第7章 数值积分与数值微分

以定积分的计算为例. 虽然计算定积分有微积分基本公式

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

但很多被积函数无法或难以求得原函数, 如

$$f(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad f(x) = e^{-x^2}$$

等. 另外在实际计算中, 常常有很多被积函数仅知道在一些离散点的函数值, 无法得到具体的解析表达式. 这些都需要利用在已知离散点上的值来计算函数的定积分的近似值.

§ 7.1 数值积分概述

由定积分的定义

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

联想到...

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

或

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

求积公式的一般形式

求积系数

求积节点

求积误差

定义7.1 若求积公式

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

对 $f(x)=x^j$ ($j=0, 1, 2,\ldots, m$)都精确成立, 但对 $f(x)=x^{m+1}$不精确成立, 即

$$\int_a^b x^j dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^j, \quad j = 0,1,2,\ldots,m.$$

$$\int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1}$$

则称此公式**具有*m*次代数精度.**

可见, 若公式具有m次代数精度, 则公式对所有次数不超过m的多项式都精确成立.

另外, 任何连续函数都可由多项式序列逼近.

?

关于多项式最佳一致逼近的一些结论

Weierstrass 第一定理 (1885):

设$f(x)\in C[a, b]$, 则对任意$\varepsilon>0$, 存在多项式$P(x)$, 使

$$\|P(x)-f(x)\|_\infty<\varepsilon$$

深入学习:

Bernstein多项式

Chebyshev逼近

……

则对任意的连续函数$f(x)$均有

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

m充分大时

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

若求积公式具有m次代数精度.

若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的求积节点已知, 且具有n次代数精度, 则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + \ldots + A_n = b - a \\ x_0 A_0 + x_1 A_1 + \ldots + x_n A_n = \dfrac{b^2 - a^2}{2} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ x_0^n A_0 + x_1^n A_1 + \ldots + x_n^n A_n = \dfrac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1} \end{cases} \tag{7.*}$$

其系数矩阵行列式满足条件:

$$D = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ x_0 & x_1 & \ldots & x_n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_0^n & x_1^n & \ldots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{0 \le i < j \le n} (x_j - x_i) \neq 0.$$

因此存在唯一的解$A_0, A_1, \ldots, A_n$.

意义: 当求积公式的求积节点确定时, 求积系数也是确定的.

例1 对求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(a) + A_1 f(b)$$

确定参数A_0, A_1, 使其代数精度尽可能高, 并求代数精度.

解: 令公式对$f(x)$=1, x都精确成立, 则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a, \\ A_0 a + A_1 b = \dfrac{b^2 - a^2}{2}, \end{cases}$$

解得: $A_0=A_1=(b-a)/2$.

因此求积公式为 $$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

此公式名为**梯形公式**

当$f(x)=x^2$时, 求积公式有

左$=(b^3-a^3)/3$, 右$=(a^2+b^2)(b-a)/2$,

一般情形下左≠右, 故此公式的代数精度为1.

例2 试确定参数A_0, A_1和x_0, x_1, 使求积公式

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

具有尽可能高的代数精度, 并求代数精度.

解: 令公式对$f(x)=1, x, x^2, x^3$都精确成立, 则

$$\begin{cases} A_0+A_1=2 \\ A_0x_0+A_1x_1=0 \\ A_0x_0^2+A_1x_1^2=2/3 \\ A_0x_0^3+A_1x_1^3=0 \end{cases}$$

经过计算, 解得:

$$x_0 = \frac{-\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}, A_0 = A_1 = 1.$$

求积公式为

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

对于求积公式

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

由前面的讨论可知, 其代数精度 至少为3.

又, 还可以检验当$f(x)=x^4$时, 观察求积公式的两端, 可见

左=2/5,

右=2/9,

左≠右,

因此可知, 此求积公式的代数精度为3.

注: 对于具有2个节点的这类数值求积公式, 其代数精度最高为3. (以后会证明这一点)

下一节

对于例2中的非线性方程组的求解

$$\begin{cases} A_0+A_1=2 \\ A_0x_0+A_1x_1=0 \\ A_0x_0^2+A_1x_1^2=2/3 \\ A_0x_0^3+A_1x_1^3=0 \end{cases}$$

设x_0, x_1是方程$x^2+bx+c=0$的根,因此

$$x_0^2+bx_0+c=0,\ \ x_1^2+bx_1+c=0.$$

故有

$$A_0(x_0^2+bx_0+c)+A_1(x_1^2+bx_1+c)\ =0 \quad \Longrightarrow \quad 2/3+2c=0$$

$$A_0x_0\,(x_0^2+bx_0+c)+A_1x_1(x_1^2+bx_1+c)\ =0 \quad \Longrightarrow \quad (2/3)b=0$$

可得 $b=0$, $c=-1/3$, 因此 $x_0=\dfrac{-\sqrt{3}}{3}, x_1=\dfrac{\sqrt{3}}{3}$,

返回例2

§ 7.1.2 插值型求积公式

若已知定积分

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

的被积函数$f(x)$在节点$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$上的函数值

$$y_k = f(x_k),\ k=0,\ 1,\ 2, \ldots,\ n.$$

则可以构造n次Lagrange插值多项式$L_n(x)$. 因为

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x),$$

所以有

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

$$= \int_a^b \left[\sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) \right] dx + \int_a^b R_n(x)dx$$

由$L_n(x)$的表达式可得:

$$= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \left[\int_a^b l_k(x)dx \right] + \int_a^b R_n(x)dx$$

即

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\left[\int_a^b l_k(x)dx\right] + \int_a^b R_n(x)dx$$

设

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx \qquad \textbf{(7.4)}$$

则

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

当满足一定条件时,

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

以上得到(求积系数由式(7.4)确定的)求积公式的一般形式.

若求积公式中求积系数A_k满足式(7.4), 则称此求积公式为**插值型求积公式**.

返回定理7.1

关于插值型求积公式的求积误差

由定义, 求积误差为

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

更具体地:

(1) Lagrange型误差

设$f(x)$在$[a, b]$具有n+1阶连续导数, 则有

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

(2) Newton型误差

$$R[f]=\int_a^b f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]\omega_{n+1}(x)dx.$$

关于带权函数积分的插值型求积公式

对于区间$[a, b]$上带权函数$\rho(x)$的积分

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

设被积函数$f(x)$在节点$a\le x_0<x_1<\ldots<x_n\le b$上的函数值

$$y_k=f(x_k),\ k=0,\ 1,\ 2,\ldots,\ n.$$

则插值型求积公式为

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

其中

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

求积误差为

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

或

$$R[f]=\int_a^b \rho(x)f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]\omega_{n+1}(x)dx.$$

思考1:

对于被积函数$f(x)$在节点$a\le x_0<x_1<\ldots<x_n\le b$上的函数值

$$y_k=f(x_k),\ k=0,\ 1,\ 2,\ldots,\ n.$$

导出的插值型求积公式, 其代数精度是多少?

易见：具有n+1个节点插值型求积公式的代数精度至少为n.

思考2:

具有n+1个节点且代数精度至少为n的求积公式是否一定是插值型求积公式?

回看：插值型求积公式的定义

讨论见黑板, 或教材P191.

定理7.1 具有***n*+1个节点**的求积公式**至少具有*n*次代数精度**的充要条件: **求积公式是插值型求积公式.**

7.1.3 Newton-Cotes求积公式——等距节点的插值型求积公式

为了简化计算, 取等距节点$x_k=a+kh$, (k=0, 1, 2,…, n, $h=(b-a)/n$, 则有

具体推导细节参见黑板

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b\prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^n\frac{x-x_i}{x_k-x_i}dx\overset{令x=a+th}{=}\frac{(-1)^{n-k}h}{k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^n(t-i)dt$$

$$=\frac{(b-a)(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^n(t-i)\,dt.$$

令 $C_k^{(n)}=\dfrac{1}{b-a}A_k$

$C_k^{(n)}$称为Newton-Cotes系数.

$$=\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^n(t-i)dt,k=0,1,\dots,n.\quad(7.7)$$

则得到**Newton-Cotes公式:**

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(a+kh) \qquad (7.8)$$

其中

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!\,(n-k)!}\int_0^n \prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n} (t-i)dt.$$

Newton-Cotes公式就是等距节点的插值型求积公式.

问题: 具有n+1个节点的Newton-Cotes公式代数精度如何?

由于Newton-Cotes公式属于插值型求积公式，所以带n+1个节点的Newton-Cotes型公式显然至少具有n次代数精度. 不仅如此, 我们还有以下进一步的结论:

定理7.2 当n为偶数时，具有n+1个节点的Newton-Cotes求积公式至少具有n+1次代数精度.

证明见黑板或教材P193.

结合定理7.1与定理7.2的结论, 可得到以下结论.

命题 具有n+1个节点Newton-Cotes求积公式的代数精度为:

$$\begin{cases} \text{至少}n\text{次, 当}n\text{为奇数时;} \\ \text{至少}n+1\text{次, 当}n\text{为偶数时.} \end{cases}$$

思考：具有n+1个节点的插值型公式代数精度是否有可能任意地高?

补充结论: 具有n+1个节点的插值型求积公式的代数精度不会超过$2n$+1.

或者等价的命题:

具有n个节点的插值型求积公式的代数精度不会超过$2n$-1.

原因? 参见P209:定理7.3.

注： 具有n+1个节点且代数精度达到$2n$+1**(理论上最大)**的插值型求积公式称作**Gauss型求积公式**.

例1 设$f(x)\in C^2[a, b]$, 求n=1时的Newton-Cotes公式, 并估计误差.

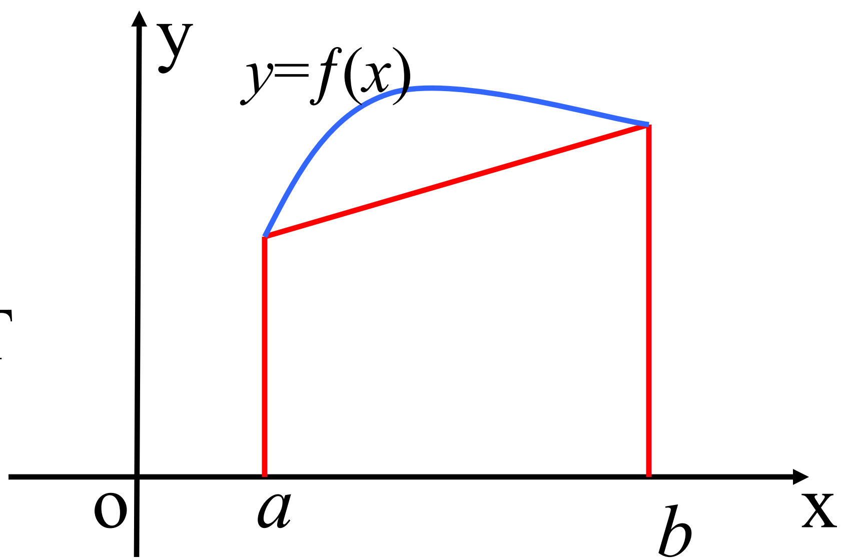
解: 计算Newton-Cotes系数

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2}, \quad C_1^{(1)} = \int_0^1 t dt = \frac{1}{2},$$

于是得n=1情形的Newton-Cotes求积公式为

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

从几何上看:



所以公式

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

也称为**梯形公式**, 记为T.

积分第一中值定理: 若$p(x)\in C[a, b]$, $q(x)$为$[a, b]$上可积函数且不变号, 则存在$\eta\in[a, b]$, 使

$$\int_a^b p(x)q(x)dx = p(\eta)\int_a^b q(x)dx$$

此时的求积误差为

$$R[f]=\frac{1}{2!}\int_a^b f''(\xi_x)(x-a)(x-b)dx \quad \boxed{=\int_a^b f[a,b,x](x-a)(x-b)dx}$$

$$=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx \qquad \int_a^b (x-a)(x-b)dx=\frac{(b-a)^3}{-6}$$

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

回到复化梯形公式

若记 $M_2=\max\limits_{a\le x\le b}|f''(x)|$, 则有误差估计

$$|R[f]|\le\frac{M_2}{12}(b-a)^3$$

例2 设$f(x)\in C^4[a, b]$, 求n=2时的Newton-Cotes公式, 并估计误差.

解: 计算Newton-Cotes系数

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6},$$

$$C_1^{(2)} = -\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt = \frac{4}{6},$$

$$C_2^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt = \frac{1}{6},$$

于是n=2情形的Newton-Cotes求积公式为

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

称之为**Simpson公式或抛物线公式**, 记为S.

思考:

关于Simpson公式的求积误差分析, (虽然也成立, 但是)不宜采用类似梯形公式的误差分析方法, 请思考原因.

Simpson公式的误差为

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

如果$f(x)\in C^4[a, b]$, 可构造三次多项式$H_3(x)$, 使满足:

$$H_3(a)=f(a), \qquad H_3(b)=f(b),$$

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

于是有

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

由定理7.2知, Simpson公式具有3次代数精度, 所以

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

由

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

得

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

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

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

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

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

$$=\frac{f^{(4)}(\eta)}{-2880}(b-a)^5,\quad \eta\in(a,b)$$

根据Lagrange插值余项

由积分第一中值定理

回到复化Simpson公式

若记 $M_4 = \max_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right|$，则有

$$\left|R[f]\right| \le \frac{M_4}{2880}(b-a)^5$$

Newton-Cotes系数表

n \ k	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

Newton-Cotes系数的一些性质

性质1：
$$\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1$$

性质1的证明, 自修或见黑板或参考P196.

性质2：(对称性)
$$C_k^{(n)} = C_{n-k}^{(n)}$$

性质2的证明, 留作思考题.

由Newton-Cotes系数表可见, 当n>7时Cotes系数中出现负数. **当n过大时, 这会影响求积公式的稳定性**, 具体解释详见教材P172-173.

例3 求n=4时的Newton-Cotes公式及误差.

解 查表可得

$$C_0^{(4)}=\frac{7}{90},\quad C_1^{(4)}=\frac{16}{45},C_2^{(4)}=\frac{2}{15},\quad C_3^{(4)}=\frac{16}{45},\quad C_4^{(4)}=\frac{7}{90}$$

于是可得n=4情形的Newton-Cotes求积公式:

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

其中 $x_k=a+kh$, k=0, 1, 2, 3, 4, 这里$h=(b-a)/4$.

称之为**Cotes公式**, 记为C. 其求积误差为

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

$$=\frac{f^{(6)}(\eta)}{-1935360}(b-a)^7,\quad \eta\in(a,b)$$

一般地, Newton-Cotes公式的截断误差为

$$R[f]=\begin{cases}\dfrac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_a^b \omega_{n+1}(x)dx, & n\text{为奇数}\\[2ex] \dfrac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_a^b x\omega_{n+1}(x)dx, & n\text{为偶数}\end{cases} \qquad \eta\in(a,\ b)$$

关于以上结论的证明, 参见有关文献.

例4 用梯形公式、Simpson公式和Cotes公式分别求积分

$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$ 的近似值.

解

梯形公式的计算值为:

$$I \approx T=\frac{1}{2}\cdot(4+2)=3$$

Simpson公式的计算值为:

$$I \approx S=\frac{1}{6}\cdot(4+\frac{64}{5}+2)=3.1333...$$

Cotes公式的计算值为:

$$I \approx S=\frac{1}{90}\cdot(28+\frac{2048}{17}+\frac{192}{5}+\frac{2048}{25}+14)\approx 3.14212$$

以上方法为近似计算圆周率π提供了很好的思路.

§ 7.2 复化求积公式——等距分段的求积公式

在区间$[a, b]$上, 取等距节点

$x_k=a+kh$, $k=0, 1, 2,\ldots, n$, 这里 $h=(b-a)/n$.

由定积分的区间可加性, 有

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=1}^{n}\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \qquad (7.16)$$

若在每个小区间$[x_{k-1}, x_k]$使用梯形公式, 则有

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

$$=\frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_1)+f(x_1)+f(x_2)+f(x_2)+f(x_3)+\ldots+f(x_{n-1})+f(x_n)]$$

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

称为复化梯形公式, 记为

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

连续函数的性质：若$g(x)$为$[a, b]$上的连续函数，则对于区间内n个互异节点上的函数值之和$\sum_{k=1}^{n} g(\xi_k)$，必存在$\eta \in (a, b)$使

$$g(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} g(\xi_k)$$

复化梯形公式的误差为

$$I - T_n = -\frac{h^3}{12}[f''(\xi_1) + f''(\xi_2) + \cdots + f''(\xi_n)]$$

$$= -\frac{h^3}{12} n f''(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

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

$$= \frac{f''(\eta)}{-12n^2}(b-a)^3, \quad \eta \in (a,b)$$

对照梯形公式的求积误差

如果记 $M_2=\max\limits_{a\le x\le b}|f''(x)|$，则有

$$|I-T_n|\le\frac{(b-a)^3}{12n^2}M_2$$

可见复化梯形公式是收敛的.

而且, 要使$|I-T_n|<\varepsilon$, 只需

$$\frac{(b-a)^3}{12n^2}M_2<\varepsilon$$

也即

$$n>\sqrt{\frac{(b-a)^3M_2}{12\varepsilon}}$$

将(7.16)式中每个小区间上的积分采用Simpson公式，则可得到**复化Simpson公式**:

$$I=\int_a^b f(x)dx\approx S_n=\sum_{k=1}^{n}\frac{h}{6}[f(x_{k-1})+4f(x_{k-\frac{1}{2}})+f(x_k)]$$

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

其中 $x_{k-\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x_{k-1}+x_k)=a+(k-\frac{1}{2})h$. **积分公式的误差为**

$$I-S_n=-\frac{h^5}{2880}[f^{(4)}(\xi_1)+f^{(4)}(\xi_2)+\cdots+f^{(4)}(\xi_n)]$$

由连续函数的性质

$$=-\frac{h^5}{2880}nf^{(4)}(\eta),\quad \eta\in(a,b)=-\frac{(b-a)h^4}{2880}f^{(4)}(\eta),\quad \eta\in(a,b)$$

$$=\frac{f^{(4)}(\eta)}{-2880n^4}(b-a)^5,\quad \eta\in(a,b)$$

对照Simpson公式的求积误差

如果记 $M_4=\max_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right|$, 则有

$$\left|I-S_n\right|\le\frac{(b-a)^5}{2880n^4}M_4$$

因此可知复化Simpson公式也是收敛的.

而且, 要使$|I-S_n|<\varepsilon$, 只需

$$\frac{(b-a)^5}{2880n^4}M_4<\varepsilon$$

也即

$$n>\sqrt[4]{\frac{(b-a)^5M_4}{2880\varepsilon}}$$

类似地可得**复化Cotes公式**:

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx C_n$$
$$=\frac{h}{90}\{7f(a)+32\sum_{k=1}^{n}\left[f\left(x_{k-\frac{3}{4}}\right)+f\left(x_{k-\frac{1}{4}}\right)\right]$$
$$+12\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}})+14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+7f(b)\}$$

误差为

$$I-C_n=\frac{f^{(6)}(\eta)}{-1935360n^6}(b-a)^7,\quad \eta\in(a,b)$$

$$|I-C_n|\le\frac{(b-a)^7}{1935360\,n^6}M_6,\quad M_6=\max_{a\le x\le b}\left|f^{(6)}(x)\right|.$$

复化Cotes公式也是收敛的. 而且, 若使$|I-C_n|<\varepsilon$, 只要

$$\frac{(b-a)^7}{1935360n^6}M_6<\varepsilon \quad \text{也即} \quad n>\sqrt[6]{\frac{(b-a)^7M_6}{1935360\varepsilon}}$$

例7-4 已知函数 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$ 的数据表

x_k	$f(x_k)$	x_k	$f(x_k)$	x_k	$f(x_k)$
0	1	3/8	0.9767267	3/4	0.9088517
1/8	0.9973978	1/2	0.9588511	7/8	0.8771926
1/4	0.9896158	5/8	0.9361556	1	0.8414710

分别用复化梯形公式、复化Simpson公式和复化Cotes公式计算积分 $I=\int_0^1 \dfrac{\sin x}{x}dx$ 的近似值, 并估计误差.

解: 复化梯形公式(n=8, h=1/8)的计算值为:

$$T_8=\frac{h}{2}\left[f(0)+2\sum_{k=1}^{7}f\left(\frac{k}{8}\right)+f(1)\right]=0.9456909.$$

此时h= 1/8

复化Simpson公式(n=4, h=1/4)的计算值为:

$$S_4 = \frac{h}{6}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{3} f\left(\frac{k}{4}\right) + 4\sum_{k=1}^{4} f\left(\frac{2k-1}{8}\right) + f(1)\right]$$

$$= 0.9460833.$$

复化Cotes公式(n=2, h=1/2)的计算值为:

$$C_2 = \frac{h}{90}\left[7f(0) + 14f\left(\frac{1}{2}\right) + 32\sum_{k=1}^{4} f\left(\frac{2k-1}{8}\right)\right.$$

$$\left. + 12\sum_{k=1}^{2} f\left(\frac{2k-1}{4}\right) + 7f(1)\right]$$

$$= 0.9460830.$$

以下进行误差估计. 由于

$$f(x)=\frac{sinx}{x}=\int_0^1\cos(xt)\,dt,$$

所以(根据对带参变量的积分的求导法则)有

$$f'(x)=-\int_0^1 t\sin(xt)\,dt,\ f''(x)=-\int_0^1 t^2\cos(xt)\,dt,$$

$$f'''(x)=\int_0^1 t^3\sin(xt)\,dt,\quad f^{(4)}(x)=\int_0^1 t^4\cos(xt)\,dt,$$

$$f^{(5)}(x)=-\int_0^1 t^5\sin(xt)\,dt,\ f^{(6)}(x)=-\int_0^1 t^6\cos(xt)\,dt.$$

于是有

$$|f''(x)|=\left|\int_0^1 t^2\cos(xt)\,dt\right|\le\int_0^1 |t^2\cos(xt)|dt$$

$$\le\int_0^1 t^2dt=\frac{1}{3},$$

$$|f^{(4)}(x)| \le \int_0^1 |t^4 \cos(xt)| dt \le \int_0^1 t^4 dt = \frac{1}{5},$$
$$|f^{(6)}(x)| \le \int_0^1 |t^6 \cos(xt)| dt \le \int_0^1 t^6 dt = \frac{1}{7}.$$
因此可取

$$M_2=1/3,\ M_4=1/5,\ M_6=1/7,$$

可得复化梯形公式的误差估计为:

$$|I - T_8| \le \frac{1^3}{12 \times 8^2} \times \frac{1}{3} = 0.434028 \times 10^{-3};$$

复化Simpson公式的误差估计为:

$$|I - S_4| \le \frac{1^5}{2880 \times 4^4} \times \frac{1}{5} = 0.271267 \times 10^{-6};$$

复化Cotes公式的误差为:

$$|I - C_2| \le \frac{1^7}{1935360 \times 2^6} \times \frac{1}{7} = 0.115335 \times 10^{-8}.$$

备注: 定积分I精确到小数点后7位的值是0.9460831.

例7-5 利用复化梯形公式和复化Simpson公式分别计算上例中的定积分，若使精度$\varepsilon=10^{-6}$，问各需取步长h为多少？

解 因为

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos xt dt$$

所以有

$$f'(x)=-\int_0^1 t\sin xt dt,\quad f''(x)=-\int_0^1 t^2\cos xt dt,$$

$$f'''(x)=\int_0^1 t^3\sin xt dt,\quad f^{(4)}(x)=\int_0^1 t^4\cos xt dt,$$

于是有

$$\left|f''(x)\right|\le\int_0^1 t^2\,|\cos xt|\,dt\le\int_0^1 t^2 dt=\frac{1}{3}$$

$$\left|f^{(4)}(x)\right|\le\int_0^1 t^4\,|\cos xt|\,dt\le\int_0^1 t^4 dt=\frac{1}{5}$$

因此可取

$$M_2=\frac{1}{3},\quad M_4=\frac{1}{5},$$

对复化梯形公式, 若使$|I-T_n|<10^{-6}$, 只要

$$n>\sqrt{\frac{M_2(b-a)^3}{12\times\varepsilon}}=\sqrt{\frac{\frac{1}{3}\times 1^3}{12\times 10^{-6}}}=\frac{1000}{6}\approx 166.67.$$

故应取n=167. 步长取h=1/167. 计算值为T_{167}.

对复化Simpson公式, 若使$|I-S_n|<10^{-6}$, 只要

$$n>\sqrt[4]{\frac{M_4(b-a)^5}{2880\times\varepsilon}}=\sqrt[4]{\frac{\frac{1}{5}\times 1^5}{2880\times 10^{-6}}}=\frac{5}{\sqrt{3}}\approx 2.89.$$

故只需取n=3. 步长取h=1/3. 计算值为S_3.

备注: 复化Simpson公式(n=3)的计算值为S_3=0.9460838.

§ 7.3 Romberg求积公式

由于

$$I - T_n = \frac{(b-a)^3}{-12n^2} f''(\eta), \qquad \eta \in (a,b),$$

$$I - T_{2n} = \frac{(b-a)^3}{-12(2n)^2} f''(\bar{\eta}), \quad \bar{\eta} \in (a,b),$$

所以有

$$\frac{I - T_n}{I - T_{2n}} \approx 4$$

由此得

$$I \approx \frac{4T_{2n} - T_n}{3} \quad \text{或} \qquad I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$$

一方面, 若$|T_{2n}-T_n|<3\varepsilon$, 则有近似误差$|I - T_{2n}|<\varepsilon$. 另一方面, $(4T_{2n}-T_n)/3$应比T_n和T_{2n}的近似程度更好. 事实上, 有

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

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

其中$x_k=a+kh$, $x_{k-1/2}=a+(k-1/2)h$, $k=0, 1, \ldots, n$. 这里$h=(b-a)/n$.

于是有

$$\frac{4T_{2n} - T_n}{3} = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{k-\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] = S_n$$

而且有

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

因此有逐次分半的复化梯形公式的递推公式:

$$\begin{cases} T_{2^0} = T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2^k} = \dfrac{T_{2^{k-1}}}{2} + \dfrac{b-a}{2^k}\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f\left(a + \dfrac{\left(i-\frac{1}{2}\right)(b-a)}{2^{k-1}}\right), k = 1,2,\ldots \end{cases}$$

而且, 要使$|I-T_{2^k}|<\varepsilon$, 只要$|T_{2^k}-T_{2^{k-1}}|<3\varepsilon$.

由复化Simpson公式的误差估计式有:

$$I - S_n = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

$$I - S_{2n} = -\frac{(b-a)^5}{2880(2n)^4} f^{(4)}(\overline{\eta}), \quad \overline{\eta} \in (a,b)$$

所以有

$$\frac{I - S_n}{I - S_{2n}} \approx 16$$

由此得

$$I \approx \frac{16S_{2n} - S_n}{15} \quad \text{或} \quad I - S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n)$$

一方面, 若$|S_{2n} - S_n| < 15\varepsilon$, 则有近似误差$|I - S_{2n}| < \varepsilon$. 另一方面, $(16S_{2n} - S_n)/15$应比S_n和S_{2n}的近似程度更好. 事实上, 有

$$(16S_{2n} - S_n)/15 = C_n.$$

类似地, 由于

$$I - C_n = -\frac{(b-a)^7}{1935360 n^6} f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

$$I - C_{2n} = -\frac{(b-a)^7}{1935360 (2n)^6} f^{(6)}(\overline{\eta}), \quad \overline{\eta} \in (a,b)$$

所以有

$$\frac{I - C_n}{I - C_{2n}} \approx 64$$

由此得

$$I \approx \frac{64 C_{2n} - C_n}{63} \quad 或 \quad I - C_{2n} \approx \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n)$$

一方面, 若$|C_{2n}-C_n|<63\varepsilon$, 则有近似误差$|I-C_{2n}|<\varepsilon$. 另一方面, $(64C_{2n}-C_n)/63$应比C_n和C_{2n}的近似程度更好.

记: $$(64C_{2n}-C_n)/63=R_n,$$

称为**Romberg求积公式**.

用$T_m^{(k)}(m=1, 2, 3, 4)$分别表示把区间2^k等分的复化梯形公式、复化Simpson公式、复化Cotes公式和Romberg求积公式. 则有$T_1^{(k)}=T_{2^k}$, $T_2^{(k)}=S_{2^k}$, $T_3^{(k)}=C_{2^k}$, $T_4^{(k)}=R_{2^k}$.

$$
\begin{cases}
T_1^0 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\[2ex]
T_1^{(k)} = \dfrac{T_1^{(k-1)}}{2} + \dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f\left(a + \dfrac{\left(i-\frac{1}{2}\right)(b-a)}{2^{k-1}}\right), \\[2ex]
T_{m+1}^{(k)} = \dfrac{4^m T_m^{(k+1)} - T_m^{(k)}}{4^m - 1}, k = 1,2,\ldots
\end{cases}
$$

要使$|I-T_m^{(k)}|<\varepsilon$, 只要$|T_m^{(k)}-T_m^{(k-1)}|<(4^m-1)\varepsilon$ $(m=1, 2, 3, 4)$.

若对Romberg求积公式作组合也有

$$I \approx \frac{4^4 R_{2n} - R_n}{4^4 - 1} = \frac{4^4}{4^4 - 1} R_{2n} + \frac{1}{4^4 - 1} R_n$$

实际计算可按下表顺序进行

k	区间等分数 $n=2^k$	梯形公式 $T_1^{(k)}$	Simpson公式 $T_2^{(k)}$	Cotes公式 $T_3^{(k)}$	Romberg公式 $T_4^{(k)}$
0	1	$T_1^{(0)}$			
1	2	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$		
2	4	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$	
3	8	$T_1^{(3)}$	$T_2^{(2)}$	$T_3^{(1)}$	$T_4^{(0)}$
4	16	$T_1^{(4)}$	$T_2^{(3)}$	$T_3^{(2)}$	$T_4^{(1)}$
…	…	…	…	…	…

例11 利用Romberg积分公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$$

解　按递推公式计算,结果如下

k	$n=2^k$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	1	3.0000000			
1	2	3.1000000	3.1333333		
2	4	3.1311765	3.1415687	3.1421177	
3	8	3.1389885	3.1415925	3.1415941	3.1415858
4	16	3.1409416	3.1415926	3.1415926	3.1415926

其(先验)误差估计为:

由于$|T_1^{(4)}-T_1^{(3)}|=0.0019531$, 应有$|I-T_1^{(4)}|<0.000651033$.

由于$|T_2^{(3)}-T_2^{(2)}|=0.0000001$, 应有$|I-T_2^{(3)}|<0.00000000666$.

由于$|T_3^{(2)}-T_3^{(1)}|=0.0000015$, 应有$|I-T_3^{(2)}|<0.0000000238$.

由于$|T_4^{(1)}-T_4^{(0)}|=0.0000068$, 应有$|I-T_4^{(1)}|<0.0000002666$.

§ 7.4 Gauss型求积公式

§ 7.4.1 Gauss型求积公式的一般理论

定理7.3 区间$[a, b]$上权函数为$\rho(x)$的具有n个节点的数值积分公式代数精度不超过$2n$-1次.

证明: 若记$x_1, x_2, \ldots, x_n$为求积节点, 则积分公式为

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \qquad (7.7)$$

取$f(x)$为$2n$次多项式: $p(x)=(x-x_1)^2(x-x_2)^2\ldots(x-x_n)^2$, 则有

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

所以, 求积公式的代数精度不超过$2n-1$. 证毕.

使求积公式具有$2n-1$次代数精度的节点$x_1, x_2, \ldots, x_n$称为**Gauss点**, 此时的插值型求积公式称为**Gauss型求积公式**.

引例

由第一节例2可见, 求积公式

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

就是Gauss型求积公式,

$$x_1 = -1/\sqrt{3}, x_2 = 1/\sqrt{3}$$

就是区间[-1, 1]上权函数$\rho(x)$=1的Gauss点.

下面用构造性方法给出Gauss点的确定方法(原理).

对于数值求积公式:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{i=1}^n A_i f(x_i),$$

取区间$[a, b]$上权函数为$\rho(x)$的**正交多项式**$p_n(x)$的n个**零点**x_1, $x_2,\ldots, x_n$作为**求积节点**, 则其求积误差为:

Newton型误差

$$R[f]=\int_a^b f(x)\rho(x)dx-\sum_{i=1}^n A_i f(x_i)$$

$$=\int_a^b f[x_1,x_2,\ldots,x_n,x]\omega_n(x)\rho(x)dx$$

$=0$

$\omega_n(x)$: n次正交多项式

当$f(x)\in P_{2n-1}$ 时,

$f[x_1, x_2,\ldots,x_n, x]\in P_{n-1}$.

由正交多项式 之性质3

这说明:取节点为n次正交多项式的零点, 即可保证公式的代数精度为$2n-1$.

定理7.4 对区间$[a, b]$上权函数为$\rho(x)$的积分

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

区间$[a,\ b]$上权函数为$\rho(x)$的正交多项式$p_n(x)$的n个零点x_1, $x_2,\ldots, x_n$恰为Gauss点.

由定理7.4可见, 构造Gauss型求积公式的方法为:

(1)求出区间$[a, b]$上权函数为$\rho(x)$的正交多项式$p_n(x)$.

(2)求出$p_n(x)$的n个零点$x_1, x_2,\ldots, x_n$即为Gauss点.

(3)计算积分系数 $A_i=\int_a^b l_i(x)\rho(x)dx,\ (i=1,2,\ldots,n.)$

例9 求积分 $\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx$ 的2点Gauss公式.

解 按Schmidt正交化过程作出正交多项式:

$$p_0(x)=1.$$

$$p_1(x)=x-\frac{(x,p_0(x))}{(p_0(x),p_0(x))}p_0(x)=x-\frac{\int_{-1}^{1}x^3dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}=x$$

$$p_2(x)=x^2-\frac{(x^2,p_0(x))}{(p_0(x),p_0(x))}p_0(x)-\frac{(x^2,p_1(x))}{(p_1(x),p_1(x))}p_1(x)$$

$$=x^2-\frac{\int_{-1}^{1}x^4dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}-\frac{\int_{-1}^{1}x^5dx}{\int_{-1}^{1}x^4dx}x=x^2-\frac{3}{5}$$

$p_2(x)$的两个零点为 $x_1=-\sqrt{\frac{3}{5}}$,$x_2=\sqrt{\frac{3}{5}}$, 积分系数为

$$A_1=\int_{-1}^{1}x^2l_1(x)dx=\int_{-1}^{1}x^2\frac{x-x_2}{x_1-x_2}dx=\frac{1}{3}$$

$$A_2=\int_{-1}^{1}x^2l_2(x)dx=\int_{-1}^{1}x^2\frac{x-x_1}{x_2-x_1}dx=\frac{1}{3}$$

故两点Gauss公式为

$$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx \approx \tfrac{1}{3}[f(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}) + f(\sqrt{\tfrac{3}{5}})]$$

注: 构造Gauss型求积公式的另一方法即按代数精度最大化原则(n个节点的求积公式最大代数精度为2n-1)列出相应的(非线性)方程组, 从而确定求积节点和求积系数(参见教材Pp.165—166的例7-1(2)).

定理7.5 设$f(x)\in C^{2n}[a, b]$, 则Gauss公式(7.7)的误差为

$$R(f)=\int_a^b f(x)\rho(x)dx-\sum_{i=1}^{n}A_i f(x_i)=\frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)dx$$

其中$\eta\in(a, b)$, $\omega_n(x)=(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$.

证明： 构造$2n-1$次插值多项式$H_{2n-1}(x)$, 使满足条件

$H_{2n-1}(x_i)=f(x_i)$, $H'_{2n-1}(x_i)=f'(x_i)$, $i=1, 2,\dots, n$. 则有

$$f(x)-H_{2n-1}(x)=\frac{f^{(2n)}(\xi_x)}{(2n)!}\omega_n^2(x)$$

由于Gauss公式(7.7)具有$2n-1$次代数精度, 所以有

$$\int_a^b H_{2n-1}(x)\rho(x)dx=\sum_{i=1}^{n}A_i H_{2n-1}(x_i)$$

于是Gauss公式(7.7)的求积误差为

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

$$=\int_a^b f(x)\rho(x)dx-\sum_{i=1}^n A_i H_{2n-1}(x_i)$$

$$=\int_a^b f(x)\rho(x)dx-\int_a^b H_{2n-1}(x)\rho(x)dx$$

$$=\int_a^b \frac{f^{(2n)}(\xi_x)}{(2n)!}\rho(x)\omega_n^2(x)dx$$

利用积分第一中值定理可得

$$R(f)=\frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)dx$$

证毕.

§ 7.4.2 几种Gauss型求积公式

(1) Gauss-Legendre求积公式

区间[-1，1]上权函数$\rho(x)=1$的Gauss型求积公式，称为**Gauss-Legendre求积公式**，其Gauss点为Legendre多项式的零点.公式的Gauss点和求积系数可在数学用表中查到．

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
1	0	2	6	±0.9324695142 ±0.6612093865 ±0.2386191861	0.1713244924 0.3607615730 0.4679139346
2	±0.5773502692	1	7	±0.9491079123 ±0.7415311856 ±0.4058451514 0	0.1294849662 0.2797053915 0.3818300505 0.4179591837
3	±0.7745966692 0	0.5555555556 0.8888888889	8	±0.9602898565 ±0.7966664774 ±0.5255324099 ±0.1834346425	0.1012285363 0.2223810345 0.3137066459 0.3626837834
4	±0.8611363116 ±0.3399810436	0.3478548451 0.6521451549			
5	±0.9061798459 ±0.5384693101 0	0.2369268851 0.4786286705 0.5688888889			

Gauss-Legendre求积公式的余项为

$$R[f]=\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^3(2n+1)}f^{(2n)}(\eta)\quad ,\eta\in(-1,1)$$

例10 用3点Gauss公式计算积分 $I=\int_{-1}^{1}\cos x dx.$

解: 查表得x_1=-0.7745966692, x_2=0, x_3=0.7745966692,

A_1=A_3=0.5555555556, A_2=0.8888888889, 所以有

$$I\approx A_1\cos x_1+A_2\cos x_2+A_3\cos x_3=1.68300355$$

误差为

$$R[f]=\left|\frac{2^7\times 6^4}{(6!)^3\times 7}(-\cos\eta)\right|\le 6.3492\times 10^{-5}$$

实际上, I=2sin1=1.68294197, 误差为|R[f]|=6.158×10^{-5} .

用Simpson公式, 则有$I\approx$1.69353487, 误差为|R[f]|=1.06×10^{-2} .

由于

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

因此, $[a, b]$上权函数$\rho(x)=1$的Gauss型求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^n A_i f(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}x_i)$$

求积误差可表示为

$$R[f] = \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^3(2n+1)} f^{(2n)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

例14 用3点Gauss公式计算积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx.$

解: 这里Gauss点和积分系数与上例相同, 所以

$$I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^3 A_i \frac{4}{1+[(1+x_i)/2]^2} = 3.141068$$

结果远比Simpson公式的结果精确.

(2) Gauss-Laguerre求积公式

区间$[0, +\infty)$上权函数$\rho(x)=e^{-x}$的Gauss型求积公式, 称为**Gauss-Laguerre求积公式**，其Gauss点为Laguerre多项式的零点. 公式的Gauss点和求积系数可在数学用表中查到 .

n	x_k	A_k
2	0.5858864376	0.8535533905
	3.4142135623	0.1464466094
3	0.4157745567	0.7110930099
	2.2942803602	0.2785177335
	602899450829	0.0103892565
4	0.3225476896	0.6031541043
	1.7457611011	0.3574186924
	4.5366202969	0.0388879085
	9.3950709123	0.0005392947

n	x_k	A_k
5	0.2635603197	0.5217556105
	1.4134030591	0.3986668110
	3.5964257710	0.0759424497
	7.0858100058	0.0036117587
	12.6408008442	0.0000233700
6	0.2228466041	0.4589646793
	1.1889321016	0.4170008307
	2.9927363260	0.1133733820
	5.7751435691	0.0103991975
	9.8374674183	0.0002610172
	15.9828739806	0.0000008985

Gauss-Laguerre求积公式为

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

求积公式的误差为

$$R[f] = \frac{(n!)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\eta), \quad \eta \in (0, +\infty)$$

由于

$$\int_0^{\infty} f(x)dx = \int_0^{\infty} e^{-x} e^{x} f(x)dx$$

所以，对[0，+∞)上权函数$\rho(x)=1$的积分,也可以构造类似的Gauss-Laguerre求积公式:

$$\int_0^{\infty} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i e^{x_i} f(x_i)$$

(3) Gauss-Hermite求积公式

区间$(-\infty, +\infty)$上权函数$\rho(x)=e^{-x^2}$的Gauss型求积公式, 称为**Gauss-Hermite求积公式**, 其Gauss点为Hermite多项式的零点. 公式的Gauss点和求积系数可在数学用表中查到 .

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
2	±0.7071067811	0.8862269254	6	±0.4360774119	0.7246295952
3	±1.2247448713	0.2954089751		±1.3358490704	0.1570673203
	0	1.8163590006		±2.3506049736	0.0045300099
4	±0.5246476232	0.8049140900	7	±0.8162878828	0.4256072526
	±1.6506801238	0.0813128354		±1.6735516287	0.0545155828
5	±0.9585724646	0.3936193231		±2.6519613563	0.0009717812
	±2.0201828704	0.0199532421		0	0.8102646175
	0	0.9453087204			

Gauss-Hermite求积公式为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \quad \text{或} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i e^{x_i^2} f(x_i)$$

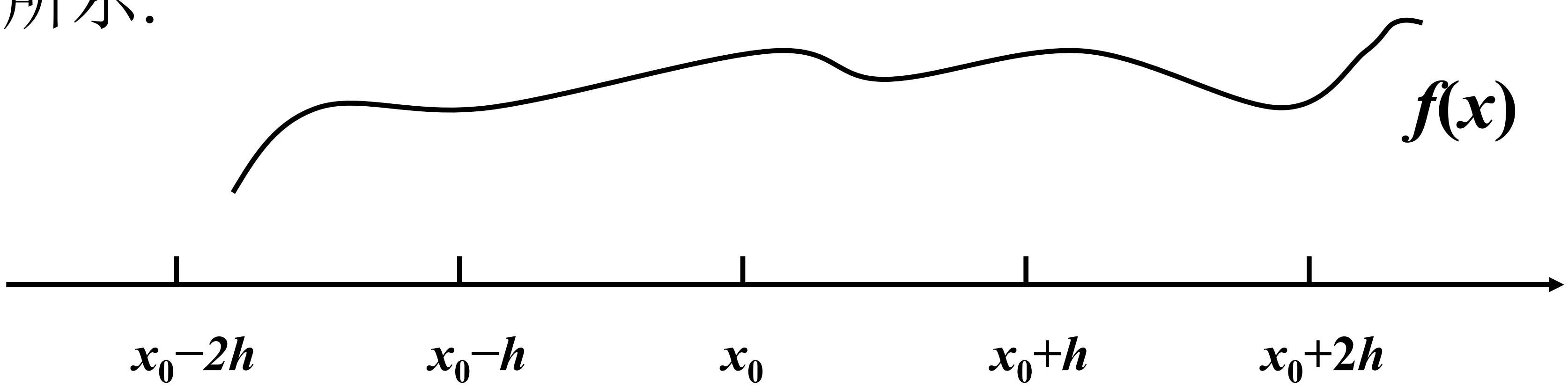
求积公式的误差为

$$R[f]=\frac{n!\sqrt{\pi}}{2^{n}(2n)!}f^{(2n)}(\eta)\quad \eta\in(-\infty,+\infty)$$

§ 7.6 数值微分

问题：对于充分光滑函数(即任意阶连续可微函数)$f(x)$，如何根据$f(x)$在离散节点$x_k(k=0, 1, 2...)$上的函数值来计算在节点$x_k(k=0, 1, 2...)$处的一阶导数值$f'(x_k)$、二阶导数值$f''(x_k)$？

假设在节点x_0附近的节点均为等距剖分, 剖分步长为h. 如图所示.



联想

由于

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x},$$

因此. . . . . .

(1) 关于一阶导数的**向前差商**数值微分公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

由Taylor展开式

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0+\theta h), \quad 0\le\theta\le 1.$$

可得**向前差商公式的误差**

$$f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}=-\frac{h}{2}f''(x_0+\theta h), \quad 0\le\theta\le 1.$$

$$=O(h).$$

(2) 关于一阶导数的**向后差商**数值微分公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

由Taylor展开式

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{h^2}{2} f''(x_0 - \theta h), \quad 0 \le \theta \le 1.$$

可得**向后差商公式的误差**

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{h}{2} f''(x_0 - \theta h), \quad 0 \le \theta \le 1.$$

$$= O(h).$$

(3) 关于一阶导数的**一阶中心差商**数值微分公式

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

当节点等距且$f(x)$充分光滑时, 由Taylor展开式

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(x_0+\theta_1 h), 0\le\theta_1\le 1.$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(x_0-\theta_2 h), 0\le\theta_2\le 1.$$

可得**一阶中心差商公式的误差**

$$f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}=\frac{h^2}{-12}[f'''(x_0+\theta_1 h)+f'''(x_0-\theta_2 h)]$$

$$=\frac{h^2}{-6}f'''(x_0+\theta h), \quad -1\le\theta\le 1.$$

$$=O(h^2).$$

(4) 关于二阶导数的二阶中心差商数值微分公式

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}$$

当节点等距且$f(x)$充分光滑时，由Taylor展开式

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0+\theta_1 h),0\le\theta_1\le 1$$

$$f(x_0-h)=f(x_0)-f'(x_0)h+\frac{h^2}{2}f''(x_0)-\frac{h^3}{6}f'''(x_0)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0-\theta_2 h),0\le\theta_2\le 1$$

可得二阶中心差商公式的误差

$$f''(x_0)-\frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}=\frac{h^2}{-24}\left[f^{(4)}(x_0+\theta_1 h)+f^{(4)}(x_0-\theta_2 h)\right]$$

$$=\frac{h^2}{-12}f^{(4)}(x_0+\theta h),\quad -1\le\theta\le 1.$$

$$=O(h^2).$$

思考1: 当非等距剖分时，一阶中心差商和二阶中心差商公式的误差如何?

思考2: 数值微分公式的稳定性如何?

思考3: 数值积分公式的稳定性如何?

关于改善数值微分公式(稳定性)的一些策略，参见教材P227.

从截断误差的角度看, 步长h越小, 截断误差越小. 但另一方面, 当h很小时, 计算过程中会出现以下情况:

(1) 两个相近的数相减;

(2) 分母的绝对值很小.

这些会引起计算误差. 因此, 步长h又不宜过小.

例如, 用一阶中心差商公式计算$f(x)=\sin x$在$x=5$处的一阶导数值$f'(5)$ ($=\cos 5=0.283662$). 计算结果如下:

h	$[f(5+h)-f(5-h)]/(2h)$	|绝对误差|
1	0.23869350	4.49686869e-02
0.1	0.28318965	4.72533980e-04
0.01	0.28365746	4.72767946e-06
0.001	0.28366214	4.72769127e-08
0.0001	0.28366218	4.73240669e-10
0.00001	0.28366219	1.13878906e-11
0.000001	0.28366219	2.85715895e-13
0.0000001	0.28366219	4.99314645e-10
0.00000001	0.28366218	2.83135443e-09
0.000000001	0.28366220	1.93731061e-08
0.0000000001	0.28366198	2.02671499e-07
1e-11	0.28366198	2.02671499e-07
1e-12	0.28366198	2.02671499e-07
1e-13	0.28477221	1.11002035e-03
1e-14	0.27755576	6.10642931e-03
1e-15	0.22204460	6.16175805e-02

以上为Intel(R) Core(™) i5 CPU 2.6GHz, win7(64位操作系统) Matlab2015b 计算结果

从计算结果可见，h=1e-6 (即h=0.000001)时，此格式的计算效果最好. 随着步长进一步缩小, 近似效果越来越差.

实际应用时，可采用步长逐次减半的方法确定最终步长. 记D(h)和D(h/2)分别为步长h和h/2时的差商公式，对给定的精度$\varepsilon>0$,

如果

$$|D(h)-D(h/2)|< \varepsilon,$$

就取步长为h/2.

否则, 进一步将步长减半.

§ 7.6.2　插值型数值微分

设$L_n(x)$是$f(x)$以$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$为节点的$n$次Lagrange插值多项式, 则取

$$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i^{(k)}(x) f(x_i), \qquad k = 1,2,\ldots,n.$$

当$f(x) \in C^{n+1+k}[a, b]$时, 有

$$f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) = \frac{d^k}{dx^k}\left[\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\right]$$

特别, 当$k=1$时有

$$f'(x) - L_n'(x) = \frac{1}{(n+1)!}\left[\frac{d}{dx}(f^{(n+1)}(\xi_x))\omega_{n+1}(x) + f^{(n+1)}(\xi_x)\frac{d}{dx}\omega_{n+1}(x)\right]$$

$$f'(x) - L_n'(x) = \frac{1}{(n+1)!}\left[\frac{d}{dx}(f^{(n+1)}(\xi_x))\omega_{n+1}(x) + f^{(n+1)}(\xi_x)\frac{d}{dx}\omega_{n+1}(x)\right]$$

如果仅限定在节点x_i处求导, 则有

$$\begin{aligned} f'(x_i) - L_n'(x_i) &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_i) \\ &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{\substack{j=0,\\ j\neq i}}^{n}(x_i - x_j), \end{aligned} \tag{7.47}$$

$$i = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

$$f'(x_i) - L_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0,\\ j\neq i}}^{n} (x_i - x_j),\ \ i = 0, 1, 2, \dots, n. \tag{7.47}$$

如取n=1的线性插值$L_1(x)=[(x-x_0)f(x_1)-(x-x_1)f(x_0)]/h$，(其中$h=x_1-x_0$)可得**数值微分的二点公式**:

$$\begin{cases} f'(x_0) = \dfrac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) - \dfrac{h}{2} f''(\xi) \\[2ex] f'(x_1) = \dfrac{1}{h}(f(x_1) - f(x_0)) + \dfrac{h}{2} f''(\xi) \end{cases}$$

$$f'(x_i) - L'_n(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0,\\ j\neq i}}^{n} (x_i - x_j),\ \ i = 0, 1, 2, \ldots, n. \tag{7.47}$$

根据(7.47), 还可构造**数值微分的三点公式**:

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

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

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

对$L_2(x)$求二阶导数，也可以得到近似二阶导数的三点公式:

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

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

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