数值分析

第三章　数值积分

参考　李庆扬　王能超　易大义

《数值分析》　第 5 版　第 4 章

第三章 数值积分

4.0 引言

我们知道, 若函数 $f(x)$在区间[a, b]上连续且其原函数为 $F(x)$, 则可用**Newton-Leibnitz**公式

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

求定积分的值，**Newton-Leibnitz** 公式 无论在理论上还是在解决实际问题上都起了很大作用，但它并不能完全解决定积分的计算问题，因为积分学涉及的实际问题极为广泛，而且极其复杂，在实际计算中经常遇到以下三种情况：

(1) 被积函数 $f(x)$ 并不一定能够找到用初等函数的有限形式表示的原函数 $F(x)$，例如：

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \quad 和 \quad \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

Newton-Leibnitz 公式就无能为力了

(2) 还有被积函数 $f(x)$ 并不复杂，例如函数

$$f(x) = x^2\sqrt{2x^2+3}$$

但积分后其表达式却很复杂，积分后其原函数 $F(x)$为：

$$F(x) = \frac{1}{4}x^2\sqrt{2x^2+3} + \frac{3}{16}x\sqrt{2x^2+3} - \frac{9}{16\sqrt{2}}\ln(\sqrt{2}x + x^2\sqrt{2x^2+3})$$

(3) 被积函数 $f(x)$ 没有具体的解析表达式, 其函数关系由表格或图形表示。

对于这些情况， 要计算积分的准确值都是十分困难的。 由此可见， 通过原函数来计算积分有它的局限性， 因而研究一种新的积分方法来解决 **Newton-Leibniz** 公式所不能或很难解决的积分问题，这时需要用数值解法来建立积分的近似计算方法。

将积分区间细分, 在每一个小区间内用简单函数代替复杂函数进行积分，这就是数值积分的思想，用代数插值多项式去代替被积函数 $f(x)$ 进行积分是本章讨论数值积分的主要内容。

4.1 数值积分概述

4.1.1 数值积分的基本思想

积分值 $I=\int_a^b f(x)dx$ 在几何上可以解释为由 $x=a, x=b$, y=0 以及 $y=f(x)$ 这四条边所围成的曲边梯形面积。如图4-1所示，而这个面积之所以难于计算是因为它有一条曲边 $y=f(x)$

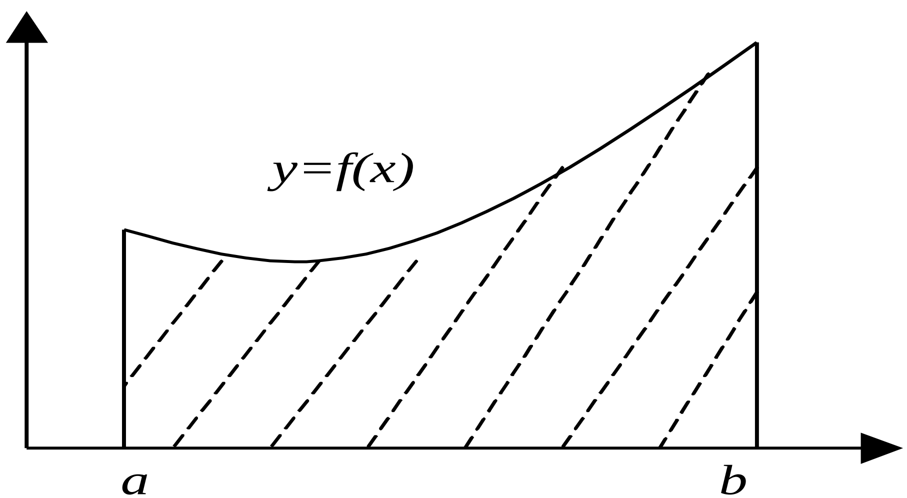


图4-1 数值积分的几何意义

建立数值积分公式的途径比较多，其中最常用的有两种：

即积分中值定理的方法（三种不同的构造平均高度的方法）以及先用一个简单的函数取近似被积函数，然后尽量将这个近似函数选取为多项式的函数，（因为多项式积分比较容易），然后对这个多项式进行积分。

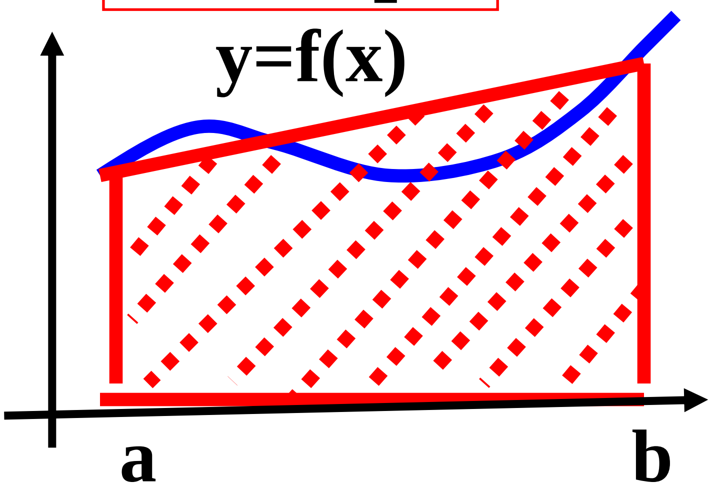
（1）由积分中值定理可知，对于连续函数 $f(x)$，在积分区间[a, b]内存在一点 ξ，使得

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\xi) \qquad \xi \in [a,b]}$$

即所求的曲边梯形的面积恰好等于底为(b-a)，高为 $f(\xi)$ 的矩形面积。但是点 ξ 的具体位置一般是未知的，因而 $f(\xi)$ 的值也是未知的，称 $f(\xi)$ 为 $f(x)$ 在区间[a, b]上的平均高度。那么只要对平均高度 $f(\xi)$ 提供一种算法，相应地就获得一种数值求积方法

按照这种思想，可构造出一些求积分值的近似公式。

例如 $f(\xi)$ 分别取 $\boxed{f(\xi)\approx\frac{f(a)+f(b)}{2}}$ 和 $\boxed{f(\xi)\approx f(\frac{a+b}{2})}$



则分别得到梯形公式和梯中矩形公式。

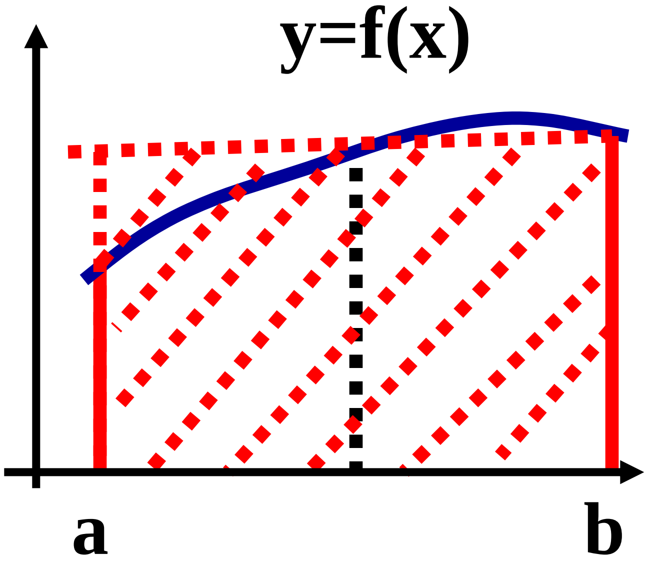
即将整个区间近似为一个梯形

① 梯形公式

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

将整个区间的中点取为矩形的高，来近似积分的值

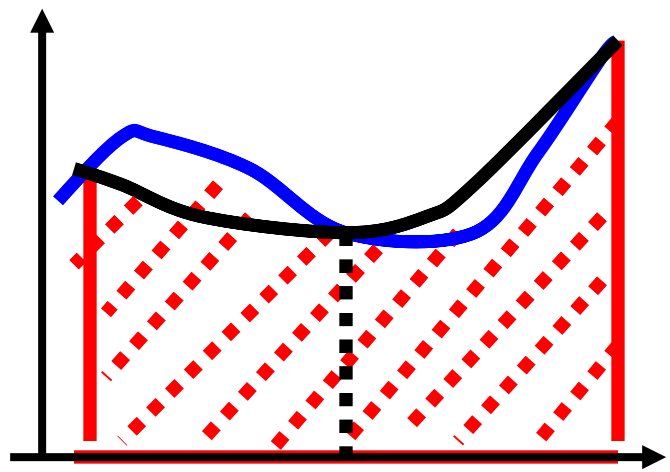
② 中矩形公式



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

③ Simpson公式

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



$f(a), f(b)$ 在这三个公式中，梯形公式把 $f(a), f(b)$ 的加权平均值 $\frac{1}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$ 作为平均高度的近似值而获得的一种数值积分方法。

中矩形公式把[a, b] 的中点处函数值 $f(\frac{a+b}{2})$ 作为平均高度 $f(\xi)$ 的近似值而获得的一种数值积分方法。

Simpson公式 是以函数 $f(x)$ 在 $a, b, (a+b)/2$ 这三点的函数值 $f(a), f(b), \quad f(\frac{a+b}{2})$ 的加权平均值 $\frac{1}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$ 作为平均高度 $f(\xi)$ 的近似值而获得的一种数值积分方法。

注意这里三个点的函数值的权重不同，中点处的权重占2/3

（2）先用某个简单函数 $\varphi(x)$ 近似逼近 $f(x)$, 用 $\varphi(x)$ 代替原被积函数 $f(x)$, 即 $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \varphi(x)dx$

以此构造数值算法。从数值计算的角度考虑, 函数 $\varphi(x)$ 应对 $f(x)$ 有充分的逼近程度, 并且容易计算其积分。由于多项式能很好地逼近连续函数, 且又容易计算积分, 因此将 $\varphi(x)$ 选取为插值多项式, 这样 $f(x)$ 的积分就可以用其插值多项式的积分来近似代替

4.1.2 插值求积公式

设已知 $f(x)$ 在节点 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$ 有函数值 $f(x_k)$, 作 n 次拉格朗日插值多项式

$$P(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)$$

式中 $$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}=\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}$$

这里 $$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

多项式 $P(x)$ 易于求积，所以可取 $\int_a^b P(x)dx$ 作为 $\int_a^b f(x)dx$ 的近似值，即

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

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

其中 $\boxed{A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx}$

称为求积系数。给出如下定义。

定义4.1 求积公式

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)} \qquad (4.1)$$

其系数 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ 时，则称求积公式为插值求积公式。

设插值求积公式的余项为 $R(f)$，由插值余项定理得

$$R(f)=\int_a^b[f(x)-P(x)]\,dx=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx$$

其实就是函数插值的余项的积分

其中 $\xi\in[a,b]$

由拉格朗日插值的余项可以得到若被插值的函数的n+1阶导数为0，则余项为0，因此插值函数和被插值函数相等，同时也可以通过另外一个方面来理解，即由拉格朗日插值可知，次数小于等于n次的函数是存在且唯一的，因此插值函数就是被插值函数。

当 $f(x)$ 是次数不高于 n 的多项式时，有 $f^{(n+1)}(x)=0$ $R(f)=0$，求积公式(4.1)能成为准确的等式。由于闭区间[a, b]上的连续函数可用多项式逼近，所以一个求积公式能对多大次数的多项式 $f(x)$ 成为准确等式，是衡量该公式的精确程度的重要指标，为此给出以下定义。

定义 （代数精度） 设求积公式（4.1）对于一切次数小于等于m的多项式

$$\boxed{f(x)=1, x, x^2, \cdots, x^m}$$

或 $$f(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_mx^m$$

是准确的，而对于次数为$m+1$的多项式是不准确的，则称该求积公式具有m次代数精度，简称代数精度

由定义可知，若求积公式（4.1）的代数精度为n，则求积系数A_k应满足线性方程组：

当不同次数的被积函数的求积结果是准确时便有右边的不同的式子

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

这是当多项式的次数为0时即f（x）=1时式4.1的结果。

同理，以下为当f(x)分别为上一页的红框中的式子时的结果。即f(x)为不同阶次的多项式。

这是关于 A_k 的线性方程组，其系数矩阵

这个方程组以及他的解的意思就是，若一个插值求积公式的代数精度为n，此时若用一个2次多项式拟合被积函数能够得到精确解，若换一个被积函数若也能够利用二次函数拟合得到精确解，则这两个二次函数一定是一样的。

$$
\begin{bmatrix}
1 & 1 & \cdots & 1 \\
x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\
x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n
\end{bmatrix}
$$

是范得蒙矩阵，当 $x_k\ (k = 0,1,\cdots,n)$ 互异时非奇异，故 A_k 有唯一解。

定理4.1 $n+1$个节点的求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$为插值型求积公式的充要条件是公式至少具有$n$次代数精度。

证:必要性 设$n+1$个节点的求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$为插值型求积公式, 求积系数为

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

又 $f(x)=P(x)+R(x)$ 当 $f(x)$ 为不高于n次的多项式时, $f(x)=P(x)$, 其余项 $R(f)=0$。因而这时求积公式至少具有n次代数精度。

充分性 若求积公式至少具有 n 次代数精度, 则对 n 次多项式

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \qquad (k = 0,1,\cdots,n)$$

精确成立, 即

$$\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j) \quad \text{而} \quad l_k(x_j) = \delta_{kj} = \begin{cases} 1 & k = j \\ 0 & k \neq j \end{cases}$$

取 $f(x) = l_k(x)$ 时

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j)$$

所以有 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ ，即求积公式为插值型求积公式

例4.1 设积分区间[a, b]为[0, 2]，取时

$$f(x)=1, x, x^2, x^3, x^4, e^x$$ 时,

分别用梯形和辛卜生公式

$$\int_0^2 f(x)dx \approx f(0)+f(2)$$

$$\int_0^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}\left[f(0)+4f(1)+f(2)\right]$$

计算其积分结果并与准确值进行比较

解:梯形公式和辛卜生的计算结果与准确值比较如下表所示

$f(x)$	1	x	x^2	x^3	x^4	e^x
准确值	2	2	2.67	4	6.40	6.389
梯形公式计算值	2	2	4	8	16	8.389
辛卜生公式计算值	2	2	2.67	4	6.67	6.421

从表中可以看出, 当 f(x)是 x^2, x^3, x^4, e^x 时, 辛卜生公式比梯形公式更精确

一般说来，代数精度越高，求积公式越精确。梯形公式和中矩形公式具有1次代数精度，辛卜生公式有3次代数精度。下面以梯形公式为例进行验证

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

取 $f(x)=1$ 时，$\int_a^b 1dx = b-a,\quad \frac{b-a}{2}(1+1)=b-a$ 两端相等

取 $f(x)=x$ 时,

$$\int_a^b xdx = \frac{1}{2}(b^2-a^2),\quad \frac{b-a}{2}(a+b)=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$$ 两端相等

取 $f(x)=x^2$ 时,

$$\int_a^b x^2dx = \frac{1}{3}(b^3-a^3),\ \frac{b-a}{2}(a^2+b^2)=\frac{1}{2}(a^2+b^2)(b-a)$$

两端不相等　　所以梯形公式只有1次代数精度。

例4.2 试确定一个至少具有2次代数精度的公式

$$\int_0^4 f(x)dx \approx Af(0)+Bf(1)+Cf(3)$$

解：要使公式具有2次代数精度，则对f(x)=1, x, x^2 求积公式准确成立，即得如下方程组。

$$\begin{cases} A+B+C=4 \\ B+3C=8 \\ B+9C=\dfrac{64}{3} \end{cases}$$

解之得， $A=\dfrac{4}{9}$, $B=\dfrac{4}{3}$, $C=\dfrac{20}{9}$

所求公式为：$\int_0^4 f(x)dx \approx \dfrac{1}{9}\left[4f(0)+12f(1)+20f(3)\right]$

例4.3 试确定求积系数 A, B, C 使

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx Af(-1) + Bf(0) + Cf(1)$$

具有最高的代数精度

解: 分别取 $f(x) = 1, x, x^2$, 使求积公式准确成立, 即得如下方程组。

$$\begin{cases} A + B + C = 2 \\ -A \quad\quad + C = 0 \\ A \quad\quad + C = \dfrac{2}{3} \end{cases}$$

所得求积公式为: $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1)$

对于 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 都准确成立, 对于 $f(x) = x^4$ 就不准确了，所以此求积公式 3 次代数精度。

由于n+1节点的插值求积公式至少有n次代数精度，所以构造求积公式后应该验算所构造求积公式的代数精度。例如 插值求积公式

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

有三个节点至少有2次代数精度，是否有3次代数精度呢？将 $f(x)=x^3$ 代入公式两端，左端和右端都等于 $(b^4-a^4)/4$，公式两端严格相等，再将 $f(x)=x^4$ 代入公式两端，两端不相等，所以该求积公式具有3次代数精度。

例4.4 考察求积公式

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

的代数精度

可以验证, 对于f(x)=1, x 时公式两端相等, 再将

f(x)=x^2 代入公式 左端 $\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{1}{3}x^3 \Big|_{-1}^{1} = \frac{2}{3}$

右端 $\frac{1}{2}[f(-1)+2f(0)+f(1)] = \frac{1}{2}[1+1] = 1$

两端不相等, 所以该求积公式具有 1 次代数精度.

三个节点不一定具有2次代数精度,

因为不是插值型的

例4.5 给定求积公式如下：

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{3}\left[2f\left(\frac{1}{4}\right)-f\left(\frac{1}{2}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)\right]$$

试证此求积公式是插值型的求积公式

证: 设 $x_0=\frac{1}{4}, x_1=\frac{1}{2}, x_2=\frac{3}{4}$, 则以这三点为插值节点的 Lagrange 插值基函数为

$$l_0(x)=\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)/\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\right)=8\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)$$

$$l_1(x)=\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)/\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{3}{4}\right)=-16\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)$$

$$l_2(x)=\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)/\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{4}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\right)=8\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)$$

$$\int_0^1 l_0(x)dx = \int_0^1 8\left(x-\frac{1}{2}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)dx = 8\int_0^1\left(x^2-\frac{5}{4}x+\frac{3}{8}\right)dx$$

$$= 8\left(\frac{1}{3}-\frac{5}{4}\times\frac{1}{2}+\frac{3}{8}\right) = 8\left(\frac{1}{3}-\frac{2}{8}\right) = \frac{8}{3}-2 = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^1 l_1(x)dx = \int_0^1 (-16)\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{3}{4}\right)dx = (-16)\int_0^1\left(x^2-x+\frac{3}{16}\right)dx$$

$$= (-16)\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2}+\frac{3}{16}\right) = (-16)\left(-\frac{1}{6}+\frac{3}{16}\right) = \frac{16}{6}-3 = -\frac{1}{3}$$

$$\int_0^1 l_2(x)dx = \int_0^1 8\left(x-\frac{1}{4}\right)\left(x-\frac{1}{2}\right)dx = 8\int_0^1\left(x^2-\frac{3}{4}x+\frac{1}{8}\right)dx$$

$$= 8\left(\frac{1}{3}-\frac{3}{4}\times\frac{1}{2}+\frac{1}{8}\right) = \frac{8}{3}-2 = \frac{2}{3}$$

插值型求积公式为

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{1}{3}\left[2f\left(\frac{1}{4}\right)-f\left(\frac{1}{2}\right)+2f\left(\frac{3}{4}\right)\right]$$

由插值型求积公式的定义知，所给的求积公式是插值型求积公式。

例4.6 求证

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{2}\left[f(-1) + 2f(0) + f(1)\right]$$

不是插值型的

证明: 设 $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$,

$A_0 = 1/2$, $A_1 = 1$, $A_2 = 1/2$

则以这三点为插值节点的 Lagrange 插值基函数为

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}=\frac{x(x-1)}{-1(-1-1)}=\frac{1}{2}x(x-1)$$

$$l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}=\frac{(x+1)(x-1)}{1(-1)}=-(x^2-1)$$

$$l_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=\frac{x(x+1)}{(1+1)}=\frac{1}{2}x(x+1)$$

$$\int_{-1}^{1}l_0(x)dx=\int_{-1}^{1}(\frac{1}{2}x^2-\frac{1}{2}x)dx=\frac{1}{2}\times\frac{2}{3}-\frac{1}{2}\times 0=\frac{1}{3}$$

$$\int_{-1}^{1}l_1(x)dx=\int_{-1}^{1}(1-x^2)dx=2-\frac{2}{3}=\frac{4}{3}$$

$$\int_{-1}^{1}l_2(x)dx=\int_{-1}^{1}(\frac{1}{2}x^2+\frac{1}{2}x)dx=\frac{1}{2}\times\frac{2}{3}+\frac{1}{2}\times 0=\frac{1}{3}$$

$\because A_k = \int_a^b l_k(x)dx \qquad k = 0,1,2$

$\therefore$ 插值型求积系数为

$A_0 = \frac{1}{3},\ A_1 = \frac{4}{3},\ A_2 = \frac{1}{3}$

与原求积公式系数不一致

（原求积公式系数$A_0 = \frac{1}{2}, A_1 = 1, A_2 = \frac{1}{2}$

若与原求积系数一致，则是插值型的）

$\therefore$ 原求积公式不是插值型的。

证毕。

例4.7 给定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx A_{-1}f(-h)+A_0 f(0)+A_1 f(h)$$

试确定求积系数 A_{-1}, A_0, A_1 使其有尽可能高的代数精度，并指出其代数精度

解： 令求积公式对 $f(x)=1,\ x,\ x^2$ 准确成立，则有

解之得 $A_0 = -\frac{4}{3}h, A_1 = A_{-1} = -\frac{8}{3}h$

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx \approx \frac{4}{3}h\left[2f(-h) - f(0) + 2f(h)\right]$$

其代数精度至少为 2, 将 $f(x) = x^3$ 代入求积公式两端相等, 而将 $f(x) = x^4$ 代入求积公式两端不相等, 所以其代数精度为 3 次

例 4.8 确定求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_1 f(a) + A_2 f(b) + A_3 f'(a)$$

使其具有尽可能高的代数精度

解： 不妨设 $a=0,\ b=h,\ b-a=h$ 设所求公式的代数精度为 2，则当 $f(x)=1, x, x^2$ 时公式变成等式, 即

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = h \\ A_2 h + A_3 = \dfrac{h^2}{2} \\ A_2 h^2 = \dfrac{1}{3} h^3 \end{cases}$$

解之得：

$$A_2=\frac{h}{3}, A_3=\frac{h^2}{6}, A_1=\frac{2}{3}h$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left[4f(a)+2f(b)+hf'(a)\right]$$

其中 h=b-a， 令 $f(x)=x^3$ 代入上式， 两端不等，说明求积公式只有 2 次代数精度。

构造插值求积公式有如下特点：

(1) 复杂函数 $f(x)$ 的积分转化为计算多项式的积分

(2) 求积系数 A_k 只与积分区间及节点 x_k 有关，而与被积函数 $f(x)$无关，可以不管 $f(x)$如何，预先算出 A_k 的值

(3) n+1个节点的插值求积公式至少具有n次代数精度

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$$

(4) 求积系数之和

可用此检验计算求积系数的正确性

例 4.9 求证当节点为n+1个时, 插值求积系数之和为

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$$

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

当节点为$n+1$个时，插值求积公式有n次代数精度, 对于f(x)=x^n, 上式严格相等, 所以取f(x)=1时，上式也严格相等，因此有

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b 1dx = \sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$$

$$\therefore \sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$$

即$A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a$

构造插值求积公式的步骤

(1)　在积分区间[a, b]上选取节点

(2)　求出 $f(x_k)$ 及利用 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

或解关于A_k的线性方程组求出A_k，这样

就得到了

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

(3)　利用 $f(x) = x^n, \ldots$　验算代数精度

例4.10 对 $\int_0^3 f(x)dx$ 构造一个至少有3次代数精度的求积公式

因为求积公式有4个节点，所以至少具有3次代数精度，只需将 f(x)=x^4 代入来验证其代数精度。将 f(x)=x^4 代入两端不相等，所以只有3次代数精度

确定求积系数A_k(k=0, 1, 2, 3)，利用求积系数公式

$$A_0=\int_0^3\frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)}dx=-\frac{1}{6}\int_0^3(x^3-6x^2+11x-6)dx=\frac{3}{8}$$

$$A_1=\int_0^3\frac{(x-0)(x-2)(x-3)}{(1-0)(1-2)(1-3)}dx=\frac{9}{8},A_2=\frac{9}{8},A_3=\frac{3}{8}$$

$$\therefore\int_0^3 f(x)dx\approx\frac{3}{8}\left[f(0)+3f(1)+3f(2)+f(3)\right]$$

4.1.5、求积公式的收敛性和稳定性

一般地，求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f_k, \tag{1.3}$$

通常称为**机械**求积**公式**.

插值型求积公式它的余项为

$$R[f] = \int_a^b [f(x) - L_n(x)]\mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\mathrm{d}x. \tag{1.7}$$

定义2 在求积公式(1.3)中, 若

$$\lim_{\substack{n\to\infty \\ h\to 0}} \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x,$$

其中 $h = \max\limits_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1})$, 则称求积公式(1.3)是收敛的.

设$f(x_k)$有误差δ_k，即$f(x_k)-\tilde{f}_k=\delta_k\ (k=0,1,\cdots,n)$，则有

$$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right|.$$

定义3 若$\forall\varepsilon>0,\exists\delta>0$,只要$\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|\le\delta\ (k=0,\cdots,n)$, 就有

$$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}(x_k)]\right|\le\varepsilon,$$

则称求积公式(1.3)是稳定的.

定理2 若求积公式(1.3)中系数$A_k>0(0,1,\cdots,n)$,则求积公式是稳定的.

这是因为，当$\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|\le\delta\ (k=0,\cdots,n)$ 时,有

$$|R_n|=\sum_{k=0}^{n}A_k\left|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)\right|\le\delta\sum_{k=0}^{n}A_k=(b-a)\delta.$$

4.2 牛顿—柯特斯(Newton-Cotes)求积公式

在插值求积公式

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

中，当所取节点是等距时称为牛顿-柯特斯公式

其中　　插值多项式 $P(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)$

求积系数 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

这里 $l_k(x)$ 是插值基函数。即有

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} dx$$

将积分区间[a, b]划分为n等分, 步长 $h=\frac{b-a}{n}$

求积节点为 $x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,n)$

为了计算系数　　　由于 $x_k-x_i=(k-i)h$, 所以

$$(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)=(-1)^{n-k}k!(n-k)!h^n$$

作变量代换 $x_k=a+th \quad x\in[a,b]$ 　当 $t\in[0,n]$ 时,

可得

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b\prod_{\substack{i=0\\i\neq k}}^{n}\frac{x-x_i}{x_k-x_i}dx$$

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

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

引进记号

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

(k=0,1…,n)

则

$$A_k=(b-a)C_k^{(n)}\qquad (k=0,1…,n)$$

代入插值求积公式(4. 1)有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)$$

称为牛顿-柯特斯求积公式, $C_k^{(n)}$ 称为柯特斯系数

容易验证 $\sum_{k=0}^{n} C_k = 1$

$\because \quad C_k = \frac{1}{b-a} A_k \qquad A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

$$\therefore \quad \sum_{k=0}^{n} C_k = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{b-a} \int_a^b l_k(x)dx$$

$$= \frac{1}{b-a} \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x)dx = \frac{1}{b-a} \int_a^b 1dx = 1$$

显然，C_k是不依赖于积分区间[a, b]以及被积函数f(x)的常数, 只要给出 n, 就可以算出柯特斯系数, 譬如当 n=1 时

$$C_0 = \frac{-1}{1 \cdot 0! \cdot 1!} \int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2} \qquad C_1 = \int_0^1 tdt = \frac{1}{2}$$

当 n=2 时

$$C_0 = \frac{(-1)^2}{2\cdot 0!\cdot 2!}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6}$$

$$C_1 = \frac{(-1)^1}{2\cdot 1!\cdot 1!}\int_0^2 t(t-2)dt = \frac{2}{3}$$

$$C_2 = \frac{(-1)^0}{2\cdot 2!\cdot 0!}\int_0^2 t(t-1)dt = \frac{1}{6}$$

P_{104} 表 4-1 给出了 n 从 1～8 的柯特斯系数。

当 n = 8 时，出现了负系数，从而影响稳定性和收敛性，因此实用的只是低阶公式。

Newton-Cotes公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j)$$

- 柯特斯系数

n							
1	1/2	1/2					
2	1/6	4/6	1/6				
3	1/8	3/8	3/8	1/8			
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90		
5	…	…	…	…	…	…	

下面分别考虑几种特殊请况。

几个低阶求积公式

在牛顿-柯特斯求积公式中n=1, 2, 4时，就分别得到下面的梯形公式、辛卜生公式和柯特斯公式。

（1）梯形公式

当 n=1 时，牛顿-柯特斯公式就是梯形公式

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

定理4.2（梯形公式的误差）设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上具有连续的二阶导数，则梯形公式的误差（余项）为

$$R_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta) \qquad \eta \in (a,b)$$

证: 由插值型求积公式的余项 $R_n(f)=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx$

其中 $\xi\in(a,b),\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

可知梯形公式的误差为

$$R_1(f)=\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx$$

由于(x-a)(x-b)在[a, b]中不变号, $f''(\xi)$ 在[a, b]上连续, 根据高等数学中的积分中值定理 , 在[a, b]上存在一点η , 使

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

因此 $$R_1(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\qquad \eta\in(a,b)$$

（2） 辛卜生公式

当 n=2时，牛顿-柯特斯公式就是辛卜生公式（或称抛物线公式）

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

定理4.3（辛卜生公式的误差）设在[a, b]上具有连续的四阶导数，则辛卜生求积公式的误差为

$$R_2(f) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{(4)}(\eta) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

定理证明从略。

（3）**柯特斯公式**

当 n=4 时，牛顿–柯特斯公式为

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

定理4.4（柯特斯公式的误差）设在[a,b]上具有连续的 6 阶导数，则柯特斯求积公式的误差为

$$R_4(f) = -\frac{8}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^7 f^{(6)}(\eta) \qquad \eta\in(a,b)$$

定理的证明从略。

例4.11 分别用梯形公式、辛卜生公式和柯特斯公式计算定积分 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\mathrm{d}x$ 的近似值（计算结果取5位有效数字）

（1） 用梯形公式计算

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\mathrm{d}x \approx \frac{1-0.5}{2}[f(0.5)+f(1)] = 0.25\times[0.70711+1] = 0.4267767 = 0.426777$$

（2） 用辛卜生公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\mathrm{d}x \approx \frac{1-0.5}{6}[\sqrt{0.5}+4\times\sqrt{(0.5+1)/2}+\sqrt{1}]$$

$$=\frac{1}{12}\times[0.70711+4\times0.86603+1] = 0.43093403 = 0.43093$$

(3)　用柯特斯公式计算，系数为

$$\frac{7}{90},\frac{32}{90},\frac{12}{90},\frac{32}{90},\frac{7}{90}$$

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\mathrm{d}x \approx \frac{1-0.5}{90}[7\times\sqrt{0.5}+32\times\sqrt{0.625}+12\times\sqrt{0.75}+32\times\sqrt{0.875}+7\times\sqrt{1}]$$

$$\frac{1}{180}\times[4.94975+25.29822+10.39223+29.93326+7]=0.43096$$

积分的准确值为

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\mathrm{d}x=\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\Big|_{0.5}^{1}=0.43096441$$

可见，三个求积公式的精度逐渐提高。

例4. 12 用辛卜生公式和柯特斯公式计算定积分

$$\int_1^3 (x^3 - 2x^2 + 7x - 5)\mathrm{d}x$$

的近似值, 并估计其误差(计算结果取5位小数)

解: 辛卜生公式

$$S \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] = \frac{3-1}{6}[1 + 4\times 9 + 25] = \frac{62}{3} = 20\frac{2}{3}$$

由于 $f(x) = x^3 - 2x^2 + 7x - 5$ $\quad f^{(4)}(x) = 0$

由辛卜生公式余项

$$R(f) = \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \qquad \eta \in [a,b]$$

知其误差为 $R(f) = 0$

解: 柯特斯公式

$$C \approx \frac{3-1}{90}\left[7f(1)+32f(1.5)+12f(2)+32f(2.5)+7f(3)\right]$$

$$=\frac{1}{45}\left[7+32\times\frac{35}{8}+12\times 9+32\times\frac{125}{8}+7\times 9\right]=20\frac{2}{3}$$

知其误差为 $R(f)=0$

该定积分的准确值 $I=20\frac{2}{3}$，这个例子告诉我们，对于同一个积分，当n≥2时，公式却是精确的，这是由于辛卜生公式具有三次代数精度，柯特斯公式具有五次代数精度，它们对被积函数为三次多项式当然是精确成立的。

4.3复化求积公式

由梯形、辛卜生和柯特斯求积公式余项可知，随着求积节点数的增多，对应公式的精度也会相应提高。但由于n≥8时的牛顿—柯特斯求积公式开始出现负值的柯特斯系数。根据误差理论的分析研究，当积分公式出现负系数时，可能导致舍入误差增大，并且往往难以估计。因此不能用增加求积节点数的方法来提高计算精度。在实际应用中，通常将积分区间分成若干个小区间，在每个小区间上采用低阶求积公式，然后把所有小区间上的计算结果加起来得到整个区间上的求积公式，这就是复化求积公式的基本思想。常用的复化求积公式有复化梯形公式和复化辛卜生公式。

4.3.1 复化梯形公式及其误差

将积分区间[a, b]划分为n等分, 步长 $h=\frac{b-a}{n}$

求积节点为 $x_k = a + kh \quad (k = 0,1,\cdots,n)$ 在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}] \quad (k = 0,1,\cdots,n-1)$ 上应用梯形公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

求出积分值 I_k 然后将它们累加求和, 用 $\sum_{k=0}^{n-1} I_k$ 作为所求积分 I 的近似值。

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

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

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

记

$$T_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right] \qquad (4.5)$$

我们称(4.5)式为复化梯形公式。

当 f(x)在[a, b]上有连续的二阶导数,在子区间 $[x_k, x_{k+1}]$上梯形公式的余项已知为

$$R_{T_k} = -\frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \qquad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}]$$

在[a, b]上的余项

$$R_T = \sum_{k=0}^{n-1} R_{T_k} = \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \right]$$

设 $f''(x)$ 在[a, b]上连续, 根据连续函数的介值定理知,
存在 $\eta \in [a,b]$，使

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) = f''(\eta) \qquad \eta \in [a,b]$$

因此, 余项

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

复化梯形求积算法实现

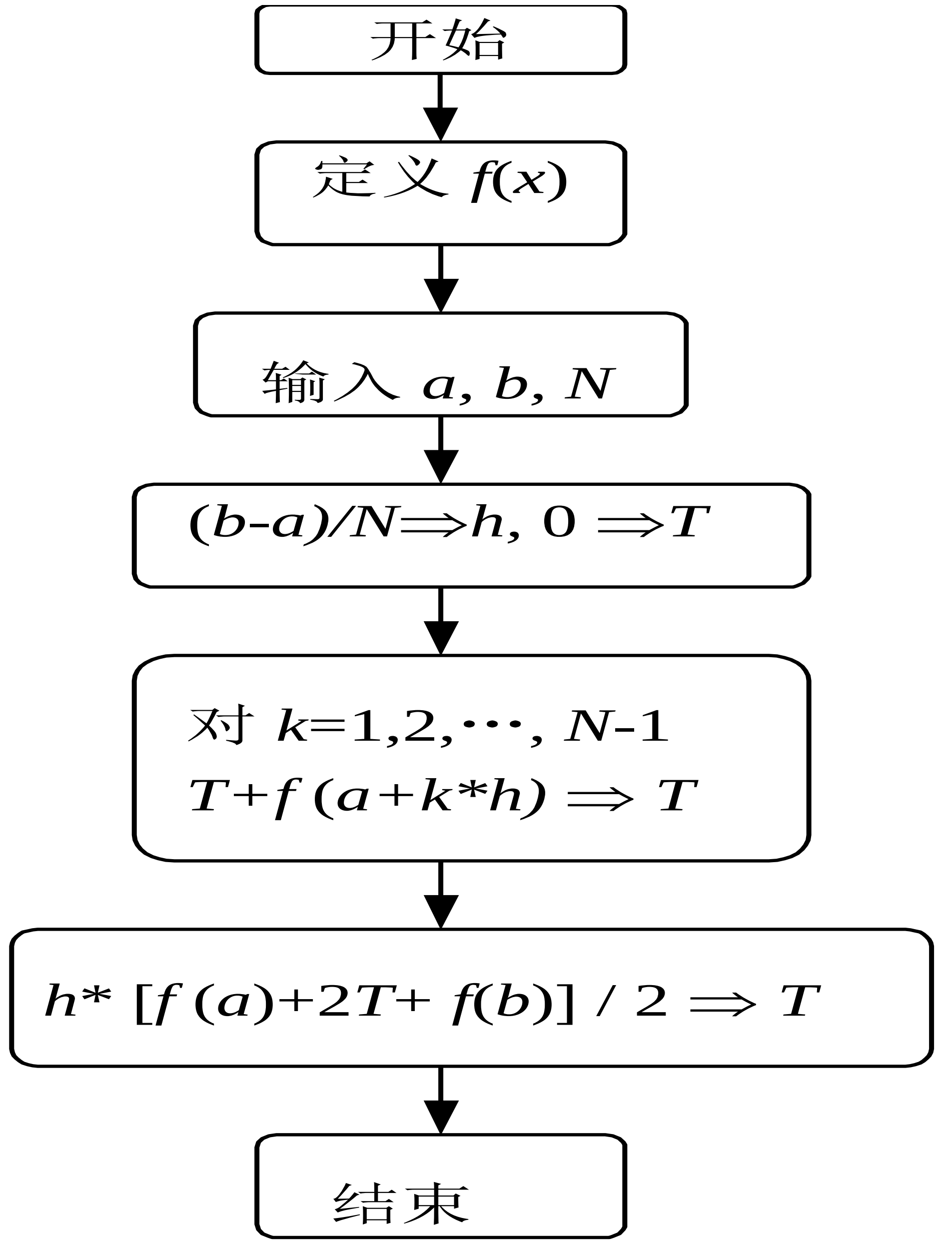
（1）复化梯形公式计算步骤

① 确定步长 h=(b-a)/N（ N 为等分数 ）

② 对k=1, 2, …, N，计算T=T+f(a +kh)

③ T= h[f(a)+ 2T + f(b)]/2

（2）复化梯形公式的流程图



4.3.2 复化辛卜生公式及其误差

将积分区间[a, b]划分为 n 等分, 记子区间$[x_k, x_{k+1}]$的中点为 $x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{1}{2}h$ 在每个小区间上应用辛卜生公式，则有

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right]$$

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

记 $$S_n = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \qquad (4.6)$$

称为复化辛卜生公式

类似于复化梯形公式余项的讨论，复化辛卜生公式（4.6）的求积余项为

$$R_s = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta) \quad \eta \in [a,b]$$

如果把每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 四等分, 内分点依次记 $x_{k+\frac{1}{4}}, x_{k+\frac{1}{2}}, x_{k+\frac{3}{4}}$ 同理可得复化柯特斯公式

$$C_n = \frac{h}{90}\left[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)\right]$$

求积余项为 $R_c = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \quad \eta \in [a,b]$

复化求积公式的余项表明，只要被积函数发f(x)所涉及的各阶导数在[a, b]上连续，那么复化梯形公式、复化辛卜生公式与复化柯特斯公式所得近似值 T_n, S_n, C_n 的余项和步长的关系依次为 $O(h^2)$ 、$O(h^4)$ $O(h^6)$。因此当 $h \to 0$ （即 $n \to \infty$ ）时，T_n, S_n, C_n 都收敛于积分真值，且收敛速度一个比一个快。

复化辛卜生求积算法实现

（1）复化辛卜生公式计算步骤

① 确定步长$h=(b-a)/N$，$S_1=f(a+h/2)$，$S_2=0$

（N 为等分数）

② 对$k=1,2,\cdots,N-1$，计算

$S_1= S_1+f(a+kh+h/2)$，$S_2= S_2+f(a+kh)$

③ $S = h[f(a)+4S_1+2S_2+f(b)]/6$

（2）复化辛卜生公式流程图

开始

↓

定义 $f(x)$

↓

输入 a, b, N

↓

$(b-a)/N \Rightarrow h,\quad a+h/2 \Rightarrow x$

$f(x) \Rightarrow S_1,\quad 0 \Rightarrow S_2$

↓

对 $k=1,2,\cdots,N-1$

$S_1 + f(a+k*h+h/2) \Rightarrow S_1$

$S_2 + f(a+k*h) \Rightarrow S_2$

↓

$h*[f(a)+4S_1+2S_2+f(b)]/6 \Rightarrow S_2$

↓

结束

例4. 13 依次用n=8的复化梯形公式、n=4的复化辛卜生公式计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$

解：首先计算出所需各节点的函数值，n=8 时，

$$h=\frac{1}{8}=0.125$$

由复化梯形公式(4. 5)可得如下计算公式：

$$T_8=\frac{1}{16}\Big[f(0)+2f(0.125)+2f(0.25)+2f(0.375)+2f(0.5)$$
$$+2f(0.625)+2f(0.75)+2f(0.875)+f(1)\Big]$$
$$=0.9456909$$

由复化辛卜生公式(4.6)可得如下计算公式

$$S_4 = \frac{1}{24}\Big[f(0) + f(1) + 2(f(0.25) + f(0.5) + f(0.75)) + 4(f(0.125) + f(0.375) + f(0.625) + f(0.875))\Big] = 0.9460832$$

（积分准确值 I=0.9460831）

这两种方法都需要提供9个点上的函数值，计算量基本相同，然而精度却差别较大，同积分的准确值（是指每一位数字都是有效数字的积分值）比较，复化梯形法只有两位有效数字(T_8=0.9456909)，而复化辛卜生法却有六位有效数字。

例4.14 用复化梯形公式计算定积分

$I=\int_0^1 e^x \mathrm{d}x$ 问区间$[0,1]$应分多少等份

才能使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$

解:取 $f(x)=e^x$, 则 $f''(x)=e^x$, 又区间长度 b−a=1，对

复化梯形公式有余项

$$\left|R_T(x)\right|=\left|-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)\right|\le\frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 e\le\frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

即 $n^2\ge\frac{e}{6}\times 10^5$, n≥212.85，取 n=213，即将区间

$[0,1]$分为 213 等份时，用复化梯形公式计算误差

不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$ 。

4.3.3　误差的事后估计与步长的自动选择

复化求积方法对于提高计算精度是行之有效的方法，但复化公式的一个主要缺点在于要先估计出步长。若步长太大，则难以保证计算精度，若步长太小，则计算量太大，并且积累误差也会增大。在实际计算中通常采用变步长的方法，即把步长逐次分半，直至达到某种精度为止。

变步长的梯形公式

变步长复化求积法的基本思想是在求积过程中，通过对计算结果精度的不断估计，逐步改变步长（逐次分半），直至满足精度要求为止。即按照给定的精度实现步长的自动选取。

设将积分区间[a, b]n 等分，即分成 n 个子区间，一共有 n+1 个节点，即 x=a+kh，k=0, 1, …，n，步长 $h=\frac{b-a}{n}$。对于某个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$，利用梯形公式计算积分近似值有

$$\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$

对整个区间[a, b]有

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

将子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 再二等份, 取其中点 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$ 作新节点, 此时区间数增加了一倍为 2n, 对某个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$, 利用复化梯形公式计算其积分近似值 。

$$\frac{h}{4}\left[f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right]$$

对整个区间[a, b]有

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

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

(4.7)式称为变步长梯形公式

比较 T_n 和 T_{2n} 有 $T_{2n} = \frac{T_n}{2} + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$ **(4.7)**

当把积分区间分成 n 等份，用复化梯形公式计算积分 I 的近似值 T_n 时，截断误差为

$$R_n = I - T_n = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\xi_n)$$

若把区间再分半为 $2n$ 等份，计算出定积分的近似值 T_{2n}，则截断误差为

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

当 $f''(x)$ 在区间[a, b]上变化不大时, 有 $f''(\xi_n) \approx f''(\xi_{2n})$

所以 $$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4}$$

可见, 当步长二分后误差将减至 $\frac{1}{4}$, 将上式移项整理, 可得验后误差估计式

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \qquad (4.8)$$

上式说明，只要二等份前后两个积分值 T_n 和 T_{2n} 相当接近，就可以保证计算结果 T_{2n} 的误差很小，使 T_{2n} 接近于积分值 I 。

4.3.4 变步长的梯形求积算法实现

（1）变步长的梯形求积法的计算步骤

① 变步长梯形求积法。它是以梯形求积公式为基础，逐步减少步长，按如下递推公式求二分后的梯形值

$$T_{2n}=\frac{T_n}{2}+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})$$

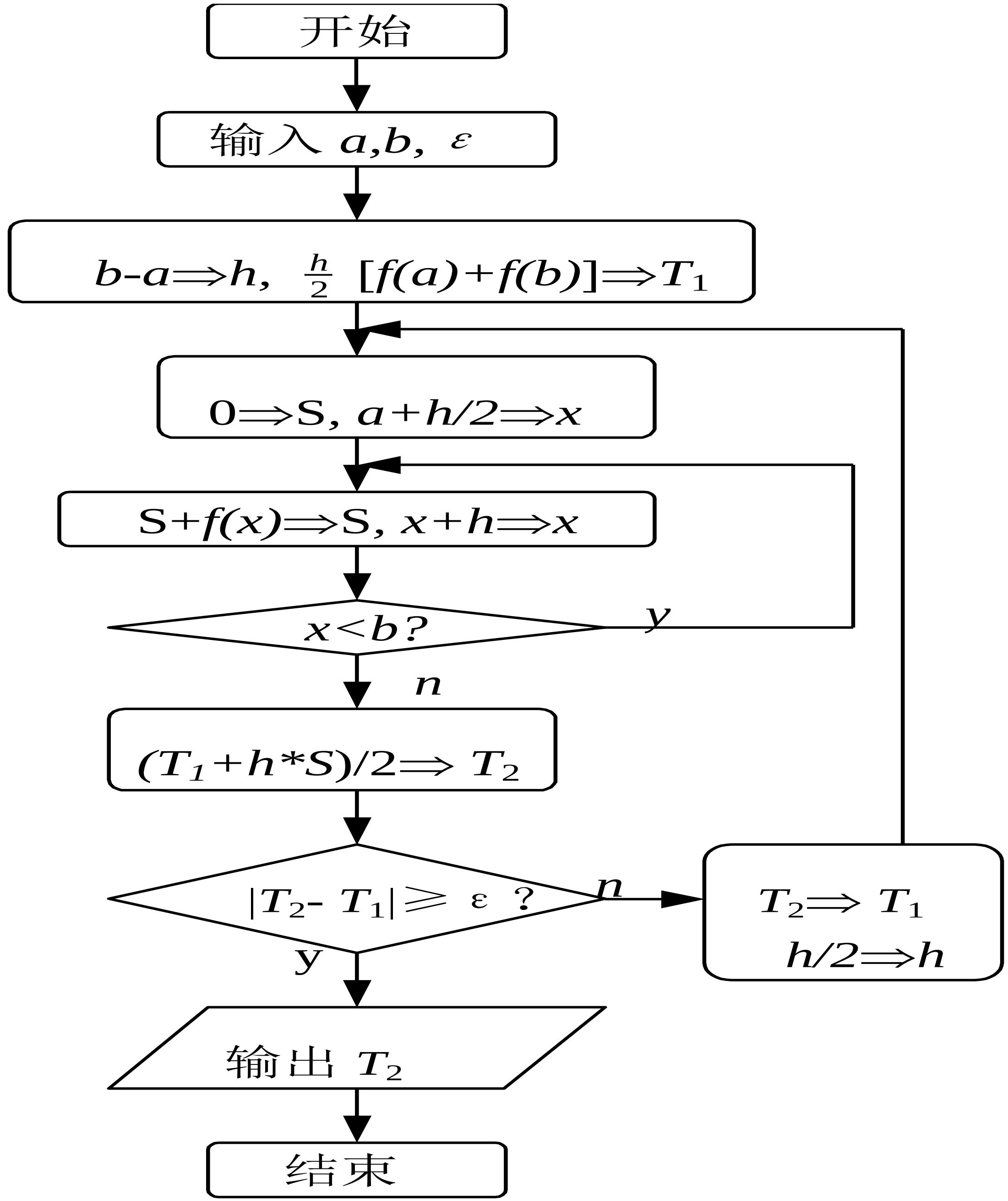
其中 T_n 和 T_{2n} 分别代表二等分前后的积分值

② 如果 $|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$，（ε 为给定的误差限 ）则 T_{2n} 作为积分的近似值, 否则继续进行二等分，即

$$\frac{h}{2}\Rightarrow h, \qquad T_{2n}\Rightarrow T_n$$

转 ①再计算，直到满足所要求的精度为止，最终取二分后的积分值 T_{2n} 作为所求的结果

（2）变步长梯形公式的流程图



例4. 15 用变步长梯形求积法计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$

解：先对整个区间[0, 1]用梯形公式, 对于

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}, f(0)=1, f(1)=0.8410709$$ 所以有

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

然后将区间二等分， 由于 $f(\frac{1}{2})=0.9588510$ ， 故有

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

进一步二分求积区间, 并计算新分点上的函数值

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

有

$$T_4 = \frac{1}{2} T_2 + \frac{1}{4} \left[f\left(\tfrac{1}{4}\right) + f\left(\tfrac{3}{4}\right) \right] = 0.9445135$$

这样不断二分下去，计算结果如 P_{110} 列表所示。积分的准确值为 0.9460831，从表中可看出用变步长二分 10 次可得此结果。

4.4 龙贝格算法

变步长梯形求积法算法简单，但精度较差，收敛速度较慢，但可以利用梯形法算法简单的优点，形成一个新算法，这就是龙贝格求积公式。龙贝格公式又称逐次分半加速法。

根据积分区间分成n等份和2n等份时的误差估计式(4.8)可得 $I \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$

所以积分值 T_{2n} 的误差大致等于 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$, 如果用 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$对 T_{2n} 进行修正时, $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$与 T_{2n} 之和比 T_{2n} 更接近积分真值, 所以可以将 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$看成是对 T_{2n} 误差的一种补偿, 因此可得到具有更好效果的式子.

这就是说，用梯形法二分前后两个积分值 T_n 和 T_{2n} 作线性组合，结果却得到复化辛卜生公式计算得到的积分值 S_n 。

复化梯形公式 $$T_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right]$$

梯形变步长公式 $$T_{2n} = \frac{T_n}{2} + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$$

代入 $\bar{T}$ 表达式得 $$\bar{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$$

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

故 $$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (4.10)$$

再考察辛卜生法。其截断误差与 h^4 成正比，因此，如果将步长折半，则误差减至 $\frac{1}{16}$，即有

$$\frac{I-S_{2n}}{I-S_n}\approx\frac{1}{16}$$

由此可得 $$I\approx\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n$$

可以验证, 上式右端的值其实等于C_n，就是说，用辛卜生公式二等份前后的两个积分值 S_n和 S_{2n} 作线性组合后，可得到柯特斯公式求得的积分值C_n，即有

$$C_n=\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n \qquad (4.11)$$

用同样的方法，根据柯特斯公式的误差公式，可进一步导出龙贝格公式

$$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n \qquad (4.12)$$

在变步长的过程中运用(4.10)、(4.11)和(4.12)，就能将粗糙的梯形值 T_n 逐步加工成精度较高的辛卜生值 S_n、柯特斯值 C_n 和龙贝格值 R_n 或者说，将收敛缓慢的梯形值序列 T_n 加工成收敛迅速的龙贝格值序列 R_n，这种加速方法称为龙贝格算法（龙贝格公式），见教材P_{112}所示。

4.4.3 龙贝格求积法算法实现

（1） 龙贝格求积法计算步骤

① 用梯形公式计算积分近似值 $T_1=\dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

② 按变步长梯形公式计算积分近似值

将区间逐次分半，令区间长度 $h=\dfrac{b-a}{2^k}\quad(k=0,1,2,\cdots)$

计算 $T_{2n}=\dfrac{T_n}{2}+\dfrac{h}{2}\sum\limits_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})\qquad(n=2^k)$

③ 按加速公式求加速值

梯形加速公式： $S_n=T_{2n}+\dfrac{T_{2n}-T_n}{3}$

辛卜生加速公式： $C_n=S_{2n}+\dfrac{S_{2n}-S_n}{15}$

龙贝格求积公式： $R_n=C_{2n}+\dfrac{C_{2n}-C_n}{63}$

④ 精度控制；直到相邻两次积分值

$$\left|R_{2n}-R_n\right|<\varepsilon$$

（其中 ε 为允许的误差限）则终止计算并取 R_n 作为积分 $\int_a^b f(x)dx$ 的近似值，否则将区间再对分，重复 ②，③，④ 的计算，直到满足精度要求为止。

(2) 龙贝格求积法流程图留给读者

(3) 程序实现

例4.16 用龙贝格算法计算定积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x$

要求相邻两次龙贝格值的偏差不超过 10^{-5}

解: 由题意 $a=0, b=1, f(x)=\frac{4}{1+x^2}$

$$T_1=\frac{1}{2}\left[f(0)+f(1)\right]=\frac{1}{2}(4+2)=3$$

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f(\tfrac{1}{2})=\frac{1}{2}\times 3+\frac{1}{2}\times\frac{16}{5}=3.1$$

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}\left[f(\tfrac{1}{4})+f(\tfrac{3}{4})\right]=\frac{1}{2}\times 3.1+\frac{1}{4}(3.764+2.56)=3.13118$$

$$T_8=\frac{1}{2}T_4+\frac{1}{8}\left[f(\tfrac{1}{8})+f(\tfrac{3}{8})+f(\tfrac{5}{8})+f(\tfrac{7}{8})\right]=3.13899$$

$$T_{16}=\frac{1}{2}T_8+\frac{1}{16}\left[f(\tfrac{1}{16})+f(\tfrac{3}{16})+f(\tfrac{5}{16})+f(\tfrac{7}{16})+f(\tfrac{9}{16})+f(\tfrac{11}{16})+f(\tfrac{13}{16})+f(\tfrac{15}{16})\right]=3.14094$$

$$S_1 = \frac{4}{3}T_2 - \frac{1}{3}T_1 = 3.1333$$

$$S_2 = \frac{4}{3}T_4 - \frac{1}{3}T_2 = 3.14157$$

$$S_4 = \frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4 = 3.14159$$

$$S_8 = \frac{4}{3}T_{16} - \frac{1}{3}T_8 = 3.14159$$

$$C_1 = \frac{16}{15}S_2 - \frac{1}{15}S_1 = 3.14212$$

$$C_2 = \frac{16}{15}S_4 - \frac{1}{15}S_2 = 3.14159$$

$$C_4 = \frac{16}{15}S_8 - \frac{1}{15}S_4 = 3.14159$$

$$R_1 = \frac{64}{63}C_2 - \frac{1}{63}C_1 = 3.14158$$

$$R_2 = \frac{64}{63}C_4 - \frac{1}{63}C_2 = 3.14159$$

由于 $|R_2 - R_1| \le 0.00001$，于是有

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x \approx 3.14159$$

4.6 高斯（Gauss）型求积公式*

4.6.1 高斯积分问题的提出

在前面建立牛顿-柯特斯公式时，为了简化计算，对插值公式中的节点限定为等分的节点，然后再定求积系数，这种方法虽然简便，但求积公式的精度受到限制。我们已经知道, 过 $n+1$ 个节点的插值形求积公式至少具有 n 次代数精度，我们不仅要问，是否存在具有最高代数精度的求积公式呢？若有，最高代数精度能达到多少呢？让我们先看一个例子：

在构造形如 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$ **（4.13）**

的两点公式时, 如果限定求积节点，$x_0 = -1, x_1 = 1$

那么所得插值求积公式

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

的代数精度仅为 1。但是, 如果对式(4. 13)中的系数 A_0, A_1 和节点 x_0, x_1 都不加限制，那么就可适当选取 A_0, A_1 和 x_0, x_1 , 使所得公式的代数精度 $m > 1$。事实上，若要使求积公式(4. 13)对函数 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 都准确成立，只要 A_0, A_1 和 x_0, x_1 满足方程组

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases}$$

解之得 $A_0 = A_1 = 1 \quad x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3} \quad x_0 = \frac{\sqrt{3}}{3}$

代入(4.13)即得

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-\frac{\sqrt{3}}{3}) + f(\frac{\sqrt{3}}{3}) \qquad (4.14)$$

可以验证，所得公式（4.14）是具有3次代数精度的插值型求积公式。

这个例子告诉我们，只要适当选择求积节点，可使插值型求积公式的代数精度达到最高。这就是本节要介绍的高斯求积公式。

同理，对于一般的插值求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad \textbf{（4.15）}$$

只要适当地选取其 $2n+2$ 个待定参数 x_k 和 $A_k,(k=0,1,\cdots,n)$，就可使它的代数精度达到 $2n+1$ 次。

定义4.3 若插值求积公式（4. 15）具有 $2n+1$ 次代数精度，则称之为高斯求积公式，并称相应的求积节点 $x_k,(k=0,1,\cdots,n)$ 为高斯点。

可以证明，n个节点的高斯求积公式具有最高不超过2n+1次的代数精度，这就是我们所要讨论的具有最高代数精度的插值型求积公式。

4.6.2 高斯求积公式的构造与应用

像构造两点高斯求积公式(4.14)一样，对于插值型求积公式(4.15)，分别取 $f(x)=1,x,\cdots,x^{2n+1}$ 用代定系数法来确定参数 x_k 和 $A_k,(k=0,1,\cdots,n)$ 从而构造 $n+1$个点高斯求积公式。但是，这种做法要解一个包含 $2n+2$ 个未知数的非线性方程组，其计算工作量是相当大的。一个较简单的方法是：

(1) 先利用区间[a, b]上的 $n+1$ 次正交多项式确定高斯点 $x_k\in[a,b]$ $(k=0,1,\cdots,n)$

(2) 然后利用高斯点确定求积系数 A_k $(k=0,1,\cdots,n)$为简单起见，对求积公式(4.15)的求积区间 $[a,b]$ 转换成 [-1,1] 的形式，作变换

$$x=\frac{b-a}{2}t+\frac{a+b}{2}$$

就可将求积区间 $[a,b]$ 变换到 [-1,1] 上，这时

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

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

即有 $$\int_a^b f(t)dt=\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1}\psi(t)dt$$

其中 $$\psi(t)=f(\frac{b-a}{2}t+\frac{a+b}{2})$$

插值求积公式节点一经确定，相应的求积系数就确定了，因此关键在于确定节点。

定理4.5 节点 $x_k,(k=0,1,\cdots,n)$ 是高斯点的充要条件是：以这些点为零点的多项式

$$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$$

与任意次数不超过 n 的 $P(x)$ 均正交

$$\int_a^b P(x)\omega(x)dx=0 \qquad (4.16)$$

由定理4.5可知，如能找到满足公式(4.16)的 $n+1$ 次多项式 $\omega(x)$，则求积公式的高斯点就确定了，进而就可确定相应的高斯求积公式。为此需要引入勒让得（Legendre）多项式及其相关结论

定义4. 4 一个仅以区间[−1, 1]上的高斯点

$x_k,(k=0,1,\cdots,n)$ 为零点的 $n+1$ 次多项式

称为 Legendre 多项式。

定理4. 6 若 $x_k,(k=0,1,\cdots,n)$ 是高斯点，则以这些点为根的多项式 $\omega(x)$ 是最高次幂系数为1的勒让得多项式 $\tilde{L}_{(n+1)}(x)$，即 $\omega(x)=\tilde{L}_{(n+1)}(x)$

其中 $$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k),\tilde{L}_{n+1}(x)=\frac{(n+1)!}{(2n+2)!}\frac{d^{n+1}\left[(x^2-1)^{n+1}\right]}{dx^{n+1}}$$

从定理可以看出, 当 n 给定, x_k 就确定了。P_{122}表4−7给出当积分区间是[−1, 1]时，2个点至 5 个点的高斯求积公式的节点、系数和余项, 其中 $\xi\in[-1,1]$，需要时可以查用。

Gauss- Legendre 点及系数表

n	$x_k^{(n)}$	$A_k^{(n)}$	R_n
1	0	2	$\frac{1}{3} f''(\eta)$
2	±0.5773503	1	$\frac{1}{135} f^{(4)}(\eta)$
3	± 0.7745967 0	5/9=0.5555556 8/9=0.8888889	$\frac{1}{15750} f^{(6)}(\eta)$
4	± 0.8611363 ± 0.3399810	0.3478548 0.6521452	$\frac{f^{(8)}(\eta)}{3472875}$
5	± 0.9061799 ± 0.5384693 0	0.2369269 0.4786287 0.5688889	$\frac{f^{(10)}(\eta)}{1237732650}$

例4.17 利用三点高斯求积公式计算 $\int_{-1}^{1}\sqrt{1.5+x}dx$ 的近似值。

解: 由表4−6可知，得到三点高斯型求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 0.5555556 f(-0.7745967)+0.8888889 f(0)+0.5555556 f(0.7745967)$$

由所求公式得

$$\int_{-1}^{1}\sqrt{1.5+x}dx \approx 0.5555556\sqrt{1.5-0.7745967}+0.8888889\sqrt{1.5+0}$$
$$+0.5555556\sqrt{1.5+0.7745967}$$
$$\approx 2.3997$$

高斯求积公式是高精度求积公式，其求积系数，

$A_k > 0,(k=0,1,\cdots,n)$ ，求积公式也是数值稳定的。

但它明显的缺点是当n改变时，系数和节点几乎都在改变，因而应用起来十分不便。同时其余项涉及高阶导数，要利用它们来控制精度也十分困难，因此在实际计算中较多采用复合求积的方法。譬如，先把积分区间[a, b]分成m个等长的小区间 $[x_{k-1}, x_k] \quad (k=0,1,\cdots,m)$，然后在每个小区间上使用同一低阶（如两点的、三点的…）高斯型求积公式算出积分的近似值，将它们相加即得积分 $\int_a^b f(x)dx$ 的近似值。

§6 数值微分

一、中点方法与误差分析

数值微分就是要用函数值的线性组合近似函数在某点的导数值. 由导数定义,差商近似导数,得到数值微分公式

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

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

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}. \quad \text{（中点公式）} \tag{6.1}$$

$$f(a \pm h) = f(a) \pm hf'(a) + \frac{h^2}{2!} f''(a) \pm \frac{h^3}{3!} f'''(a) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(a)$$

$$\pm \frac{h^5}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots,$$

$$G(h) \stackrel{\Delta}{=} \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} = f'(a) + \frac{h^2}{3!} f'''(a) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots.$$

误差估计 $$\left|G(h) - f'(a)\right| \le \frac{h^2}{6} M, \tag{6.2}$$

其中$M \ge \max\limits_{|x-a| \le h} \left| f'''(x) \right|$.

表面上看 h 越小越好，但从舍入误　差角度考虑，h 不能太小.

见教材：$f(x) = \sqrt{x}$，$f'(2) = ?$(表4−8).

设计算$f(a+h)$和$f(a-h)$分别有舍入误差ε_1和ε_2,记$\varepsilon = \max\{|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|\}$，则计算$G(h)$的舍入误差$\le \dfrac{|\varepsilon_1| + |\varepsilon_2|}{2h} = \dfrac{\varepsilon}{h}$.

计算$f'(a)$的误差上界为 $$E(h) \le \frac{h^2}{6}M + \frac{\varepsilon}{h}.$$

最优步长$h = \sqrt[3]{3\varepsilon / M}$.

设$f(x) = \sqrt{x}$,四位数字计算$f'(2)$(表4−8),$h = ?$

$$h = \sqrt[3]{3 \times 0.5 \times 10^{-4} \times 4 \times (2+h)^{3/2}} < \sqrt[3]{24 \times 10^{-4}} = 0.1339.$$

二、插值型的求导公式

已知函数$y=f(x)$的节点上的函数值$y_i=f(x_i)\,(i=0,1,\cdots,n)$，建立插值多项式$P(x)$.

取
$$f'(x)\approx P'(x), \tag{6.3}$$
统称为**插值型求导公式**.

余项
$$f'(x)-P_n'(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x)+\frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f^{(n+1)}(\xi),$$
其中$\xi\in(a,b),\omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$.

$$\Rightarrow \qquad f'(x_k)-P_n'(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k). \tag{6.4}$$

下面考虑在等距节点时节点上的导数值.

1. 两点公式

$$P_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1),$$

$$P_1'(x)=\frac{1}{h}[-f(x_0)+f(x_1)],$$

$$P_1'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)],\ P_1'(x_1)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)].$$

$$f'(x_0)=\frac{1}{h}[f(x_1)-f(x_0)]-\frac{h}{2}f''(\xi),$$

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

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

2. 三点公式

$$P_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)$$

$$+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$$

$$P_2(x_0+th)=\frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0)-t(t-2)f(x_1)+\frac{1}{2}t(t-1)f(x_2).$$

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)].$$

$$P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)],$$

$$P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)],$$

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

$$P_2'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)].$$

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

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

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

高阶导数公式

$$f^{(k)}(x)\approx P_n^{(k)}(x),\quad k=1,2,\cdots.$$

如： $$P_2''(x_0+th)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)],$$

$$f''(x_1)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi). \tag{6.7}$$

三、利用数值积分求导

设$f(x)$充分光滑,$\varphi(x)=f'(x)$, $x_i=a+ih, i=0,1,\cdots,n, h=\dfrac{b-a}{n}$,

$$f(x_{i+1})=f(x_{i-1})+\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}\varphi(x)\mathrm{d}x,\qquad i=1,\cdots,n-1, \tag{6.8}$$

右边积分采用不同的数值积分计算，就得到不同的数值微分公式. 例如，由

$$\varphi(x)=\varphi(x_i)+\varphi'(x_i)(x-x_i)+\frac{(x-x_i)^2}{2!}\varphi''(\zeta_i),\ \zeta_i\in(x_{i-1},x_{i+1}),$$

得到中矩形公式

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}\varphi(x)\mathrm{d}x=2h\varphi(x_i)+\frac{1}{3}h^3\varphi''(\xi_i),\quad \xi_i\in(x_{i-1},x_{i+1}).$$

代入(6.8)，整理得到中点微分公式:

$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-\frac{1}{6}h^3\varphi''(\xi_i).$$

将辛普森公式

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}\varphi(x)\mathrm{d}x=\frac{h}{3}[\varphi(x_{i-1})+4\varphi(x_i)+\varphi(x_{i+1})]-\frac{1}{90}h^5\varphi^{(4)}(\eta_i),$$

$$\eta_i\in(x_{i-1},x_{i+1}).$$

略去余项代入(6.8)，记$m_i\overset{\Delta}{=}\varphi(x_i)=f'(x_i)$,得到

$$m_{i-1}+4m_i+m_{i+1}=\frac{3}{h}\left[f(x_{i+1})-f(x_{i-1})\right],\quad i=1,2,\cdots,n-1.$$

$$\begin{bmatrix}4&1&&&\\1&4&1&&\\&\ddots&\ddots&\ddots&\\&&1&4&1\\&&&1&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}m_1\\m_2\\\vdots\\m_{n-2}\\m_{n-1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{3}{h}(f_2-f_0)-f_0'\\\frac{3}{h}(f_3-f_1)\\\vdots\\\frac{3}{h}(f_{n-1}-f_{n-3})\\\frac{3}{h}(f_n-f_{n-2})-f_n'\end{bmatrix},\qquad(6.9)$$

或者取 $m_1 = \dfrac{1}{2h}[f(x_2) - f(x_0)], m_{n-1} = \dfrac{1}{2h}[f(x_n) - f(x_{n-2})],$

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & 1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-3} \\ m_{n-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{h}(f_3 - f_1) - m_1 \\ \frac{3}{h}(f_4 - f_2) \\ \vdots \\ \frac{3}{h}(f_{n-2} - f_{n-4}) \\ \frac{3}{h}(f_{n-1} - f_{n-3}) - m_{n-1} \end{bmatrix}, \quad (6.9)'$$

可利用追赶法求解(下一章).

例8 给定$f(x) = \sqrt{x}$的数表(表4-9),并已知$f'(100)$和$f'(105)$求$f(x)$在$x = 101, 102, 103, 104$上的一阶导数.

四、利用三次样条求导

根据三次样条理论(P53,57),

$$\max_{a\le x\le b}|f^{(k)}(x)-s^{(k)}(x)|\le C_k\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^{4-k},$$

$$f'(x_j)\approx s'(x_j+0)=-\frac{h_j}{3}M_j-\frac{h_j}{6}M_{j+1}+\frac{y_{j+1}-y_j}{h_j},$$

$$f''(x_j)\approx M_j.$$

$$\|f'-s'\|_\infty\le\frac{1}{24}\|f^{(4)}\|_\infty h^3,$$

$$\|f''-s''\|_\infty\le\frac{3}{8}\|f^{(4)}\|_\infty h^2.$$

五、利用外推方法求数值微分

中点公式: $f'(a) \approx G(h) = \dfrac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$.

由Taylor公式: $G(h) = f'(a) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_l h^{2l} + \cdots$,

其中系数$\alpha_l (l = 1,2,\cdots)$与$h$无关.

$$G_1(h) \overset{\Delta}{=} \frac{4G(\frac{h}{2}) - G(h)}{3} = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots.$$

$$\cdots$$

$$G_m(h) \overset{\Delta}{=} \frac{4^m G_{m-1}(\frac{h}{2}) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}, \quad (m = 1,2,\cdots). \qquad (6.11)$$

$G_0(h) = G(h)$. 见表4−10.

$$G_m(h) - f'(a) = O(h^{2(m+1)}).$$

例9 用外推法计算$f(x) = x^2 e^{-x}$在$x = 0.5$的导数.

本章小结

本章介绍了积分的数值计算方法，其基本原理主要是逼近论，即设法构造某个简单函数 $P(x)$近似表示 $f(x)$ ，然后对 $P(x)$ 求积或求导得到 $f(x)$ 的积分。基于插值原理，推导了数值积分的基本公式。

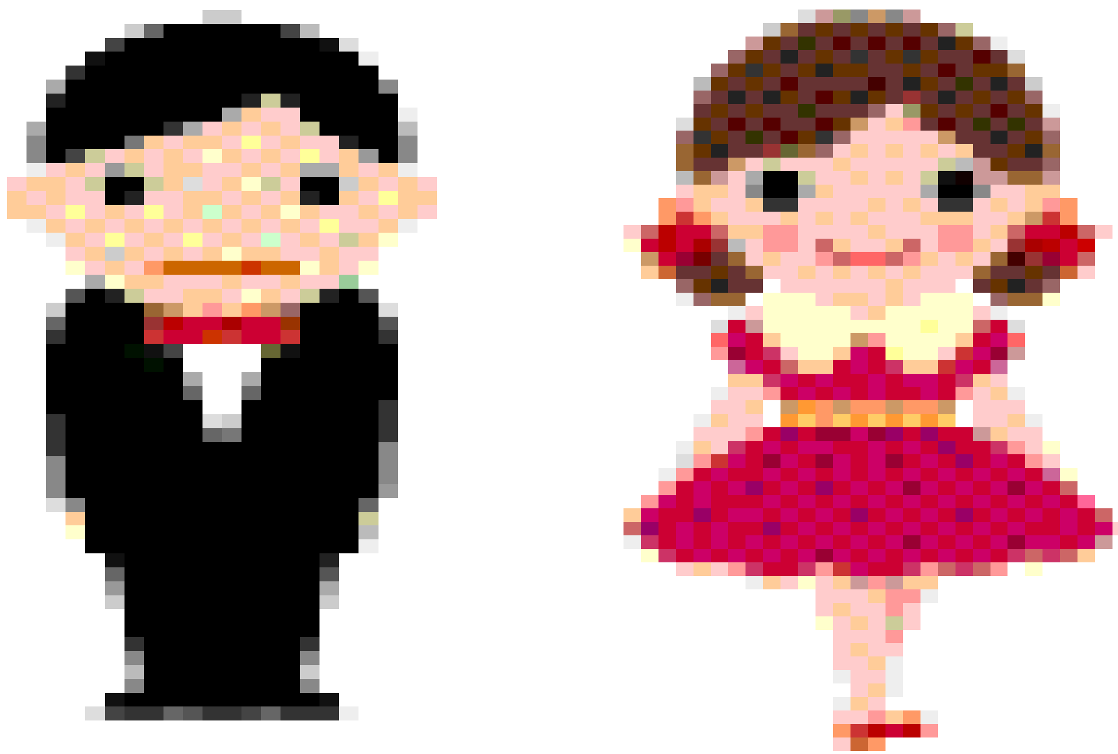
插值型求积公式介绍了牛顿—柯特斯公式和高斯公式两类。前者取等距节点，算法简单而容易编制程序。但是，由于在 $n \geq 8$ 时出现了负系数，从而影响稳定性和收敛性。因此实用的只是低阶公式。解决长区间与低阶公式的矛盾是使用复化求积公式，

因此，常用的数值积分法都是复化求积公式。高斯公式不但具有最高代数精度，而且收敛性和稳定性都有保证，因此是高精度的求积公式。高斯公式还可以通过选择恰当的权函数，用于计算奇异积分和广义积分，也可使一些复杂的积分计算简化。高斯公式的主要缺点是节点与系数无规律。所以高阶高斯公式不便于上机使用。实际应用中可以把低阶高斯公式进行复化。

龙贝格算法是在区间逐次分半过程中，对用梯形法所获得的近似值进行多级“加工”，从而获得高精度的积分近似值的一种方法。它具有自动选取步长且精度高，计算量小的特点，便于在计算机上使用。是数值积分中较好的方法，必须熟练地掌握。

建立在代数精度概念上的待定系数法也是数值积分中的一般方法，按待定系数法确定的数值积分公式没有误差估计式，只能从代数精度出发，估计其精确程度。

Thank you very much!




作业
习题 *P*135
1(1) , 2(1), 6, 8(1),
10, 14, 18