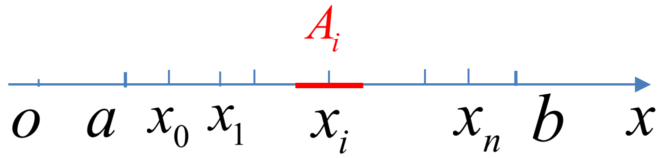
第4章　数值积分与数值微分

- ✓ 4.1 引言
- ✓ 4.2 插值型求积公式及其性质
- 4.3 牛顿—柯特斯公式及余项估计
- 4.4 复化求积法
- 4.5 龙贝格积分法
- 4.6 高斯型求积公式
- 4.7 数值微分

数值积分公式



一般形式： $$I(f) \triangleq \int_a^b \rho(x) f(x) \mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \triangleq I_n(f)$$

插值型： $$\int_a^b \rho(x) f(x) \mathrm{d}x \approx \int_a^b \rho(x) L_n(x) \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

其中$A_i = \int_a^b \rho(x) l_i(x) \mathrm{d}x \quad (i = 0, 1, \cdots, n)$

误差 $$E_n(f) = \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) dx$$

本节学习 将积分区间 $[a,b]$ n 等分，步长 $h = \dfrac{b-a}{n}$,

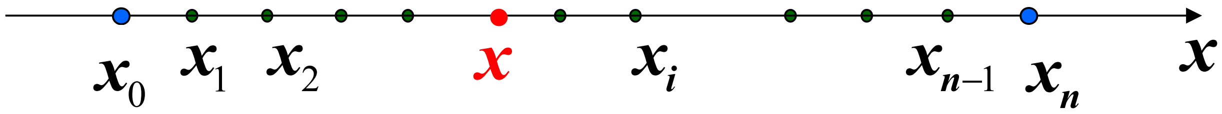
由此确定的求积公式

4.3 牛顿—柯特斯公式及余项估计

1. 牛顿—科特斯(Newton－Cotes)公式

权函数$\rho(x)\equiv 1$.

将区间$[a,b]$ n等分，步长$h=\dfrac{b-a}{n}$，等距节点$x_i=a+ih\ (i=0\sim n)$，



令$x=a+th$，则 Lagrange 插值基函数为

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{t-j}{i-j}\qquad (i=0\sim n)$$

故求积系数为

$$A_i=\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x=\frac{(-1)^{n-i}h}{i\,!(n-i)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t\ (i=0\sim n)$$

$$A_i = \frac{(-1)^{n-i} h}{i!(n-i)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)\mathrm{d}t \quad (i=0\sim n)$$

令 $C_i^{(n)} = \frac{A_i}{b-a} = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)\mathrm{d}t$ 称为Cotes系数.

故 $A_i = (b-a)C_i^{(n)} \ (i=0,1,2,\cdots,n)$

则求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$

称为 n 阶Newton—Cotes公式.

Cotes系数与$f(x)$, $[a,b]$ 无关，仅与n, i 有关!!

$$\text{求积公式}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$$

$$\text{其中}C_i^{(n)} = \frac{A_i}{b-a} = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(t-j)\mathrm{d}t$$

几个低阶的Newton－Cotes公式

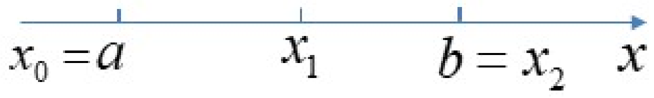
（1）梯形公式　当$n=1$时，2个节点

Cotes系数为 $C_0^{(1)} = C_1^{(1)} = \dfrac{1}{2}$

$$\text{求积公式}\quad \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \triangleq T(f)$$

称为梯形公式，代数精度为**1**.

（2）辛普森(Simpson)公式: 当$n=2$ 时，3个节点



步长$h=\dfrac{b-a}{2}$

Cotes系数为 $C_0^{(2)}=\dfrac{1}{6},\ C_1^{(2)}=\dfrac{4}{6},\ C_2^{(2)}=\dfrac{1}{6}$

求积公式 $\displaystyle\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \triangleq S(f)$

称为**Simpson**公式，代数精度为 **3**.

Simpson公式的几何意义是，S 恰好是经过三点

$$(a,f(a)),\ \left(\frac{a+b}{2}, f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right),\ (b,f(b))$$

的抛物线所围成的曲边梯形的面积.

（3）科特斯（**Cotes**公式）： 当$\boldsymbol{n}=4$时，5个节点

$x_0=a \quad x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad b=x_4 \quad x$　　步长 $\boldsymbol{h}=\dfrac{\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a}}{4}$

Cotes系数为$C_0^{(4)}=\dfrac{7}{90},\ C_1^{(4)}=\dfrac{32}{90},\ C_2^{(4)}=\dfrac{12}{90},\ C_3^{(4)}=\dfrac{32}{90},\ C_4^{(4)}=\dfrac{7}{90}$

求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{90}[7f(a)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(b)] \triangleq C(f)$$

称为**Cotes**公式，代数精度为 5.

通常预先计算出不同n 值对应的柯特斯系数制成一个表，根据此表方便的写出各阶牛顿—科特斯公式.

n=1, 2, ⋯, 8时的柯特斯系数

n									
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

梯形公式，1次代数精度

辛普森公式，3次代数精度

柯特斯公式，5次代数精度

◆对称性 $C_i^{(n)} = C_{n-i}^{(n)}$

◆归1性 $\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = 1$

当$n<8$时，Cotes系数$C_i^{(n)}>0$，N-C积分公式是稳定的；

当$n\geq 8$时，Cotes系数出现负值，故不能保证N-C公式是稳定的.

2. Newton－Cotes公式的数值稳定性

当$n<8$时, Cotes系数$C_i^{(n)}>0$，N-C积分公式是稳定的；

当$n=8$时, Cotes系数出现负值, 故不能保证N-C公式是稳定的.

分析　因为 $\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right|>\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}=1$

假定$C_k^{(n)}\cdot(f(x_k)-\bar{f}_k)>0$，且$\left|f(x_k)-\bar{f}_k\right|=\delta$，则有

$$\left|I_n(f)-I_n(\bar{f})\right|=\left|(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}\left(f(x_k)-\bar{f}_k\right)\right|$$

$$=(b-a)\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right|\left|f(x_k)-\bar{f}_k\right|=(b-a)\delta\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right|>(b-a)\delta.$$

说明数值积分不稳定，故$n\geq 8$ 的N-C公式不宜使用.

例1 分别用梯形公式、**Simpson** 公式、**Cotes** 公式计算积分

$$I=\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,\mathrm{d}x$$

解（1）梯形公式 $I\approx\frac{0.5}{2}(\sqrt{0.5}+\sqrt{1})\approx 0.42677670$；

（2）Simpson公式 $I\approx\frac{0.5}{6}(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+\sqrt{1})\approx 0.43093403$

（3）**Cotes**公式

$$I\approx\frac{0.5}{90}(7\sqrt{0.5}+32\sqrt{0.625}+12\sqrt{0.75}+32\sqrt{0.875}+7\sqrt{1})\approx 0.43096407$$

准确值 $I=\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,\mathrm{d}x=x^{\frac{3}{2}}\Big|_{\frac{1}{2}}^{1}=1-\frac{1}{2\sqrt{2}}\approx 0.43096441$

练习：分别用梯形、**Simpson**、**Cotes** 公式计算 $\int_{1}^{2}\ln x\,\mathrm{d}x$ 及 $\int_{0}^{1}e^{-x^2}\,\mathrm{d}x$.

3. 偶数阶N－C公式的代数精度

因为N-C公式是插值型求积公式，故n阶N-C公式至少具有n次代数精度. 通过进一步的验证可知：

n=2的辛普森公式具有3次代数精度；

n=4的科特斯公式具有5次代数精度.

定理1 当n为偶数时，牛顿-科特斯公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$$

至少具有$n+1$代数精度.

$$E_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

证　取$f(x)=x^{n+1}$，误差

$$E_n(f)=\int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x \quad （令\ x=a+th)$$

$$=h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}(t-i)\mathrm{d}t$$

若n为偶数，$\frac{n}{2}$为整数，令$t=u+\frac{n}{2}$，则

$$E_n(f)=h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \underbrace{\prod_{i=0}^{n}(u+\frac{n}{2}-i)}_{奇函数}\mathrm{d}u=0$$

说明偶数阶的N-C公式至少有n+1次的代数精度.

对比：n为偶数时，$I_n(f)$达到$n+1$阶代数精度。

需计算$n+1$个系数，$n+1$个函数值;

而$n+1$为奇数, $I_{n+1}(f)$也达到$n+1$阶代数精度。

但需要计算$n+2$个系数，$n+2$个函数值，

因此一般选用n为偶数的$\mathrm{N-C}$公式.

在实际计算积分时, 常用低阶的梯形-公式，Simpson-公式

及Cotes-公式.

4. Newton－Cotes公式的积分余项

（1）梯形公式的积分余项

$$E_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

$$E_T(f)=I(f)-T(f)=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

设 $f''(x)\in C^2[a,b]$， 由于 $g(x)=(x-a)(x-b)$在区间

$[a,b]$上不变号，根据第一积分中值定理，存在 $\eta\in[a,b]$，使

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

其中步长 $h=b-a$.

第一积分中值定理：

条件：(1) $f(x), g(x)$在闭区间$[a,b]$上可积；

(2) $g(x)$在$[a,b]$上不变号；

(3) $f(x)$连续，

结论：在积分区间$[a,b]$上至少存在一点ξ,

使 $$\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x = f(\xi)\int_a^b g(x)\mathrm{d}x$$

（2）Simpson公式的积分余项

$$E_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

$$E_S(f)=I(f)-S(f)$$

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

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

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

其中步长$h=\dfrac{b-a}{2}$，$f^{(4)}(x)\in C^4[a,b]$.

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

证　因为辛普森公式具有三次代数精度，故构造一个埃尔米特插值的 3 次插值多项式 $H(x)$，使其满足

$$H(a)=f(a),\ H(c)=f(c),\ H(b)=f(b),\ \ H'(c)=f'(c)$$

其中 $c=\dfrac{a+b}{2}$. 而 $H(x)$ 代入辛普森公式是准确的，即

$$\int_a^b H(x)\mathrm{d}x=\frac{b-a}{6}[\overset{=f(a)}{H(a)}+4\overset{=f(c)}{H(c)}+\overset{=f(b)}{H(b)}]$$

由插值条件可知，上式右端实际上等于按**Simpson**公式求出的积分值S，因此积分余项

$$E_S(f)=I(f)-S(f)=\int_a^b[f(x)-H(x)]\mathrm{d}x$$

而 $f(x)\approx H(x)$ 时，插值余项为

$$f(x)-H(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)，\quad \xi\in(a,b)$$

所以 $E_S(f)=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\underbrace{(x-a)(x-c)^2(x-b)}_{\text{不变号}}\mathrm{d}x$

应用第一积分中值定理，

$$E_S(f)=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4f^{(4)}(\eta)，\quad \eta\in[a,b] \qquad \#$$

（3）Cotes公式的积分余项

$$E_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

$$E_C(f)=I(f)-C(f)$$

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

$$=-\frac{2(b-a)}{945}h^6 f^{(6)}(\eta),\quad \eta\in[a,b]$$

其中步长$h=\dfrac{b-a}{4}$，$f^{(6)}(x)\in C^6[a,b]$.

（4）一般的N-C公式的积分余项 $E_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$

定理2 设 $f(x)\in C^{n+2}[a,b]$ (k是正整数).

若n为偶数，则积分余项

$$R_n(f)=\frac{h^{n+3}f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t,\quad \eta\in[a,b]$$

若n为奇数，则积分余项

$$R_n(f)=\frac{h^{n+2}f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t,\quad \eta\in[a,b]$$

例2　试用梯形公式和**Simpson**公式计算积分$I=\int_0^1 e^{-x}\,\mathrm{d}x$的近似值，并估计误差.

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

解　$a=0, b=1,\ f(x)=e^{-x}$，导函数

$$f'(x)=-e^{-x},\ f''(x)=e^{-x},\ f'''(x)=-e^{-x},\ f^{(4)}(x)=e^{-x}.$$

梯形公式计算得　$I\approx T=\dfrac{1}{2}[e^{0}+e^{-1}]\approx 0.68393972$

误差　$|I-T|=\left|-\dfrac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\right|\le\dfrac{1}{12}e^{0}\approx 0.08333333$

Simpson公式计算得

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

$$I\approx S=\frac{1}{6}[e^{-0}+4e^{-0.5}+e^{-1}]\approx 0.63233368$$

误差 $$|I-S|=\left|-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\right|$$

$$\le\frac{1}{180}(0.5)^4 e^0\approx 0.0003472222$$

Simpson公式比梯形公式计算精度高.

4.4 复化(合)求积公式

Newton－Cotes公式：插值型的，节点等间距

存在问题：1)应用高阶($n \geq 8$)的N-C公式计算积分，

会出现数值积分不稳定性($C_i^{(n)}$为负值时)；

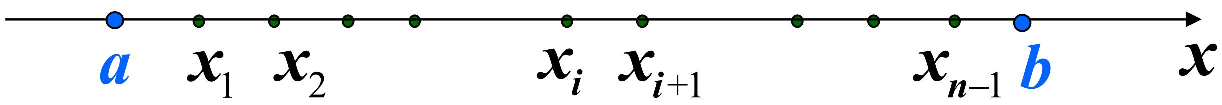
2)而应用低阶公式因步长过大使得误差(积分余项)变大.

解决办法：复化求积法

基本思想：将区间分成若干个子区间，在每个子区间上

用低阶N-C公式计算积分.

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} I_i(f)$$



常用的两种求积公式作复化求积

梯形公式 $T=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

积分余项：$E_T=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\eta\in[a,b]$

代数精度： 1次代数精度。

辛普森公式 $S=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$

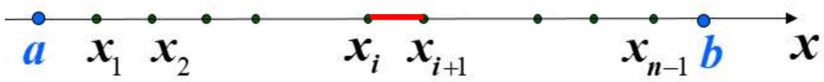
积分余项：$E_S=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$

代数精度：3次代数精度

1. 复化梯形公式

将$[a,b]$等分成n个区间，$h=\dfrac{b-a}{n}$，$x_i=a+ih$, $i=0\sim n$

在每个子区间上使用梯形公式



$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx=\frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i),\ \ x_i<\xi_i<x_{i+1}$$

则 $$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{2}\big[f(x_i)+f(x_{i+1})\big]-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)\right\}$$

$$=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right]-\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)$$

$$=\underline{\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)]}-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)$$

$$=\underline{T_n}+E_{T_n}$$

设$f''(x)\in C^2[a,b]$,

$$\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)=f''(\xi)$$

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

$$I=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)]-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)$$

复化梯形公式： $T_n(f)=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)]$

余项： $E_{T_n}(f)=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi),\ \xi\in(a,b)$

$$=O(h^2)$$

稳定性：

设 $f(x_i)$ 有误差 ε_i ，且 $\max\limits_{0\le i\le n}|\varepsilon_i|=\frac{1}{2}\times10^{-t}$，则$T_n(f)$的误差为

$$|\eta_n|\le\frac{h}{2}[1+2\sum_{i=1}^{n-1}1+1]\times\frac{1}{2}\times10^{-t}=\frac{1}{2}\times10^{-t}(b-a),$$

所以复化梯形公式是数值稳定的.

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

收敛性：设$f''(x) \in C^2\left[a,b\right]$，则$\lim\limits_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$

事实上 $$\lim_{n\to\infty} T_n = \lim_{n\to\infty} \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

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

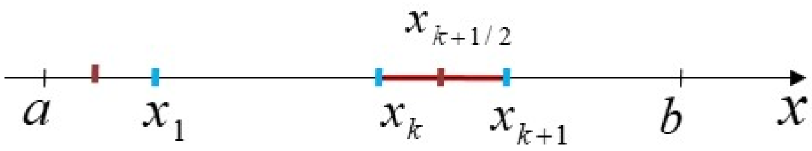
$$= \frac{1}{2}\left[\lim_{n\to\infty}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)\frac{b-a}{n} + \lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\frac{b-a}{n}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\int_a^b f(x)\mathrm{d}x + \int_a^b f(x)\mathrm{d}x\right) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

2. 复化Simpson公式

将$[a,b]$分成n个区间，$h=\dfrac{b-a}{n}$，在每个子区间$[x_k,x_{k+1}]$上使用辛普森公式，记区间中点$x_{k+1/2}=x_k+\dfrac{h}{2}$，得

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



$$=\sum_{k=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]-\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi_k)\right\}$$

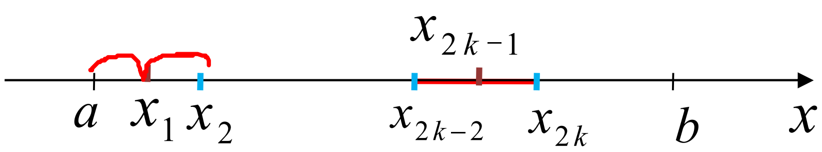
记 $$S_n=\frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]$$

$$=\frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]$$

称为复化辛普森求积公式

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

$(h_1 = \frac{h}{2}) \quad = \frac{h_1}{3}[f(a) + 4\sum_{k=1}^{n} f(a+(2k-1)h_1) + 2\sum_{k=1}^{n} f(a+2kh_1) + f(b)]$



n个子区间$[x_{2k-2}, x_{2k}](k = 1 \sim n)$

$x_k = a + \frac{h}{2}k \ (k = 0, 1, \cdots, 2n)$,

积分余项 设$f^{(4)}(x) \in C^4[a,b]$

$$E_{S_n}(f) = -\frac{h}{180}(\frac{h}{2})^4 \sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_k), \quad \xi_k \in (x_k, x_{k+1}) \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

$$= -\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\xi) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)$$

$$= O(h^4)$$

类似有，复化辛普森求积公式是收敛的、数值稳定的.

例1 对于函数 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$，给出 $[0,1]$ 上 $n=8$ 的函数表，试用复化梯形公式

及复化辛普森公式计算积分 $I=\displaystyle\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 的近似值，并估计误差.

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

课后练习

解 将积分区间[0,1]划分为 8 等分，应用复化梯形法求得 $T_8=0.9456909$；

将积分区间[0,1]分为 4 等分，应用复化辛普森法求得 $S_4=0.9460832$.

准确值 $I=0.94608307\cdots$

估计误差

提供9个点上的函数值，

两种方法计算量基本相同，

精度差别较大.

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

$$E_{S_n}(f) = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\xi), \xi \in (a,b)$$

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

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

故 $\max\limits_{0\le x\le 1}\left|f^{(k)}(x)\right| \le \int_0^1 \left|\cos(xt+\frac{k\pi}{2})\right| t^k \mathrm{d}t \le \int_0^1 t^k \mathrm{d}t = \frac{1}{k+1}$

复化梯形公式的误差 $\left|I - T_8\right| \le \frac{h^2}{12}\max\limits_{0\le x\le 1}\left|f''(x)\right| \le \frac{1}{12}(\frac{1}{8})^2\frac{1}{3} \approx 0.434\times 10^{-3}$

复化辛普森公式的误差 $\left|I - S_4\right| \le \frac{1}{2880}(\frac{1}{4})^4\frac{1}{5} \approx 0.271\times 10^{-6}$

复化求积方法如何选择步长h？

设给定精度ε ，要求$|E_n(f)|=|I(f)-I_n(f)|<\varepsilon$,

例如：应用复化辛普森法求积分，

要使误差 $$|E_{S_n}(f)|=\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4|f^{(4)}(\xi)|<\varepsilon$$

只要 $$\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\max_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|<\varepsilon$$

若估算出 $\max\limits_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|\le M$，则

$$h<2\left(\frac{180\varepsilon}{(b-a)M}\right)^{1/4}$$

事前估计

（先验误差）

例2 应用复合梯形公式计算积分$I=\int_0^1 6e^{-x^2}\mathrm{d}x$，要求误差不超过$10^{-6}$，试确定所需的步长和节点个数.

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

解 令 $f(x)=6e^{-x^2}$，则 $f'(x)=-12xe^{-x^2}$，$f''(x)=12e^{-x^2}(2x^2-1)$，

$$f'''(x)=24xe^{-x^2}(3-2x^2)\neq 0,\quad x\in(0,1),$$

由于 $f''(x)$ 在 $[0,1]$ 上为单调函数，所以

$$\max_{x\in[0,1]}|f''(x)|=\max\{|f''(0)|,|f''(1)|\}=\max\{|-12|,|12e^{-1}|\}=12$$

由复化梯形的误差公式 $E_n(f)=-\dfrac{h^2(1-0)}{12}f''(\xi)$，$0<\xi<1$

$$\Rightarrow\ |E_n(f)|\le\frac{h^2}{12}\max_{x\in[0,1]}|f''(x)|$$

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

要使$\left|E_n(f)\right| \le 10^{-6}$，只要 $\frac{h^2}{12}\max_{x\in[0,1]}\left|f''(x)\right| \le 10^{-6}$

即 $\frac{12h^2}{12} = h^2 \le 10^{-6} \Rightarrow h \le 10^{-3}.$

取步长 $h = 10^{-3}$， 由 $h = \frac{b-a}{n} = \frac{1}{n} \Rightarrow n = 10^3$

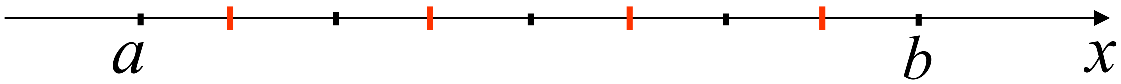
故可取节点数为**1001**.

4.5 龙贝格(Romberg)积分法

4.3、4.4 介绍的定步长法虽然简单，但收敛速度慢，并且要事先确定一个适当的步长．　而步长的选取是一个难题．

故实际问题中常用变步长—区间逐次半分法求积分.

基本思想：将积分区间$[a,b]$逐次分半，反复使用复合求积公式，直到相邻两次计算结果之差的绝对值达到误差精度停止，取后一次计算结果作为积分的近似值.



1. 梯形法的逐次半分递推公式

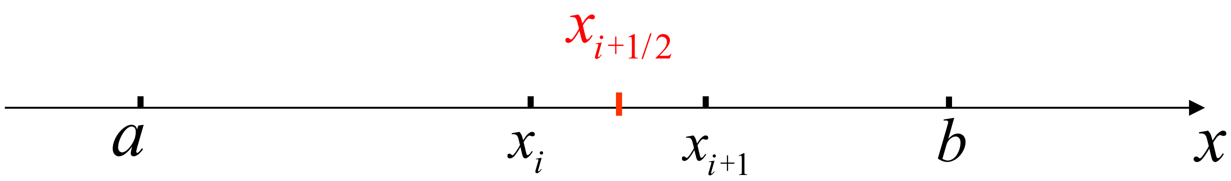
将区间 $[a,b]$ n 等分，节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$,

记 $x_i = a + ih\ (i = 0\sim n)$，步长 $h = \dfrac{b-a}{n}$，则复化梯形公式

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

在每个子区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上取中点 $x_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{2}(x_i + x_{i+1}),\ i = 0\sim\ n-1$

将区间 $[a,b]$ 半分成了 $2n$ 等分.



半分前 T_n　　　半分后 T_{2n}

每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上的积分应用复化梯形公式，计算得

$$\frac{h}{4}[f(x_i)+2f(x_{i+1/2})+f(x_{i+1})]$$，h是二分前的步长

各子区间上复化梯形值相加，求得半分后的复化梯形值为

半分后 $$T_{2n}=\frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+f(x_{i+1})]+\frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+1/2})$$

半分前 $$T_n=\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]$$

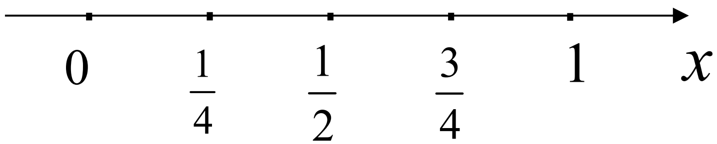
则 $$\boxed{T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+1/2})}$$ 梯形法的半分递推公式

也称为变步长的梯形公式.

例1 用复合梯形的逐次半分公式计算积分$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$.

解 设$f(x)=\frac{\sin x}{x}$，计算出$f(0)=1$，$f(1)\approx 0.8414709$，

1）根据梯形公式计算可得



$$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]\approx 0.9207355$$

2）将区间二等分，求出 $f(\frac{1}{2})=0.9588510$

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f(\frac{1}{2})\approx 0.9397933$$

3）再将区间二等分，并求出

$$f(\frac{1}{4})=0.9896158,\quad f(\frac{3}{4})=0.9088516$$

则 $$T_{2^2} \triangleq T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})] \approx 0.9445135$$

依次二分计算列表如下：k代表二分次数，$n=2^k$为区间个数。

	k	T_{2^k}	k	T_{2^k}	
T_1	0	0.9207355	6	0.9460769	
T_2	1	0.9397933	7	0.9460815	
T_4	2	0.9445135	8	0.9460827	
T_8	3	0.9456909	9	0.9460830	
T_{16}	4	0.9459850	10	0.9460831	T_{1024}
T_{32}	5	0.9460596			

此表表明，用复合梯形法计算积分I要达到7位有效数字的精度，需要二分10次，即用到1025个分点，计算量很大.

例2 用复合梯形半分法计算积分 $I=\int_0^1 \frac{1}{(1+x)\sqrt{x}}\mathrm{d}x$，

精确至3位有效数字.

解 $I=\int_0^1 \frac{1}{(1+x)\sqrt{x}}\mathrm{d}x = \int_0^1 \frac{2}{1+t^2}\mathrm{d}t \triangleq \int_0^1 g(t)\mathrm{d}t$ (设$\sqrt{x}=t$)

$\boldsymbol{T}_{2^0} = \frac{1}{2}[\boldsymbol{g}(0)+\boldsymbol{g}(1)] = 1.5$， $\boldsymbol{T}_{2^1} = \frac{1}{2}\boldsymbol{T}_{2^0} + \frac{1}{2}\boldsymbol{g}(0.5) = 1.55$，

$\boldsymbol{T}_{2^2} = \frac{1}{2}\boldsymbol{T}_{2^1} + \frac{1}{4}[\boldsymbol{g}(0.25)+\boldsymbol{g}(0.75)] = 1.5656$，

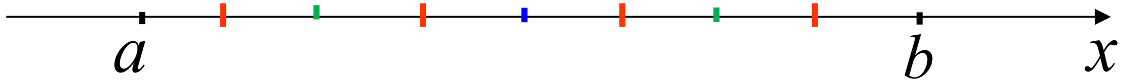
$\boldsymbol{T}_{2^3} = \frac{1}{2}\boldsymbol{T}_{2^2} + \frac{1}{8}[\boldsymbol{g}(0.125)+\boldsymbol{g}(0.375)+\boldsymbol{g}(0.625)+\boldsymbol{g}(0.875)] = 1.5695$

注意到 $\left|\boldsymbol{T}_{2^3}-\boldsymbol{T}_{2^2}\right| \le \frac{1}{2}\times 10^{-2}$，取 $\boldsymbol{I}\approx 1.57$

事后估计
（后验误差）

准确值 $I=\int_0^1 \frac{1}{(1+x)\sqrt{x}}\mathrm{d}x = \int_0^1 \frac{2}{1+t^2}\mathrm{d}t = 2\arctan t\Big|_0^1 = \frac{\pi}{2} \approx 1.57$

◆ 在等距节点的情况下，计算积分数值积分通常采用将区间逐次半分法进行. 这样前一次的结果在半分之后仍可使用，易于编程.



逐次半分递推公式如下：

将积分区间$[a,b]$逐次半分为2^k个区间（$k=0,1,2,\cdots$ 是半分次数），则递推公式为：

$$\begin{cases} T_1=\dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2^k}=\dfrac{1}{2}T_{2^{k-1}}+\dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}}f[a+(2i-1)\dfrac{b-a}{2^k}] \quad (k=1,2,3,\cdots) \end{cases}$$

由此得到一个梯形值序列$\{T_{2^k}\}$，其极限值即为定积分

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\lim_{k\to\infty}T_{2^k}$$

优点：计算简单，由于每次的积分近似值 $T_{2^{k-1}}$ 充分利用了前一次的近似值 T_{2^k}，所以工作量降低近一半.

缺点：收敛速度缓慢。

改进方法：龙贝格算法

龙贝格算法是基于逐次分半梯形序列值推导的一种快速收敛的积分算法. 该算法以较小的计算量求出精度较高的数值积分.

2. 龙贝格(Romberg)算法

基本思想 在复化梯形值序列值 $\{T_{2^k}\}: T_{2^0}, T_{2^1}, T_{2^2}, \cdots$ 的基础上，通过线性运算，作三次加速构造出龙贝格算法.

$$\text{梯形值序列} \xrightarrow{\text{线性组合}} \text{辛普森值序列}$$

$$\xrightarrow{\text{线性组合}} \text{柯特斯序列} \xrightarrow{\text{线性组合}} \text{龙贝格序列}$$

首先 根据复合梯形法求积公式的余项

$$I - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi_n),\quad \xi_n \in (a,b)$$

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

当 $f''(x) \in C[a,b]$，且 n 充分大时 $f''(\xi_n) \approx f''(\xi_{2n})$，有

$$I - T_{2n} \approx -\frac{b-a}{12} \times \frac{1}{4} h^2 f''(\xi_n) = \frac{1}{4}(I - T_n)$$

$$\Rightarrow \boxed{I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)}$$

事后误差估计的理论依据

给定精度 $\varepsilon > 0$**，如果** $|T_{2n} - T_n| \le 3\varepsilon$**，则取** $I \approx T_{2n}$.

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

否则，修正误差

$$\boldsymbol{I} \approx \boldsymbol{T}_{2n} + \frac{1}{3}(\boldsymbol{T}_{2n} - \boldsymbol{T}_n) = \frac{4}{3}\boldsymbol{T}_{2n} - \frac{1}{3}\boldsymbol{T}_n = \frac{4\boldsymbol{T}_{2n} - \boldsymbol{T}_n}{4-1} \triangleq \tilde{\boldsymbol{T}}$$

$n=1$时，计算$\tilde{T}$，得

$$\frac{4T_2 - T_1}{4-1} = \frac{4}{3}\frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a) + f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right] - \frac{1}{3}(b-a)\left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$= \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right] = S_1$$

即 $S_1 = \frac{4}{4-1} T_2 - \frac{1}{4-1} T_1$ 比梯形公式有更高的代数精度.

依次推导

$$S_2 = \frac{4}{4-1} T_4 - \frac{1}{4-1} T_2$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$S_n = \frac{4}{4-1} T_{2n} - \frac{1}{4-1} T_n$$

$$\boxed{S_n = \frac{4}{3} T_{2n} - \frac{1}{3} T_n}$$

线性组合

故，由梯形值序列 $\left\{\boldsymbol{T}_{2^k}\right\}: \boldsymbol{T}_{2^0}, \boldsymbol{T}_{2^1}, \boldsymbol{T}_{2^2}, \cdots$

求得收敛速度较快的Simpson序列

$$\left\{\boldsymbol{S}_{2^k}\right\}: \boldsymbol{S}_{2^0}, \boldsymbol{S}_{2^1}, \boldsymbol{S}_{2^2}, \boldsymbol{S}_{2^3}, \cdots$$

误差为 $\boldsymbol{O}(\boldsymbol{h}^4)$.

再 根据复化辛普森求积公式的余项

$$R_n = I - S_n = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi_n),$$

$$R_{2n} = I - S_{2n} = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{4}\right)^4 f^{(4)}(\xi_{2n})$$

假定 $f^{(4)}(\xi_n) \approx f^{(4)}(\xi_{2n})$，两式相除，得

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

修正误差

$$I \approx S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2n} - \frac{1}{4^2-1}S_n \triangleq \tilde{S} = C_n$$

（可证明）

故，在Simpson序列$\{S_{2^k}\}$的基础上，通过线性组合公式

$$C_n = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2n} - \frac{1}{4^2-1}S_n$$

构造出收敛速度更快的Cotes序列

$$\{C_{2^k}\}: C_{2^0}, C_{2^1}, C_{2^2}, C_{2^3}, \cdots \qquad \text{误差为 } O(h^6).$$

进一步，通过C_{2n}与 C_n 的线性组合公式

$$R_n = \frac{4^3}{4^3-1}C_{2n} - \frac{1}{4^3-1}C_n$$

构造出龙贝格(**Romberg**)序列

$$\{R_{2^k}\}: R_{2^0}, R_{2^1}, R_{2^2}, R_{2^3}, \cdots$$

■ Romberg 算法步骤

第1步　由逐次半分复化梯形递推公式

$$\begin{cases} T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)], \\ T_{2^k} = \dfrac{1}{2}T_{2^{k-1}} + h_k \displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f[a+(2i-1)h_k]\,, \quad h_k = \dfrac{b-a}{2^k}, \quad k=1,2,\cdots \end{cases}$$

求出梯形序列 $\{T_{2^k}\}$： $T_{2^0}, T_{2^1}, T_{2^2}, \cdots, T_{2^k}, \cdots$

第2步　由三次加速公式
$$\begin{cases} S_{2^k} = \dfrac{4}{4-1}T_{2^{k+1}} - \dfrac{1}{4-1}T_{2^k} \\ C_{2^k} = \dfrac{4^2}{4^2-1}S_{2^{k+1}} - \dfrac{1}{4^2-1}S_{2^k} \\ R_{2^k} = \dfrac{4^3}{4^3-1}C_{2^{k+1}} - \dfrac{1}{4^3-1}C_{2^k} \end{cases}$$

求出龙贝格序列 $\{R_{2^k}\}$： $R_{2^0}, R_{2^1}, R_{2^2}, \cdots, R_{2^k}, \cdots$

第3步 根据计算过程表，求得近似值

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	T_{2^0}			
1	T_{2^1}	S_{2^0}		
2	T_{2^2}	S_{2^1}	C_{2^0}	
3	T_{2^3}	S_{2^2}	C_{2^1}	R_{2^0}
4	T_{2^4}	S_{2^3}	C_{2^2}	R_{2^1}
5	T_{2^5}	S_{2^4}	C_{2^3}	R_{2^2}
…	…	…	…	…

若 $\left|R_{2^1}-R_{2^0}\right|<\varepsilon$，取 $I\approx R_{2^1}$；否则计算 $T_{2^5},S_{2^4},C_{2^3},R_{2^2}$，

判别 $\left|R_{2^2}-R_{2^1}\right|<\varepsilon$? 是，停止；否则，继续.

例3　试用**Romberg**算法计算 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 的近似值.

解　计算梯形值 $T_{2^0}, T_{2^1}, T_{2^2}, T_{2^3}$，加速三次，得

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	0.9207355			
1	0.9397933	0.9461459		
2	0.9445153	0.9460869	0.9460830	
3	0.9456909	0.9460833	0.9460831	0.9460831

二分3次梯形值 $T_{2^3}=0.9456909$，只有3位有效数字，

经过3次加速的龙贝格值 $R_1=0.9460831$，具有7位效数字.

查理森外推法

记 $$T_m^{(k)}=\frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1},(m=1,2,\cdots,k=0,1,2,\cdots)$$

其中m为加速次数,k为半分次数. 则

$$\left\{T_0^{(k)}\right\}\text{就是梯形序列}\left\{T_{2^k}\right\}$$

$$\left\{T_1^{(k)}\right\}\text{就是辛普森序列}\left\{S_{2^k}\right\}$$

$$\left\{T_2^{(k)}\right\}\text{就是柯特斯序列}\left\{C_{2^k}\right\}$$

$$\left\{T_3^{(k)}\right\}\text{就是龙贝格序列}\left\{R_{2^k}\right\}$$

在复化梯形序列的基础上，通过将不同步长对应的结果依次做线性组合，得到更高阶准确度结果的做法称为理查森外推法 .

一般地，用$\dfrac{4^m}{4^m-1}, -\dfrac{1}{4^m-1}$对二分前后的计算结果做线性组合，可得到更高精度的求积公式．但 $m \geq 4$时，$\dfrac{4^m}{4^m-1} \approx 1$, $-\dfrac{1}{4^m-1} \approx 0$, 构造的求积公式与前一公式差别不大，反而增加了计算量，通常用到Romberg 算法即可．

例4 试用理查森外推法计算 $I=\int_0^1 x^{3/2}\mathrm{d}x$ 的近似值(外推5次).

解 计算梯形值 $T_{2^0}, T_{2^1}, T_{2^2}, T_{2^3}, T_{2^4}, T_{2^5}$， 加速五次，得

近似值 $I \approx T_5^{(0)} = 0.400002$

练习 试用龙贝格算法计算 $I=\int_0^1 x^{3/2}\mathrm{d}x$ 的近似值（保留小数点后六位）.

小 结

1. 数值积分方法的思想；

2. 插值型求积公式：$\int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$，$A_i = \int_a^b \rho(x)l_i(x)\mathrm{d}x$

3. Newton—Cotes 公式：常用—梯形、辛普森、柯特斯公式；

4. 复化积分公式：复化梯形、复化辛普森公式，余项；

5. 龙贝格积分法。

注意：插值节点 x_i 已知，且等间距分布.