第 5 章 数值积分与数值微分

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

1 基本概念

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 $\Delta x=\max\limits_{1\le k\le n}\Delta x_k$. 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**. 记

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

定义 1.1 称

$$R(f) = I(f) - I_n(f)$$

为求积公式的截断误差.

2 插值型求积公式

2.1 插值型求积公式

给定节点 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$, 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 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$. 记

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

则

$$I(f) \approx I_n(f). \tag{2.1}$$

定义 2.1 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 $R(f) = I(f) - I_n(f)$, 由插值多项式的余项得插值型求积公式的截

断误差

$$
\begin{aligned}
R(f) &= I(f) - I_n(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b l_k(x)dx\right]f(x_k) \\
&= \int_a^b f(x)dx - \int_a^b L_n(x)dx \\
&= \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx \\
&= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)dx, \quad \xi \in (a, b). \qquad (2.2)
\end{aligned}
$$

定义 2.2 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

$$
C_{n,k} = \frac{(-1)^{n-k}}{n \cdot k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} (t - j) dt, \quad k = 0, 1, \cdots, n, \tag{2.3}
$$

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 (2.3) 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:

$$T(f) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]. \tag{2.4}$$

(2.4) 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 (2.3) 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

$$S(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right]. \tag{2.5}$$

(2.5) 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 (2.3) 求得

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

可得 5 个等距节点的插值型求积公式

$$\begin{aligned} C(f) = \quad & \frac{b-a}{90}\Big[7f(a)+32f(\frac{3a+b}{4})+12f(\frac{a+b}{2}) \\ & +32f(\frac{a+3b}{4})+7f(b)\Big]. \end{aligned} \tag{2.6}$$

(2.6) 称为 **Cotes** 公式.

2.2 代数精度

定义 2.3 给定一个求积分 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$ 的求积公式

$$I(f)\approx I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k), \tag{2.7}$$

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

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

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

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

则称求积公式 (2.7) 的**代数精度是 m**.

注 2.1 设 $\mathcal{P}_r$ 是 r 次多项式空间, 则代数精度 $m = \max\{r|I(f) = I_n(f), \forall f \in \mathcal{P}_r\}$.

由插值型求积公式的截断误差 (2.2) 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 2.1 求积公式

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

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 2.2 求积公式

$$I(f) \approx I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{2.8}$$

的代数精度是 $m \Longleftrightarrow$ 它对 $1, x, x^2, \cdots, x^m$ 精确成立, 而对 x^{m+1} 不精确成立. 即

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

例 2.1 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,

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

$$\neq \frac{b^5 - a^5}{5}.$$

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

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

2.3 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

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

(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

$$R_s(f)\quad =I(f)-S(f)=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b H(x)dx$$

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

(3) Cotes 公式的截断误差

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

3 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 $[a, b]$ 作 n 等分, 记 $h = (b-a)/n$, $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \cdots, n$.

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

3.1 复化梯形公式

对小区间上的积分 $\displaystyle\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$ 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

$$I(f)-T_n(f) = -\frac{h^3}{12}nf''(\eta) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta). \tag{3.1}$$

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

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

就有

$$|I(f)-T_n(f)| = \frac{b-a}{12}h^2|f''(\eta)| \le \frac{b-a}{12}M_2h^2 \le \varepsilon. \tag{3.2}$$

(3.2) 称为先验误差估计.

由 (3.1) 可得

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

当 h 很小时, 有

$$I(f)-T_n(f) \approx \frac{h^2}{12}[f'(a)-f'(b)]. \tag{3.3}$$

同样, 将 $[a,b]$ 进行 $2n$ 等分, 得

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 [f'(a) - f'(b)]. \tag{3.4}$$

由 (3.3) 和 (3.4) 可得

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

或

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{3}[T_{2n}(f) - T_n(f)]. \tag{3.5}$$

给定精度 ε, 当

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

就有

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

(3.5) 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:

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

3.2 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:

$$\begin{aligned}
& I(f) - S_n(f) \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} \left\{ \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx - \frac{h}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})] \right\} \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_k), \quad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}], \\
&= -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k), \quad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}]. \qquad (3.6)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} I(f)-S_n(f) &= -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 n f^{(4)}(\eta) \\ &= -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta\in(a,b). \end{aligned} \tag{3.7}$$

记 $M_4=\max\limits_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|$. 对给定的精度 ε, 选取 h 使得

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

就有

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

(3.7) 称为复化 Simpson 的先验误差估计. 由 (3.6) 可得

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

当 h 很小时有

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

从而有

$$
\begin{aligned}
I(f)-S_{2n}(f) &\approx \frac{1}{16}[I(f)-S_n(f)], \\
I(f)-S_{2n}(f) &\approx \frac{1}{15}[S_{2n}(f)-S_n(f)].
\end{aligned}
$$

对于给定精度 ε, 当

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

就有

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

3.3 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

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

当 h 很小时有

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

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

对于给定精度 ε, 当

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

就有

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

3.4 复化求积公式的阶数

定义 3.1 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, 复化梯形公式为 2 阶; 复化 Simpson 公式为 4 阶; 复化 Cotes 公式为 6 阶.

4 Romberg 求积法

由 (3.5) 有

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

上式也可以写成

$$I(f)\approx\frac{4}{3}T_{2n}(f)-\frac{1}{3}T_n(f). \tag{4.1}$$

(4.1) 说明其右端项可以近似积分 $I(f)$. 记

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

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

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

$$R_n(f) = \frac{64}{63}C_{2n}(f) - \frac{1}{63}C_n(f). \tag{4.2}$$

(4.2) 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 4.1 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 个节点.

5　Gauss 求积公式

例 5.1　用梯形公式求积分 $\int_2^5 [2+(x-3)^2]dx$ 的近似值.

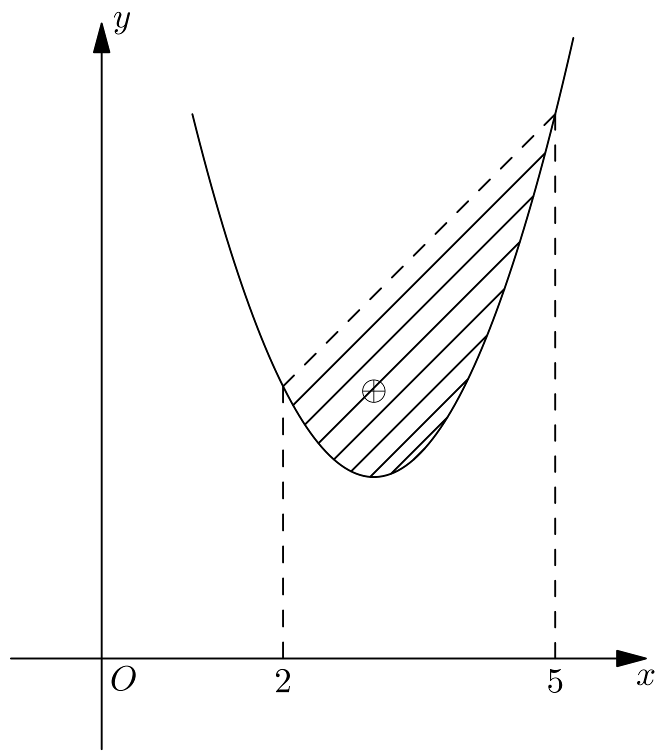

图 5.1　数值积分误差示意图

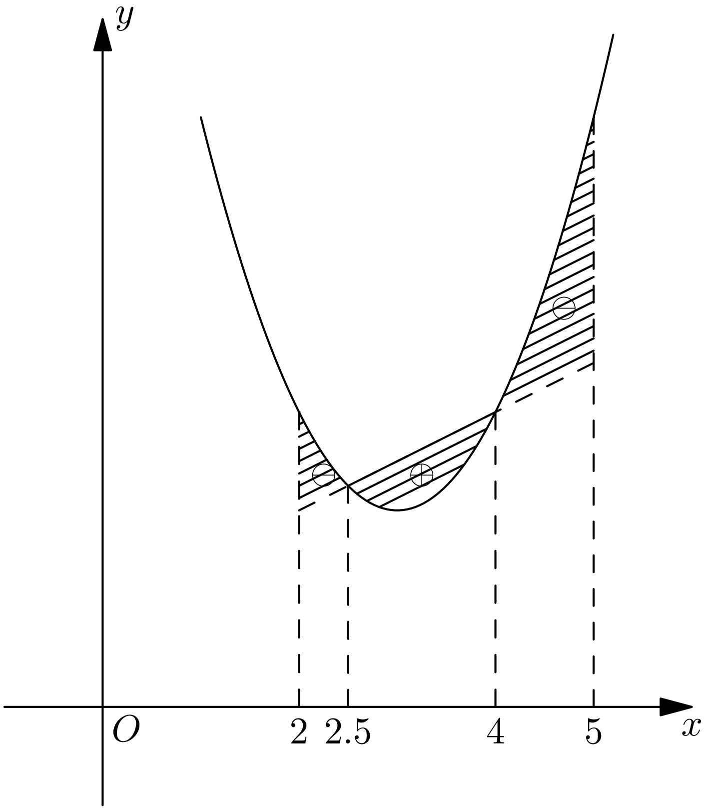

图 5.2　数值积分误差示意图

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 (简称 **Gauss**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 $(2n+1) \Longleftrightarrow$

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

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

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

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

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

证明 ” $\Longrightarrow$ ”: 设 $I_n(f)$ 是 Gauss 公式, 则其代数精度为 $(2n+1)$, 即对任意一个次数不超过 $(2n+1)$ 的多项式精确成立. 设 $p(x)$ 是任意一个次数不超过 n 的多项式, 则 $p(x)W_{n+1}(x)$ 是一个次数不超过 $(2n+1)$ 的多项式, 有

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

” $\Longleftarrow$ ”: 设对任意次数不超过 n 的多项式 $p(x)$, 有

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

设 $f(x)$ 是任意一个次数不超过 $(2n+1)$ 的多项式, 用 $W_{n+1}(x)$ 除 $f(x)$, 设得商 $s(x)$ 和余式 $r(x)$. 即有

$$f(x) = s(x)W_{n+1}(x) + r(x),$$

显然 $s(x), r(x)$ 都是次数不超过 n 的多项式. 因此有

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b s(x)W_{n+1}(x)dx + \int_a^b r(x)dx$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_a^b r(x)dx \quad (\text{由正交性条件}) \\
&= \sum_{k=0}^{n} A_k r(x_k) \quad (\text{由插值型求积公式性质}) \\
&= \sum_{k=0}^{n} A_k s(x_k) W_{n+1}(x_k) + \sum_{k=0}^{n} A_k r(x_k) \quad (W_{n+1}(x_k) = 0) \\
&= \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).
\end{aligned}
$$

这说明求积公式代数精度为 $(2n+1)$, 即它为 Gauss 公式.

5.1 正交多项式

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 $\boldsymbol{n}$ **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.

5.2 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

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

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, $t_0=-\dfrac{1}{\sqrt{3}}, t_1=\dfrac{1}{\sqrt{3}}, \tilde{A}_0=1, \tilde{A}_1=1$, 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

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

5.3 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 公式为

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

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

5.5 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 $A_k > 0(k = 0, 1, \cdots, n)$.

在利用求积公式 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 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 $\max_{0\le k\le n} |f(x_k) - \tilde{f}_k| < \delta$ 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.

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.

例 5.3　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 $I(f)-G(f)=\dfrac{1}{135}\left(\dfrac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\xi),\quad \xi\in(a,b)$;

(3) 构造对应的 2 点复化 Gauss 公式 $G_n(f)$.

6 数值微分

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

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

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

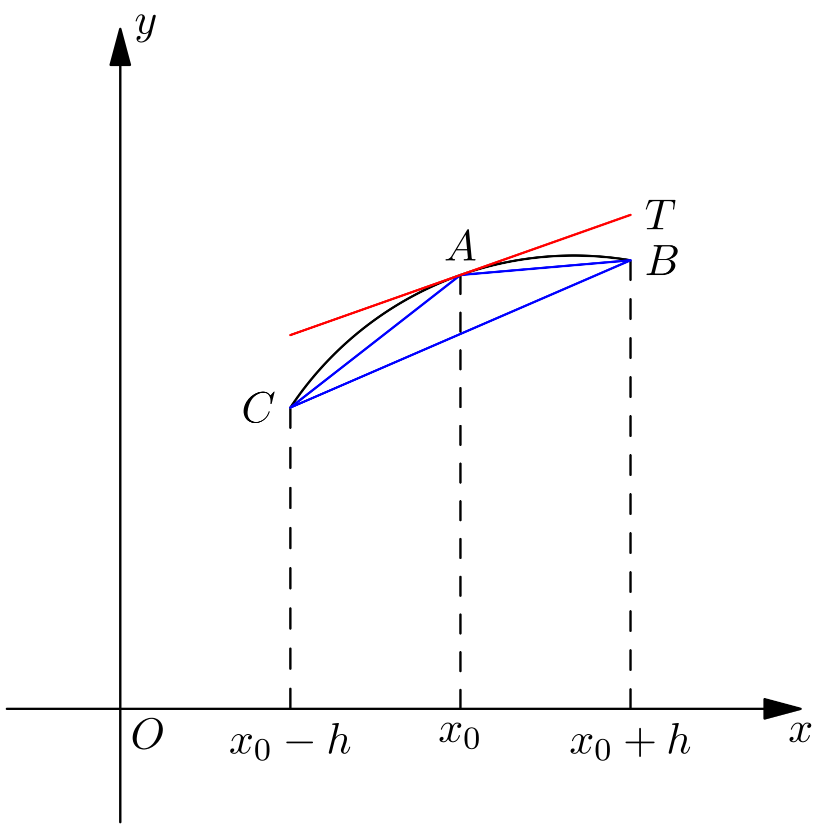

图 8.1　数值微分

7 习 题

p.253 $\sim$ 266

1(1),(3), 2(1), 3(1)(2), 6(1), 10, 12, 21.

上机题：用 Romberg 求积法计算积分

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{1+100x^2} dx$$

的近似值, 要求误差不超过 0.5×10^{-7}.