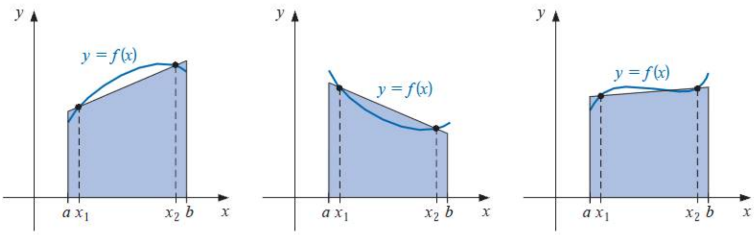
由于牛顿-柯特斯公式是利用被积函数$f(x)$在$n+1$给定点的取值来构造n次插值多项式的积分作为近似, 其误差估计中包含有$f(x)$的$(n+1)$阶导数, 因此其代数精度至少为n. 在牛顿-柯特斯公式中用的都是等距节点:

$$x_0 = a,\ x_i = a + i * h, \quad x_n = b.$$

这在得到求积公式时是很方便的, 但是这样可能会降低近似的准确性, 例如下图:



利用梯形求积公式是用经过$f(x)$首尾两个端点的直线来近似$f(x)$. 但这不一定是最好的选择, 比如下图中的直线就是更好的近似:



在高斯求积公式中, 这些点并不是被选成等距节点, 而是希望通过节点$x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n$和系数$\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_n$, 使得误差

$$\int_a^b f(x)dx - \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i)$$

在某种意义下最小. 一种衡量的方法是希望具有尽可能高的代数精度, 即对次数尽可能高的多项式, 高斯求积公式能得到精确解.

注意现在一共有$2n$个待定参数: 系数$\omega_1,\ \cdots,\ \omega_n$和节点$x_1,\ \cdots,\ x_n$(必须落在区间$[a,b]$内). 因此期望能达到的最高代数精度为$2n-1$, 即期望对所有次数不超过$2n-1$的多项式, 高斯求解公式能得到精确解.

先看比较简单的情形, 对于

$$I(f) \ = \ \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x.$$

我们要得到一个近似求积公式

$$I_n(f) \ = \ \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i),$$

希望通过对节点$\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$和系数$\{\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n\}$的选取, 使得误差

$$E_n(f) \ = \ I(f) - I_n(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i)$$

能对次数尽可能高的多项式$f(x)$精确为零. 注意到

$$E_n(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m) = \ a_0 E_n(1) + a_1 E_n(x) + \cdots + a_m E_n(x^m).$$

因此对于所有次数不超过m的多项式满足$E_n(f) = 0$等价于

$$E_n(x^i) \ = \ 0, \quad i = 0, 1, \ldots, m.$$

情形1　$n = 1$, 这时我们可以要求

$$E_1(1) = 0 \ \text{ and } \ E_1(x) = 0.$$

即

$$\int_{-1}^{1} 1\,\mathrm{d}x \ - \ \omega_1 \ = \ 0, \quad \int_{-1}^{1} x\,\mathrm{d}x \ - \ \omega_1\, x_1 \ = \ 0.$$

由此解得 $w_1 = 2$, $x_1 = 0$. 于是可以得到一阶高斯公式如下:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \ \approx \ 2f(0) \ = \ I_1(f).$$

这就是中点公式, 它对所有次数不超过1的$f(x)$能得到精确积分值.

情形2　$n = 2$, 这时可以要求

$$E_2(x^i) \ = \ \int_{-1}^{1} x^i\,\mathrm{d}x \ - \ (\omega_1 x_1^i + \omega_2 x_2^i) \ = \ 0, \ \ i = 0, 1, 2, 3$$

即

$$\begin{array}{ll} 2{=}\displaystyle\int_{-1}^{1} 1\,\mathrm{d}x{=}\omega_1 + \omega_2, & 0{=}\displaystyle\int_{-1}^{1} x\,\mathrm{d}x{=}\omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 \\ \frac{2}{3}{=}\displaystyle\int_{-1}^{1} x^2\,\mathrm{d}x{=}\omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2, & 0{=}\displaystyle\int_{-1}^{1} x^3\,\mathrm{d}x{=}\omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3 \end{array}$$

求解这个关于$\omega_1, \omega_2, x_1, x_2$的非线性方程组可得

$$\omega_1 = \omega_2 = 1, \quad \text{and} \quad x_1 = \frac{-1}{\sqrt{3}}, \ \ x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

这样就得到了2阶高斯公式:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \ \approx \ f(\frac{-1}{\sqrt{3}}) \ + \ f(\frac{1}{\sqrt{3}}) \ = \ I_2(f).$$

这就是三点高斯-勒让德Gauss-Legendre公式, 它对所有次数不超过3的$f(x)$能得到精确积分值.

情形3 对于一般的n, 考虑更一般的带权函数的求积公式:

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

可适当选取x_k和A_k使其具有$2n+1$阶代数精度.

具体方法是先按照下面定理的结论找出x_k, 然后再根据条件"对于所有次数不超过n的多项式都精确成立"来构造系数A_k, 即

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

其中$l_k(x)$是Lagrange基函数.

定理 上述插值型求积公式的节点x_i是高斯点的充分必要条件是以这些节点为零点的多项式

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

与任意次数不超过n的多项式$p(x)$关于权函数$\rho(x)$正交,及

$$\int_a^b \rho(x)p(x)\omega_{n+1}(x)dx = 0. \tag{5.1}$$

证明 先证必要性. 任取次数不超过n的多项式$p(x)$, 则$p(x)\omega_{n+1}(x)$ 次数不超过$2n+1$. 取$f(x) = p(x)\omega_{n+1}(x)$, 则应精确成立, 即

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

再证充分性. 设$f(x)$是任意次数不超过$2n+1$的多项式, 则有$f(x) = p(x)\omega_{n+1}(x) + r(x)$, 其中$p(x), r(x)$次数不超过$n$. 于是有

$$\begin{aligned}\int_a^b \rho(x)f(x)dx &= \int_a^b \rho(x)(p(x)\omega_{n+1}(x) + r(x))dx \\ &= \int_a^b \rho(x)r(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k r(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).\end{aligned}$$

这里第二个等式利用了(5.1), 第三个等式利用了该积分公式是插值型积分公式, 即对任意次数不超过n的多项式都精确成立, 最后一个公式利用了$r(x_k) = f(x_k)$. 证毕.

例 确定求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x}f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

中的x_0, x_1, A_0, A_1, 使其具有最高代数精度.

解 权函数为$\rho(x) = \sqrt{x}$. 设$\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1) = x^2 + bx + c$, 则由上述定理可知其与$1, x$关于$\rho(x)$正交, 即

$$\int_0^1 \sqrt{x}\omega(x)dx = 0, \quad \int_0^1 \sqrt{x}x\omega(x)dx = 0.$$

于是有
$$\frac{2}{7}+\frac{2}{5}b+\frac{2}{3}c=0,\quad \frac{2}{9}+\frac{2}{7}b+\frac{2}{5}c=0,$$
解得$b=-10/9, c=5/21$. 因此可求得$\omega(x)$的零点
$$x_0=0.289949,\quad x_1=0.821162.$$
至于系数A_0, A_1, 可以利用Lagrange基函数与$\rho(x)$的乘积的积分得到, 也可以由当$f(x)$取$1, x$时公式精确成立得到, 即
$$A_0+A_1=\int_0^1\sqrt{x}dx=2/3,\quad A_0x_0+A_1x_1=\int_0^1\sqrt{x}xdx=2/5.$$
解得$A_0=0.277556, A_1=0.389111$.

5.1 Gauss-Legendre公式

若取区间为$[-1,1]$, 权函数为$\rho(x)=1$, 则得公式
$$\int_{-1}^1 f(x)dx\approx\sum_{k=0}A_kf(x_k),$$
其中x_k是$n+1$阶Legendre多项式的所有零点.

若取$n=0$, $P_1(x)=x$, 其零点为$x_0=0$, 则有$\int_{-1}^1 f(x)dx\approx A_0f(0)$. 由于它对$f(x)=1$精确成立, 可得系数$A_0=2$, 这就是前面的中点公式.

若取$n=1$, $P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$的零点为$\pm\sqrt{1/3}$, 类似可计算出系数为$A_0=A_1=1$, 即
$$\int_{-1}^1 f(x)dx\approx f(-1/\sqrt{3})+f(1/\sqrt{3}).$$
这就是前面推导的三点Gauss-Legendre求积公式. 更多的公式可参见122页的表4-7.

例10 利用三点高斯-勒让德公式近似计算
$$I(f)\ =\ \int_{-1}^1 e^x\,\mathrm{d}x.$$

解 由于$f(x)=e^x$, 因此就有
$$I_2(f)\ =\ e^{-\frac{1}{\sqrt{3}}}+e^{\frac{1}{\sqrt{3}}}\ \approx\ 2.3437.$$
真实误差为:
$$I(f)-I_2(f)\ \approx\ 0.00771.$$

当积分区间不是[-1,1]时,
$$I(f)\ =\ \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x,$$
可以利用变量替换
$$x\ =\ \frac{(b+a)+t(b-a)}{2},\quad -1\le t\le 1.$$

把原积分化为[-1,1]上的定积分,

$$I(f) \ = \ \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b+a)+t(b-a)}{2}\right) \mathrm{d}t = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} g(t)dt.$$

再利用上面的公式.

5.2 Gauss-Chebyshev公式

若取区间为$[-1,1]$, 权函数为$\rho(x)=1/\sqrt{1-x^2}$, 则得公式

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k),$$

其中x_k是$n+1$阶Chebyshev多项式的所有零点:

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right), \quad k=0,1,\ldots,n.$$

可计算出系数为$A_k = \frac{\pi}{n+1}$. 在使用时, 将$n+1$个点改成n个节点, 于是得到Gauss-Chebyshev求积公式:

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

Gauss-Chebyshev公式可以用来计算奇异积分.

例11 用五点Gauss-Chebyshev公式近似计算

$$I \ = \ \int_{-1}^{1} \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x.$$

解 由于$f(x)=e^x$, 因此就有

$$I_5(f) \ = \ \frac{\pi}{5} e^{cos\frac{(2k-1)}{10}\pi} = 3.977463.$$

5.3 Gauss-Laguerre公式

若取区间为$[0,+\inf)$, 权函数为$\rho(x)=e^{-x}$, 则得Gauss-Laguerre公式

$$\int_{0}^{+\inf} e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{k=0} A_k f(x_k),$$

其中x_k是$n+1$阶Laguerre多项式的所有零点, 部分具体数值可参见124页的表4-8.

例12 利用Gauss-Laguerre公式近似计算

$$I(f) \ = \ \int_{0}^{+\inf} e^{-x}\sin x\,\mathrm{d}x.$$

解 取$n=1$时, 查表可以得到x_0, x_1, A_0, A_1, 从而可得近似值

$$A_0 \sin x_0 + A_1 \sin X_1 = 0.43246.$$

取$n=5$时的近似值为0.50005, 与精确值0.5已经比较接近了.

5.4 Gauss-Hermite公式

若取区间为$(-\inf,+\inf)$, 权函数为$\rho(x)=e^{-x^2}$, 则得Gauss-Hermite公式

$$\int_{-\inf}^{+\inf} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=0} A_k f(x_k),$$

其中x_k是$n+1$阶Hermite多项式的所有零点, 系数为

$$A_k = 2^{n+1}(n+1)! \frac{\sqrt{\pi}}{[H'_{n+1}(x_k)]^2}.$$

部分具体数值可参见125页的表4-9.

例13 利用Gauss-Hermite公式计算

$$I(f) \;=\; \int_{-\inf}^{+\inf} e^{-x^2} x^2 \,\mathrm{d}x.$$

解 取$n=1$, $H_2(x)=4x^2-2$, 其零点为$x_0=-\frac{\sqrt{2}}{2}, x_1=\frac{\sqrt{2}}{2}$, 可计算得到$A_0=A_1=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$, 由此可得

$$\int_{-\inf}^{+\inf} e^{-x^2} x^2 \,\mathrm{d}x = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

注意此时代数精度为3, 而x^2是二次多项式, 因此这是精确值.

6 数值微分

6.1 中点方法与误差分析

按导数的定义可以简单的用差商近似导数, 立即可以得到几种数值微分公式:

$$
\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}, \\
f'(a) &\approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h}, \\
f'(a) &\approx \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h},
\end{aligned}
$$

其中h被称为**步长**. 最后一种微分方法称为中点方法, 它是前两种方法的算术平均, 但它的误差阶却从$O(h)$提高到$O(h^2)$.

利用Taylor展开容易得到中点方法的误差为

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

因此从截断误差的角度看, 步长h越小越好.

但是从舍入误差的角度看, 当h很小时, 会出现$f(a+h)$和$f(a-h)$两个非常接近的数相减造成有效数字的严重损失, 从而带来很大的误差. 所以步长h也不宜太小.

例如用中点公式近似$f(x)=\sqrt{x}$在$x=2$处的导数的公式为

$$\frac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}.$$

设用4位有效数字计算, 下表给出了部分结果:

h	$G(h)$	h	$G(h)$	h	$G(h)$
1	0.3660	0.05	0.3530	0.001	0.3500
0.5	0.3564	0.01	0.3500	0.0005	0.3000
0.1	0.3535	0.005	0.3500	0.0001	0.3000

注意导数的精确值为0.353553, 因此可见$h=0.1$时最好.

6.2 插值型求导公式

其基本思想是利用函数在一些点的取值构造插值多项式, 然后利用插值多项式的导数值作为函数的导数值的近似. 但是这种方法误差可能很大, 要特别注意误差的分析.

我们只给出两种简单的情形, 而且只考虑计算节点处的导数值.

1. 两点公式. 假设给出两个节点x_0和x_1点的函数值. 利用一次拉格朗日插值容易得到近似求导公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}, \quad f'(x_1) \approx \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}.$$

2. 三点公式. 假定给出三个节点$x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$的函数值, 利用二次拉格朗日插值容易得到近似求导公式:

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}(-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)),$$
$$f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}(-f(x_0) + f(x_2)),$$
$$f'(x_2) \approx \frac{1}{2h}(f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)).$$

还可以建立高阶数值微分公式, 比如

$$f''(x_1) \approx \frac{1}{h^2}(f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)).$$

6.3 三次样条求导

与上一种方法的思想类似, 如果能找到$f(x)$的三次样条函数近似$S(x)$, 那么可以用$S(x)$的导数值来作为$f(x)$的导数值的近似.

6.4 外推算法

与数值积分的Richardson外推类似, 数值微分同样可以利用Richardson外推技巧加速收敛. 例如, 利用中点公式计算导数值时

$$f'(x) \approx G(h) = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)).$$

利用Taylor展开可得

$$f'(x) = G(h) + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \cdots,$$

其中a_i与h无关, 利用Richardson外推技巧把h主次分半, 则有

$$G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}(h/2) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}, \quad m = 1, 2, \cdots$$

这是一个非常有效的计算数值微分的方法.