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 $y=f(x)$

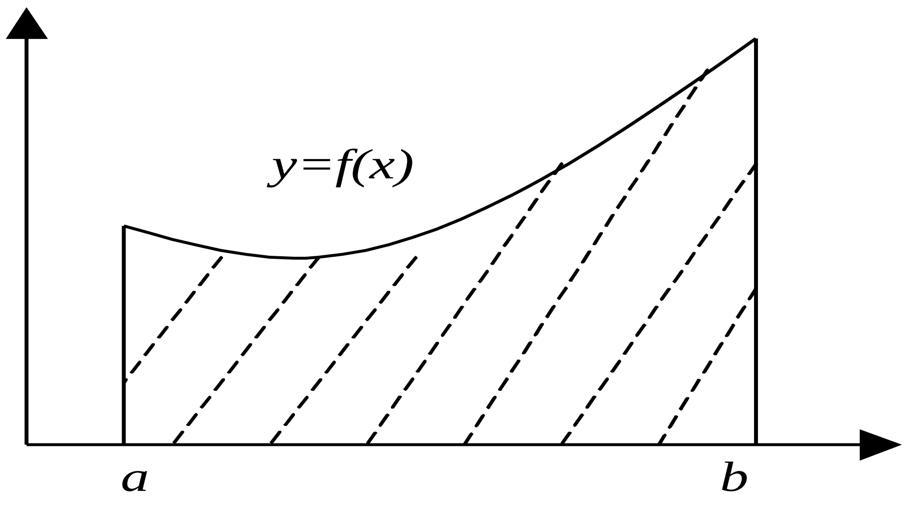


图4-1　数值积分的几何意义

建立数值积分公式的途径比较多, 其中最常用的有两种：

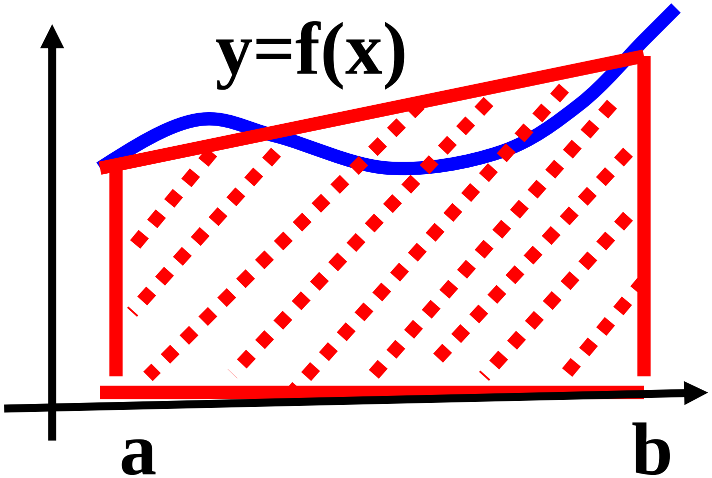
（1）由积分中值定理可知，对于连续函数 $f(x)$，在积分区间[a, b]内存在一点 ξ，使得

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

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。

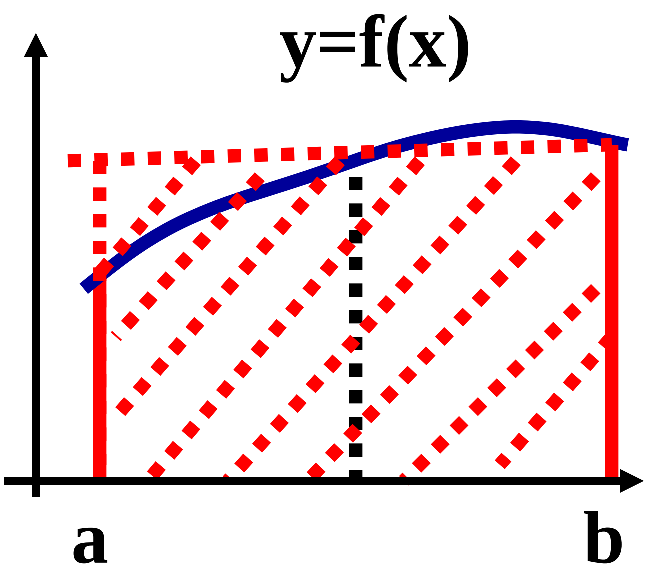
例如 $f(\xi)$ 分别取 $f(\xi)\approx\dfrac{f(a)+f(b)}{2}$ 和 $f(\xi)\approx f(\dfrac{a+b}{2})$



则分别得到梯形公式和梯中矩形公式。

① 梯形公式

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

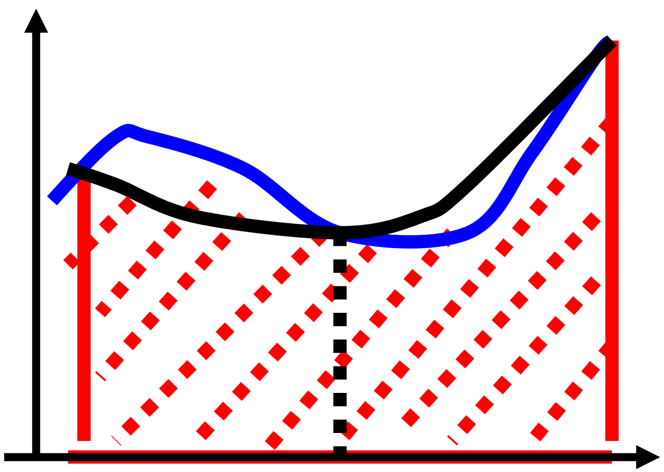


② 中矩形公式

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

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。

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

称为求积系数。给出如下定义。

定义4. 1 求积公式

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

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

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

其中 $\xi \in [a,b]$

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

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

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:

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

这是关于 A_k 的线性方程组，其系数矩阵

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

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

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

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

转移

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

较好

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

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

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

这个式子的代数精度实际上是固有的，本来对于三个数据点的插值求积公式至少有2次代数精度，这个式子赠送了一次代数精度。

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。

由于只有三个未知数因此只需要三个方程即可，当把所欲未知数求出来以后，再去看他有几次代数精度，这是他所固有的

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

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)=x² 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

从他有三个插值节点但是只有1次代数精度，可以判断出他不是插值型求积公式。因为插值型求积公式当有三个插值节点时至少有2次代数精度。同时也可以利用n+1个节点的插值求积公式至少有n次代数精度的式子是唯一的，而辛普森公式是具有三个节点的插值求积公式（它不仅有2次代数精度，一个求积公式是否有更高次的代数精度是不一定的），因此对于有三个节点的插值求积公式若和辛普森公式不一样，则他就不是插值求积公式。

例4.5 给定求积公式如下：

如何判断一个求积公式是否为插值求积公式，即需要利用拉格朗日基函数积分然后求出每一个函数值对应的系数来判断是否为插值求积公式。

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

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

插值求积公式是唯一的，但是具有n次代数精度的插值求积公式不是唯一的，比如辛普森公式本应该只有2次代数精度但是却具有3次代数精度，而三次代数精度的插值求积公式还有一个四个点的插值求积公式。

（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：

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

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

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

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

即所有系数之和为整个积分区间的宽度

但是若这样的话岂不是和例题4.8，矛盾吗？问

例4.8不是插值求积公式，看后面还有f的导数

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

利用拉格朗日基函数求求积系数

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

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

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

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

i.e. as the number of point approach infinity
and the gap between each point approach zero,
if 求积公式仍然和右边相等就称该公式收敛。

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

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.e. the value of the function in each point is not accurate.

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

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

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

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

$\boxed{\text{求积节点为} \quad x_k = a + kh(k = 0,1,\cdots,n)}$

为了计算系数　　由于 $x_k - x_i = (k-i)h$, 所以

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

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

原来的拉格朗日插值求积公式的求积系数

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

代入插值求积公式(4. 1)有

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

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 $\boxed{\sum_{k=0}^{n} C_k = 1}$ 插值型求积公式的特点，所有系数之和为区间的宽度

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

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

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

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

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

当 n=2 时

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

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

coeficient of simposon's equation.

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

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。

Dose a negative coeficient affect stability?

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

（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

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

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

why is it the sixth derivative

因为它将区间分成了4份，取了5个数据点，因此余项为n+1阶导数
注意此处的n是指数据点的个数不是之前的划分的区间的个数

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

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

取两个端点的值即可

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

（2） 用辛卜生公式

这个求积公式需要三个数据点，因此还要加一个区间中点的值。

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

$$= \frac{1}{12}\times[0.707\,11+4\times0.866\,03+1] = 0.43093403 = 0.43093$$

(3) 用柯特斯公式计算，系数为

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

科特斯公式是指n=4时的即取5个数据点时，且不同的数据点之间等距。

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

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

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

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

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

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

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

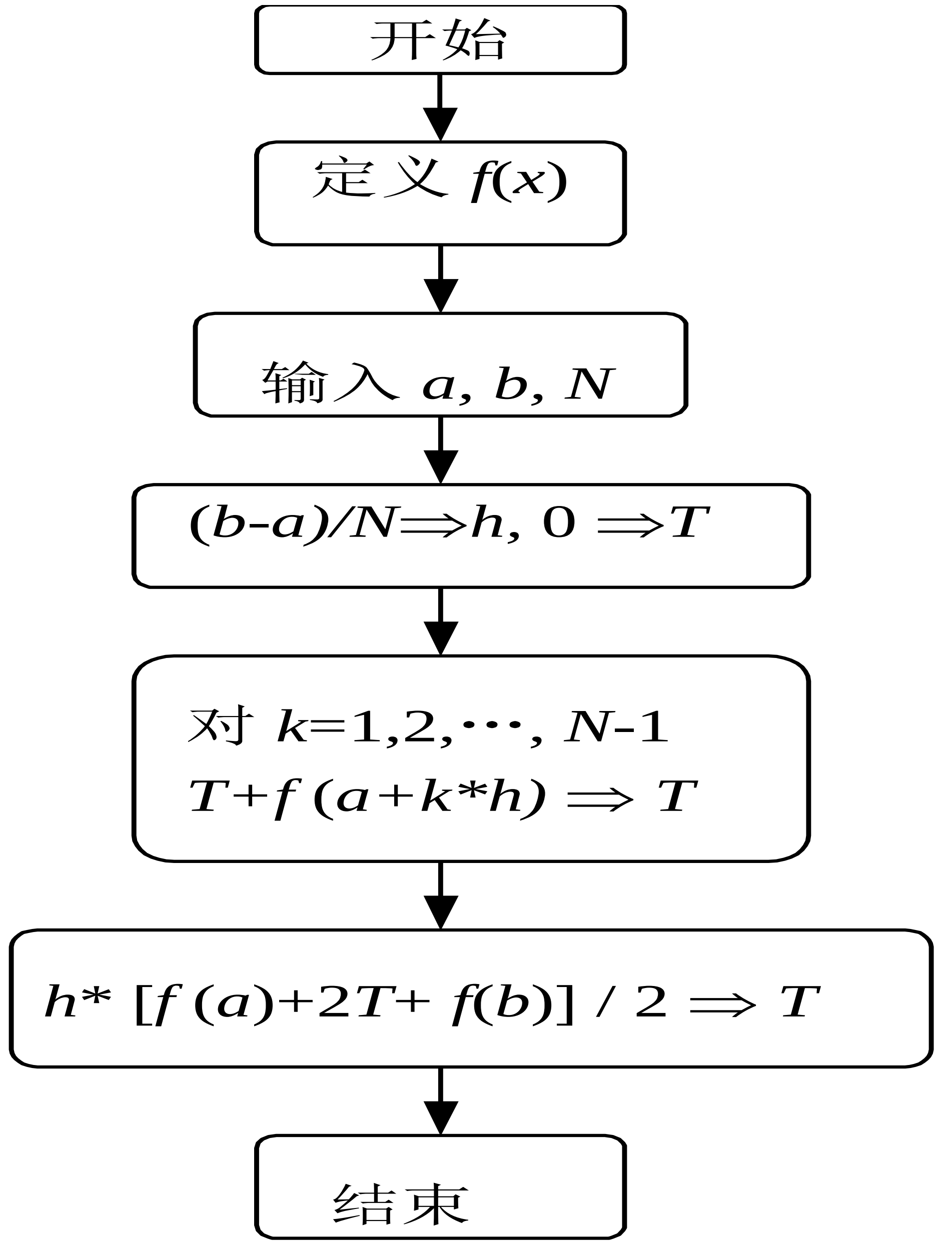
（1）复化梯形公式计算步骤

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$h=(b-a)/N$，$S_1=f(a+h/2)$，$S_2=0$

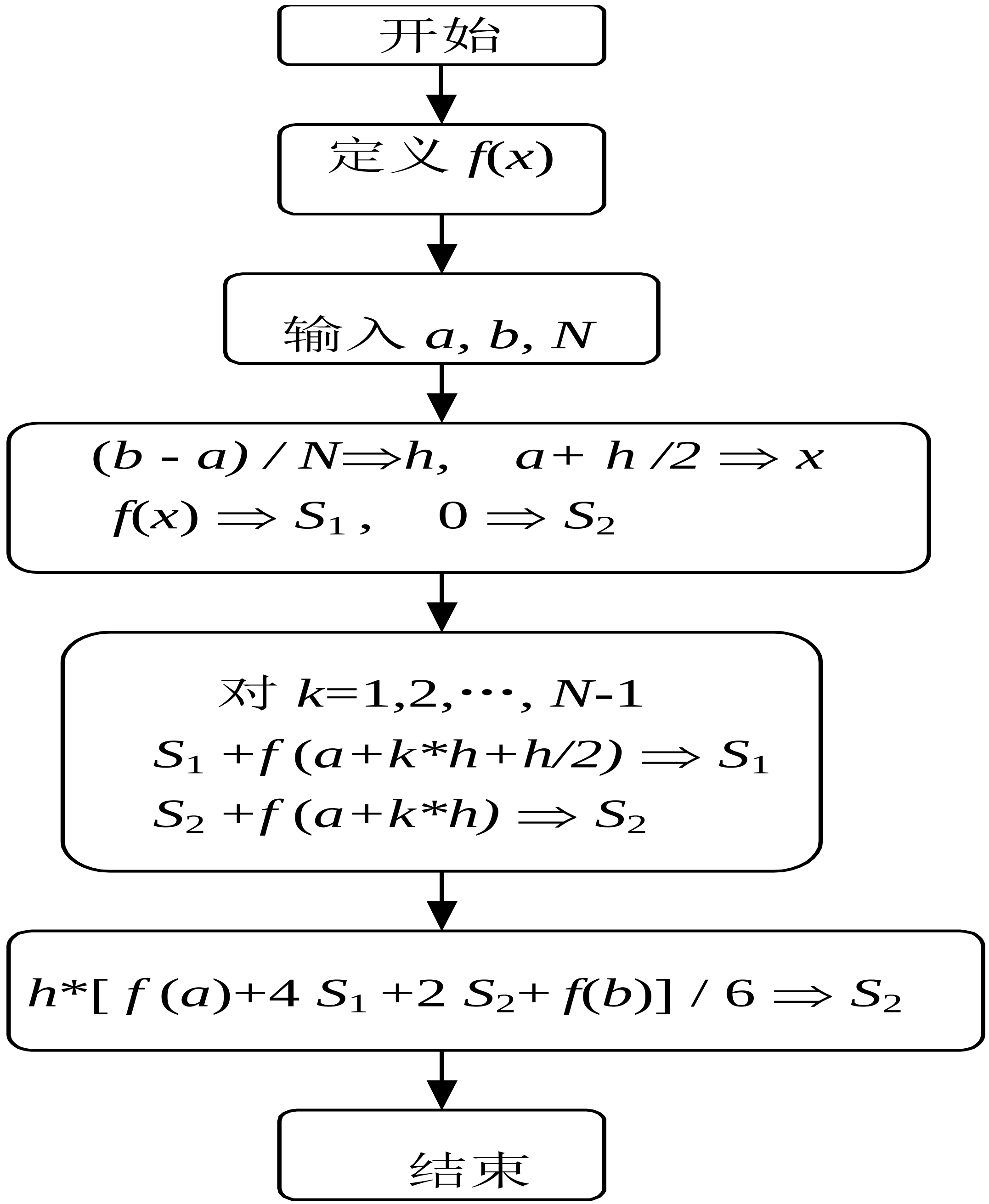
（N 为等分数）

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



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：

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

由复化辛卜生公式(4.6)可得如下计算公式

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

（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

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

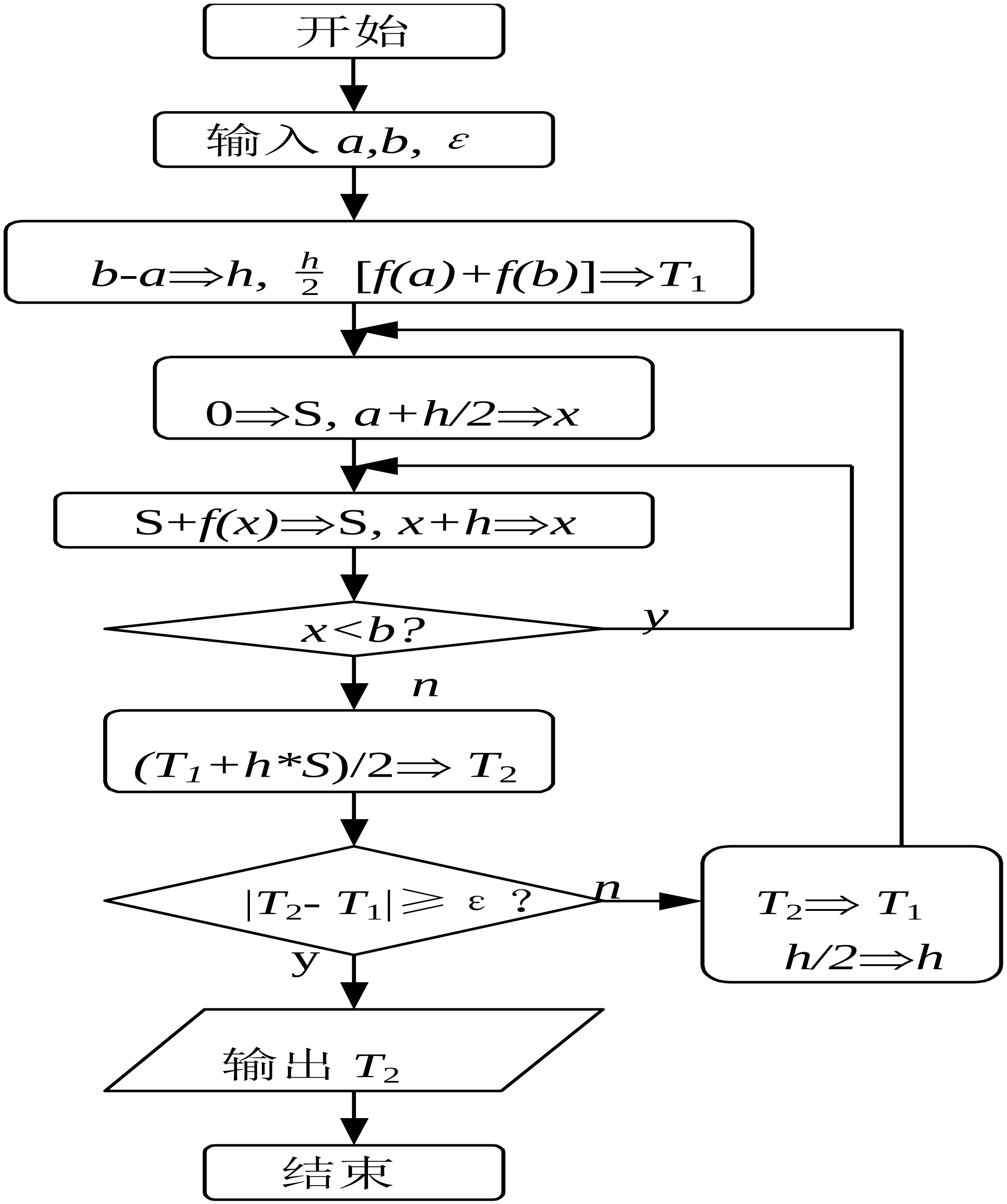
其中 T_n 和 T_{2n} 分别代表二等分前后的积分值

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 $f(\tfrac{1}{2})=0.9588510$ ，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

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

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

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 $\left|R_2 - R_1\right| \leq 0.00001$，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

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

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	$\pm$ 0.7745967 0	5/9=0.5555556 8/9=0.8888889	$\frac{1}{15750} f^{(6)}(\eta)$
4	$\pm$ 0.8611363 $\pm$ 0.3399810	0.3478548 0.6521452	$\frac{f^{(8)}(\eta)}{3472875}$
5	$\pm$ 0.9061799 $\pm$ 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 $[x_{k-1}, x_k]$ $(k = 0,1,\cdots,m)$，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

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

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

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

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

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

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

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 $E(h)\le\dfrac{h^2}{6}M+\dfrac{\varepsilon}{h}.$

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），$h=?$

$$h=\sqrt[3]{3\times0.5\times10^{-4}\times4\times(2+h)^{3/2}}<\sqrt[3]{24\times10^{-4}}=0.1339.$$

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$\xi\in(a,b),\omega_{n+1}(x)=\prod\limits_{j=0}^{n}(x-x_j)$.

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

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

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

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

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

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

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$f(x)=x^2e^{-x}$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。

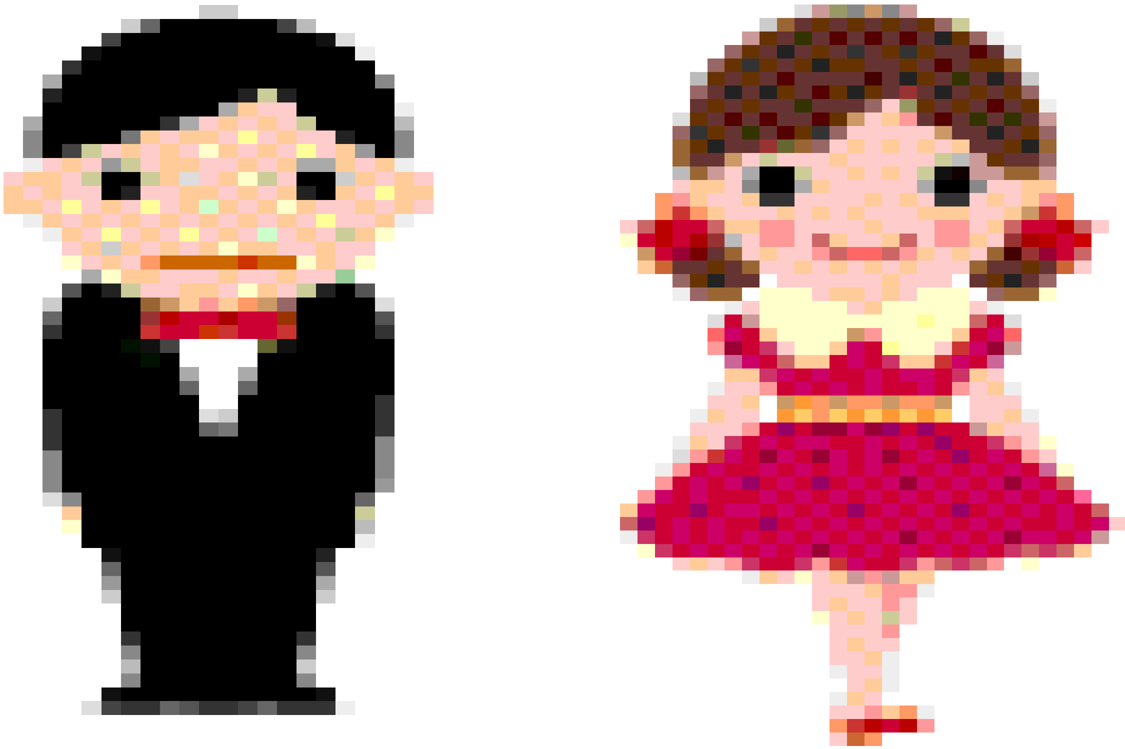
插值型求积公式介绍了牛顿—柯特斯公式和高斯公式两类。前者取等距节点，算法简单而容易编制程序。但是，由于在 $n \geq 8$ 时出现了负系数，从而影响稳定性和收敛性。因此实用的只是低阶公式。解决长区间与低阶公式的矛盾是使用复化求积公式，

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 $P135$

1(1) , 2(1), 6, 8(1), 10, 14, 18