

第六章 数值微分与数值积分

§ 1 引言

§ 2 数值微分公式

§ 3 **Newton-cotes**求积公式

§ 4 复化求积公式

§ 5 **Romberg**求积算法

§ 6 **Gauss**型求积公式*

§1 引言

- 一 函数 $f(x)$ 的表达式复杂，或需要利用函数在相关离散节点处的函数值计算其导数。所以，有必要研究微分计算的数值方法。
- 二 积分学基本定理 $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$
应用中碰到如下情况：
 - ① $f(x)$ 的原函数无法用初等函数给出； $\int_2^5 e^{-x^2} dx$ $\int_2^5 \frac{\sin x}{x} dx$
 - ② $f(x)$ 用表格形式给出；
 - ③ $f(x)$ 的原函数能用初等函数表示，但表达式过于复杂。所以，有必要研究积分计算的数值方法。

§ 2 数值微分公式

以离散数据 $(x_i, f(x_i))$ ($i = 0, 1, \dots, n$) 近似表达 $y=f(x)$ 在节点 x_i 处的导数值 $f'(x_i)$, 通常称为**数值微分(公式)**。

一 插值法

给出列表函数 $y=f(x)$, 可建立插值多项式 $L_n(x)$ 。

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

取 $L'_n(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似函数, 则

$$f'(x) = L'_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} \left[\frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi(x)) \right] \text{ 难以求得}$$

限定求节点 x_i 的导数值, 则 $f'(x_i) = L'_n(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_i)$

设 $M = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(n+1)}(x)|$, 则 $|f'(x_i) - L'_n(x_i)| \leq \frac{M}{(n+1)!} |\omega'_{n+1}(x_i)|$

为讨论方便，假定所给节点为等距分布。

1 两点公式 ($n=1$)

$$\text{由 } f'(x_i) = L'_1(x_i) + \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!} \omega'_2(x_i) \quad i = 0, 1 \quad \omega_2(x) = (x - x_0)(x - x_1)$$

$$\text{及 } L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) \quad L'_1(x) = \frac{1}{-h} f(x_0) + \frac{1}{h} f(x_1)$$

$$\text{得 } f'(x_i) = \frac{1}{h} [-f(x_0) + f(x_1)] + \frac{f^{(2)}(\xi)}{2} [(x - x_0) + (x - x_1)] \Big|_{x=x_i} \quad i = 0, 1$$
$$h = x_1 - x_0$$

$$\text{即 } \begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{h} [f(x_1) - f(x_0)] - \frac{h}{2} f''(\xi_0) & \xi_0 \in (x_0, x_1) \\ f'(x_1) = \frac{1}{h} [f(x_1) - f(x_0)] + \frac{h}{2} f''(\xi_1) & \xi_1 \in (x_0, x_1) \end{cases}$$

$$f'(x_i) = L'_n(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_i)$$

2 三点公式 ($n=2$)

$$\begin{aligned} \text{由 } p_2(x) = & \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) \\ & + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \end{aligned}$$

$$\text{令 } x_1 = x_0 + h \quad x_2 = x_0 + 2h \quad x = x_0 + th$$

$$\text{其中 } h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$$

$$\text{得 } p_2(x_0 + th) = \frac{(t-1)(t-2)}{2} f(x_0) + \frac{t(t-2)}{-1} f(x_1) + \frac{t(t-1)}{2} f(x_2)$$

将两边对 t 求导, 得

$$h p_2'(x_0 + th) = \frac{f(x_0)}{2} [(t-1) + (t-2)] - f(x_1) [t + (t-2)] + \frac{f(x_2)}{2} [t + (t-1)]$$

$$\text{即 } p_2'(x_0 + th) = \frac{1}{2h} \{ (2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2) \}$$

根据 $f(x) = p_2(x) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{3!}$, 则有

$$f'(x_i) = p'_2(x_i) + \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} [(x-x_1)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_1)] \Big|_{x=x_i}$$

$i = 0, 1, 2$

注意在 $x = x_0 + th$ 中, 当 $t = 0, 1, 2$ 时, 得 $x = x_0, x_1, x_2$

故有

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{2h} \{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\} + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0) \quad \xi_0 \in (x_0, x_2) \\ f'(x_1) &= \frac{1}{2h} \{-f(x_0) + f(x_2)\} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1) \quad \xi_1 \in (x_0, x_2) \\ f'(x_2) &= \frac{1}{2h} \{f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\} + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2) \quad \xi_2 \in (x_0, x_2) \end{aligned}$$

还可以建立高阶数值微分公式: $f^{(i)}(x) \approx p_n^{(i)}(x) \quad i = 1, 2, \dots$

$$p'_2(x_0 + th) = \frac{1}{2h} \{(2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)\}$$

二 Taylor展开法

证明 $f'(x_i) = \frac{1}{h}[f(x_i + h) - f(x_i)] - \frac{h}{2} f''(\xi_1), \xi_1 \in (x_i, x_i + h)$

$$f'(x_i) = \frac{1}{h}[f(x_i) - f(x_i - h)] + \frac{h}{2} f''(\xi_2), \xi_2 \in (x_i - h, x_i)$$

根据Taylor公式

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_1)$$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_2)$$

即得。

两点公式
$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \frac{h}{2} f''(\xi_0) & \xi_0 \in (x_0, x_1) \\ f'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \frac{h}{2} f''(\xi_1) & \xi_1 \in (x_0, x_1) \end{cases}$$

证明 $f'(x_i) = \frac{1}{2h}[f(x_i + h) - f(x_i - h)] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_3), \xi_3 \in (x_i - h, x_i + h)$

根据Taylor公式 $f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(\xi_1)$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) - \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(\xi_2)$$

相减 $f(x_i + h) - f(x_i - h) = 2hf'(x_i) + \frac{h^3}{6} (f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2))$

即 $f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} - \frac{h^3}{6} \frac{1}{2h} (f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2))$

若 $f^{(3)}(x)$ 连续, 则 $m \leq \frac{1}{2} (f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2)) \leq M$

(m, M 为 $f^{(3)}(x)$ 的最小值与最大值)

由连续函数的介值定理, 必存在 ξ_3 , 使得

$$f^{(3)}(\xi_3) = \frac{1}{2} [f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2)]$$

故得 $f'(x_i) = \frac{1}{2h}[f(x_i + h) - f(x_i - h)] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_3), \xi_3 \in (x_i - h, x_i + h)$

三点公式 $f'(x_1) = \frac{1}{2h} \{-f(x_0) + f(x_2)\} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1) \quad \xi_1 \in (x_0, x_2)$

三 Richardson外推法

假设一量 S 与步长 h 无关, $S^*(h)$ 为依赖于步长 h 的近似 S 的量。并有

$$S - S^*(h) = a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \cdots + a_k h^{p_k} + \cdots$$

$\{a_i\}_{i=1}^{\infty}, \{p_i\}_{i=1}^{\infty}$ 与步长 h 无关, 幂次满足 $0 < p_1 < p_2 < \cdots$

即用 $S^*(h)$ 近似 S 时, 误差的量级是 $O(h^{p_1})$ 。

由

$$S - S^*\left(\frac{h}{2}\right) = a_1 \left(\frac{h}{2}\right)^{p_1} + a_2 \left(\frac{h}{2}\right)^{p_2} + \cdots + a_k \left(\frac{h}{2}\right)^{p_k} + \cdots$$

得 $[S - S^*(h)] - 2^{p_1} [S - S^*\left(\frac{h}{2}\right)] \longrightarrow (1 - 2^{p_1})S - [S^*(h) - 2^{p_1} S^*\left(\frac{h}{2}\right)]$

$$= a_2 (1 - 2^{p_1 - p_2}) h^{p_2} + \cdots + a_k (1 - 2^{p_1 - p_k}) h^{p_k} + \cdots$$

$$\text{即 } S - \frac{S^*(h) - 2^{p_1} S^*\left(\frac{h}{2}\right)}{1 - 2^{p_1}} = \hat{a}_2 h^{p_2} + \hat{a}_3 h^{p_3} + \cdots + \hat{a}_k h^{p_k} + \cdots$$

式中新的系数 $\left\{ \hat{a}_k = a_k \frac{1 - 2^{p_1 - p_k}}{1 - 2^{p_1}} \right\}_{k=2}^{\infty}$

$$\text{令 } S_1^*(h) = \frac{1}{1-2^{p_1}} S^*(h) + \frac{-2^{p_1}}{1-2^{p_1}} S^*\left(\frac{h}{2}\right)$$

由于 $S - S_1^*(h) = O(h^{p_2})$

故新的近似量 $S_1^*(h)$ 近似 S 时，误差的量级是 $O(h^{p_2})$ 。

上述高阶近似是两个低阶近似的线性组合。

依据 $S_1^*(h)$ 的表达式，还可对 $S_1^*(h)$ 再进行外推，得到量 S 的更高阶近似。

上述方法称为 **Richardson 外推技巧**。这一技巧可用于数值积分、数值微分等问题的数值计算。

$$S - \frac{S^*(h) - 2^{p_1} S^*\left(\frac{h}{2}\right)}{1 - 2^{p_1}} = \hat{a}_2 h^{p_2} + \hat{a}_3 h^{p_3} + \cdots + \hat{a}_k h^{p_k} + \cdots$$

如：对一阶微分计算的中点公式进行外推

$$S(x) = f'(x), S^*(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

$$\text{则 } S - S^*(h) = f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = -\frac{f'''(x)}{3!}h^2 - \frac{f^{(5)}(x)}{5!}h^4 + \dots$$

近似量 $S^*(h)$ 近似 S 时，误差量级是 $O(h^2)$ 。

$$S - S^*\left(\frac{h}{2}\right) = -\frac{f'''(x)}{3!}\left(\frac{h}{2}\right)^2 - \frac{f^{(5)}(x)}{5!}\left(\frac{h}{2}\right)^4 + \dots$$

$$[S - S^*(h)] - 2^2[S - S^*\left(\frac{h}{2}\right)] = O(h^4) \Rightarrow 3S - \left[4S^*\left(\frac{h}{2}\right) - S^*(h)\right] = O(h^4)$$

$$\Rightarrow S - \left[\frac{4}{3}S^*\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}S^*(h)\right] = O(h^4) \quad \text{即 } f'(x) - \left[\frac{4}{3}S^*\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}S^*(h)\right] = O(h^4)$$

$$\text{令 } S_1^*(h) = \frac{4}{3}S^*\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}S^*(h)$$

新的近似量 $S_1^*(h)$ 近似 S 时，误差量级是 $O(h^4)$ 。

$$f'(x_i) = \frac{1}{2h}[f(x_i+h) - f(x_i-h)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi_3)$$

§ 3 Newton-cotes 求积公式

设 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$, $h_i = x_i - x_{i-1}$, $x_{i-1} \leq \xi_i \leq x_i$

一元可积函数的定积分 $I = \int_a^b f(x)dx = \lim_{h \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(\xi_i)h_i$
可以看成函数值线性组合的极限。

去掉极限过程就得到一种近似方法。

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

或
$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + E_n[f] = I_n + E_n[f]$$

称为**求积公式**。 x_i ($i = 0, 1, 2, \cdots, n$) 称为**求积节点**。

A_i ($i = 0, 1, 2, \cdots, n$) 称为**求积系数**。

$E_n[f]$ 称为**求积公式的余项**（**截断误差**）；

A_i 仅与求积节点 x_i 的选取有关，它不依赖于 $f(x)$ 。

一 求积公式的代数精（确）度

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

对于任意不高于 m 次的代数多项式准确成立。

而对于某一个 $m+1$ 次多项式并不准确成立。

则称上述求积公式具有 m 次代数精（确）度。

定理 求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ 具有 m 次代数精度的充分必要条件是

$$\int_a^b dx = \sum_{i=0}^n A_i \quad \int_a^b x dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i \quad \dots \quad \int_a^b x^m dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i^m$$

$$\int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{i=0}^n A_i x_i^{m+1}$$

证明：充分性 若

$$\int_a^b dx = \sum_{i=0}^n A_i \quad \int_a^b x dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i \quad \cdots \quad \int_a^b x^m dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i^m$$
$$\int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{i=0}^n A_i x_i^{m+1}$$

$$\text{则 } a_0 \int_a^b dx + a_1 \int_a^b x dx + \cdots + a_m \int_a^b x^m dx = a_0 \sum_{i=0}^n A_i + a_1 \sum_{i=0}^n A_i x_i + \cdots + a_m \sum_{i=0}^n A_i x_i^m$$

$$\text{即 } \int_a^b (a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m) dx = \sum_{i=0}^n A_i (a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_m x_i^m)$$

求积公式对任意不高于 m 次的代数多项式准确成立。

$$\text{由 } \int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{i=0}^n A_i x_i^{m+1}$$

知求积公式对于某一个 $m+1$ 次多项式并不准确成立。

综上所述，求积公式具有 m 次代数精度。

必要性 若求积公式具有 m 次代数精度，则有

$$\int_a^b dx = \sum_{i=0}^n A_i \quad \int_a^b x dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i \quad \cdots \quad \int_a^b x^m dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i^m$$

由于求积公式对于某一个 $m+1$ 次多项式并不准确成立，故有

$$\int_a^b (a_0 + a_1 x + \cdots + a_{m+1} x^{m+1}) dx \neq \sum_{i=0}^n A_i (a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_{m+1} x_i^{m+1})$$

$$\begin{aligned} \text{即} \quad & a_0 \int_a^b dx + a_1 \int_a^b x dx + \cdots + a_m \int_a^b x^m dx + a_{m+1} \int_a^b x^{m+1} dx \\ & \neq a_0 \sum_{i=0}^n A_i + a_1 \sum_{i=0}^n A_i x_i + \cdots + a_m \sum_{i=0}^n A_i x_i^m + a_{m+1} \sum_{i=0}^n A_i x_i^{m+1} \end{aligned}$$

利用上述 $m+1$ 个等式，则有

$$\int_a^b x^{m+1} dx \neq \sum_{i=0}^n A_i x_i^{m+1}$$

给定 $n+1$ 个节点, 构造至少有 n 次代数精度的求积公式

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

即

$$\begin{aligned} \int_a^b dx &= \sum_{i=0}^n A_i \\ \int_a^b x dx &= \sum_{i=0}^n A_i x_i \\ &\vdots \\ \int_a^b x^n dx &= \sum_{i=0}^n A_i x_i^n \end{aligned} \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b-a \\ (b^2-a^2)/2 \\ \vdots \\ (b^{n+1}-a^{n+1})/(n+1) \end{bmatrix}$$

若求积节点互异, 则系数矩阵非奇异。所以, 可通过求解方程组而得到唯一的 $n+1$ 个求积系数。

定理 对于区间 $[a,b]$ 上给定的 $n+1$ 个互异节点 $a \leq x_0 < \cdots < x_n \leq b$, 总存在求积系数 A_0, A_1, \cdots, A_n , 使求积公式至少有 n 次代数精度, 且该求积公式唯一。

Remark

定出 $A_i (i = 0, 1, \dots, n)$ ，则求积公式至少具有 n 次代数精度，但并不一定它具有 n 次代数精度。要将 x^{n+1} 代入求积公式，如果等式不准确成立，则求积公式具有 n 次代数精度；否则代数精度将大于 n 。

求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ 至少有零次代数精度。

$$\text{由 } \int_a^b dx = \sum_{i=0}^n A_i \quad \text{知} \quad \sum_{i=0}^n A_i = b - a$$

例：确定求积公式 $\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0) + f(h)] + \alpha h^2[f'(0) - f'(h)]$ 中的待定参数 α ，使其代数精度尽量高，并指明所构造的求积公式具有的代数精度。(作业)

解: $\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0) + f(h)] + \alpha h^2[f'(0) - f'(h)]$ 含一个待定参数

当 $f(x)=1$ 时, 有 $\int_0^h dx \equiv \frac{h}{2}[1+1]$

当 $f(x)=x$ 时, 有 $\int_0^h xdx \equiv \frac{h}{2}[0+h] + \alpha h^2[1-1]$

令求积公式对 $f(x)=x^2$ 成立, 即

$$\int_0^h x^2 dx = \frac{h}{2}[0+h^2] + \alpha h^2(2 \times 0 - 2h) \Rightarrow \alpha = \frac{1}{12}$$

令 $f(x)=x^3$, 代入已求得的求积公式, 有

$$\int_0^h x^3 dx = \frac{h}{2}[0+h^3] + \frac{h^2}{12}[0-3h^2]$$

令 $f(x)=x^4$, 代入已求得的求积公式, 有

$$\int_0^h x^4 dx \neq \frac{h}{2}[0+h^4] + \frac{h^2}{12}[0-4h^3]$$

故 $\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0) + f(h)] + \frac{h^3}{12}[f'(0) - f'(h)]$ 有三次代数精度。

二 插值型求积公式

基本思想:

用插值多项式 $p_n(x)$ 的积分代替函数 $f(x)$ 的积分。
设已知互异节点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 上的函数值 $\{f(x_i)\}_{i=0}^n$ 。

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

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

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

$$\text{其中 } A_i = \int_a^b l_i(x) dx。$$

求积系数由 $A_i = \int_a^b l_i(x) dx$ 确定的求积公式
称为**插值型求积公式**。

定理 $n+1$ 个求积节点的数值求积公式是插值型的充要条件是该公式至少有 n 次代数精度。

证明： 必要性 设求积公式为插值型的。

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

可知：对于任意次数 $\leq n$ 的多项式 $f(x)$, $E_n[f] = 0$ 。

故**插值型求积公式至少具有 n 次代数精度**。

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

充分性*: 设求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$
至少具有 n 次代数精度。

则对于不高于 n 次的多项式, 上述等式精确成立。

特别地, 取 $f(x) = l_j(x)$ ($j = 0, 1, \dots, n$)

有

$$\begin{aligned}\int_a^b l_j(x)dx &= \sum_{i=0}^n A_i l_j(x_i) \\ &= A_0 l_j(x_0) + A_1 l_j(x_1) + \dots + A_n l_j(x_n)\end{aligned}$$

注意 $l_j(x_i) = \delta_{ji}$

$$A_j = \int_a^b l_j(x)dx \quad (j = 0, 1, \dots, n)$$

根据插值型求积公式定义知, 其**求积公式**
为插值型求积公式。

三 Newton-cotes 公式

将 $[a,b]$ 分为 n 等份，其步长 $h = (b-a)/n$ ，节点 $x_i = a + ih$ ($i = 0, 1, \dots, n$)。对应的插值型求积公式称为**Newton-Cotes求积公式**。

由插值型求积公式，可得

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

$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx = \int_a^b \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x_i)} dx \quad (n \neq 0)$$

其中节点等距分布。

$n=0$ 的公式称为**中点公式**（习题：用Taylor展开推导）

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad \text{记为} \quad M(f)$$

一次代数精度。

$n=1$ 的公式称为**梯形公式**

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

一次代数精度。

$n=2$ 的公式称为**Simpson公式或抛物线公式**。

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

三次代数精度。

$n=4$ 的公式称为**Cotes公式**（ $x_i = a_0 + ih \quad (i = 0, 1, \dots, 4)$ ）

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

五次代数精度。

记 $A_i = (b-a)c_i^{(n)} \quad (i = 0, 1, \dots, n)$, $c_i^{(n)}$ 称为Cotes系数。

$$\sum_{i=0}^n A_i = b-a \quad \sum_{i=0}^n c_i^{(n)} = 1$$

定理 n 为偶数（节点数 $n+1$ 为奇数）时，Newton-Cotes求积公式的代数精度至少是 $n+1$ ；

n 为奇数（节点数 $n+1$ 为偶数）时，Newton-Cotes求积公式的代数精度至少是 n 。

证明略

广义积分中值定理

如果 $f(x)$, $g(x)$ 在区间 $[a,b]$ 连续, 且 $g(x)$ 在区间 (a,b) 不变号, 则存在 $\eta \in (a,b)$, 使得

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

四 几种低阶求积公式的截断误差

① 若 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 有二阶连续导数，中点求积公式有下列误差估计：

$$E_M[f] = \int_a^b f(x)dx - (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\eta) \quad a < \eta < b$$

证：由Taylor展开式

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\xi)}{2!}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 \quad \xi \text{ 依赖 } x$$

两边在 $[a, b]$ 上积分。因 $(x - \frac{a+b}{2})^2$ 在 $[a, b]$ 上不变号，故由广义积分中值定理知，在 (a, b) 上存在一点 η ，使得：

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx \\ &= (b-a)f\left(\frac{b+a}{2}\right) + \frac{(b-a)^3}{24} f''(\eta) \quad (a < \eta < b) \end{aligned}$$

中点求积公式($n=0$)有一次代数精度。

② 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 有二阶连续导数，**梯形求积公式**有下列误差估计：

$$E_T[f] = \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)] = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta) \quad a < \eta < b$$

证： 由 $E_T[f] = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx$ ξ 依赖 x

注意 $(x-a)(x-b) \leq 0$ ，且 $f^{(2)}(\xi)$ 是 $[a,b]$ 上依赖于 x 的连续函数。运用广义积分中值定理，在 (a,b) 上存在一点 η ，使得

$$\begin{aligned} E_T[f] &= \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx = \frac{f''(\eta)}{2!} \int_a^b (x-a)(x-b)dx \\ &= -\frac{1}{12} f''(\eta)(b-a)^3 \quad (a < \eta < b) \end{aligned}$$

梯形求积公式($n=1$)有一次代数精度。

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

③ 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 有四阶连续导数, **Simpson公式**有下列误差估计:

$$\begin{aligned} E_S[f] &= \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] \\ &= -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), a < \eta < b \end{aligned}$$

证: 注意Simpson公式的代数精度为三。构造次数不高于三次的多项式 $H_3(x)$, 使之满足插值条件:

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

$$\begin{aligned} E_S[f] &= \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] \\ &= \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{6} [H_3(a) + 4H_3(\frac{a+b}{2}) + H_3(b)] \\ &= \int_a^b f(x)dx - \int_a^b H_3(x)dx \quad \int_a^b H_3(x)dx = \frac{b-a}{6} [H_3(a) + 4H_3(\frac{a+b}{2}) + H_3(b)] \end{aligned}$$

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

$$E_2(f) = \int_a^b \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!} (x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx, \text{ 但此积分无法计算。}$$

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

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

注意 $(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b) \leq 0$ ，且 $f^{(4)}(x)$ 是 $[a, b]$ 上的连续函数。运用广义积分中值定理，在 (a, b) 上存在一点 η ，使得

$$E_S[f] = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!} \int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2 (x-b)dx = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), a < \eta < b$$

即

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

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

Simpson公式($n=2$)有三次代数精度。

④ 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 有六阶连续导数, **Cotes公式**有下列误差估计:

$$\begin{aligned} E_C[f] &= \int_a^b f(x)dx - \\ &\quad - (b-a) \left[\frac{7}{90} f(x_0) + \frac{32}{90} f(x_1) + \frac{12}{90} f(x_2) + \frac{32}{90} f(x_3) + \frac{7}{90} f(x_4) \right] \\ &= -\frac{2}{945} (b-a) \left(\frac{b-a}{4} \right)^6 f^{(6)}(\eta) \quad a < \eta < b \end{aligned}$$

Cotes公式有五次代数精度。

五 求积公式的收敛性与稳定性

求积公式

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + E_n[f]$$

截断误差

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

如果 $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n[f] = 0$ ($\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) = \int_a^b f(x)dx$) ,
则称该**求积公式收敛**。

如果求积公式对函数值的误差不敏感(误差能够控制), 则称该**求积公式稳定**。

求积公式稳定的充分条件

设计算 $\{f(x_i)\}_{i=0}^n$ 有绝对误差 $\{e_i\}_{i=0}^n$ ，即

$$f^*(x_i) - f(x_i) = e_i$$

$$\text{记 } I_n(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad I_n(f^*) = \sum_{i=0}^n A_i f^*(x_i)$$

$$\begin{aligned} \text{由 } |e(I_n^*)| &= |I_n(f^*) - I_n(f)| = \left| \sum_{i=0}^n A_i f^*(x_i) - \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \right| \\ &= \left| \sum_{i=0}^n A_i (f^*(x_i) - f(x_i)) \right| = \left| \sum_{i=0}^n A_i e_i \right| \leq \sum_{i=0}^n |A_i| |e_i| \end{aligned}$$

$$\text{记 } \varepsilon = \max_{0 \leq i \leq n} |e_i| \quad \text{则 } |e(I_n^*)| \leq \varepsilon \sum_{i=0}^n |A_i|$$

$$\text{若 } A_i > 0 \ (i = 0, 1, \dots, n) \quad \text{有 } |e(I_n^*)| \leq \varepsilon \sum_{i=0}^n A_i = (b-a)\varepsilon$$

故当求积系数 A_i 全为正时，求积公式稳定。

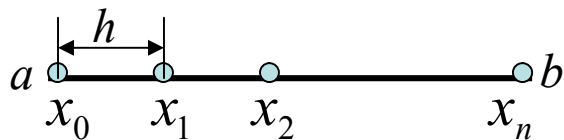
$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

§ 4 复化求积公式

一 复化求积算法

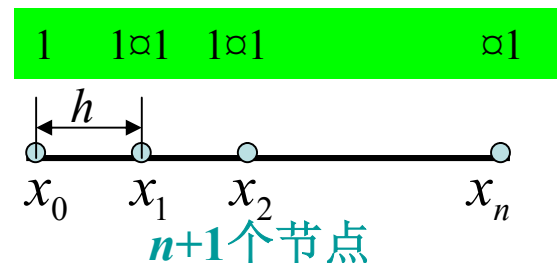
当 $n \leq 7$ 时，cotes系数为正；从 $n=8$ 开始，cotes系数有正有负（见课本96页）。这会使计算误差得不到控制，稳定性得不到保证。

计算时通常不采用 n 较大的Newton-cotes公式，而是将 $[a, b]$ 等分为 n 个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ $i = 0, 1, \dots, n-1$ ，记 $h=(b-a)/n$ 。在每个小区间上用低阶Newton-cotes公式，然后对所有小区间的计算结果求和，这样建立的求积公式称为复化（Newton-cotes）求积公式。



$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

1 复化梯形公式



$$\begin{aligned}
 I &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \\
 &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] - \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) \\
 &= \frac{h}{2} [f(a) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(b)] - \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) \\
 &= T_n(f) + E_{T_n}(f)
 \end{aligned}$$

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

复化梯形公式

$$E_{T_n}(f) = I - T_n(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i)$$

复化梯形公式的余项

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] - \frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta) \quad a < \eta < b$$

若 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 连续, 设 m 为 $f''(x)$ 的最小值, M 为 $f''(x)$ 的最大值, 则

$$m \leq \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) \leq M$$

根据连续函数介值定理, 在 (a,b) 定有一点 η , 使

$$f''(\eta) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i)$$

故 $E_{T_n}(f) = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) = -\frac{nh}{12} h^2 f''(\eta)$

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

当被积函数二阶导函数连续时, 复化梯形公式收敛, 并且稳定。

$$E_{T_n}(f) = I - T_n = -\frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i)$$

2 复化Simpson公式

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

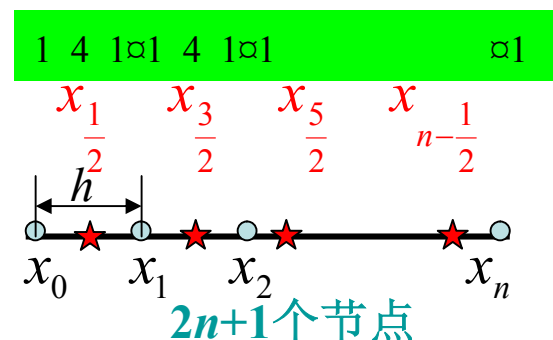
$$= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{6} [f(x_i) + 4f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(x_{i+1})] - \frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)$$

$$= \frac{h}{6} [f(a) + 4f(x_{\frac{1}{2}}) + 2f(x_1) + 4f(x_{\frac{3}{2}}) + 2f(x_2) + 4f(x_{\frac{5}{2}}) + \cdots$$

$$+ 2f(x_{n-1}) + 4f(x_{(n-1)+\frac{1}{2}}) + f(b)] - \frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)$$

$$= \frac{h}{6} \left[f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(b) \right] - \frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)$$

$$= S_n(f) + E_{S_n}(f)$$



$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] - \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta) \quad a < \eta < b$$

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

复化Simpson公式

$$E_{S_n}(f) = I - S_n(f) = -\frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)$$

复化Simpson公式的余项

若 $f^{(4)}(x)$ 在 $[a,b]$ 连续, 设 m 为 $f^{(4)}(x)$ 的最小值,
 M 为 $f^{(4)}(x)$ 的最大值, 则有

$$m \leq \frac{\sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)}{n} \leq M$$

$$f^{(4)}(\eta) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i)$$

故 $E_{S_n}(f) = -\frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_i) = -\frac{h^5}{2880} n \cdot f^{(4)}(\eta)$

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

当被积函数二阶导函数连续时, 复化Simpson
 公式收敛, 并且稳定。

例：取5个等距节点(含区间端点)，用复化梯形、复化Simpson求积公式近似计算 $\int_0^1 e^x dx$ (小数点后至少取4位)。

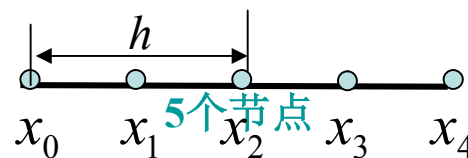
解：对于复化梯形公式， $h = \frac{1-0}{4} = \frac{1}{4}$

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^x dx &\approx \frac{h}{2} (e^0 + 2e^{\frac{1}{4}} + 2e^{\frac{1}{2}} + 2e^{\frac{3}{4}} + e^1) \\ &\approx \frac{0.25}{2} \times (1.00000 + 2 \times 1.28402 + 2 \times 1.64872 + 2 \times 2.11700 + 2.71828) \\ &\approx 1.7272 \end{aligned}$$



对于复化Simpson公式， $h = \frac{1-0}{2} = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^x dx &\approx \frac{h}{6} (e^0 + 4e^{\frac{1}{4}} + 2e^{\frac{1}{2}} + 4e^{\frac{3}{4}} + e^1) \\ &\approx \frac{0.5}{6} \times (1.00000 + 4 \times 1.28402 + 2 \times 1.64872 + 4 \times 2.11700 + 2.71828) \\ &\approx 1.7183 \end{aligned}$$



$$\int_0^1 e^x dx = 1.718281828 \dots$$

例：用积分 $\int_2^8 \frac{1}{x} dx = 2\ln 2$ 计算 $\ln 2$ ，且要使所得近似值具有5位有效数字。问用复化梯形公式、复化Simpson公式计算时，至少要取多少个节点？

解：由 $\ln 2 = \frac{1}{2} \int_2^8 \frac{1}{x} dx$

$$\text{且 } \frac{1}{2} \int_2^8 \frac{1}{x} dx > \frac{1}{2} \int_2^8 \frac{1}{8} dx = \frac{1}{2} \left(\frac{8-2}{8} \right) = 0.375$$

$$\text{即 } 0.375 < \ln 2 < \ln e$$

故计算 $\ln 2$ 时，要使误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-5}$ 。

① 由 $E_{T_n}(f) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta)$

得 $|E_{T_n}(f)| \leq \frac{(b-a)}{12} h^2 M_2 = \frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2 \quad M_2 = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(2)}(x)|$

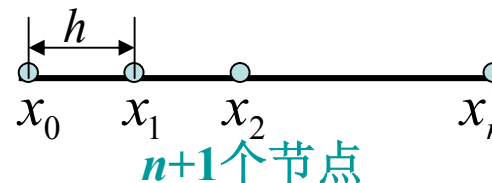
由 $f(x) = \frac{1}{2x} \quad f'(x) = -\frac{1}{2x^2} \quad f''(x) = \frac{1}{x^3}$

得 $M_2 = \max_{2 \leq x \leq 8} \left| \frac{1}{x^3} \right| = \frac{1}{2^3} = \frac{1}{8}$

令 $|E_{T_n}(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2 = \frac{6^3}{12n^2} \times \frac{1}{8} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$

得 $n \geq 670.8203933\dots$

故节点至少应取672个。



$$\ln 2 = \frac{1}{2} \int_2^8 \frac{1}{x} dx$$

② 由 $E_{S_n}(f) = -\frac{(b-a)}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta)$

得 $|E_{S_n}(f)| \leq \frac{b-a}{2880} h^4 M_4 = \frac{(b-a)^5}{2880n^4} M_4 \quad M_4 = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)|$

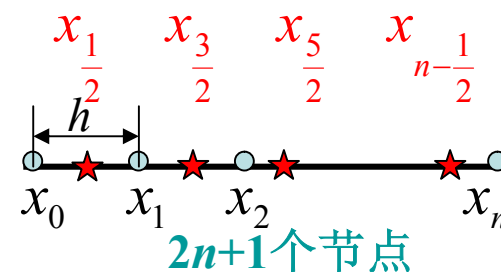
由 $f(x) = \frac{1}{2x} \quad f'(x) = -\frac{1}{2x^2} \quad f''(x) = \frac{1}{x^3} \quad f^{(3)}(x) = \frac{-3}{x^4} \quad f^{(4)}(x) = \frac{12}{x^5}$

得 $M_4 = \max_{2 \leq x \leq 8} \left| \frac{12}{x^5} \right| = \left| \frac{12}{2^5} \right| = \frac{3}{8}$

令 $|E_{S_n}(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880n^4} M_4 = \frac{6^5}{2880n^4} \times \frac{3}{8} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-5}$

得 $n \geq 21.21320343 \dots$ n 至少应取 22。

求积节点至少应取 $2n+1=45$ 个。



注： 复化型求积公式非插值型求积公式。

二 区间逐次分半求积法

使用复化求积公式时，

- ① 若事先估计需要的节点个数，需要对被积函数的高阶导数做估计，其工作量可能很大；
- ② 被积函数的高阶导数无法估计时（如被积函数的解析表达式未知），节点数目无法事先估计。
- ③ 即使估计出应采用的节点数目，该节点数有可能偏大，从而增加了不必要的计算量。

实际中常用“事后误差估计”法。

“事后误差估计”法：在步长逐次分半的过程中，反复利用复化求积公式进行计算。并同时查看相继两次计算结果的差值是否达到要求，直到所求得的积分值满足精度要求为止。

用 $T_n(f), S_n(f), C_n(f)$ 和 $T_{2n}(f), S_{2n}(f), C_{2n}(f)$ 分别表示 $[a, b]$ n 等份和 $2n$ 等份时复化梯形求积公式、复化 Simpson 求积公式、复化 Cotes 求积公式的计算结果。

由复化梯形公式，有

$$I(f) = T_n(f) - \frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta_1) \quad I(f) = T_{2n}(f) - \frac{b-a}{12} \left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta_2)$$

假定 $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上变化不大，即 $f''(\eta_1) \approx f''(\eta_2)$

$$\text{则 } \frac{I(f) - T_n(f)}{\frac{-(b-a)}{12} h^2} \approx \frac{I(f) - T_{2n}(f)}{\frac{-(b-a)}{12} \left(\frac{h}{2}\right)^2} \quad \text{即 } \frac{I(f) - T_n(f)}{I(f) - T_{2n}(f)} \approx 4$$

上式可改写为 $4T_{2n}(f) - T_n(f) \approx 3I(f)$

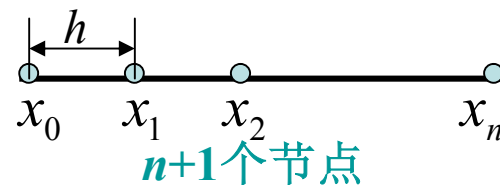
$$\text{即 } I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3}(T_{2n}(f) - T_n(f))$$

计算时只需检验 $|T_{2n}(f) - T_n(f)| < \varepsilon$ 是否满足？若不满足，则再把区间分半进行计算，直到满足要求为止。

步长折半的复化梯形公式 (T_{2n} 与 T_n 的关系)

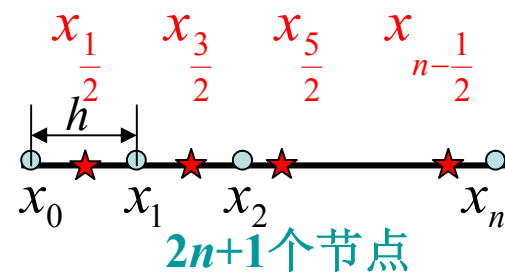
目的： 利用前一次计算结果以减少重复计算函数值的工作量。

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



$$T_{2n}(f) = \frac{h'}{2} \left(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{2n-1} f(x'_i) + f(b) \right) \quad h' = \frac{h}{2}$$

$$\{x'_i\}_{i=1}^{2n-1} : \left\{ x_1, x_1, x_3, x_2, \dots, x_{n-1}, x_{n-\frac{1}{2}} \right\}$$

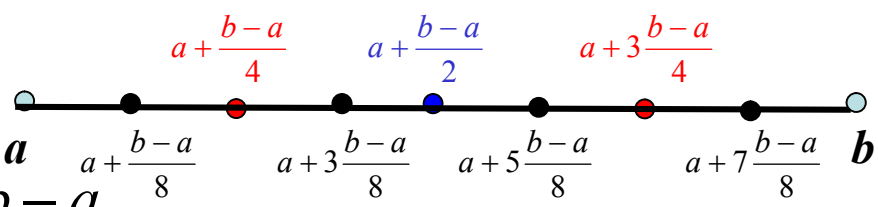


故 $T_{2n}(f) = \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2} [f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] + 2 \sum_{i=1}^n f(x_{i-\frac{1}{2}})$

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

称为**步长折半（区间逐次分半）**的复化梯形公式。

步长折半复化梯形公式的实施:

$$\begin{aligned}
 T_1(f) &= \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \\
 T_2(f) &= \frac{1}{2} T_1(f) + \frac{b-a}{2} f\left(a + \frac{b-a}{2}\right) \\
 T_4(f) &= \frac{1}{2} T_2(f) + \frac{b-a}{4} \left(f\left(a + \frac{b-a}{4}\right) + f\left(a + 3\frac{b-a}{4}\right) \right) \\
 T_8(f) &= \frac{1}{2} T_4(f) \\
 &+ \frac{b-a}{8} \left(f\left(a + \frac{b-a}{8}\right) + f\left(a + 3\frac{b-a}{8}\right) + f\left(a + 5\frac{b-a}{8}\right) + f\left(a + 7\frac{b-a}{8}\right) \right) \\
 &\vdots
 \end{aligned}$$


对**复化Simpson公式**， 由

$$I(f) = S_n(f) - \frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta_1) \quad I(f) = S_{2n}(f) - \frac{b-a}{2880} \left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_2)$$

假定 $f^{(4)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上变化不大， 则 $\frac{I(f) - S_n(f)}{I(f) - S_{2n}(f)} \approx 2^4 = 4^2$

$$\text{即 } I(f) \approx S_{2n}(f) + \frac{1}{15} (S_{2n}(f) - S_n(f)) = S_{2n}(f) + \frac{1}{4^2 - 1} (S_{2n}(f) - S_n(f))$$

对**复化Cotes公式**， 由

$$I(f) = C_n(f) - \frac{2(b-a)}{945} \left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta_1) \quad I(f) = C_{2n}(f) - \frac{2(b-a)}{945} \left(\frac{h}{8}\right)^6 f^{(6)}(\eta_2)$$

假定 $f^{(6)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上变化不大， 则有 $\frac{I(f) - C_n(f)}{I(f) - C_{2n}(f)} \approx 2^6 = 4^3$

$$\text{即 } I(f) \approx C_{2n}(f) + \frac{1}{63} (C_{2n}(f) - C_n(f)) = C_{2n}(f) + \frac{1}{4^3 - 1} (C_{2n}(f) - C_n(f))$$

§ 5 Romberg求积算法

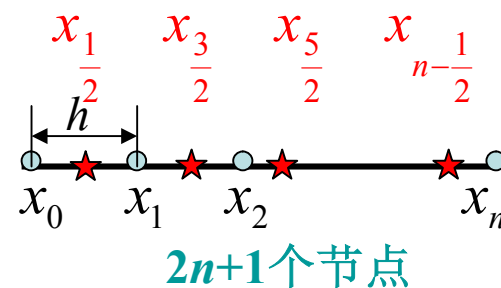
一 用低精度公式构造高精度公式

对于步长折半的逐步求积过程，可以运用 $T_{2n}(f) - T_n(f)$ 对 $T_{2n}(f)$ 进行校正，这样能够得到更好的积分近似值。

实际有
$$T_{2n}(f) + \frac{1}{3}(T_{2n}(f) - T_n(f)) = \frac{4}{3}T_{2n}(f) - \frac{1}{3}T_n(f) = S_n(f)$$

证明： 记 $h = x_{i+1} - x_i$ ，则

$$S_n(f) = \frac{h}{6} [f(x_0) + 4f(x_{\frac{1}{2}}) + 2f(x_1) + 4f(x_{\frac{3}{2}}) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + 4f(x_{n-\frac{1}{2}}) + f(x_n)]$$



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

$$S_n(f) = \frac{h}{6} [2f(x_0) + 4f(x_{\frac{1}{2}}) + 4f(x_1) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + 4f(x_{n-\frac{1}{2}}) + 2f(x_n)] \\ - \frac{h}{6} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

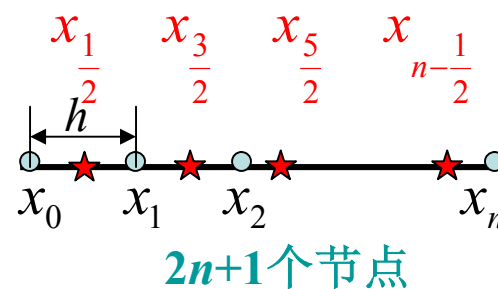
设 $\{x'_i\}_{i=1}^{2n-1} : \{x_{\frac{1}{2}}, x_1, x_{\frac{3}{2}}, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_{n-\frac{1}{2}}\}$

$$S_n(f) = \frac{2h}{6} [f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{2n-1} f(x'_i)] - \frac{h}{6} [f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)] \\ = \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{h}{2} \right) [f(a) + 2 \sum_{i=1}^{2n-1} f(x'_i) + f(b)] - \frac{1}{3} \cdot \frac{h}{2} [f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)]$$

$$= \frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f)$$

即 $S_n(f) = \frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f)$

(1)



或 $S_n(f) = \frac{4}{4-1} T_{2n}(f) - \frac{1}{4-1} T_n(f)$

$$S_n(f) = \frac{h}{6} [f(x_0) + 4f(x_{\frac{1}{2}}) + 2f(x_1) + 4f(x_{\frac{3}{2}}) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + 4f(x_{n-\frac{1}{2}}) + f(x_n)]$$

类似可以证明：

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

或
$$C_n(f) = \frac{4^2}{4^2 - 1} S_{2n}(f) - \frac{1}{4^2 - 1} S_n(f)$$

$$R_n(f) = \frac{64}{63} C_{2n}(f) - \frac{1}{63} C_n(f) \quad (3)$$

或
$$R_n(f) = \frac{4^3}{4^3 - 1} C_{2n}(f) - \frac{1}{4^3 - 1} C_n(f)$$

这个公式称为**Romberg求积公式**。

序列 $\{T_n(f)\}$ ， $\{S_n(f)\}$ ， $\{C_n(f)\}$ 和 $\{R_n(f)\}$ 分别称为**梯形序列**，**Simpson序列**，**Cotes序列**和**Romberg序列**。

利用公式(1)、(2)、(3)构成计算积分的数值算法称为**Romberg求积算法**。

公式(1)、(2)、(3)表明：对复化梯形公式、复化Simpson公式、复化Cotes公式进行线性组合，得到了复化Simpson公式、复化Cotes公式、复化Romberg公式的计算值，从而分别把误差从 $O(h^2)$ 提高到 $O(h^4)$ 、把误差从 $O(h^4)$ 提高到 $O(h^6)$ 、把误差从 $O(h^6)$ 提高到 $O(h^8)$ 。

得到Romberg序列后还可以继续外推而得到新的求积序列。将这些计算结果进行线性组合来提高计算精度的技术称为**Richardson外推技术**。但由于在新的求积序列中，其线性组合系数分别为：

$$\frac{4^m}{4^m - 1} \approx 1 \quad \frac{1}{4^m - 1} \approx 0$$

即新的求积序列与前一个序列结果相差不大，故通常外推到Romberg序列为止。

二 Romberg求积算法的实现

T
数
表

等分份数 $n=2^k$	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
$n=1$	T_1 (1)			
$n=2$	T_2 (2)	S_1 (3)		
$n=4$	T_4 (4)	S_2 (5)	C_1 (6)	
$n=8$	T_8 (7)	S_4 (8)	C_2 (9)	R_1 (10)
$n=16$	T_{16} (11)	S_8 (12)	C_4 (13)	R_2 (14)
$n=32$	T_{32} (15)	S_{16} (16)	C_8 (17)	R_4 (18)
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

若 $|R_{2n} - R_n| < \varepsilon$ ， 停止计算。

§ 6 Gauss型求积公式

给定 $n+1$ 求积节点，通过选取求积系数，可使插值型求积公式的代数精度达到 n 或 $n+1$ 。若求积节点和求积系数共 $2n+2$ 个待定参数都可以优化选取，则含 $n+1$ 个求积节点的求积公式有望达到 $2n+1$ 次代数精度。

若 x_0, x_1, \dots, x_n 是 $[a, b]$ 上的一组互异节点，且求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ 具有 $2n+1$ 次代数精度，则称该求积公式为**Gauss型求积公式**。

Gauss型求积公式是代数精度最高的求积公式。

例： n 个求积节点的**插值型**求积公式，代数精度至少为 $n-1$ 。 n 个求积节点的**高斯型**求积公式，代数精度为 $2(n-1)+1=2n-1$ 。

定理 n 为偶数（节点数 $n+1$ 为奇数）时，Newton-Cotes求积公式的代数精度至少是 $n+1$ ；
 n 为奇数（节点数 $n+1$ 为偶数）时，Newton-Cotes求积公式的代数精度至少是 n 。

总结

1. 复化求积算法

- 复化梯形公式、复化Simpson公式及其余项
- 运用复化公式的余项估计求积节点的个数
(或求积节点间距离)
- 基于误差事后估计法计算积分

2. 插值型求积公式

- 低阶Newton-Cotes公式及其截断误差
- 插值型公式及低阶Newton-Cotes公式代数精确度的结论
- 求积公式代数精度的判别
- 求积公式的收敛性与稳定性

3. Romberg求积算法

- 步长折半的复化梯形公式
- 用低精度公式构造高精度公式
- 用Romberg求积算法计算积分

4. 数值微分

- 用插值法及Taylor级数展开法推导或证明数值微分公式
- 基于常用数值微分公式的计算

5*. Gauss型求积公式

- Gauss型求积公式基本概念