第六章 数值积分与数值微分

§6.0 数值积分概述

由积分学基本定理知 $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$

但应用中常碰到如下情况：

①f(x)的原函数无法用初等函数给出

②f(x)用表格形式给出

③虽然f(x)的原函数能用初等函数表示,
但表达式过于复杂。

这时积分与求导都必须使用数值的方法。

在积分区间[a,b]上取一系列点 $x_k(k=0,1,2,\cdots n)$，设

$$a \le x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$$

用被积函数在这些点的函数值的线性组合作为积分近似值

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

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+R[f]=I_n+R[f]$$

其中*R*[*f*]称为**求积公式的余项**。$x_k(k=0,1,2,\cdots n)$称为**求积节点**。$A_k(k=0,1,2,\cdots n)$ 称为**求积系数**。A_k仅与求积节点 x_k 的选取有关，而不依赖与被积函数*f*(x)的具体形式。

§6.1 数值微分

以离散数据 $(x_k, f(x_k))\quad (k=0,1,2,\ldots\ldots n)$ 近似表达在节点 $y=f(x)$ 处的微分,通常称这类问题为**数值微分**。

一、Taylor展开法

根据Taylor展开式可得

$$f(x_k+h)=f(x_k)+f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(\xi_1)\quad \xi_1\in(x_k,x_k+h)$$

$$f(x_k-h)=f(x_k)-f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(\xi_2)\quad \xi_2\in(x_k-h,x_k)$$

则有:

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k+h)-f(x_k)}{h}-\frac{h}{2}f''(\xi_1) \qquad \xi_1\in(x_k,x_k+h)$$

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k)-f(x_k-h)}{h}+\frac{h}{2}f''(\xi_2) \qquad \xi_2\in(x_k-h,x_k)$$

类似地,由

$$f(x_k+h)=f(x_k)+f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(x_k)+\frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1) \qquad \xi_1\in(x_k,x_k+h)$$

$$f(x_k-h)=f(x_k)-f'(x_k)h+\frac{h^2}{2!}f''(x_k)-\frac{h^2}{3!}f'''(\xi_2) \qquad \xi_2\in(x_k-h,x_k)$$

可得下面的中点公式:

中点公式：

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k+h)-f(x_k-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(\xi_3)$$

$$\xi_3\in(x_k-h,x_k+h)$$

展开到3阶可得：

$$f''(x_k)=\frac{f(x_k+h)-2f(x_k)+f(x_k-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_4)$$

$$\xi_4\in(x_k-h,x_k+h)$$

二、插值函数法

给出列表函数 $y=f(x)$，可建立插值多项式 $p_n(x)$，取 $p'_n(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似函数，则称为 $f'(x)\approx p_n'(x)$，**插值型求导公式**。

$$\text{由} f(x)=p_n(x)+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad \xi\in\left[x_0,x_n\right]$$

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

确定节点，x_k上的导数值，有余项

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

为讨论方便，假定所给节点是等距的。

1.一阶两点公式

$$\begin{cases} f'(x_0) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \dfrac{hf''(\xi_1)}{2!} \\ f'(x_1) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \dfrac{h}{2}f''(\xi_2) \end{cases} \qquad \xi_1, \xi_2 \in (x_0, x_1)$$

2.一阶三点公式

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}(-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2))+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}\{-f(x_0)+f(x_2)\}-\frac{f^{(3)}(\xi_2)}{6}h^2$$

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}\{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)\}+\frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_3)$$

$$\xi_i\in(x_0,x_2)\qquad i=1,2,3$$

3.二阶三点公式

$$f''(x_0)=\frac{1}{h^2}\left[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)\right]-hf^{(3)}(\xi_1)+\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_2)$$

$$f''(x_1)=\frac{1}{h^2}\left[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)\right]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_3)$$

$$f''(x_2)=\frac{1}{h^2}[f(x_1)-2f(x_1)+f(x_2)+hf^{(3)}(\xi_4)-\frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_5)]$$

$$\xi_i\in(x_0,x_2)\qquad i=1,2,3,4,5$$

Remark1：在数值微分计算中，并非步长越小精度越高。这是因为数值微分对舍入误差非常敏感，它随步长h的缩小而增大，导致计算不稳定。

Remark2：在数值微分计算中，当插值多项式收敛到函数$f(x)$时，P'_n（x）不一定收敛到$f'(x)$。

Remark3：为了避免上述问题，可以用样条插值函数的导函数来代替$f(x)$的导函数。

§6.2 Newton Cotes 公式

一、.Newton—Cotes求积公式

常用的构造数值求积公式的一种方法是利用插值多项式$P_n(x)$来构造求积公式

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

称为**插值型求积公式**。

将$[a,\ b]$分为n等份，$h=(b-a)/n$，选取节点 $x_k = a + kh(k=0,1,\cdots,n)$，作$n$次*Lagrange*插值多项式

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx$$

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

由Lagrange插值公式，可得

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}dx$$

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

显然系数 A_k 与 $f(x)$无关，只与节点有关。

系数 A_k 还可以进一步表示：

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

令 $x = a + th$ 即有 $dx = hdt$ ，$[a,b] \leftrightarrow [0,n]$

$$x - x_k = (t-k)h$$

故 $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)\cdots(x - x_n) = h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n)$

$$\omega'_{n+1}(x_k) = (x_k - x_0)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)$$

$$= h^n k(k-1)\cdots 1\cdot(-1)(-2)\cdots(-(n-k))$$

$$= h^n k!(-1)^{n-k}(n-k)!$$

故

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

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

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

$$= (b-a) c_k^{(n)}$$

故求积公式可写为

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f(x_0+kh)$$

其中:

$c_k^{(n)}$**称为柯特斯系数，上式称Newton----Cotes公式。**

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

称为Newton - Cotes公式的截断误差。

当$n=1$时，

$$c_0^{(1)}=\frac{(-1)^{1-0}}{1\cdot 1!\cdot 0!}\int_0^1(t-1)dt=(-1)\times\left.\frac{(t-1)^2}{2}\right|_0^1=\frac{1}{2}$$

$$c_1^{(1)}=\frac{(-1)^{1-1}}{1\cdot 1!\cdot 0!}\int_0^1 tdt=\left.\frac{1}{2}t^2\right|_0^1=\frac{1}{2}$$

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

该公式称为**梯形公式**。

n=2可计算得到

$$c_0^{(2)} = 1/6 \quad c_1^{(2)} = 4/6 \quad c_2^{(2)} = 1/6$$

故有：

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)[\frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)]$$

它称为**辛浦生（Simpson）公式**或**抛物线公式**。

n=4　Newton—Cotes公式为

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

其中, $x_k = a_0 + kh \quad (k = 0,1,\cdots,4)$

这个公式特别称为柯特斯公式。

类似地我们可以求出n=5,6,…时的柯特斯系数，从而建立相应的求积公式。

二、求积公式的代数精确度

若某个求积公式对尽可能多的被积函数都准确成立，那么这个公式就具有比较好的使用价值。对此，有如下定义：

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

对于一切不高于*m*次的代数多项式准确成立，

而对于某个*m*+1次多项式并不准确成立，

则称上述求积公式**具有*m*次代数精确度**，简称**代数精度**。

Remark1：求积公式具有*m*次代数精确度的充要条件是它对于$f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$都能准确成立，而对于$f(x)=x^{m+1}$不准确成立。

Remark2：梯形公式、辛浦生公式、柯特斯公式分别具有1，3，5次代数精度。

Remark3：牛顿 - 柯特斯公式是基于*n*+1个节点的插值公式导出的，因而其代数精度不低于*n*次。

Remark4：*n*为偶数的牛顿 - 柯特斯公式具有*n*+1次代数精度， *n*为奇数的牛顿 - 柯特斯公式具有*n*次代数精度。

三、求积公式的截断误差

引理（积分第二中值定理）：如果$f(x)$,$g(x)$在区间$[a,b]$连续，且$g(x)$在区间(a,b)不变号，则存在$\xi\in(a,b)$,使得

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

定理6.2：若$f(x)$在$[a,b]$上有二阶连续导数，则梯形求积公式的截断误差为：

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

$$= -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\quad a\le\eta\le b$$

证：

$$由R[f]=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx,\quad \xi依赖于x。$$

由于 $f''(\xi)$ **是依赖于*x*的函数，且在[*a*,*b*]上连续，** $(x-a)(x-b)\le 0,$ **故运用积分 中值定理，在[*a*,*b*]上存在一点** η **使得：**

$$\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx = f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

$$=-\frac{1}{6}f''(\eta)(b-a)^3 (a\le\eta\le b)$$

$$\therefore R[f]=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

证毕

定理6.3：若$f(x)$在$[a,b]$上有四阶连续导数，则辛浦生求积公式的截断误差为：

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

$$=-\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^4(\eta)$$

$$=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta) \qquad a\le\eta\le b$$

证明：由于辛浦生公式的代数精度为3，为此构造次数小于等于3的多项式 $H_3(x)$，使满足：

$$H_3(a)=f(a) \quad H_3(b)=f(b)$$

$$H_3\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad H_3'\left(\frac{a+b}{2}\right)=f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

$$\text{由于}\int_a^b H_3 dx=\frac{b-a}{6}\left[H_3(a)+4H_3\left(\frac{a+b}{2}\right)+H_3(b)\right]$$

$$f(x)=H_3(x)+\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$$

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

$$=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}[H_3(a)+4H_3(\frac{a+b}{2})+H_3(b)]$$

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

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

由于$f^{(4)}(\xi)$是依赖于*x*的函数，在[*a,b*]上连续，故$(x-a)(x-c)^2(x-b)\le 0$，可运用积分中值定理，在[*a,b*]上存在一点 η，使

$$\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-b)(x-c)^2 dx$$

$$= f^{(4)}(\eta)\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx$$

$$R[f] = -\frac{1}{180} f^{(4)}(\eta)(b-a)(\frac{b-a}{2})^4$$

$$= -\frac{1}{2880} f^{(4)}(\eta)(b-a)^5 (a \le \eta \le b)$$

证毕

类似地,若*f(x)*在[*a,b*]上有六阶连续导数，则柯特斯求积公式的截断误差为：

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

$$a\le\eta\le b$$

四、Newton - Cotes公式的稳定性

由Newton - Cotes公式的代数精确度及余项的结果看，n越大越好。而事实上，n 增大时，计算量也变大，误差积累变得越来越严重。另外，求积公式的稳定性及收敛性也没有保证。

因为牛顿 - 柯特斯公式对于$f(x)=1$必然准确成立，

故有 $$\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$$

设计算 $f(x_k)$有绝对误差 ε_k，即 $f^*(x_k)-f(x_k)=\varepsilon_k$.

则在实际中用$(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f^*(x_k)$ 代替 $(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$

所产生的误差为$(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} \varepsilon_k$。

如果 $C_k^{(n)}$ 均为正数，令 $\varepsilon = \max\limits_{0\le k\le n}|\varepsilon_k|$ ，则有

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

$$(b-a)\varepsilon\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = (b-a)\varepsilon$$

用此计算过程是稳定的。如果 $C_k^{(n)}$ 有正有负，则

$$(b-a)\varepsilon\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right| > (b-a)\varepsilon\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = (b-a)\varepsilon$$

此时误差得不到控制，因而稳定性得不到保证。当 n 很大时，Newton - Cotes求积公式的系数出现负值，因此实际中很少使用。

五、待定系数法

利用待定系数法可以得出各种求积公式，而且可以具有尽可能高的代数精度。

定理：

在区间$[a,b]$上,对于给定n+1个互异节点$a \le x_0 \le \cdots \le x_n \le b$,总存在求积系数 $A_0, A_1, \cdots A_n$, 使求积公式至少有n次代数精度。

事实上，只要令求积公式对于 $f(x) = 1, x, x^2, \cdots, x^n$

都能准确成立即可得到下式：

$$\int_a^b dx = \sum_{k=0}^{n} A_k$$

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

$$\vdots$$

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

则可通过给定的n+1个节点得到上述含n+1个未知数、n+1个方程的方程组。

若求积节点互异，则

$$\det A = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} \neq 0$$

从而可得唯一解 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$,

从而构造出至少具有 *n* 次代数精度的求积公式。

例： 确定求积公式

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

中的待定参数，使其代数精度尽量高，并指明所构造的求积公式具有的代数精度。

解：求积公式中含有一个待定参数，

当 $f(x)=1, x$ 时,有 $\int_0^h dx \equiv \frac{h}{2}[1+1]$

$$\int_0^h x dx \equiv \frac{h}{2}[0+h]+\alpha h^2[1-1]$$

故令求积公式对 $f(x)=x^2$ 成立,即

$$\int_0^h x^2dx=\frac{h}{2}[0+h^2]+\alpha h^2(2\times 0-2h)$$ 得 $\alpha=\dfrac{1}{12}$

令 $f(x)=x^3$ 代入已求得的求积公式，显然

$$\int_0^h x^3dx=\frac{h}{2}[0+h^3]+\frac{h^2}{12}[0-3h^2]$$

令 $f(x)=x^4$

$$\int_0^h x^4dx\neq\frac{h}{2}[0+h^4]+\frac{h^2}{12}[0-4h^3]$$

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

具有三次代数精度。 #

§6.3 复化求积公式

当$n\leq7$时，*Newton-Cotes*系数均为正，但从n=8 开始， *Newton-Cotes*系数有正有负，这会使计算误差得不到控制，稳定性得不到保证。

因 此， 实 际 计 算 时， 一 般 不 采 用 n 较 大 的 *Newton-Cotes*公式，而是将区间[a,b]等分为N个小区间，其长度为$h=(b-a)/N$,在每个小区间上应用低阶的公式，然后对所有小区间上的计算结果求和，这样得出的 求积公式称为复化求积公式。

一、常用的几种复化求积公式

1.复化梯形公式

将[*a*,*b*]等分为*N*个子区间 $[x_k, x_{k+1}]\quad k=0,1,\cdots,N-1.$

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

$$=\sum_{k=0}^{N-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{N-1}f''(\eta_k)$$

$$=T_N+R_1^{(N)}[f]\qquad \eta_k\in(x_k,x_{k+1})$$

其中 $$T_N=\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{N-1}(f(x_k)+f(x_{k+1}))$$

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

当$N\to\infty$时，

$$T_N=\frac{1}{2}\left[\sum_{k=0}^{N-1}(f(x_k)h+\sum_{k=1}^{N}f(x_k)h\right]\to$$

$$\frac{1}{2}\left[\int_a^b f(x)dx+\int_a^b f(x)dx\right]=\int_a^b f(x)dx$$

即T_N收敛于$\int_a^b f(x)dx$ 。

关于复化梯形公式的余项有如下定理：

定理6.4 设$f(x)$在区间$[a,b]$上有连续的二阶导数，则复化梯形公式的截断误差为：

$$\boxed{R_1^{(N)}[f] = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta) \qquad (\eta \in (a,b))}$$

证明：$$R_1^{(N)}[f] = I - T_N = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{N-1} f''(\eta_k)$$

若$f''(x)$在[a,b]连续,设m为$f''(x)$的最小值,M为$f''(x)$的最大值,则

$$m \le \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} f''(\eta_k) \le M.$$

故由介值定理,一定在(a,b)有一点 使

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

$$故R_1^{(N)}[f]=-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{N-1}f''(\eta_k)=-\frac{Nh}{12}h^2f''(\eta)$$

$$\eta\in(a,b)$$

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

证毕

Remark：若$|f''(x)|\le M_2$，则有误差估计式

$$\left|R_1^{(N)}[f]\right|\le\frac{b-a}{12}h^2M_2$$

2.复化辛浦生公式

将 $[a,b]$ 等份成 N 个子区间 $[x_{2k}, x_{2k+2}]$ $(k=0, 1, \ldots, N-1)$，子区间长度 $h=\dfrac{b-a}{N}$ 。

由

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{N-1}\int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}} f(x)dx$$

$$=\sum_{k=0}^{N-1}\frac{h}{6}[f(x_{2k})+4f(x_{2k+1})+f(x_{2k+2})]-\frac{h^5}{2880}\sum_{k=0}^{N-1} f^{(4)}(\eta_k)$$

$$=\frac{h}{6}[f(a)+4\sum_{k=0}^{N-1} f(x_{2k+1})+2\sum_{k=1}^{N-1} f(x_{2k})+f(b)]-\frac{b-a}{2880}h^4 f^4(\eta)$$

$$=S_N+R_2^{(N)}[f]$$

式中 $x_k=a+k\dfrac{h}{2}(k=1,2,\cdots,2N-1), \eta\in(a,b)$

3.复化柯特斯公式

将[*a*,*b*]等份成*N*个子区间[x_{4k}，x_{4k+4}](k = 0，1，…,N-1)，子区间长度 $h=\dfrac{b-a}{N}$ 。

由 $$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{N-1}\int_{x_{4k}}^{x_{4k+4}} f(x)dx$$

$$=\sum_{k=0}^{N-1}\frac{h}{90}[7f(x_{4k})+32f(x_{4k+1})+12f(x_{4k+2})+32f(x_{4k+3})+7f(x_{4k+4})]-\frac{2h}{945}(\frac{h}{4})^6\sum_{k=0}^{N-1}f^{(6)}(\eta_k)$$

$$=\frac{h}{90}[7f(a)+32\sum_{k=1}^{N}f(x_{4k-3})+12\sum_{k=1}^{N}f(x_{4k-2})+32\sum_{k=1}^{N}f(x_{4k-1})+14\sum_{k=1}^{N-1}f(x_{4k})+7f(b)]-\frac{2(b-a)}{945}(\frac{h}{4})^6 f^{(6)}(\eta)$$

$$=C_N+R_4^{(N)}[f] \qquad \eta\in(a,b)$$

式中$x_k=a+k\dfrac{h}{4}(k=1,2,\cdots,2N-1),\eta\in(a,b)$

例子1

若取9个节点，用复化梯形公式、复化辛浦生公式和复化柯特斯公式计算积分，其步长以及与9个节点所对应的求积系数分别是多少?

- **解**：复化梯形公式：N=8，h=(b-a)/8，对应的求积系数为1、2、2、2、2、2、2、2、1。
- 复化辛浦生公式：N=4，h=(b-a)/4，对应的求积系数为1、4、2、4、2、4、2、4、1。
- 复化柯特斯公式：N=2，h=(b-a)/2，对应的求积系数为7、32、12、32、14、32、12、32、7。 #

例子2

用积分 $\int_2^8 \frac{1}{x}dx = 2\ln 2$,计算 *ln*2,要使所得积分近似值具有5位有效数字。问用复化梯形公式，复化Simpson公式时，至少要取多少个节点?

解:由 $\ln 2 = \frac{1}{2}\int_2^8 \frac{1}{x}dx$ 且 $\frac{1}{2}\int_2^8 \frac{1}{x}dx > \frac{1}{2}\int_2^8 \frac{1}{8}dx = \frac{3}{8} = 0.375$

即 $0.375 < \ln 2 < \ln e$

故,计算ln2时，要使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$,

也即计算2ln2，其误差不超过 10^{-5}。

(1).由$\left|R_1^{(N)}[f]\right| \le \frac{(b-a)}{12}h^2 M_2 = \frac{(b-a)^3}{12N^2}M_2$

其中 $M_2 = \max\limits_{a\le x\le b}\left|f''(x)\right|$

$\left|f'(x)\right| = \left|\frac{1}{x^2}\right|$ $\left|f''(x)\right| = \left|\frac{2}{x^3}\right|$ $M_2 = \max\limits_{2\le x\le 8}\left|\frac{2}{x^3}\right| = \frac{2}{2^3} = \frac{1}{4}$

令$\left|R_1^{(N)}[f]\right| \le \frac{(b-a)^3}{12N^2}M_2 = \frac{6^3}{12N^2}\times\frac{1}{4} \le 10^{-5}$

$N \ge \sqrt{\frac{6^3}{12\times 4}\times 10^5} = 670.8203933....$

故区间应取671个，节点至少应取672。

(2)由 $$\left|R_2^{(N)}[f]\right| = \left|\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta)\right| \le \frac{b-a}{2880}h^4 M_4 = \frac{(b-a)^5}{2880N^4}M_4$$

其中 $M_4 = \max_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right|$ **由**

$$f'(x) = \frac{-1}{x^2},\ f''(x) = \frac{2}{x^3},\ f^{(3)}(x) = \frac{-6}{x^4},\ f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}$$

$$M_4 = \max_{2\le x\le 8}\left|\frac{24}{x^5}\right| \le \left|\frac{24}{2^5}\right| = \frac{3}{4}$$

令 $$\left|R_2^{(N)}[f]\right| = \frac{(b-a)^5}{2880}\times\frac{M_4}{N^4} = \frac{6^5}{2880N^4}\times\frac{3}{4} \le 10^{-5}$$

$$N \ge \left\{\frac{6^5\times 3}{2880\times 4}\times 10^5\right\}^{\frac{1}{4}} = \sqrt[4]{\frac{6^5\times 3\times 10}{2880\times 4}}\times 10 = 21.2132034$$

故区间N应取22，即45个节点。 #

二、区间逐次分半求积法

1.误差的事后估计法

- 复化求积公式是提高精度的一种有效方法，但在使用复化求积公式之前，必须根据复化求积公式的余项进行先验估计，以确定节点数目，从而确定合适的等分步长。因为余项表达式中包含了被积函数的导数，而估计各阶导数的最大值往往是很困难的，且估计的误差上界往往偏大。所以实际中，常常使用“事后估计误差”的方法，通过区间的逐次分半，在步长逐次分半的过程中，反复利用复化求积公式进行计算，查看相继两次计算结果的差值是否达到要求，直到所求得的积分值满足精度要求。
- 该法也称为步长自动选择的变步长求积法。

对梯形公式，假定区间分为N等份时，由公式

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{N-1} f(x_k)+f(b)]=T_N$$

其中 $x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,N)$

算出的积分近似值为T_N,因而有

$$I=T_N-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta_1) \qquad \eta_1\in(a,b)$$

再把各个小区间分别对分，得积分的近似值为T_{2N}，则积分值为

$$I=T_{2N}-\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta_2)\ \ \eta_2\in(a,b)$$

假定$f''(x)$有$[a,b]$上变化不大，即有 $f''(\eta_1)=f''(\eta_2)$
则

$$\frac{I-T_N}{I-T_{2N}} \approx \frac{\frac{-(b-a)}{12}h^2}{\frac{-(b-a)}{12}(\frac{h}{2})^2} \approx 4$$

上式可改写为

$$I \approx T_{2N} + \frac{1}{3}(T_{2N} - T_N) = T_{2N} + \frac{1}{4-1}(T_{2N} - T_N)$$

计算时只需检验 $|T_{2N} - T_N| < \varepsilon$ 是否满足？若不满足，则再把区间分半进行计算，直到满足要求为止 。

类似的，还可以得到下面的结论：

对于辛浦生公式，假定 $f^{(4)}(x)$ 在[*a*,*b*]上变化不大，则有

$$I \approx S_{2N} + \frac{1}{15}(S_{2N} - S_N) = S_{2N} + \frac{1}{4^2 - 1}(S_{2N} - S_N)$$

对于Cotes公式，假定$f^{(6)}(x)$在[*a*,*b*]上变化不大，则有

$$I \approx C_{2N} + \frac{1}{63}(C_{2N} - C_N) = C_{2N} + \frac{1}{4^3 - 1}(C_{2N} - C_N)$$

2.区间逐次分半的梯形公式

由于$T_N = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(x) + f(b)]$

$$T_{2N} = \frac{h}{4}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{2N-1} f(x_0 + k\frac{h}{2}) + f(b)]$$

故$T_{2N} = \frac{h}{4}[f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + 2\sum_{k=1}^{N} f(x_k - \frac{h}{2})]$

$$= \frac{1}{2}T_N + \frac{h}{2}\sum_{k=1}^{N} f(a + (2k-1)\frac{h}{2})$$

即$T_{2N} = \frac{1}{2}T_N + \frac{b-a}{2N}\sum_{k=1}^{N} f(a + (2k-1)\frac{b-a}{2N})$

据此我们得到复化梯形公式区间逐次分半时的递推计算公式：

$$\begin{cases} T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2N} = \dfrac{1}{2}T_N + \dfrac{b-a}{2N}\sum\limits_{j=1}^{N} f\left(a+(2j-1)\dfrac{b-a}{2N}\right) \end{cases}$$

$$(N = 2^{k-1}; k = 1,2,\cdots)$$

计算时只需检验 $|T_{2N} - T_N| < \varepsilon$ 是否满足？若不满足，则再把区间分半进行计算，直到满足要求为止。

§6.4 Romberg求积法

一、对低精度公式经过组合构造高精度公式

从S_N及T_{2N}, T_N的计算公式可验证得到：

$$S_N=\frac{4}{3}T_{2N}-\frac{1}{3}T_N=\frac{4}{4-1}T_{2N}-\frac{1}{4-1}T_N$$

事实上，

$$S_N=\sum_{k=0}^{N-1}\frac{h}{6}[f(x_{2k})+f(x_{2k+1})+f(x_{2k+2})]$$

$$=\frac{h}{6}[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+2f(x_4)+$$

$$\cdots+2f(x_{2N-2})+4f(x_{2N-1})+f(x_{2N})]$$

$$=\frac{h}{6}[2f(x_0)+4f(x_1)+4f(x_2)+4f(x_3)+\cdots+4f(x_{2N-1})+2f(x_{2N})]$$

$$-\frac{h}{6}[f(x_0)+2f(x_2)+2f(x_4)+\cdots+2f(x_{2N-2})+f(x_{2N})]$$

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

$$=\frac{4}{3}T_{2N}-\frac{1}{3}T_N$$

即 $S_N=\frac{4}{3}T_{2N}-\frac{1}{3}T_N=\frac{4T_{2N}-T_N}{4-1}$ （1）

类似地，可以证明：

$$C_N = S_{2N} - \frac{1}{15}(S_{2N} - S_N) = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2N} - \frac{1}{4^2-1}S_N \qquad (2)$$

$$R_N = C_{2N} + \frac{1}{63}[C_{2N} - C_N] = \frac{4^3}{4^3-1}C_{2N} - \frac{1}{4^3-1}C_N \qquad (3)$$

这个公式（3）称为**Romberg公式。**

由（1）（2）（3）组成的方法称为**Romberg算法。**

序列$\{T_N\}$,$\{S_N\}$,$\{C_N\}$和$\{R_N\}$分别称为**梯形序列，Simpson序列，Cotes序列和Romberg序列。**

上述用若干个积分近似值推算出更为精确的积分近似值的方法，称为外推算法。得到Romberg序列后还可以继续外推，得到新的求积序列，称为Richardson外推算法。但由于在新的求积序列中，其线性组合的系数分别为：

$$\frac{4^m}{4^m-1}\approx 1,\qquad \frac{1}{4^m-1}\approx 0$$

因此，新的求积序列与前一个序列结果相差不大，故通常外推到Romberg序列为止。

可以证明，梯形序列，Simpson序列，Cotes序列和Romberg序列均收敛到积分值，且每次外推可使误差阶提高二阶。

二、Romberg算法的实现

T数表：

区间等分数 $n=2^k$	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k}-2}$	$R_{2^{k-3}}$
1	T_1			
2	T_2	S_1		
4	T_4	S_2	C_1	
8	T_8	S_4	C_2	R_1
16	T_{16}	S_8	C_4	R_2
32	T_{32}	S_{16}	C_8	R_4
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

对上面的T数表作计算，一直到Romberg序列中前后两项之差的绝对值不超过给定的误差限为止。

Remark:Romberg算法具有占用内存少，精确度高的优点，是实际中最常用的算法之一。

§6.5 Gauss型求积公式

问题： 若求积公式

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

中含有$2n+2$个待定参数 $x_k, A_k \quad (k = 0,1,2,\cdots,n)$

我们能否通过节点的选择将求积公式的代数精度从n或者$n+1$提高到$2n+1$?

一、Gauss型求积公式

定义： 把具有$n+1$个节点的具有$2n+1$次代数精确度的插值型求积公式

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

称为Gauss型求积公式，其求积节点 x_k(k=0，1，……n）称为高斯点，系数 A_k 称为高斯系数。

Remark：构造Gauss型求积公式的关键在于确定高斯点，再由$n+1$个高斯点构造基函数，从而得到高斯系数。

定理： 插值型求积公式中的节点 $x_k\,(k=0,1,\cdots,n)$ 是高斯点的充要条件是，在[***a***,***b***]上，以这些点为零点的***n***+**1**次多项式 $\omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$ 与任意次数不超过***n***的多项式***P*(*x*)**正交，即

$$\int_a^b \omega_{n+1}(x)P(x)dx=0$$

证明:

必要性：

设 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$是高斯点，于是对任意次数不超过n的多项式$P(x)$，

$f(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)$的次数不超过$2n+1$。

故有

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

充分性：

设$\int_a^b \omega_{n+1}(x)P(x)dx=0$ 对于任意次数不超过$2n+1$的多项式$f(x)$，设$\omega_{n+1}(x)$除$f(x)$的商为$p(x)$，余项为$q(x)$。

即$f(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)+q(x)$

其中$P(x),q(x)$的次数$\leq n$

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)dx+\int_a^b q(x)dx$$

由条件$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)dx = 0,$

所给的求积公式是插值型的，其代数精度至少为*n*。

故$\int_a^b q(x)dx = \sum_{n=0}^{n} A_k q(x_k)$

所以求积公式至少具有2*n*+1次代数精确度。对于2*n*+2次多项式

$f(x) = \omega_{n+1}^2(x)$ **有**

$\int_a^b f(x)dx > 0$ **而** $\sum_{k=0}^{n} A_k \omega_{n+1}^2(x_k) = 0$

故求积公式的代数精确度是2*n*+1。

证毕

两条结论：

①．高斯型求积公式一定是插值型求积公式，其系数由高斯点唯一确定。

②．高斯型求积公式是代数精度最高的求积公式（$2n+1$次）。

当高斯点确定以后，高斯系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$

即可由线性方程组

$$\begin{cases} \int_a^b dx = \sum_{k=0}^{n} A_k \\ \int_a^b x\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k \\ \vdots \\ \int_a^b x^n dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^n \end{cases}$$

确定.

也可以由插值型求积公式中的系数公式 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx$ 确定。

二、Legendre多项式

$n+1$次Legendre多项式为：

$$P_{n+1}(x)=\frac{1}{(n+1)!2^{n+1}}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(x^2-1)^{n+1}\quad(x\in[-1,1];n=0,1,2,\cdots)$$

其性质有

- 1、$n+1$次Legendre多项式与任意不超过n次的多项式在区间[-1,1]上正交。
- 2、$n+1$次Legendre多项式的$n+1$个零点都在区间[-1,1]内。

例： 一次Legendre多项式及其零点为：

$$P_1(x) = x, \qquad x_0 = 0$$

二次Legendre多项式及其零点为：

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \qquad x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

三次Legendre多项式及其零点为：

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad x_0 = -\sqrt{0.6}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{0.6}$$

三、Gauss-Legendre求积公式

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

$x_k(k=0,1,\cdots,n)$为$P_{n+1}(x)=\dfrac{1}{(n+1)!2^{n+1}}\dfrac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(x^2-1)^{n+1}$的零点。

$$A_k = \frac{2}{(1-x_k^2)\left[P'_{n+1}(x_k)\right]^2} \quad (k=0,1,\cdots,n)$$

一点Gauss-Legendre求积公式为：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 2f(0)$$

两点Gauss-Legendre求积公式为：

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

三点Gauss-Legendre求积公式为：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9} f(-\sqrt{0.6}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(\sqrt{0.6})$$

实际上我们可以给出任意次Gauss-Legendre求积公式在任意区间上的节点与系数，从而得到任意区间上的Gauss-Legendre求积公式。

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

即可将区间[a,b]变换到[-1,1]上：

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

四、Gauss型求积公式的截断误差

定理：

设 $f(x)$在 $[a,b]$ 内只有**2*n*+2**阶导数，则高斯型求积公式的余项为：

$$R[f]=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx \quad \xi\in(a,\ b)$$

证明：

设$H_{2n+1}(x)$为满足$\begin{cases} H_{2n+1}(x_k)=f(x_k) \\ H_{2n+1}'(x_k)=f'(x_k) \end{cases}(k=0,1,\cdots,n)$

的Hermite插值多项式，则 $H_{2n+1}(x)$的次数$\leq 2n+1$。

且$f(x)-H_{2n+1}(x)=\dfrac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\ \xi\in(a，\ b)$

由于高斯型求积公式的代数精度为2*n*+1，故

$$R[f]=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)\quad=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k H_{2n+1}(x_k)$$

$$=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b H_{2n+1}(x)dx\quad=\int_a^b \frac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)dx$$

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

证毕

高斯型求积公式具有代数精度高、且总是收敛、稳定的优点。但当求积节点数增加时，前面的函数值不能在后面利用。因此，有时也可以将区间分化成若干个小区间，在每个小区间上应用低阶的Gauss型求积公式，即复化高斯求积公式。