第四章

数值积分

§4.1数值积分的一般问题

数值求积公式

讨论如下形式的数值求积公式

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i) \tag{4.1.1}$$

称为机械求积公式.

其中$x_i \in [a,b]$ ($i=0,1,2,\ldots n$)称为求积节点;

H_i($i=0,1,2,\ldots n$)称为求积系数(它与$f(x)$无关).

$$E(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i) \tag{4.1.2}$$

称为求积公式的余项.

求积公式的代数精度

- 定义　若求积公式(4.1.1)对所有次数不超过m的多项式都精确成立，而对于某个$m+1$次多项式不能精确成立，则称此求积公式具有m次代数精度（或称该公式是m阶的）.
- 上述定义等价于：若求积公式(4.1.1)对$f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$均精确成立，而对$f(x)=x^{m+1}$不精确成立,则称此求积公式具有m次代数精度（或称该公式是m阶的）.
- 代数精度的概念是衡量求积公式精确性的标准.

插值型求积公式

- 以给定互异点$x_0, x_1, \ldots, x_n$ 为插值节点,作$f(x)$的n次插值多项式$\varphi_n(x)$,把$\varphi_n(x)$ 写成Lagrange插值多项式的形式

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \left(\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x\right) f(x_i)$$

求积系数

$$H_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x, \quad (i=0,1,2,\cdots,n)$$

- 对于求积公式

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

如果求积系数

$$H_i = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}\mathrm{d}x \qquad (4.1.3)$$

则称(4.1.1)为插值型求积公式.

其余项 $E(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} p_{n+1}(x)\mathrm{d}x$

若公式(4.1.1)是插值型求积公式，则它至少具有n次代数精度.

- 反之，若求积公式(4.1.1)至少具有n次代数精度，因$l_k(x)\in M_n$, $k=0,1,2,\ldots,n$.求积公式(4.1.1)对$l_k(x)$精确成立，即

$$\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}H_i l_k(x_i)=H_k,\ k=0,1,2,\cdots,n$$

- 综上有

定理 求积公式(4.1.1)至少具有n次代数精度的充分必要条件是它是插值型的.

例 确定求积公式中的待定参数，使其代数精确度尽量高，并指明求积公式所具有代数精度.

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

- 解 求积分公式中含有三个待参数，即A_{-1}, A_0, A_1. 令求积公式对$f(x)=1,x,x^2$ 精确成立，即

$$\begin{cases} A_{-1} + A_0 + A_1 = 2h \\ -h(A_{-1} - A_1) = 0 \\ h^2(A_{-1} + A_1) = \dfrac{2}{3}h^3 \end{cases}$$

解得 $A_{-1} = A_1 = \frac{1}{3}h, \quad A_0 = \frac{4}{3}h$,所求公式至少具有2次代数精确度.

再将$f(x)=x^3,x^4$代入所确定的求积公式，有

$$\int_{-h}^{h} x^3\mathrm{d}x = 0 = \frac{h}{3}(-h)^3 + \frac{h}{3}(h^3)$$

$$\int_{-h}^{h} x^4\mathrm{d}x = \frac{2}{5}h^5 \neq \frac{h}{3}(-h)^4 + \frac{h}{3}h^4$$

故 $\int_{-h}^{h} f(x)dx \approx \frac{h}{3} f(-h) + \frac{4h}{3} f(0) + \frac{h}{3} f(h)$ 具有3次代数精度.

§4.2 等距节点的Newton-Cotes公式

Newton-Cotes公式

将区间$[a,b]$ n等分，其分点为$x_i=a+ih$，$i=0,1,2,\ldots,n$， $h=(b-a)/n$，以这$n+1$个等距分点为插值节点,作n次插值多项式

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} f(x_i)l_i(x)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x\right)f(x_i)$$

求积系数

$$H_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x,\quad (i=0,1,2,\cdots,n)$$

- 作变量替换$x=a+th$，于是

$$H_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{(-1)^{n-i}h}{i!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t$$

记 $C_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot i!(n-i)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(t-j)\mathrm{d}t,\quad (i=0,1,2,\cdots,n)$ (4.2.1)

称为柯特斯（Cotes）系数.

则

$$H_i=(b-a)C_i^{(n)} \qquad (4.2.1)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i) \qquad (4.2.3)$$

称等距节点的插值型求积公式(4.2.3)为n阶牛顿—柯特斯（Newton-Cotes）公式.

- 当n=1时, Newton-Cotes公式(4.2.3)为梯形求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] = T \qquad (4.2.4)$$

$H_0 = H_1 = (b-a)/2$, $C_0 = C_1 = 1/2$

几何意义:用梯形面积近似代替曲边梯形面积.

- 当n= 2 时, Newton-Cotes公式(4.2.3)为抛物线(Simpson)求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] = S \qquad (4.2.5)$$

$H_0 = H_2 = (b-a)/6$, $H_1 = 2(b-a)/3$, $C_0 = C_2 = 1/6$, $C_1 = 2/3$

- 当n=4时, Newton-Cotes公式(4.2.3)为Cotes公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] \tag{4.2.6}$$

$H_0=H_4=7(b\text{-}a)/90, H_1=H_3=32(b\text{-}a)/90, H_2=12(b\text{-}a)/90,$

$C_0=C_4=7/90,\quad C_1=C_3=32/90, C_2=12/90.$

- 其它情形可通过查Cotes系数表，给出具体公式.

Newton-Cotes公式的收敛性

定理 对于n+1个节点的Newton-Cotes公式的求积系数H_k, 当$n\to\infty$时, 数列 $\sum_{k=0}^{n}|H_k|$ 无限放大.

定理 如果当$n\to\infty$时, 与插值型求积公式(4.1.1)相应的数列 $\sum_{k=0}^{n}|H_k|$ 无限放大, 则有函数$f(x)\in C[a,b]$, 使得数列

$$\sum_{k=0}^{n} H_k f(x_k) \quad (n=1,2,3,\cdots)$$

不收敛于 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$

此定理说明Newton-Cotes公式并不总是收敛于积分的真值.

Newton-Cotes公式的数值稳定性

- 设精确值为$f(x_j)$的计算值为$\tilde f(x_i)$，且

$$\left|f(x_i)-\tilde f(x_i)\right|\le\varepsilon_i,\quad i=0,1,2,\cdots,n.\quad \varepsilon=\max_i\varepsilon_i$$

那么

$$\left|\sum_{i=0}^{n}H_i f(x_i)-\sum_{i=0}^{n}H_i\tilde f(x_i)\right|\le\sum_{i=0}^{n}|H_i|\left|f(x_i)-\tilde f(x_i)\right|\le\varepsilon\sum_{i=0}^{n}|H_i|$$

若每个H_i (i=0,1,2,…,n)都为正, 则

$$\left|\sum_{i=0}^{n}H_i f(x_i)-\sum_{i=0}^{n}H_i\tilde f(x_i)\right|\le\varepsilon\sum_{i=0}^{n}H_i=(b-a)\varepsilon$$

这时数值计算是稳定的.

若H_i有正有负,则$\sum_{i=0}^{n}|H_i|>b-a$且随n的增大无限放大,

这时数值计算是不稳定的.

- 当n=8时，Newton-Cotes公式中求积系数出现负数.
- 实际计算并不用高阶Newton-Cotes公式，一方面余项含高阶导数；另一方面其收敛性、稳定性都差.

Newton-Cotes公式的代数精度

- 对于n阶的Newton-Cotes公式

当n为奇数时，至少具有n次代数精度；

当n为偶数时，至少具有$n+1$次代数精度.

梯形求积公式具有1次代数精度.

抛物线求积公式具有3次代数精度.

Newton-Cotes公式的余项

- 对于n阶的Newton-Cotes公式

当n为奇数时，若$f(x)\in C^{n+1}[a,b]$,则

$$E(f)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b p_{n+1}(x)\mathrm{d}x,\quad \xi\in(a,b)$$

当n为偶数时，若$f(x)\in C^{n+2}[a,b]$,则

$$E(f)=\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b xp_{n+1}(x)\mathrm{d}x,\quad \xi\in(a,b)$$

定理4.3 当n为奇数时，Newton-Cotes公式有n次代数精度；当n为偶数时，Newton-Cotes公式有$n+1$次代数精度.

- 梯形求积公式的余项
- 定理 1　若$f(x)\in C^2[a,b]$,则梯形求积公式有余项估计

$$E_T(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\qquad \eta\in(a,b)$$

(4.2.7)

- 证　由插值余项定理知

$$f(x)-L_1(x)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x-a)(x-b)\quad \xi\in(a,b)$$

等式两边积分得

$$E_T(f)=\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

由于$f(x)\in C^2[a,b]$，且$(x\text{-}a)(x\text{-}b)$在$[a,b]$上非正(不变号),故根据积分中值定理知,至少存在一点$\eta\in(a,b)$,使

$$E_T(f)=\frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x=-\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\eta)$$

- 抛物线求积公式的误差
- 定理 2　若$f(x)\in C^4[a,b]$,则抛物线求积公式有余项估计

$$E_s(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

$$=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)\qquad \eta\in(a,b)\qquad (4.2.8)$$

- 证 抛物线求积公式具有3次代数精度, 为此构造三次多项式$P_3(x)$，满足 $P_3(a)=f(a)$,

$$P_3(\frac{a+b}{2})=f(\frac{a+b}{2}),P_3(b)=f(b),P_3'(\frac{a+b}{2})=f'(\frac{a+b}{2})$$

则

$$f(x)-P_3(x)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\quad \xi\in(a,b)$$

等式两边从a到b积分得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\int_a^b P_3(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\mathrm{d}x$$

由于$P_3(x)$是三次多项式，故抛物线求积公式对它准确成立，即

$$\int_a^b P_3(x)\,\mathrm{d}\,x=\frac{b-a}{6}[P_3(a)+4P_3(\frac{a+b}{2})+P_3(b)]$$

$$=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$

这样

$$E_s(f)=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\mathrm{d}x$$

由于$f(x)\in C^4[a,b]$，且$(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)$在$[a,b]$上非正(不变号),故根据积分中值定理知,至少存在一点$\eta\in(a,b)$,使

$$E_s(f)=\frac{1}{4!}f^{(4)}(\eta)\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\mathrm{d}x$$

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

复化Newton-Cotes公式

复化梯形求积公式

将区间$[a, b]$ n等份，其分点为$x_i=a+ih$ $(i=0,1,2,\ldots n)$, $h=(b-a)/n$. 在每个小区间$[x_k, x_{k+1}]$ $(k=0,1,2,\ldots n-1)$,上利用梯形求积公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}\,x \approx \frac{x_{k+1}-x_k}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$

则

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

$$=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)=T_n \qquad (4.2.9)$$

称$T_n=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)]$为复化梯形求积公式.

- 将区间$[a, b]$ $2n$等份,得复化梯形求积公式

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

$$T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+U_n)$$

其中

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

- 复化梯形求积公式的误差
- 定理 3　若$f(x)\in C^2[a,b]$,则

$$E(f;T_n)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta),\quad \eta\in(a,b) \tag{4.2.10}$$

- 证

$$E(f;T_n)=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}\,x - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}\{\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}\,x - \frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]\}$$
$$= -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)\qquad \eta_k\in(x_k,x_{k+1})$$

由于$f(x)\in C^2[a,b]$，利用连续函数的性质知存在一点$\eta\in(a,b)$,使

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

这样

$$E(f;T_n)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta),\quad \eta\in(a,b)$$

- $$\lim_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

即复化梯形求积公式是收敛的

- T_n的求积系数均为正，故是数值稳定的.

复化抛物线求积公式

将区间$[a, b]$ n等份，其分点为$x_i=a+ih$ $(i=0,1,2,\ldots n)$, $h=(b-a)/n$. 在每个小区间$[x_k, x_{k+1}]$ $(k=0,1,2,\ldots n-1)$,上利用抛物线求积公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{x_{k+1}-x_k}{6}[f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})]$$

则

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

$$= \frac{h}{6}[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)] = S_n \qquad (4.2.11)$$

称为复化抛物线求积公式.

- $$S_n = \frac{1}{3}T_n + \frac{2}{3}U_n$$

$$S_n = \frac{4T_{2n} - T_n}{4-1} \qquad (4.2.12)$$

- 复化抛物线求积公式的误差

定理 4 若$f(x) \in C^4[a,b]$,则

$$E(f;S_n) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}\,x - S_n = -\frac{(b-a)}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b)$$

(4.2.13)

- $$\lim_{n\to\infty} S_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

即复化梯形求积公式是收敛的

- S_n的求积系数均为正，故是数值稳定的.

- 复化Cotes公式

$$C_n = \frac{h}{90}[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)] \tag{4.2.14}$$

其余项为

$$E(f;C_n) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - C_n = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \eta \in (a,b) \tag{4.2.15}$$

复化Cotes公式是收敛的、数值稳定的.

$$C_n = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2 - 1}$$

例 用梯形求积公式和Simpson公式计算积分 $\int_0^1 e^{-x}dx$,并估计误差.

- 解 记$a=0$, $b=1$, $f(x)=e^{-x}$,则$f'(x)=-e^{-x}$ $f''(x)=e^{-x}$, $f'''(x)=-e^{-x}$, $f^{(4)}(x)=e^{-x}$

$$T=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{1-0}{2}(e^{-0}+e^{-1})=0.683\,939\,7$$

$$E_T(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)=-\frac{1}{12}e^{-\eta},\quad \eta\in(0,1)$$

$$|E_T(f)|\le\frac{1}{12}=0.083\,333$$

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

$$= \frac{1-0}{6}(\mathrm{e}^{-0} + 4\mathrm{e}^{-0.5} + \mathrm{e}^{-1}) = 0.632\,333\,7$$

$$E_S(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta) = -\frac{1}{2880}\mathrm{e}^{-\eta}, \quad \eta \in (0,1)$$

$$\left| E_S(f) \right| \le \frac{1}{2880} = 0.000\,347\,2$$

推导如下矩形求积公式:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(a)+\frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2$$

解 将$f(x)$在a处展开，得

$$f(x)=f(a)+f'(\xi)(x-a),\quad \xi\in(a,x)$$

两边在$[a, b]$上积分，得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b f(a)\mathrm{d}x+\int_a^b f'(\xi)(x-a)\mathrm{d}x$$

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

由于x-a在$[a, b]$上不变号，故有$\eta\in(a,b)$, 使

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(a)+f'(\eta)\int_a^b (x-a)\mathrm{d}x$$

从而得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(a)+\frac{1}{2}f'(\eta)(b-a)^2,\quad \eta\in(a,b)$$

- 例 若用复化梯形求积公式求$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$的近似值，问要将积分区间[0, 1]分成多少等份才能保证计算结果有四位有效数字？若用复化抛物线求积公式呢？

- 解 记$f(x)=e^{-x}$，则 $f''(x)=f^{(4)}(x)=e^{-x}$． $\int_0^1 \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$ 的真值具有零位整数，所以要求计算结果有四位有效数字，即要求复化梯形求积公式的误差满足

$$0.3 < \int_0^1 e^{-x} < 1$$

$$|E(f;T_n)| \le \frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

由于b-a=1, $h=(b-a)/n=1/n$,所以要使

$$|E(f;T_n)| = \frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\eta) = \frac{1}{12n^2}\mathrm{e}^{-\eta} \le \frac{1}{12n^2} \le \frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

只要 $n^2 \ge \frac{1}{6}\times 10^4$ ，开平方得，$n \ge 40.8$，取n=41.

- 因此，若用复化梯形公式求 $\int_0^1 e^{-x}dx$ 的近似值，必需将区间[0, 1]分成41等分才能保证计算结果有四位有效数字.
- 若用复化抛物线求积公式，则由其误差估计式知，要使

$$\left|E(f;S_n)\right| = \left|-\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta)\right| = \frac{h^4}{2880}e^{-\eta} \le \frac{1}{2880n^4} \le \frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

只要$n\geq 2$，因此用复化抛物线求积公式计算，只需将区间[0, 1]分成2等分.

试分别用复化梯形求积公式和复化抛物线求积公式计算下列积分，并比较结果.

$$\int_0^1 \frac{x}{4+x^2}dx \ (\text{将区间8等分})$$

- 解　将区间[0, 1]8等分，分点为$x_i=ih$ (i=0,1,2,…8), h=1/8.，令$f(x)=x/(4+x^2)$

可计算得下表

x_i	0	1/8	1/4	3/8	1/2
$f(x_i)$	0	0.031 128 4	0.061 538 5	0.090 566 0	0.117 647 1
x_i		5/8	3/4	7/8	1
$f(x_i)$		0.142 348 8	0.164 383 6	0.183 606 6	0.200 00

- 由复化梯形求积公式得

$$T_8 = \frac{1}{2} \times \frac{1}{8}\left[f(0) + 2\sum_{i=1}^{7} f(x_i) + f(1) \right]$$
$$= \frac{1}{16}\left[f(0) + 2f(\frac{1}{8}) + 2f(\frac{1}{4}) + 2f(\frac{3}{8}) + 2f(\frac{1}{2}) + 2f(\frac{5}{8}) + 2f(\frac{3}{4}) + 2f(\frac{7}{8}) + f(1) \right]$$
$$\approx 0.111\,402\,4$$

- 由复化抛物线求积公式得

$$S_4 = \frac{1}{6} \times \frac{1}{4}\left\{ f(0) + 2\left[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{1}{2}) + f(\frac{3}{4}) \right] + 4\left[f(\frac{1}{8}) + f(\frac{3}{8}) + f(\frac{5}{8}) + f(\frac{7}{8}) \right] + f(1) \right\}$$
$$\approx 0.111\,572\,4$$

- 与积分的精确值比较，显然复化抛物线求积法比复化梯形求法精确得多.

$$\int_0^1 \frac{x}{4+x^2}\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\ln(4+x^2)\Big|_0^1 = \frac{1}{2}\ln\frac{5}{4} = 0.1115717$$

- 例4.1 利用复化梯形公式计算积分

$$S_i(1)=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$$

的近似值 T_8，并利用递推公式 $S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$ 求出复化的Simpson公式 S_4 的值，然后都与真值 $S_i(1)=0.9460831$ 比较（所谓真值是指其每一位数字都是有效数字）。

解　我们采用步长对分法。先对整个区间[0,1]使用梯形公式。对于函数$f(x)=\sin x/x$，它在$x=0$值应补充定义为$f(0)=1$，而$f(1)=0.8414709$。于是得

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

然后将区间二等分，再求出中点的函数值

$$f(\frac{1}{2})=0.9588510.$$

于是利用递推公式(4.2.26)，有

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

我们进一步二分求积区间，并计算新分分点上的函数值

$$f(\frac{1}{4}) = 0.9896158, \quad f(\frac{1}{4}) = 0.9088516.$$

再利用式(4.2.26)，有

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

相仿地，可得到

$$T_8 = 0.9456909.$$

再应用递推公式(4.2.31)，求得

$$S_4 = \frac{4T_8 - T_4}{3} = 0.9460834.$$

与真值相比，T_8 具有三位有效数字，而 S_4具有六位有效数字。

§ 4.3 Romberg求积法

$$E(f;T_n)=I(f)-T_n=-\frac{(b-a)^3}{12}\frac{1}{n^2}f''(\eta_1),\quad \eta_1\in(a,b) \qquad O(h^2)$$

$$E(f;T_{2n})=I(f)-T_{2n}=-\frac{(b-a)^3}{12}\frac{1}{(2n)^2}f''(\eta_2),\quad \eta_2\in(a,b)$$

$$\frac{I(f)-T_n}{I(f)-T_{2n}}\approx 4,\qquad I(f)\approx T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}=S_n \quad (4.3.1)\quad O(h^4)$$

- 同理得

$$\frac{I(f)-S_n}{I(f)-S_{2n}}\approx 16,\qquad I(f)\approx S_{2n}+\frac{1}{15}(S_{2n}-S_n)=\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}=C_n,\ (4.3.2)\quad O(h^6)$$

- 同理得Romberg公式

$$\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}=R_n \qquad O(h^8) \qquad (4.3.3)$$

- …进行下去.
- 在变步长(半分区间)的过程中运用(4.3.1), (4.3.2), (4.3.3),就能将粗糙的近似值T_n逐步加工成精度较高的S_n (3阶的), C_n (5阶的), , R_n ,…值，提高了收敛速度，其实质起到了加速收敛的作用，也称为逐次分半加速法.

Romberg方法

- 将区间[a, b]依次作$2^0, 2^1, 2^2, \ldots$等分，记 $h_i = \dfrac{b-a}{2^i}$

按复化梯形求积公式算得的值相应地记为 $T_0^{(0)}, T_0^{(1)}, T_0^{(2)}, \cdots$.

由公式

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}$$

递推计算数表

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$\cdots$
0	$T_0^{(0)}$				
1	$T_0^{(1)}$	$T_1^{(0)}$			
2	$T_0^{(2)}$	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$		
3	$T_0^{(3)}$	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

用$T_m^{(k)}$或$T_m^{(0)}$作为定积分的近似值.

若$f(x)\in C^{2m+2}[a,b]$,则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_m^{(k)} = -\frac{B_{2m+2}}{2^{(m+1)(m+2k)}\cdot(2m)!}(b-a)^{2m+3} f^{(2m+2)}(\eta), \quad \eta\in(a,b) \tag{4.3.4}$$

其中B_{2m+2}是只与m有关而与k无关的常数.

由此可知:

T数表中元素$T_m^{(k)}$相应的求积公式具有$2m+1$次代数精度.

而且对固定的m

$$\lim_{k\to\infty} T_m^{(k)} = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{4.3.5}$$

即T数表中第m列的元素收敛于积分真值.

若$f(x)$是有界可积的， 不仅(4.3.5)成立,而且还有

$$\lim_{m\to\infty} T_m^{(0)} = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

即T数表中对角线上的元素也收敛于积分真值.

- T数表中的每一个元素$T_m^{(k)}$的值都是由2^k, 2^{k+1}, … ,2^{k+m}个区间上复化梯形公式的线性组合，即$T_m^{(k)}$的值是第一列元素值的线性组合.
- 在实际计算中，当表中对角线 (列)上出现两个顺序连接的数之差为允许误差时，即可停止运算.

例 用Romberg求积法求积分 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x$ 的近似值,要求误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-4}$.

- 解 记 $f(x)=\frac{4}{1+x^2},\quad a=0,\quad b=1$

$$f(0)=\frac{4}{1+0^2}=4,\quad f(1)=\frac{4}{1+1^2}=2$$

$$T_0^{(0)}=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\frac{1-0}{2}[f(0)+f(1)]=3$$

$$f(0.5)=\frac{4}{1+0.5^2}=3.2$$

$$T_0^{(1)}=\frac{1}{2}[T_0^{(0)}+f(0.5)]=\frac{1}{2}(3+3.2)=3.1$$

$$f(0.25)=\frac{4}{1+0.25^2}=3.764\,705\,9,\quad f(0.75)=\frac{4}{1+0.75^2}=2.560\,000\,0$$

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{2}\{T_0^{(1)} + \frac{1}{2}\times[f(0.25) + f(0.75)]\} = 3.131\,176\,5$$

$$f(0.125) = \frac{4}{1+0.125^2} = 3.938\,461\,5 \qquad f(0.375) = \frac{4}{1+0.375^2} = 3.506\,849\,3$$

$$f(0.625) = \frac{4}{1+0.625^2} = 2.876\,404\,5 \qquad f(0.875) = \frac{4}{1+0.875^2} = 2.265\,486\,7$$

$$T_0^{(3)} = \frac{1}{2}\{T_0^{(2)} + \frac{1}{4}\times[f(0.125) + f(0.375) + f(0.625) + f(0.875)]\} = 3.138\,988\,5$$

$$T_0^{(4)} = \frac{1}{2}\left[T_0^{(3)} + \frac{1}{8}\sum_{k=1}^{8} f\left((2k-1)\frac{b-a}{16}\right) = 3.140\,941\,6\right]$$

由递推算式 $$T_m^{(k)}=\frac{4^{(m)}T_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1}$$
计算得下表

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
0	3.000 000				
1	3.100 000	3.133 333			
2	3.131 177	3.141 569	3.142 118		
3	3.138 989	3.141 593	3.141 594	3.141 586	
4	3.140 942	3.141 593	3.141 593	3.141 593	3.141 593

$$\left|T_4^{(0)}-T_3^{(0)}\right|\le\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

取$T_4^{(0)}$作为的近似值,即 $\int_0^1\frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x\approx3.141\,593$. 这一结果与准确值 $\int_0^1\frac{4}{1+x^2}\mathrm{d}x=4\arctan x\Big|_0^1=\pi$相比较已有较好的效果.

§4.4 Gauss求积公式

- 问题：固定节点数目为n+1的情况下，适当选取一组节点$x_0, x_1, \ldots, x_n$，及求积系数 $H_0, H_1, \ldots, H_n$，使求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} H_k f(x_k) \tag{4.4.1}$$

具有2n+1次代数精度.

- 定义 若求积公式 (4.4.1) 具有2n+1次代数精度，则称该求积公式为Gauss求积公式，相应的求积节点称为Gauss点.
- Gauss求积公式一定是插值型求积公式.

Gauss求积公式的构造

- 由定义公式(4.4.1) 对$f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^{2n+1}$精确成立，得

$$
\begin{cases}
H_0+H_1+H_2+\cdots H_n=\int_a^b 1\mathrm{d}x \\
H_0x_0+H_1x_1+H_2x_2+\cdots H_nx_n=\int_a^b x\mathrm{d}x \\
\cdots \quad \cdots \\
H_0x_0^{2n+1}+H_1x_1^{2n+1}+H_2x_2^{2n+1}+\cdots H_nx_n^{2n+1}=\int_a^b x^{2n+1}\mathrm{d}x
\end{cases}
$$

求解x_i,H_i

这种方法是非线性的，求解困难.

- 定理 插值型求积公式(4.4.1)是Gauss求积公式的充分必要条件是：以其节点为零点的n+1次多项式$p_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$在$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)\equiv 1$与一切次数$\le n$的多项式正交，即

$$\int_a^b q_n(x)p_{n+1}(x)\mathrm{d}x=0,\quad \forall q_n(x)\in M_n \quad (4.4.2)$$

- 证 充分性 若(4.4.2)成立，$\forall f(x)\in M_{2n+1}$,

$f(x)= s_n(x)\, p_{n+1}(x)+r_n(x)$, $s_n(x)$,$r_n(x)\in M_n$

由公式(4.4.1) 有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b s_n(x)\, p_{n+1}(x)\mathrm{d}x + \int_a^b r_n(x)\mathrm{d}x$$

$$= \sum_{i=0}^{n} H_i r(x_i) = \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i)$$

从而求积公式(4.4.1)是Gauss求积公式.

- 必要性 若公式(4.4.1) 具有$2n+1$次代数精度，$\forall q_n(x)\in M_n,\ q_n(x)p_{n+1}(x)\in M_{2n+1}$

$$\int_a^b q_n(x)\,p_{n+1}(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}H_i q_n(x_i)\,p_{n+1}(x_i)=0,$$

即$p_{n+1}(x)$在$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)\equiv 1$与一切次数$\leq n$的多项式正交.

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} H_k f(x_k) \qquad (4.4.1)$$

- 定理 $n+1$个节点的机械求积公式(4.4.1)的代数精度不能超过$2n+1$.
- 证 令

$$f(x)=p^2_{n+1}(x)=(x-x_0)^2(x-x_1)^2\ldots(x-x_n)^2$$

其中x_i $(i=0,1,\ldots,n)$是求积节点,

$$\sum_{k=0}^{n} H_k p_{n+1}^2(x_k) = 0$$

而

$$\int_a^b p_{n+1}^2(x)\mathrm{d}x > 0$$

- 定理 $n+1$个节点的插值型求积公式的代数精度至少为n，最高为$2n+1$.

- 例 建立两点Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx H_0 f(x_0) + H_1 f(x_1)$$

由定义对$f(x)=1, x, x^2, x^3$准确成立，有

$$\begin{cases} H_0 + H_1 = 2 \\ H_0 x_0 + H_1 x_1 = 0 \\ H_0 x_0^2 + H_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\ H_0 x_0^3 + H_1 x_1^3 = 0 \end{cases}$$

解得

$$H_0 = H_1 = 1, \quad x_0 = -x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$

两点Gauss公式为 $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$

- 例 建立两点Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx H_0 f(x_0) + H_1 f(x_1)$$

由定理

$$\begin{cases} \int_{-1}^{1} (x-x_0)(x-x_1)\mathrm{d}x = 0 \\ \int_{-1}^{1} x(x-x_0)(x-x_1)\mathrm{d}x = 0 \end{cases}$$

解得 $x_0 = -x_1 = -\dfrac{1}{\sqrt{3}}$

对$f(x)=1, x, x^2, x^3$准确成立，有

$$\begin{cases} H_0 + H_1 = 2 \\ H_0 x_0 + H_1 x_1 = 0 \end{cases}$$ ，解得 $H_0 = H_1 = 1$

两点Gauss公式为 $\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx f(-\dfrac{1}{\sqrt{3}}) + f(\dfrac{1}{\sqrt{3}})$

Gauss求积公式的余项

- 考察以$x_0, x_1, \ldots, x_n$为节点的Hermite插值公式

$$f(x)-H(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}p_{n+1}{}^2(x)$$

利用Gauss求积公式及积分中值定理有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\sum_{i=0}^{n}H_iH(x_i)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\sum_{i=0}^{n}H_i f(x_i)=E(f)$$

$$E(f)=\int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}p_{n+1}{}^2(x)\mathrm{d}x=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b p_{n+1}{}^2(x)\mathrm{d}x$$

Gauss求积公式的收敛性

- 定理 若$f(x)\in C[a,b]$，则Gauss求积公式是收敛的.即

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

Gauss求积公式的数值稳定性

- 定理　Gauss求积公式的系数$H_k(k=0,1,2,\ldots,n)$全是正的.
- 证 考察基函数$l_k(x)\in M_n$，　$l_k^2(x)\in M_{2n}$，　Gauss求积公式对其精确成立，故

$$0<\int_a^b l_k^2(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}H_i l_k^2(x_i)=H_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$$

$$(k=0,1,2,\ldots,n)$$

推论　Gauss求积公式是数值稳定的.

- 证 设精确值为$f(x_j)$的计算值为 $\tilde{f}(x_i)$，且

$$\left|f(x_i)-\tilde{f}(x_i)\right|\le\varepsilon_i,\quad i=0,1,2,\cdots,n.\quad \varepsilon=\max_i\varepsilon_i$$

那么

$$\left|\sum_{i=0}^{n}H_i f(x_i)-\sum_{i=0}^{n}H_i\tilde{f}(x_i)\right|\le\sum_{i=0}^{n}\left|H_i\right|\left|f(x_i)-\tilde{f}(x_i)\right|\le\varepsilon\sum_{i=0}^{n}H_i$$

$$=\varepsilon\sum_{i=0}^{n}\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x=\varepsilon\int_a^b\sum_{i=0}^{n}l_i(x)\mathrm{d}x=\varepsilon(b-a)$$

这时数值计算是稳定的.

Gauss–Legendre求积公式

- 区间[-1, 1]上的Gauss求积公式

  Legendre多项式序列$\{P_n(x)\}$是区间[-1, 1]上的关于权函数$\rho(x)\equiv 1$的正交多项式序列，Gauss点应选为$P_{n+1}(x)$的零点，这样构成的求积公式称为Gauss–Legendre求积公式.

- Legendre多项式的递推公式为

$$p_{n+1}(x)=\frac{2n+1}{n+1}xP_n(x)-\frac{n}{n+1}P_{n-1}(x)$$

- Legendre多项式

$$P_0(x)=1,\ P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]$$

其中 $P_1(x)=x$

$P_2(x)=(3x^2-1)/2$

$P_3(x)=(5x^3-3x)/2$

$P_4(x)=(35x^4-30x^2+3)/8$

… …

- Gauss–Legendre求积公式的求积节点确定后，可利用其具有的代数精度确定求积系数.
- 两点Gauss–Legendre公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$$

- 三点Gauss–Legendre公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(\sqrt{\frac{3}{5}})$$

- 我们可以通过变量替换

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

- 将区间[a, b]上的积分转化为区间[-1, 1]上的积分，然后通过Gauss–Legendre公式计算出它的近似值.

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}(b-a)\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)\mathrm{d}t$$

试用利用三点Gauss–Legendre公式计算计积分

$$I=\int_1^3 \frac{1}{y}\mathrm{d}y$$

- 解　作如下变量替换:

$$y=\frac{1}{2}(a+b)+\frac{1}{2}(b-a)t=t+2$$

则当时$y\in[1，3]$， $t\in[-1,1]$，且

$$dy=\mathrm{d}t,\quad \int_1^3 \frac{1}{y}\mathrm{d}y=\int_{-1}^1 \frac{1}{t+2}\mathrm{d}t$$

三点Gauss–Legendre公式

$$\int_1^3 \frac{1}{y}\mathrm{d}y=\int_{-1}^1 \frac{1}{t+2}\mathrm{d}t\approx 0.555\,555\,6\left(\frac{1}{2+0.774\,596\,7}+\frac{1}{2-0.774\,596\,7}\right)$$

$$+0.888\,888\,9\times\frac{1}{2+0}=1.098\,039\,283$$

Gauss型求积公式

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

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} H_k f(x_k) + E(f)$$

- 在本节的讨论中，将积分中加权$\rho(x)$，便得到带权函数的Gauss求积公式，即Gauss型求积公式的定义及同样相关结论.

建立Gauss型求积公式 $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$

- 解 所求Gauss型求积公式应具有3次代数精度，故对$f(x)=1,x,x^2.x^3$ 都能精确成立，即有

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{x}} = 2 & (1) \\ x_0 A_0 + x_1 A_1 = \int_0^1 \sqrt{x}\mathrm{d}x = \frac{2}{3} & (2) \\ x_0^2 A_0 + x_1^2 A_1 = \int_0^1 \sqrt{x}x\mathrm{d}x = \frac{2}{5} & (3) \\ x_0^3 A_0 + x_1^3 A_1 = \int_0^1 \sqrt{x}x^2\mathrm{d}x = \frac{2}{7} & (4) \end{cases}$$

(3)+(2) ×α+(1)×β，得 $A_0(x_0^2 + \alpha x_0 + \beta) + A_1(x_1^2 + \alpha x_1 + \beta) = \frac{2}{5} + \frac{2}{3}\alpha + 2\beta$

(4)+(3)× α +(2)×β，得 $A_0 x_0(x_0^2 + \alpha x_0 + \beta) + A_1 x_1(x_1^2 + \alpha x_1 + \beta) = \frac{2}{7} + \frac{2}{5}\alpha + \frac{2}{3}\beta$

- 取x_0, x_1为 $x^2 + \alpha x + \beta$ =0的根，有

$$\begin{cases} \frac{1}{5} + \frac{1}{3}\alpha + \beta = 0 \\ \frac{1}{7} + \frac{1}{5}\alpha + \frac{1}{3}\beta = 0 \end{cases}$$

解得 $\alpha = -\frac{6}{7}, \quad \beta = \frac{3}{35}$，从而有 $x^2 - \frac{6}{7}x + \frac{3}{35} = 0$

解此方程，得

$$x_0 = \frac{3}{7} - \frac{2\sqrt{6}}{7\sqrt{5}}, \quad x_1 = \frac{3}{7} + \frac{2\sqrt{6}}{7\sqrt{5}}$$

再由(1)和(2)解得

$$A_0 = 1 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}}, \quad A_1 = 1 - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}}$$