计算方法

北京师范大学数学科学学院
主讲人：纪光华
Email：ghji@bnu.edu.cn

本章主要内容

1. 插值型求积公式
2. 复化求积公式
3. Romberg求积法
4. Gauss求积公式
5. 数值微分

考虑定积分$I(f)=\int_a^b f(x)dx$.

1. 当$f(x)$的原函数不能用初等函数表示，如e^{-x^2}, $\frac{\sin x}{x}$, $\frac{1}{\ln x}$等.
2. $f(x)$是一个函数表，即不知道$f(x)$的表达式.

在上述2种情况下，只能求积分$I(f)$的近似值. 由定积分定义，

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x\to 0}\sum_{k=1}^n f(x_k)\Delta x_k,$$

其中$\Delta x = \max_{1\le k\le n}\Delta x_k$. 因此有

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^n f(x_k)\Delta x_k.$$

一般的数值积分公式为:

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

其中称x_k为求积点，A_k为求积系数.

5.1 插值型求积公式

5.1.1 插值型求积公式

给定节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, 已知$f(x)$在这些点上的函数值为$f(x_i)$ $(i = 0, 1 \cdots, n)$. 由插值理论, $f(x)$ 的n次插值多项式为:

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

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} \left[\int_a^b l_k(x)dx \right] f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k). \end{aligned}$$

其中$A_k = \displaystyle\int_a^b l_k(x)dx$. 记 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$, 则

$$I(f) \approx I_n(f). \tag{1}$$

定义5.1

设有计算积分$I(f)$的求积公式

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

如果求积系数$A_k = \int_a^b l_k(x)dx \ (k = 0, 1, \cdots, n)$,则称该求积公式为插值型求积公式.

记$R(f) = I(f) - I_n(f)$, 称它为求积公式(1)的截断误差. 由插值多项式的余项得插值型求积公式的截断误差

$$\begin{aligned} R(f) &= I(f) - I_n(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} \left[\int_a^b l_k(x)dx\right] f(x_k) \\ &= \int_a^b f(x)dx - \int_a^b L_n(x)dx = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx \\ &= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)dx, \quad \xi \in (a, b). \end{aligned} \tag{2}$$

定义5.2

如果求积点$x_k(k=0,1,\cdots,n)$是等距的，即

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad k = 0,1,\cdots,n,$$

则称对应的插值型求积公式为*Newton-Cotes*公式.

下面假设节点等距. 令$x = a + th, t \in [0,n]$, 则$x_k = a + kh$, $x_j = a + jh$,

$$\begin{aligned}
A_k &= \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx \\
&= h\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{t-j}{k-j}dt = \frac{(-1)^{n-k}h}{k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)dt \\
&= (b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)dt, \quad k=0,1,\cdots,n.
\end{aligned}$$

记

$$C_{n,k} = \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} (t-j)dt, \quad k = 0, 1, \cdots, n, \tag{3}$$

则Newton-Cotes公式可写为

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

其中$C_{n,k}$只依赖与k和n.

(1) $n = 1, h = b - a, x_0 = a, x_1 = b$. 由(3)可以求得$C_{1,0} = \frac{1}{2}, C_{1,1} = \frac{1}{2}$. 得2 个等距节点的插值型求积公式:

$$T(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]. \tag{4}$$

(4)称为梯形公式.

(2) $n=2, h=\frac{b-a}{2}, x_0=a, x_1=\frac{a+b}{2}, x_2=b$. 由(3)求得$C_{2,0}=\frac{1}{6}, C_{2,1}=\frac{2}{3}, C_{2,2}=\frac{1}{6}$. 得3个等距节点的插值型求积公式

$$S(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]. \tag{5}$$

(5)称为Simpson公式.

(3) $n=4, h=\frac{b-a}{4}, x_0=a, x_1=\frac{3a+b}{4}, x_2=\frac{a+b}{2}, x_3=\frac{a+3b}{4}, x_4=b$, 由(3)求得

$$C_{4,0}=\frac{7}{90}, \quad C_{4,1}=\frac{32}{90}, \quad C_{4,2}=\frac{12}{90}, \quad C_{4,3}=\frac{32}{90}, \quad C_{4,4}=\frac{7}{90}.$$

可得5个等距节点的插值型求积公式

$$\begin{aligned} C(f)= & \frac{b-a}{90}\Big[7f(a)+32f(\frac{3a+b}{4})+12f(\frac{a+b}{2}) \\ & +32f(\frac{a+3b}{4})+7f(b)\Big]. \end{aligned} \tag{6}$$

(6)称为Cotes公式.

5.1.2 代数精度

定义5.3

给定一个求积分$I(f)=\int_a^b f(x)dx$的求积公式

$$I(f) \approx I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \qquad (7)$$

如果当$f(x)$是任意次数不超过m的多项式时，求积公式精确成立，即对任意次数不超过m次的多项式$p_m(x)$有

$$I(p_m) = I_n(p_m), \quad \text{或} \quad \int_a^b p_m(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k p_m(x_k),$$

而至少对1个$m+1$次多项式不精确成立，即存在$m+1$次多项式$q_{m+1}(x)$，使得

$$I(q_{m+1}) \neq I_n(q_{m+1}), \quad \text{或} \quad \int_a^b q_{m+1}(x)dx \neq \sum_{k=0}^{n} A_k q_{m+1}(x_k)$$

由插值型求积公式的截断误差(2)知, $n+1$个节点的插值型求积公式的代数精度至少是n.

定理5.1

求积公式$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$ 至少具有n次代数精度$\Longleftrightarrow$该求积公式是插值型求积公式, 即

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx, \quad ,k=0,1,\cdots,n.$$

定理5.2

求积公式

$$I(f)\approx I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k) \tag{8}$$

的代数精度是$m \Longleftrightarrow$ 它对$g_0(x)=1,g_1(x)=x,g_2(x)=x^2,\cdots,$ $g_m(x)=x^m$精确成立, 而对$g_m(x)=x^{m+1}$不精确成立. 即

$$I(g_k)=I_n(g_k), \quad ,k=0,1\cdots,m, \quad I(g_{m+1})\neq I_n(g_{m+1}).$$

例5.1

求下面Simpson公式的代数精度.

$$S(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right].$$

解 Simpson公式是3个等距节点的插值型求积公式, 故其代数精度至少是2. 当$f(x)=x^3$时,

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b x^3 dx = \frac{b^4-a^4}{4}, \\ S(f) &= \frac{b-a}{6}\left[a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right] \\ &= \frac{b^4-a^4}{4}. \end{aligned}$$

当$f(x)=x^4$时,

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b x^4 dx = \frac{b^5-a^5}{5}, \\ S(f) &= \frac{b-a}{6}\left[a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4\right] \\ &\neq \frac{b^5-a^5}{5}. \end{aligned}$$

所以Simpson公式的代数精度是3.

一般, $n+1$个节点的Newton-Cotes(等距节点插值型)公式的代数精度

$$= \begin{cases} n, & n\text{是奇数} \\ n+1, & n\text{是偶数} \end{cases}$$

5.1.3 梯形公式、Simpson公式和Cotes公式的截断误差

(1) 梯形公式的截断误差

$$
\begin{aligned}
R_T(f) = I(f) - T(f) \quad &= \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx \\
&= \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx \\
&= -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta), \quad \eta \in (a,b).
\end{aligned}
$$

(2) Simpson公式的截断误差

作$f(x)$的3次Hermite插值多项式$H(x)$, 满足

$$H(a)=f(a),\qquad H\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{a+b}{2}\right),\quad H(b)=f(b),$$
$$H'\left(\frac{a+b}{2}\right)=f'\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

则其余项

$$f(x)-H(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b),\ \xi\in(a,b).$$

由于Simpson公式的代数精度为3, 即

$$\int_a^b H(x)dx=S(H),$$

所以有

$$\begin{aligned}\int_a^b H(x)dx=S(H) &= \frac{b-a}{6}\left[H(a)+4H\left(\frac{a+b}{2}\right)+H(b)\right]\\ &= \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=S(f\end{aligned}$$

截断误差为

$$
\begin{aligned}
R_s(f) \quad & = I(f) - S(f) = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b H(x)dx \\
& = \int_a^b [f(x) - H(x)]dx \\
& = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4}(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b)dx \\
& = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4} \int_a^b (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b)dx \\
& = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).
\end{aligned}
$$

(3) Cotes公式的截断误差

$$
R_C(f) = I(f) - C(f) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).
$$

5.2 复化求积公式

由上节截断误差看出，求积公式的截断误差依赖于区间长度. 要减小误差，就要减小区间长度. 将区间$[a, b]$ n等分，
记$h = (b-a)/n$, $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \cdots, n$.

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

5.2.1 复化梯形公式

对小区间上的积分$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$应用梯形公式，就得到复化梯形公式.

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

由梯形公式的截断误差，可得复化梯形公式$T_n(f)$得截断误差

$$
\begin{aligned}
I(f)-T_n(f) &= \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx - \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})] \\
&= \sum_{k=0}^{n-1}\left\{\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx - \frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]\right\} \\
&= \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right], \quad \eta_k\in[x_k,x_{k+1}].
\end{aligned}
$$

设$f(x)\in C^2[a,b]$，则由连续函数介值定理，$\exists\eta\in(a,b)$，使

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

所以得$T_n(f)$的截断误差

$$
I(f)-T_n(f) = -\frac{h^3}{12}nf''(\eta) = -\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta). \tag{9}
$$

设$\max\limits_{a\le x\le b}|f''(x)|\le M_2$. 对于给定的精度$\varepsilon$, 只要

$$\frac{b-a}{12}M_2h^2\le\varepsilon,$$

就有

$$|I(f)-T_n(f)|=\frac{b-a}{12}h^2|f''(\eta)|\le\frac{b-a}{12}M_2h^2\le\varepsilon. \qquad (10)$$

(10)称为先验误差估计.
由(9)可得

$$\begin{aligned}\frac{I(f)-T_n(f)}{h^2} &= -\frac{1}{12}\times h\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)\longrightarrow-\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx\\ &=\frac{1}{12}[f'(a)-f'(b)],\quad \text{当}\ h\to 0.\end{aligned}$$

当h很小时, 有

$$I(f)-T_n(f)\approx\frac{h^2}{12}[f'(a)-f'(b)]. \qquad (11)$$

同样, 将$[a,b]$进行$2n$等分, 得

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 [f'(a) - f'(b)]. \tag{12}$$

由(11)和(12)可得

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{4}[I(f) - T_n(f)],$$

或

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{3}[T_{2n}(f) - T_n(f)]. \tag{13}$$

给定精度ε, 当

$$\frac{1}{3}|T_{2n}(f) - T_n(f)| \leq \varepsilon,$$

就有

$$|I(f) - T_{2n}(f)| \leq \varepsilon.$$

(13)称为后验误差估计.

假设$T_n(f)$已知, 求$T_{2n}(f)$时可以用下面的公式计算:

$$\begin{aligned} T_{2n}(f) \qquad &= \sum_{k=0}^{n-1} \left\{ \frac{1}{2} \times \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+\frac{1}{2}})] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \times \frac{h}{2}[f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})] \right\} \\ &= \frac{1}{2} T_n(f) + \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

例6.1

利用复化梯形公式计算$I(f)=\int_1^5 \frac{\sin x}{x}dx$的近似值，精确到7位有效数字。

解：

$$
\begin{aligned}
T_1(f) &= \frac{5-1}{2}[f(1)+f(5)] = 1.29937226 \\
T_2(f) &= \frac{1}{2}[T_1(f)+4f(3)] = 0.74376614 \\
T_4(f) &= \frac{1}{2}[T_2(f)+2(f(2)+f(4))] = 0.63733116 \\
T_8(f) &= \frac{1}{2}[T_4(f)+(f(1.5)+f(2.5)+f(3.5)+f(4.5))] = 0.61213199
\end{aligned}
$$

k	2^k	T_{2^k}	$\frac{1}{3}(T_{2^k} - T_{2^{k-1}})$
0	1	1.29937226	
1	2	0.74376614	-0.18520204
2	4	0.63733116	-0.03547833
3	8	0.61213199	-0.000839972
4	16	0.60591379	-0.00207273
5	32	0.60436425	-0.00051651
6	64	0.60397717	-0.00012902
7	128	0.60388042	-0.00003225
8	256	0.60385624	-0.00000806
9	512	0.60385019	-0.00000202
10	1024	0.60384868	-0.00000050
11	2048	0.60384830	-0.00000013
12	4096	0.60384821	-0.00000003

$$\int_1^5 \frac{\sin x}{x} dx \approx 0.6038482$$

5.2.2 复化Simpson公式

记$x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$，对每个小区间上积分$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$应用Simpson 公式，得到下面的复化Simpson公式:

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

利用Simpson公式的截断误差，可得复化Simpson公式的截断误差:

$$\begin{aligned}
& I(f) - S_n(f) \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} \left\{ \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx - \frac{h}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})] \right\} \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_k), \quad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}], \\
&= -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k), \quad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}]. \qquad (14)
\end{aligned}$$

设$f(x) \in C^4[a,b]$, 由连续函数介值定理, 存在$\eta \in (a,b)$, 使

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

所以得

$$\begin{aligned} I(f) - S_n(f) &= -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 n f^{(4)}(\eta) \\ &= -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b). \quad (15) \end{aligned}$$

设$\max\limits_{a \le x \le b} \left| f^{(4)}(x) \right| \le M_4$. 对给定的精度$\varepsilon$, 选取$h$使得

$$\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 M_4 \le \varepsilon,$$

就有

$$|I(f) - S_n(f)| \le \varepsilon.$$

(15)称为复化Simpson的先验误差估计.

由(14)可得

$$
\begin{aligned}
\frac{I(f)-S_n(f)}{\left(\frac{h}{2}\right)^4} &= -\frac{1}{180}\times h\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k) \to -\frac{1}{180}\int_a^b f^{(4)}(x)dx, \\
&= \frac{1}{180}[f^{(3)}(a)-f^{(3)}(b)] \quad 当\ h\to 0,
\end{aligned}
$$

当h很小时有

$$
I(f)-S_n(f)\approx\frac{1}{180}[f^{(3)}(a)-f^{(3)}(b)]\left(\frac{h}{2}\right)^4,
$$

$$
I(f)-S_{2n}(f)\approx\frac{1}{180}[f^{(3)}(a)-f^{(3)}(b)]\left(\frac{\frac{h}{2}}{2}\right)^4.
$$

从而有

$$
I(f)-S_{2n}(f)\approx\frac{1}{16}[I(f)-S_n(f)],
$$

$$
I(f)-S_{2n}(f)\approx\frac{1}{15}[S_{2n}(f)-S_n(f)].
$$

对于给定精度ε，当

$$\frac{1}{15}|S_{2n}(f) - S_n(f)| \leq \varepsilon,$$

就有

$$|I(f) - S_{2n}(f)| \leq \varepsilon.$$

例6.2

利用复化Simpson公式计算$I(f) = \int_1^5 \frac{\sin x}{x} dx$的近似值，精确到7位有效数字。

解：

k	2^k	S_{2^k}	$\frac{1}{3}(S_{2^k} - S_{2^{k-1}})$
0	1	0.55856409	
1	2	0.60185283	0.00288592
2	4	0.60373227	0.00012530
3	8	0.60384106	0.00000725
4	16	0.60384773	0.00000044
5	32	0.60384815	0.00000003

5.2.3 复化Cotes公式

记

$$x_{k+\frac{1}{4}} = x_k + \frac{1}{4}h, x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{1}{2}h, x_{k+\frac{3}{4}} = x_k + \frac{3}{4}h.$$

对积分 $\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$ 应用Cotes公式, 即得复化Cotes公式:

$$C_n(f)$$
$$= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{90}[7f(x_k) + 32f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 32f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 7f(x_{k+1})]$$

其截断误差为

$$I(f) - C_n(f) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).$$

当h很小时有

$$I(f) - C_n(f) \approx \frac{2}{945}[f^{(5)}(a) - f^{(5)}(b)]\left(\frac{h}{4}\right)^6,$$

$$I(f) - C_{2n}(f) \approx \frac{1}{63}[C_{2n}(f) - C_n(f)].$$

对于给定精度ε，当

$$\frac{1}{63}|C_{2n}(f) - C_n(f)| \leq \varepsilon,$$

就有

$$|I(f) - C_{2n}(f)| \leq \varepsilon.$$

5.2.4 复化求积公式的阶数

定义6.1

设有计算积分$I(f)$的复化求积公式$I_n(f)$，如果存在正整数p和非零常数C，使

$$\lim_{h \to 0} \frac{I(f) - I_n(f)}{h^p} = C,$$

则称公式$I_n(f)$是p阶的.

从上面定义知，复化梯形公式—2阶；复化Simpson公式—4阶；复化Cotes公式—6阶.

5.3 Romberg求积法

由(13)有

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

上式也可以写成

$$I(f) \approx \frac{4}{3}T_{2n}(f) - \frac{1}{3}T_n(f). \tag{16}$$

(16)说明其右端项可以近似积分$I(f)$.

记

$$
\begin{aligned}
\tilde{T}_n(f) \quad &= \frac{4}{3}T_{2n}(f) - \frac{1}{3}T_n(f) \\
&= \frac{4}{3}\sum_{k=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{4}[f(x_k) + f(x_{k+\frac{1}{2}})] + \frac{h}{4}[f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})]\right\} \\
&\qquad\qquad -\frac{1}{3}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})] \\
&= \sum_{k=0}^{n-1}\left[\frac{h}{3}\left(f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right) - \frac{h}{6}\left(f(x_k) + f(x_{k+1})\right.\right. \\
&= \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})] \\
&= S_n(f).
\end{aligned}
$$

即得

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

同样, 由复化Simpson公式误差估计

$$I(f) - S_{2n}(f) \approx \frac{1}{15}[S_{2n}(f) - S_n(f)]$$

得

$$I(f) \approx \frac{16}{15}S_{2n}(f) - \frac{1}{15}S_n(f).$$

可以验证

$$C_n(f) = \frac{16}{15}S_{2n}(f) - \frac{1}{15}S_n(f).$$

$$I(f) - C_{2n}(f) \approx \frac{1}{63}[C_{2n}(f) - C_n(f)],$$

记

$$R_n(f) = \frac{64}{63}C_{2n}(f) - \frac{1}{63}C_n(f). \tag{17}$$

(17)称为Romberg公式. 可以证明Romberg公式的截断误差为$O(h^8)$. 从而可得

$$I(f) - R_{2n}(f) \approx \frac{1}{255}[R_{2n}(f) - R_n(f)].$$

利用Romberg求积法可以列表计算.

区间等分数(n)	$T_n(f)$		$S_n(f)$		$C_n(f)$		$R_n(f)$
1	T_1		S_1		C_1		R_1
	$\downarrow$	$\nearrow$		$\nearrow$		$\nearrow$	
2	T_2		S_2		C_2		R_2
		$\nearrow$		$\nearrow$		$\nearrow$	
4	T_4		S_4		C_4		R_4
		$\nearrow$		$\nearrow$		$\nearrow$	
8	T_8		S_8		C_8		$\vdots$
		$\nearrow$		$\nearrow$			
16	T_{16}		S_{16}		$\vdots$		
		$\nearrow$					
32	T_{32}		$\vdots$				
$\vdots$	$\vdots$						

例5.1

分别用复化梯形公式、复化*Simpson*公式、复化*Cotes*公式和*Romberg* 求积法计算积分

$$\int_1^5 \frac{\sin x}{x} dx,$$

精确至7位有效数字.

解

(1) 复化梯形公式. 要求

$$\frac{1}{3}|T_{2n} - T_n| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-7}.$$

计算得$2n = 4096$, 即要求4097个节点.

(2) 复化Simpson公式. 要求

$$\frac{1}{15}|S_{2n}(f) - S_n(f)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-7}.$$

计算得$2n = 32$, 即要求65个节点.

(3) 复化Cotes公式. 要求

$$\frac{1}{63}|C_{2n}(f) - C_n(f)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-7}.$$

计算得$2n = 8$, 即要求33个节点.

(4) Romberg求积法. 要求

$$\frac{1}{255}|R_{2n}(f) - R_n(f)| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-7}.$$

计算得$2n = 2$, 即要求17节点.

5.4 Gauss求积公式

1. Newton-Cotes公式对次数不超过n的多项式精确成立；
2. 使用等距节点上的函数值限制了求积公式的精度；

例5.1

用梯形公式求$\int_2^5 [2+(x-3)^2]dx$的近似值。

- 该定积分的精确值为$I=9$;
- 用梯形公式得：$T=\frac{3}{2}[f(2)+f(5)]=13.5$;
- 调整节点，取$x_0=2.5, x_1=4$，得积分近似值$\tilde{T}=8.3571$

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

求积公式中的节点采用一种最优的方式来选取，使得误差达到最小；

2n+2个参数，有可能使得求积公式具有2n+1次代数精度。

定义5.1

设

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

$I_n(f)$是求积分$I(f)$的求积公式. 如果求积公式$I_n(f)$的代数精度是$(2n+1)$, 则称该求积公式是*Gauss-Legendre* 公式, 对应的求积点$x_k, k=0,1\cdots,n$称为*Gauss*点.

由代数精度知, 求积公式$I(f)\approx I_n(f)$的代数精度为$(2n+1) \Longleftrightarrow$

$$\int_a^b x^i dx=\sum_{k=0}^{n} A_k x_k^i, \quad i=0,1,\cdots,2n+1. \tag{18}$$

例5.2

考虑求积公式

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

决定求积系数A_0, A_1和求积点x_0, x_1，使其成为2点Gauss公式.

解 $n = 1$, 即要使公式的代数精度为$2 + 1 = 3$. 由代数精度得

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

$$f(x) = x, \quad A_0 x_0 + A_1 x_1 = \int_{-1}^{1} xdx = 0,$$

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

$$f(x) = x^3, \quad A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3 dx = 0.$$

求得$A_0 = A_1 = 1, x_0 = -\dfrac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$, 故$[-1, 1]$上两点Gauss公式为$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$.
非线性方程组(18)，较复杂，通常$n > 2$就很难求解。所以，一般不通过求解该方程组来确定x_k, A_k，而从分析高斯点的特性来构造高斯求积公式。

定理5.1

设

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

$I_n(f)$是计算积分$I(f)$的插值型求积公式，记

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

则求积公式$I(f)\approx I_n(f)$是Gauss求积公式(代数精度$2n+1$，或$\{x_k\}_{k=0}^{n}$ 为Gauss点)$\Longleftrightarrow$ $W_{n+1}(x)$与任意一个次数不超过n的多项式$p(x)$正交，即

$$\int_a^b p(x)W_{n+1}(x)dx=0.$$

5.4.1 Gauss-Legendre求积公式

定义5.2

设

$$g_n(x) = a_{n,0}x^n + a_{n,1}x^{n-1} + \cdots + a_{n,n-1}x + a_{n,n}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots ,$$

其中$a_{n,0} \neq 0$. 如果对任意的$i, j = 0, 1, \cdots, i \neq j$有

$$(g_i, g_j) = \int_a^b g_i(x)g_j(x)dx = 0,$$

则称$\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$为区间$[a, b]$上的正交多项式序列, 称$g_n(x)$为区间$[a, b]$上的$n$次正交多项式.

定理5.2

设$\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$为区间$[a,b]$上的正交多项式序列，则对任意的$n$，多项式

$$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_n(x)$$

线性无关.

由该结论知，如果$\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$为区间$[a,b]$上的正交多项式序列，则$g_0(x)$, $g_1(x)$, $\cdots$, $g_n(x)$组成n次多项式空间的一组基，从而$g_n(x)$与任意一个次数不超过$n-1$的多项式正交.

定理5.3

设$\{g_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$为区间$[a,b]$上的正交多项式序列，则$g_n(x)$在$(a,b)$上有$n$个不同的实零点.

定义5.3

称

$$P_n(t) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n(t^2-1)^n}{dt^n}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

为n次勒让德(Legendre)多项式

由定义可知

$$P_0(t) = 1, \quad P_1(t) = t, \quad P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2 - 1),$$
$$P_3(t) = \frac{1}{2}(5t^3 - 3t), \quad P_4(t) = \frac{1}{8}(35t^4 - 30t^2 + 2), \cdots .$$

定理5.4

*Legendre*多项式序列$\{P_k(t)\}_{k=0}^{\infty}$是区间$[-1,1]$上的正交多项式序列.

5.4.2 区间$[-1,1]$上的Gauss公式

考虑区间$[-1,1]$上的Gauss公式

$$I(g)=\int_{-1}^{1}g(t)dt\approx\sum_{k=0}^{n}\tilde{A}_k g(t_k),$$

由定理5.1，定理5.2和定理5.3知，$n+1$次Legendre多项式$P_{n+1}(t)$的零点就是Gauss公式的节点，而求积系数为

$$\tilde{A}_k=\int_{-1}^{1}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{t-t_j}{t_k-t_j}dt,\quad k=0,1,\cdots,n.$$

当$n=0$时，$t_0=0, \tilde{A}_0=2$，得1个节点的Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} g(t)dt \approx 2g(0).$$

$n=1$时，$t_0=-\frac{1}{\sqrt{3}}, t_1=\frac{1}{\sqrt{3}}, \tilde{A}_0=1, \tilde{A}_1=1$，得到2个节点的Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} g(t)dt \approx g\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+g\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

当$n=2$时，$t_0=-\sqrt{\frac{3}{5}}, t_1=0, t_2=\sqrt{\frac{3}{5}}$，$\tilde{A}_0=\frac{5}{9}$，$\tilde{A}_1=\frac{8}{9}$，$\tilde{A}_2=\frac{5}{9}$. 得到3点Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} g(t)dt \approx \frac{5}{9}g\Big(-\sqrt{\frac{3}{5}}\Big)+\frac{8}{9}g(0)+\frac{5}{9}g\Big(\sqrt{\frac{3}{5}}\Big).$$

5.4.3 区间$[a, b]$上的Gauss公式

考虑区间$[a, b]$上的积分 $$I(f) = \int_a^b f(x)dx,$$

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

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

由$[-1, 1]$上的Gauss公式得$[a, b]$上的Gauss公式

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^n \frac{b-a}{2}\tilde{A}_k f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t_k\right).$$

令

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t_k, \quad A_k = \frac{b-a}{2}\tilde{A}_k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots, n,$$

则得$[a, b]$上的Gauss积分公式为

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

5.4.4 Gauss公式的截断误差

定理5.5

设$f(x) \in C^{2n+2}[a,b]$, 则$Gauss$公式

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

的截断误差为

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b W_{n+1}^2(x)dx, \end{aligned}$$

其中$W_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j), \quad \xi \in (a,b).$

推论5.1

设有计算$I(f)=\int_a^b f(x)dx$的求积公式

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

则其代数精度最多$2n+1$。

5.4.5 Gauss公式的稳定性和收敛性

定理5.6

Gauss公式

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

的求积系数$A_k > 0(k = 0, 1, \cdots, n)$.

稳定性

在利用求积公式$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$计算中，由于舍入误差影响，$f(x_k)$往往有误差，即计算时用$f(x_k)$的近似值$\tilde{f}_k$计算，因而实际求得定积分近似值为

$$I_n(\tilde{f})=\sum_{k=0}^{n}A_k\tilde{f}_k.$$

定义5.4

求积公式$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k(f(x_k)$，其近似值为$I_n(\tilde{f})=\sum_{k=0}^{n}A_k\tilde{f}_k$. 如果对任意$\varepsilon>0$，存在$\delta>0$，当$\max\limits_{0\le k\le n}|f(x_k)-\tilde{f}_k|<\delta$时，有$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|<\varepsilon$，则称该求积公式是稳定的.

定理5.7

*Gauss*公式

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

是稳定的.

收敛性

定义5.5
给定求积公式

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

如果对任意$\varepsilon > 0$, 存在正整数N, 当$n > N$时, 有$|I(f) - I_n(f)| < \varepsilon$, 则称该求积公式收敛.

定理5.8
设$f(x) \in C[a, b]$, 则$Gauss$公式收敛.

5.4.6 带权积分

积分

$$I(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx$$

称为带权积分，其中$\rho(x)$称为权. 权$\rho(x)$要满足如下三个条件: $\rho(x)$在$[a, b]$上连续，且

1. 当$x \in (a, b)$时，$\rho(x) \geq 0$;
2. $\displaystyle\int_a^b \rho(x) dx > 0$;
3. 对$k = 0, 1, 2, \cdots$，积分$\displaystyle\int_a^b x^k \rho(x) dx$存在.

可以构造带权积分的求积公式:

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k). \tag{19}$$

如果当$f(x) = 1, x, x^2, \cdots, x^m$时，求积公式(19)精确成立，而当$f(x) = x^{m+1}$时，求积公式(19) 不精确成立，则称该求积公式的代数精度是m. 当其代数精度是$(2n+1)$时，称为Gauss公式.

例5.3

给定积分$I(f)=\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}}dx$及对应的求积公式

$$I(f)\approx Af\left(\frac{1}{5}\right)+Bf(1).$$

(1) 求A,B使上述求积公式的代数精度尽量高，并指出达到的最高次代数精度;

(2) 设$f(x)\in C^3[0,1]$，求该求积公式的截断误差.

解

(1) 当$f(x)=1$，左边$=\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}dx=2$，右边$=A+B$.

当$f(x)=x$，左边$=\int_0^1 \frac{x}{\sqrt{x}}dx=\frac{2}{3}$，右边$=\frac{1}{5}A+B$.

要使代数精度尽量高则

$$\begin{aligned} A+B&=2 \\ \frac{1}{5}A+B&=\frac{2}{3} \end{aligned}$$

求得$A=\frac{5}{3}, B=\frac{1}{3}$. 此时求积公式为

$$I(f)\approx\frac{5}{3}f\left(\frac{1}{5}\right)+\frac{1}{3}f(1).$$

当$f(x)=x^2$时，左边$=\int_0^1 \frac{x^2}{\sqrt{x}}dx=\frac{2}{5}$，右边$=\frac{5}{3}\left(\frac{1}{5}\right)^2+\frac{1}{3}(1)^2=\frac{2}{5}$.

当$f(x)=x^3$时，左边$=\int_0^1 \frac{x^3}{\sqrt{x}}dx=\frac{2}{7}$，右

(2) 作一个2次Hermite插值多项式$H(x)$, 满足

$$H\left(\frac{1}{5}\right)=f\left(\frac{1}{5}\right),\quad H(1)=f(1),\quad H'\left(\frac{1}{5}\right)=f'\left(\frac{1}{5}\right).$$

该多项式存在唯一, 且

$$f(x)-H(x)=\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}\left(x-\frac{1}{5}\right)^2(x-1),\quad \xi\in\left(\frac{1}{5},1\right).$$

所以

$$
\begin{aligned}
& I(f)-\left[\frac{5}{3} f\left(\frac{1}{5}\right)+\frac{1}{3} f(1)\right] \\
= & \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} d x-\left[\frac{5}{3} H\left(\frac{1}{5}\right)+\frac{1}{3} H(1)\right] \quad (\text{由插值条件}) \\
= & \int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} d x-\int_0^1 \frac{H(x)}{\sqrt{x}} d x \quad (\text{利用代数精度为}2) \\
= & \int_0^1 \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} \frac{1}{\sqrt{x}}\left(x-\frac{1}{5}\right)^2(x-1) d x \\
= & \frac{f^{(3)}(\eta)}{3!} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}\left(x-\frac{1}{5}\right)^2(x-1) d x \quad (\text{积分中值定理}) \\
= & -\frac{16}{1575} f^{(3)}(\eta), \quad \eta \in(0,1) .
\end{aligned}
$$

例5.4

设$f(x) \in C^4[a,b]$, 对积分$I(f) = \int_a^b f(x)dx$

1. 构造具有3次代数精度的Gauss公式$G(f)$;
2. 证明$I(f) - G(f) = \frac{1}{135}(\frac{b-a}{2})^5 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)$;
3. 构造对应的2点复化Gauss公式$G_n(f)$.

常用带权积分

1. Gauss-Chebyshev求积公式

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

$$x_k=\cos\left(\left(k+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{n+1}\right)(k=0,1,\cdots,n)\text{是n+1次Chebyshe}$$

2. Gauss-Hermite求积公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

其中x_k是$(n+1)$次Hermite多项式的零点。

5.5 重积分的近似计算

考虑矩形区域$D=\{(x,y)|a\le x\le b, c\le y\le d\}$上的积分

$$I(f)=\iint_D f(x,y)dxdy, \tag{20}$$

其中a,b,c,d为常数，$f(x,y)$在D上连续。将重积分化为累次积分$I(f)=\int_a^b\left(\int_c^d f(x,y)dy\right)dx$，对$x,y$分别利用前面的方法。

5.6 数值微分

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}, \quad (\text{向前差商})$$
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}, \quad (\text{向后差商})$$
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}, \quad (\text{中点差商})$$

将$f(x_0+h), f(x_0-h)$在x_0点Taylor展开，可以得

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = -\frac{h}{2}f''(x_0) + O(h^2),$$
$$f'(x_0) - \frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h} = \frac{h}{2}f''(x_0) + O(h^2),$$
$$f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} = -\frac{h^2}{6}f'''(x_0) + O(h^3),$$

Remark:

从截断误差的角度来看，步长h越小，计算结果越准确；但是从计算角度看，h越小，$f(x_0+h)$与$f(x_o-h)$越接近，直接相减会造成有效数字的严重损失，因此从舍入误差的角度看步长h不宜取太小。

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

比较$D(h), D(\frac{h}{2})$，如果

$$\left|D\left(\frac{h}{2}\right)-D(h)\right|<\varepsilon$$

则步长取为$\dfrac{h}{2}$.

插值型求导公式

对于列表函数的求导，应用插值原理，可以建立插值多项式$p_n(x) \approx f(x)$。可以取

$$f'(x) \approx p_n'(x)$$

称为插值型求导公式。

截断误差：

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

某个节点上的导数的截断误差：

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

两点公式

作线性插值

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1),$$

记$h = x_1 - x_0$,两边求导

$$p_1'(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)],$$

带余项的两点公式:

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \frac{h}{2} f''(\xi_0), (x_0 < \xi_0 < x_1), \quad (21)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \frac{h}{2} f''(\xi_1), (x_0 < \xi_1 < x_1). \quad (22)$$

三点公式

作插值函数

$$
\begin{aligned}
p_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x-x_2)}f(x_1) \\
&\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)
\end{aligned}
$$

记$x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = h$，带余项的3点求导公式

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_0), (x_0 < \xi_0 < x_2), \\
f'(x_1) &= \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi_1), (x_0 < \xi_1 < x_2), \\
f'(x_2) &= \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi_2), (x_0 < \xi_2 < x_2).
\end{aligned}
$$