第六章 数值积分与数值微分

引　　言

Newton − Leibnitz公式(其中$F(x)$为$f(x)$的原函数)

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

例如，对概率积分$\dfrac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^t e^{-x^2}dx \qquad t \in [0,+\infty)$

由于被积函数的原函数$F(x)$不可能找到，牛顿-莱布尼兹公式也就无能为力了。

所谓数值积分，从近似计算的角度看，就是在区间$[a,b]$上适当地选取若干个点x_i，然后用这些节点上的函数值$f(x_i)$的加权平均方法获得定积分的近似值，即

$$\boxed{\lim_{\Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{n} f(\bar{x}_i)\Delta x_i} \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

从数值逼近的观点看，所谓数值积分，就是用一个具有一定精度的简单函数$\varphi(x)$代替被积函数$f(x)$，而求出定积分的近似值，即

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \varphi(x)dx$$

取$\varphi(x)=p_n(x)$得插值型求积公式，

即：用插值多项式$p_n(x) \approx f(x)$，

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx$$

第一节 等距节点的牛顿—柯特斯求积公式

一、牛顿—柯特斯求积公式

1、插值型求积公式的推导

设 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a,b]$, $p_n(x)$是$f(x)$的n次Lagrange插值多项式

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

则有

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

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n), a < \xi(x) < b$$

则有

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

$$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),a<\xi(x)<b$$

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

$$=\int_a^b\sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x)dx+\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)dx$$

$$=\sum_{i=0}^n A_i f(x_i)+\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)dx$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)dx$$

插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R(f) \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \quad (1)$$

其中

$$A_i = \int_a^b l_i(x)dx \quad i = 0,1,\cdots,n \quad (2)$$

$$l_j(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)} = \prod_{i=0,i\neq j}^{n} \frac{x-x_i}{x_j-x_i}$$

截断误差或余项为

$$R(f) = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)dx \quad (3)$$

数值求积公式的一般形式

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

A_i $(i=0,1,\ldots,n)$称为求积系数，

x_i $(i=0,1,\ldots,n)$称为求积节点。

2、 牛顿—柯特斯求积公式含义

当求积**节点等距**分布时，插值型求积公式称为牛顿—柯特斯(**Newton-Cotes**) 求积公式。

将积分区间[a,b] n等分，节点x_i为

$$x_i=a+ih, \qquad i=0,1,2,\dots,n$$

其中$h=(b-a)/n$。有

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \qquad (4)$$

其中 $A_i=\int_a^b l_i(x)dx$

引进变换 $x=a+th\ ,\ 0\le t\le n$

$x_j=a+jh,\ j=0,1,2,\ldots,n$
$dx=hdt$
$h=(b-a)/n$

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

$$=h\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne i}}^{n}\frac{t-j}{i-j}dt=(b-a)C_i^{(n)}\quad,\quad i=0,1,\cdots,n$$

$$C_i^{(n)}=\frac{1}{n}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne i}}^{n}\frac{t-j}{i-j}dt=\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\ne i}}^{n}(t-j)dt\quad(5)$$

$$i=0,1,\cdots,n$$

$C_i^{(n)}$称为柯特斯系数。

于是牛顿—柯特斯求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)=(b-a)\sum_{i=0}^{n}C_i^{(n)}f(x_i)\quad(6)$$

牛顿—柯特斯系数 $C_i^{(n)}$

n	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8
1	1/2	1/2							
2	1/6	2/3	1/6						
3	1/8	3/8	3/8	1/8					
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90				
5	19/288	25/96	25/144	25/144	25/96	19/288			
6	41/840	9/35	9/280	34/105	9/280	9/35	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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

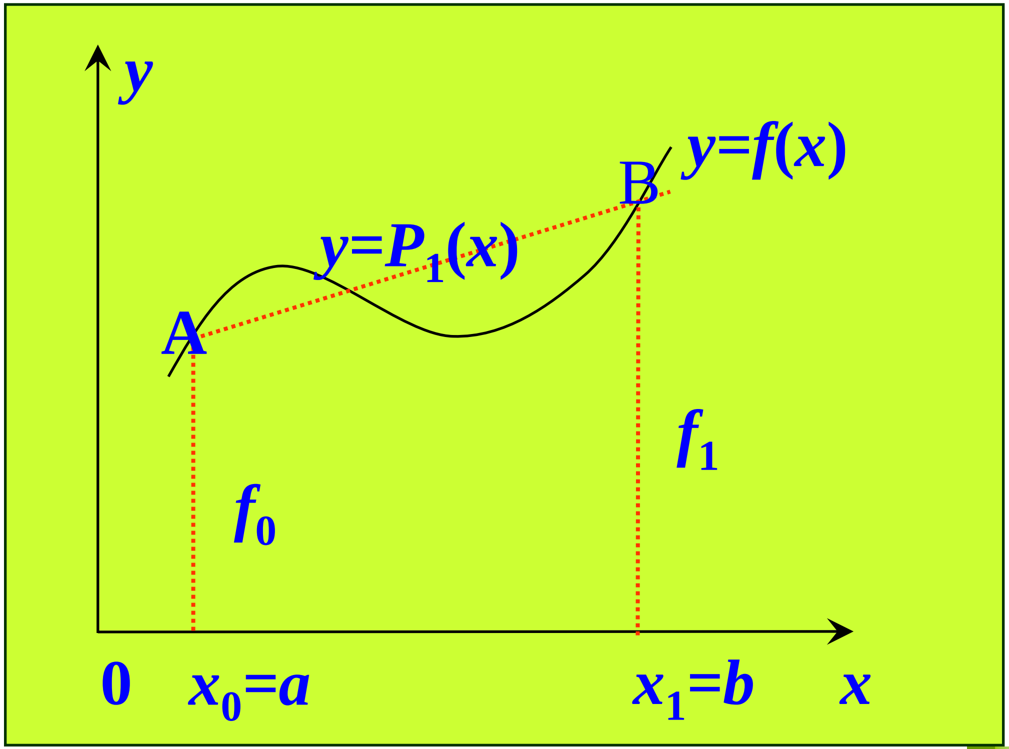
可证明 $\sum_{j=0}^{n} A_j = b - a, \quad \sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} = 1$

（1）梯形公式(n=1)

$x_0=a,\ x_1=b,\ h=b-a,\quad c_0^{(1)}=c_1^{(1)}=1/2$

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

梯形公式的几何意义是用四边梯形x_0ABx_1的面积代替曲边梯形的面积。



(2) 辛卜生公式 (n=2)

$x_0 = a,\ x_1 = a+h,\ x_2 = b,\ h = (b-a)/2$

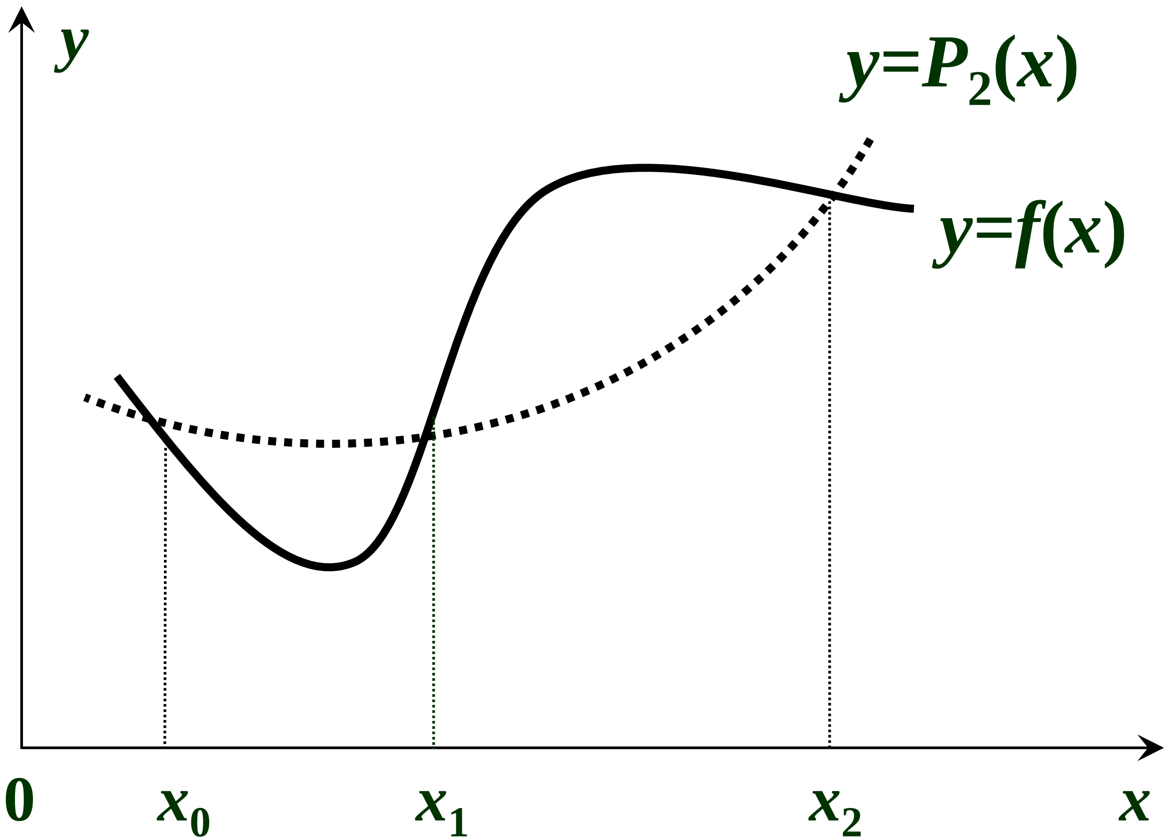
$C_0^{(2)} = 1/6$, $C_1^{(2)} = 4/6$, $C_2^{(2)} = 1/6$

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

或 $$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)) = S$$

辛卜生公式又称为**抛物线公式**。

辛卜生公式的几何意义是用抛物线$y=P_2(x)$围成的曲边梯形面积代替由$y=f(x)$围成的曲边梯形面积图2。



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

例： 用梯形公式与辛卜生公式

$$I=0.7668010$$

求 $I=\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx$ 的近似值。

解：

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

梯形公式

$$I=\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx \approx \frac{2}{2}\left(e^{-\frac{1}{2}}+e^{-\frac{3}{2}}\right)\approx 0.829660819$$

辛卜生公式

$$I=\int_1^3 e^{-\frac{x}{2}}dx \approx \frac{2}{6}\left(e^{-\frac{1}{2}}+4e^{-\frac{2}{2}}+e^{-\frac{3}{2}}\right)\approx 0.766575505$$

例 n=3 为3/8 辛卜生公式

$x_0 = a,\ x_1 = a+h,\ x_2 = a+2h,\ x_3 = b\ ,\ h = (b-a)/3$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx \approx \frac{b-a}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

n=4为 Cotes 公式

$x_0 = a,\ x_1 = a+h,\ x_2 = a+2h,\ x_3 = a+3h,\ x_4 = b\ ,\ h = (b-a)/4$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$$

例：用Newton-Cotes公式计算

$$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$$

解：当n取不同值时，计算结果如下所示。

$I_{准}=0.9460831$

n	近似结果
1	0.9207354
2	0.9461359
3	0.9461109
4	0.9460830
5	0.9460830

二、插值型求积公式的代数精度

定义1：若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 对一切不高于*m*次的多项式*p*(*x*)都等号成立，即*R*(*p* (*x*))=0；而对于某个*m*+1次多项式等号不成立，则称此公式的代数精度为*m*.

定义1 ⟺ 定义2

定义2：若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 对 $f(x)=1,x,x^2,x^3\ldots x^m$，都等号成立，即 $R(x^i)=0$；而对于 x^{m+1} 等号不成立，则称此公式 的代数精度为*m*.

代数精度求法　　从 $f(x)=1,x,x^2,x^3\ldots$ 依次验证求积公式是否成立，若第一个不成立的等式是 x^m, 则其代数精度是*m*-1.

代数精度越高，数值求积公式越精确

例1：证明下面数值求积公式具有1次代数精度.

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{2}(f(0)+f(1))$$

解：取$f(x)=1$,

$$左=1=\int_0^1 f(x)dx=\frac{1}{2}(f(0)+f(1))=1=右$$

取$f(x)=x$,

$$左=\frac{1}{2}=\int_0^1 f(x)dx=\frac{1}{2}(f(0)+f(1))=\frac{1}{2}=右$$

取$f(x)=x^2$,

$$左=\frac{1}{3}=\int_0^1 f(x)dx\neq\frac{1}{2}(f(0)+f(1))=\frac{1}{2}=右$$

所以求积公式具有 1 次代数精度。

例2：设有 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$

成立，确定 A_0、A_1、A_2，使上述数值求积公式的代数精度尽可能高，并求代数精度。

解：分别取 $f(x)=1$，x，x^2，则有 $A_0+A_1+A_2=2$

$-A_0+A_2=0$

$A_0+A_2=2/3$

解得 $A_0=1/3$，$A_1=4/3$，$A_2=1/3$；

则 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}(f(-1)+4f(0)+f(1))$

取 $f(x)=x^3$，左=右=0；

$f(x)=x^4$，左=$\int_{-1}^{1}x^4dx=2/5 \neq$ 右=2/3

所以具有 **3** 次代数精度。

Newton-Cotes公式的代数精度

定理6-1： 由n+1个互异节点x_0、x_1、… x_n构造的插值型求积公式的代数精度至少为n。

由于Newton-Cotes公式是其特殊情形(等距节点)，它的代数精度至少是n，还可以证明 **当n为偶数时Newton-Cotes公式的代数精度至少是n+1.**

这里系数A_j只依赖于求积节点与积分区间，与$f(x)$无关。

显然当$f(x)$是任何一个不超过n次的多项式时，余项

$$R(f) = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}(x)dx = 0$$

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

即求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{n} A_i f(x_j)$ 至少具有n次代数精度。

三、Newton-Cotes公式的截断误差

引理：（第二积分中值定理）

如果函数$f(x)$在$[a,b]$上连续，函数$g(x)$在$[a,b]$上可积且不变号，则存在$\eta\in(a,b)$使

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

定理3：设$f(x)$在$[a,b]$上有二阶连续导数，则梯形求积公式的截断误差为

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

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

证明: $n=1$,由截断误差公式(3)有

$$R_T(f)=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx,\quad \xi\in[a,b]$$

由于$f''(\xi)$是依赖于x的函数且在$[a,b]$上连续，又

$(x-a)(x-b)\le 0$，$x\in[a,b]$，由引理知，在区间$[a,b]$

上存在一点η使得

$$R_T(f)=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

证毕

带误差项的梯形公式是

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)}$$

定理4： 设$f(x)$在$[a,b]$上有4阶连续导数，则辛卜生求积公式的截断误差为

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

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

证： 已知辛卜生求积公式的代数精度为3，因此考虑构造一个三次插值多项式$p_3(x)$满足下列条件

$$p_3(a)=f(a) \qquad p_3(b)=f(b)$$

$$p_3(\tfrac{a+b}{2})=f(\tfrac{a+b}{2}) \qquad p_3'(\tfrac{a+b}{2})=f'(\tfrac{a+b}{2})$$

根据插值余项定理得：

$$f(x)-p_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\tfrac{a+b}{2})^2(x-b)$$

$$a\le\xi\le b$$

两边求定积分得

$$\int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_3(x)dx = \frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-\tfrac{a+b}{2})^2(x-b)dx$$

因为是$p_3(x)$是三次多项式（代数精度为3），所以

$$\int_a^b p_3(x)dx = \frac{b-a}{6}\left[p_3(a)+4p_3(\frac{a+b}{2})+p_3(b)\right] = \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

得到截断误差

$$R(f) = \frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx$$

假设$f^{(4)}(\xi)$在区间$[a,b]$上连续，

而且当$x\in[a,b]$时$(x-a)(x-\tfrac{a+b}{2})^2(x-b)\le 0$

由引理知，在$[a,b]$上总存在一点η使得

因此辛卜生求积公式的截断误差为

$$R(f)=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$$

$$=\frac{1}{4!}f^4(\eta)\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$$

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

带误差项的辛卜生公式是

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$$

$$a<\eta<b$$

定理5：(Newton-Cotes公式余项定理)

设 $x_0 = a, x_n = b, h = \frac{1}{n}(b-a)$.

(1) 若 $f \in C^{n+2}[a,b]$, n是偶数, 则

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j) + \frac{h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)dt$$

(2) 若 $f \in C^{n+1}[a,b]$, n是奇数, 则

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j) + \frac{h^{n+2} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt$$

例：证明 $\sum_{j=0}^{n} A_j = b-a,\quad \sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} = 1$

证：$n \geq 1$, 取$f(x)=1$,

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

及 $R(f) = \dfrac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)dx$

知 $R(f)=0$

所以 $b-a = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i$

$$= (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i) = (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)}$$

$\therefore \sum_{j=0}^{n} A_j = b-a,\quad \sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} = 1$

四、Newton-Cotes公式的数值稳定性分析

初步看来似乎n值越大，代数精度越高。是不是n越大越好呢？答案是否定的。考察Newton-Cotes公式的数值稳定性，即讨论舍入误差对计算结果的影响。

$$I=\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)=(b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)=I_n$$

用I_n近似计算I时，若计算函数值$f(x_k)$有误差ε_k，$k=0, 1, 2, \ldots, n$; 设$C_k^{(n)}$没有误差，则在牛顿–柯特斯求积公式的计算中，由ε_k引起的误差为

$$e_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)-(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}(f(x_k)+\varepsilon_k)$$

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

n	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8
1	1/2	1/2							
2	1/6	2/3	1/6						
3	1/8	3/8	3/8	1/8					
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90				
5	19/288	25/96	25/144	25/144	25/96	19/288			
6	41/840	9/35	9/280	34/105	9/280	9/35	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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

但是, Newton-Cotes公式的系数在当n=8 时,出现负数，说明当n≥8时，稳定性将得不到保证,另一方面误差项中有高阶导数，一般地说，难以进行误差估计。因此，在实际计算中，不用高阶的牛顿—柯特斯求积公式,一般我们只取n=1,2,4。