第四章 数值积分 /* Numerical Integration */

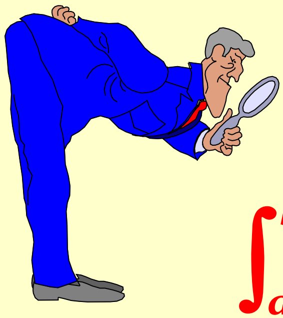
§1 数值积分的基本概念/*Elements Concept of NumericalIntegration */

- 对于积分 $I = \int_a^b f(x)dx$
- 只要求出被积函数 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$，便有下列

牛顿—莱布尼兹（Newton-Leibniz）公式：

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

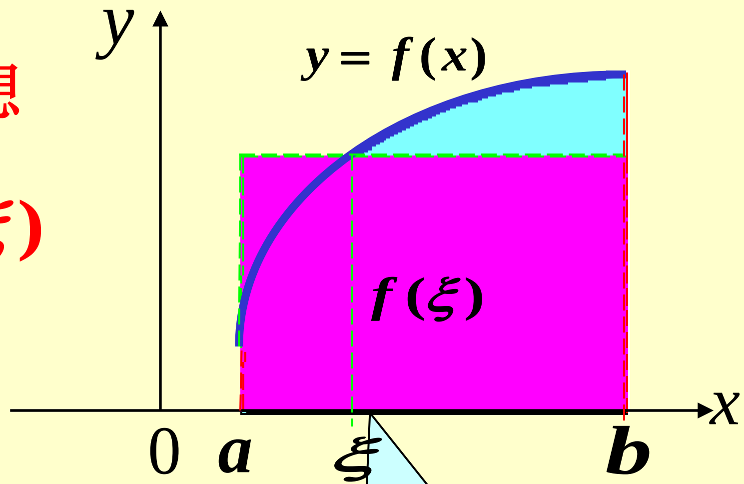
但因大量被积函数找不到用初等函数表示的原函数或 $f(x)$ 是由一张测量数据表给出时，牛顿—莱布尼兹公式则不能直接运用。



数值求积公式的基本思想

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

积分中值定理



底为$(b-a)$，高为$f(\xi)$的矩形面积为所求。

为了得到 $f(\xi)$ 的值我们则提供一些算法，用每种算法相应获得一种求积方法. 如 取平均高度 $f(\xi)$的近似值分别是

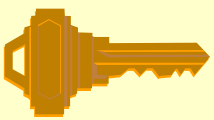
$$\frac{1}{2}[f(a)+f(b)]\ ,\ f\left(\frac{a+b}{2}\right)\ ,\ \frac{1}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right].$$

- $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$ – 梯形公式;
- $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ – 中矩公式;
- $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$ – 辛普森公式;

一般的，我们取[a, b]内若干个节点 x_k 处的高度 $f(x_k)$ 通过加权平均的方法近似的得出平均高度 $f(\xi)$，这类求积公式的一般形式：

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

式中 x_k 称为求积节点，A_k 称为求积系数，亦称伴随节点 x_k 的权。这类求积法通常称为机械求积法。



数值积分有下述三个方面的主要问题：

1) 精确性程度的衡量标准问题；

2) 求积公式的具体构造问题；

3) 余项估计问题（亦即误差估计问题）；

代数精度的概念

为了使一个求积公式能对更多的积分具有较好的实际计算意义，就要求它对尽可能多的被积函数都准确地成立。

$$I \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n) \quad (1)$$

--- 确定 $A_0, A_1, \cdots, A_n$ 之待定系数法。

对公式(1)，自然希望：取最简单函数 —— 多项式时，公式能精确成立！

即：$I = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + \cdots + A_n f(x_n)$ （又意味解方程组）

定义 如果某个求积公式对于次数不超过 m 的多项式均能准确成立，但对于 $m+1$ 次多项式就不一定准确，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

我们为什么绕不开多项式？计算机只能+-*或/所以只能计算多项式！别的要先转成多项式。

万事俱备可定 A_i 了！

即 若某个求积公式所对应的误差$R[f]$满足：$R[P_k]=0$ 对任意 $k \le m$ 阶的多项式成立，且 $R[P_{m+1}] \ne 0$ 对某个 $m+1$ 阶多项式成立，则称此求积公式的代数精度为m 。

取 $f(x) = 1, x, x_2, \cdots; x^m$ 代入(1), 并令相等:

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b-a \quad \sum_{k=0}^{n} A_k x_k = \frac{1}{2}(b^2-a^2) \quad \cdots\cdots \quad \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^n = \frac{1}{n+1}(b^{n+1}-a^{n+1})$$

即:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b-a \\ (b^2-a^2)/2 \\ (b^3-a^3)/2 \\ \vdots \\ (b^{n+1}-a^{n+1})/2 \end{bmatrix}$$

由此解出 $A_0, A_1, \cdots, A_n$ 如果

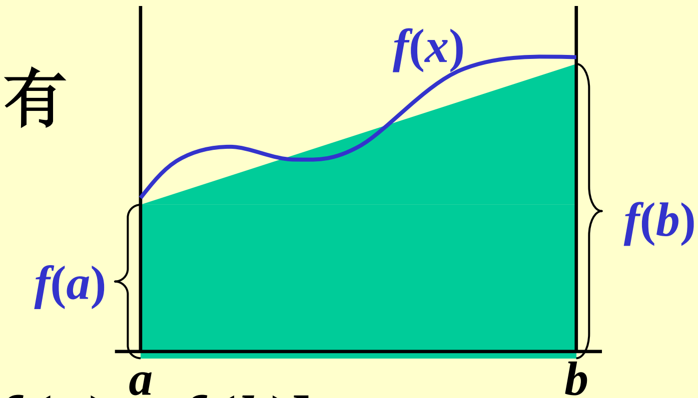
$$\int_a^b x^{n+1}\,dx \ne A_0 x_0^{n+1} + A_1 x_1^{n+1} + \cdots + A_n x_n^{n+1}$$

则所得公式具有n次代数精度，如果相等呢，则用x^{n+2}验证，·· · 。

求积公式的构造

例： 试构造两点求积公式：$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(a) + A_1 f(b)$

并考察其代数精度。



解 令公式对 $f(x)=1, x$ 准确成立，则有

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a \\ A_0 a + A_1 b = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2) \end{cases}$$

$$\Rightarrow A_0 = A_1 = \frac{b-a}{2} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

代数精度 = 1

梯形公式

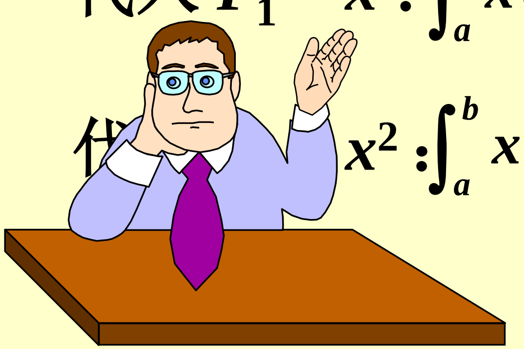
/* trapezoidal rule*/

逐次检查公式是否精确成立

代入 $P_0 = 1$: $\int_a^b 1\,dx = b - a = \frac{b-a}{2}[1+1]$

代入 $P_1 = x$: $\int_a^b x\,dx = \frac{b^2-a^2}{2} = \frac{b-a}{2}[a+b]$

代入 $P_2 = x^2$: $\int_a^b x^2 dx = \frac{b^3-a^3}{3} \neq \frac{b-a}{2}[a^2+b^2]$



若 x_k 给定，则有 $n+1$ 个待定量.

定理 在区间[a, b]上，对于给定的n+1个互异节点：

$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$ 总存在求积系数 $A_0, A_1, \cdots, A_n$，使求积公式至少具有n次代数精度。

插值型的求积公式 /*interpolatory quadrature*/

设给定一组节点 $a \le x_0 < x_1 \cdots < x_n \le b$ 且已知函数 $f(x)$ 在这些节点上的值，作插值函数 $L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)$。由于代数多项式 $L_n(x)$ 的原函数是容易求出的，我们取 $I_n = \int_a^b L_n(x)dx$ 作为积分 $I = \int_a^b f(x)dx$ 的 令

n次代数精度

$f(x_k) = L_n(x_k)$

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

这样构造出的求积公式 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

称作是插值型的，式中求积系数 A_k 通过插值基函数 $l_k(x)$ 积分得出 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$。

插值型求积公式的余项为：$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$

式中 ξ 与变量 x 有关，$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

定理 形如 $\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的求积公式至少有 n 次代数精度 $\Leftrightarrow$ 该公式为插值型（即：$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$ ）

证 充分性由余项易证得。下证必要性。

如果求积公式至少有 n 次代数精度，则它对于 $l_k(x)$ 应准确成立，即有

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

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

注意到

$$l_k(x_j)=\begin{cases}1 & k=j\\ 0 & k\neq j\end{cases}$$

例 对 $\int_0^3 f(x)dx$ 构造一个至少具有三次代数精度的求积公式。

解 具有4个求积节点的插值型求积公式，至少有3次代数精度，如果在[0，3]上取节点为0，1，2，3，则插值型求积公式为

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

$$\int_0^3 f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + A_2 f(2) + A_3 f(3)$$

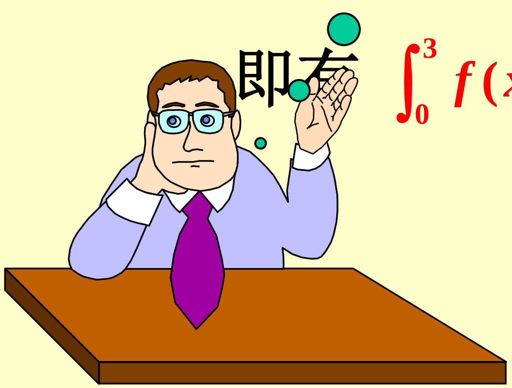
下面求 $A_k \ (k = 0,1,2,3)$

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

到底有多少次代数精度？

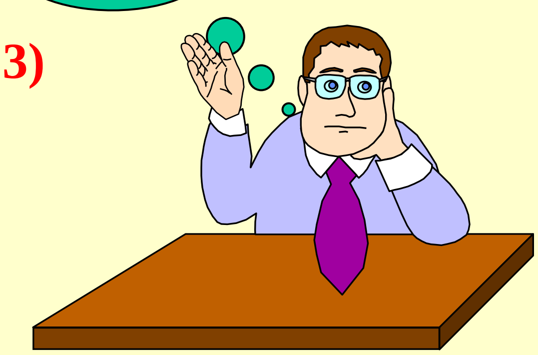
$A_2 = \frac{9}{8}$，$A_3 = \frac{3}{8}$

将 $f(x) = x^4$ 代入公式验证，两端不相等



即有 $\int_0^3 f(x)dx \approx \frac{3}{8} f(0) + \frac{9}{8} f(1) + \frac{9}{8} f(2) + \frac{3}{8} f(3)$

只有三次代数精度



例. 试确定下面积分公式中的参数使其代数精确度尽量高.

$$I=\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I_2$$

解: $f(x)=x^0$ $\quad I=\int_0^h x^0 dx = h$ $\quad I_2=h$

$f(x)=x^1$ $\quad I=\int_0^h x^1 dx=\frac{h^2}{2}$ $\quad I_2=\frac{h^2}{2}$

$f(x)=x^2$

$$I=\int_0^h x^2 dx=\frac{h^3}{3} \qquad I_2=\frac{h^3}{2}+ah^2[0-2h]=(\frac{1}{2}-2a)h^3$$

令$I=I_2$ $\quad a=\frac{1}{12}$

$$I=\int_0^h f(x)dx\approx\frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I_2$$

$f(x)=x^3$

$$I=\int_0^h x^3dx=\frac{h^4}{4}\qquad I_2=\frac{h^4}{2}+ah^2[0-3h^2]=\frac{h^4}{4}$$

$f(x)=x^4$

$$I=\int_0^h x^4dx=\frac{h^5}{5}\qquad I_2=\frac{h^5}{2}+ah^2[0-4h^3]=\frac{h^5}{6}$$

因此 $\qquad I(x^j)=I_2(x^j)\quad j=0,1,2,3$

$$I(x^4)\neq I_2(x^4)$$

所以该积分公式具有3次代数精确度.

求积公式收敛性和稳定性

定义 在求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 中，若

$$\lim_{\substack{n\to\infty \\ h\to 0}} \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)dx,$$ 其中 $h = \max\limits_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1})$ 则称求积公式是收敛的。

定义 对任给 $\varepsilon > 0$，若存在 $\delta > 0$ ，只要 $|f(x_k) - \tilde{f}_k| < \delta$

就有 $\left|\sum_{k=0}^{n} A_k [f(x_k) - \tilde{f}_k]\right| \le \varepsilon$ 成立 ，则称求积公式是稳定的。

定理 若求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 中系数 $A_k > 0(k = 0,1,\ldots,n)$ 则此求积公式是稳定的。

证明：对任给 $\varepsilon > 0$，若取 $\delta = \dfrac{\varepsilon}{b-a}$，对 $(k = 0,1,2,\cdots,n)$ 都有 $\left| f(x_k) - \tilde{f}_k \right| \le \delta$ 则有

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

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

故知求积公式是稳定的。

§ 2 Newton-Cotes 公式

利用插值多项式 $P_n(x)$

插值型积分公式

/*interpolatory quadrature*/

在$[a, b]$上取 $a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$，做 f 的 n 次插值多项式 $L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)$，即得到

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

A_k

$$A_k = \int_a^b \prod_{j \ne k} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} dx$$

由节点决定，与 $f(x)$ 无关。

误差 $R[f]$

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

$$= \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx = \int_a^b R_n(x)dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)dx$$

❖ 当节点等距分布时：$x_k = a + k\,h,\ h = \dfrac{b-a}{n},\quad k = 0, 1, \ldots, n$

$$A_k = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{j \ne k} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)} dx \qquad \text{令}\ x = a + t\,h$$

$$= \int_0^n \prod_{j \ne k} \frac{(t-j)h}{(k-j)h} \times h\,dt = \frac{(b-a)(-1)^{n-k}}{n\,k!(n-k)!} \int_0^n \prod_{j \ne k} (t-j)dt$$

Cotes系数 $C_k^{(n)}$

注：Cotes 系数仅取决于 n 和 k，可查表得到。与 $f(x)$ 及区间 $[a, b]$ 均无关。

– 柯特斯系数表

	$C_k^{(n)}$								
$n \backslash k$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1/2	1/2							
2	1/6	2/3	1/6						
3	1/8	3/8	3/8	1/8					
4	7/90	16/45	2/15	16/45	7/90				
5	**19/288**	**25/96**	**25/144**	**25/144**	**25/96**	**19/288**			
6	**41/840**	**9/35**	**9/280**	**34/105**	**9/280**	**9/35**	**41/840**		
7	$\frac{715}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{715}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

当$n \geq 8$时，柯特斯系数有正有负，这时稳定性得不到保证。

$n = 1$: $C_0^{(1)} = \frac{1}{2}$, $C_1^{(1)} = \frac{1}{2}$

Trapezoidal Rule

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

代数精度 = 1

$$R[f] = \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-a)(x-b)dx$$

/* 令 $x = a+th$, $h = b-a$, 用中值定理 */

$$= -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi), \quad \xi \in [a,b], \; h = \frac{b-a}{1}$$

$n = 2$: $C_0^{(2)} = \frac{1}{6}$, $C_1^{(2)} = \frac{2}{3}$, $C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$

Simpson's Rule

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

代数精度 = 3

$$R[f] = -\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b), \; h = \frac{b-a}{2}$$

$n = 3$: Simpson's 3/8-Rule, 代数精度 = 3, $R[f] = -\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi)$

$n = 4$: Cotes Rule, 代数精度 = 5, $R[f] = -\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\xi)$

例 分别用梯形公式和Simpson公式计算积分 $\int_1^2 e^{\frac{1}{x}}dx$ 的近似值和截断误差。

解：梯形公式 $\int_1^2 e^{\frac{1}{x}}dx \approx \frac{2-1}{2}(e+e^{\frac{1}{2}}) = 2.1835$

$$f(x)=e^{\frac{1}{x}},\ f'(x)=-\frac{1}{x^2}e^{\frac{1}{x}},\ f''(x)=(\frac{2}{x^3}+\frac{1}{x^4})e^{\frac{1}{x}}$$

截断误差为 $|R_1| \le \frac{(2-1)^3}{12}\max\limits_{1\le x\le 2}|f''(x)| = \frac{(2-1)^3}{12}f''(1) = 0.6796$

Simpson公式 $\int_1^2 e^{\frac{1}{x}}dx \approx \frac{2-1}{6}(e+4e^{\frac{1}{1.5}}+e^{\frac{1}{2}}) \approx 2.0263$

$$f^{(4)}(x)=(\frac{1}{x^8}+\frac{12}{x^7}+\frac{36}{x^6}+\frac{24}{x^5})e^{\frac{1}{x}},\quad \max_{1\le x\le 2}|f^{(4)}(x)| = f^{(4)}(1)=198.43$$

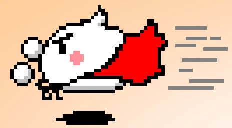
截断误差为 $|R_2| \le \frac{(2-1)^5}{2880}\max\limits_{1\le x\le 2}|f^{(4)}(x)| = \frac{(2-1)^5}{2880}|f^{(4)}(1)| = 0.06890.$

例　用牛顿—柯特斯公式计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$.

结果如下表，m 为有效数字位数。

n	I_n	m
1	0.9270354	1
2	0.9461359	3
3	0.9461109	3
4	0.9460830	6
5	0.9460830	6

HW:
p.121
#1，#4



Excuses for not doing homework

I could only get arbitrarily close to my textbook. I couldn't actually reach it.

定理 当阶n为偶数时，牛顿—柯特斯公式至少有n+1次代数精度。

证：见教材P90（只需验证当n为偶数时，牛顿—柯特斯公式对

$f(x)=x^{n+1}$ 的余项为零）