数值分析

第四章：数值积分

张亚楠[1]

苏州大学数学科学学院

[1]Email: ynzhang@suda.edu.cn

问题提出

如何计算定积分?

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\lambda \to 0} \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\Delta x_j$$

微积分基本定理

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

如果无法找到原函数或者原函数过于复杂不适合数值计算，怎么办?

定积分本质是一个具体的数！！！

我们的目标是找到这个数的近似值，精度越高越好，代价越小越好！

数值积分的几种思路

- 积分中值定理:

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

数值积分的几种思路

- 积分中值定理:

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

- 近似被积函数

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

数值积分的几种思路

- 积分中值定理:

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

- 近似被积函数

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

- 积分的区域可加性：复化求积分公式

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx = \dots$$

数值积分的几种思路

- 积分中值定理:

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

- 近似被积函数

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

- 积分的区域可加性：复化求积分公式

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx = \dots$$

- 进一步提高效率：自适应求积分

数值积分的几种思路

- 积分中值定理:

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

- 近似被积函数

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

- 积分的区域可加性：复化求积分公式

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx = \dots$$

- 进一步提高效率：自适应求积分

数值积分的几种思路

- 积分中值定理:

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

- 近似被积函数

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$$

- 积分的区域可加性：复化求积分公式

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx = \ldots$$

- 进一步提高效率：自适应求积分

Example 1

左矩形，右矩形公式，中点公式，梯形公式

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= f(\xi)(b-a) \\
&\approx f(a)(b-a) && \text{左矩形} \\
&\approx f(b)(b-a) && \text{右矩形} \\
&\approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) && \text{中矩形} \\
&\approx \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) && \text{梯形公式}
\end{aligned}$$

梯形公式的截断误差

利用Taylor展开推导，其它公式留作习题

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

Hint:

$$f(x) = f(a) + f^{'}(a)(x-a) + f^{''}(\xi_1)(x-a)^2$$

$$f(x) = f(b) + f^{'}(b)(x-b) + f^{''}(\xi_2)(x-b)^2$$

$$\begin{aligned} E_T &= \int_a^b \frac{1}{2}\left[\underline{\underline{f^{'}(a)(x-a) + f^{'}(b)(x-b)}} + \underline{f^{''}(\xi_1)(x-a)^2 + f^{''}(\xi_2)(x-b)^2}\right]dx \\ &= \frac{1}{2}\left[\underline{\underline{(f^{'}(a) - f^{'}(b))\frac{(b-a)^2}{2}}} + \underline{C_1 * (b-a)^3}\right] \\ &= C_2 * (b-a)^3 \end{aligned}$$

具体常数与f(x)二阶导数有关，利用微分中值定理和介值定理可精确估计。

1. 数值积分的效果与被积函数的光滑度和积分区间有关
2. 高阶导数越小，积分区间越小，效果越好

如何改进？

1. 寻找比梯形公式更好的公式：Simpson、Gauss
2. 根据积分区间可加性，将大区间积分分割成小区间：复化求积公式

Contents

插值型求积

$$\begin{cases} \text{目标：} \int_a^b f(x)dx \\ \text{已有手段：插值} f(x) \approx p_n(x) \end{cases} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx$$

对被积函数f(x)考虑多项式$p_n(x)$插值方法近似，进而对 多项式精确求积

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

思考

积分给定，利用上式计算出结果还缺少什么？

插值型求积

Definition 2

给定n+1个节点$\{x_j\}$, 求积公式

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

A_k称为求积系数，x_j 求积节点；如果

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

则称求积公式是插值型的.

计算过程

1. 选出求积节点x_j并计算求积系数A_k
2. 计算和式

如何判断求积公式的好坏?

给定 求积公式

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

1. 计算复杂度
2. 稳定性
3. 收敛性
4. 代数精度

Tips 代数精度和稳定性是我们设计具体求积算法的准则！！

代数精度

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

思考：如果f(x)本身是次数不超过n的多项式，上述求积公式误差是多少?

代数精度

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

思考: 如果f(x)本身是次数不超过n的多项式，上述求积公式误差是多少?

进一步思考: 若一求积公式对所有次数不超过n的多项式精确成立，n是否越大越好?

Definition 3

如果某个求积公式对所有次数不超过m的代数多项式精确成立，但是对m+1阶多项式不精确成立，则称该公式有m次代数精度(Order of exactness).

如何刻画求积公式对所有次数不超过n的代数多项式精确成立？

Hint: 只要验证求积公式对$\{1, x, x^2, ..., x^n\}$精确成立， 即表明对次数不超过n的多项式都精确成立。

1. 若某个具体的求积公式对$\{1, x, x^2, ..., x^n\}$精确成立，即

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

2. 任意一个次数不超过n的多项式 $P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$ 成立

$$\int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b \sum_{j=0}^{n} a_j x^j\,dx = \sum_{j=0}^{n} a_j \int_a^b x^j\,dx = \sum_{j=0}^{n} a_j \sum_{k=0}^{n} (x_k)^j A_k$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \underline{\underline{\sum_{j=0}^{n} a_j (x_k)^j}} A_k = \sum_{k=0}^{n} \underline{\underline{P_n(x_k)}} A_k \to \text{精确！！}$$

验证：中矩形公式和梯形公式具有一次代数精度。

Example 4

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

取 $f(x)=1,$

$$left = b-a, \quad right = b-a$$

取 $f(x)=x,$

$$left = \frac{1}{2}(b^2-a^2), \quad right = \frac{a+b}{2}(b-a)$$

取 $f(x)=x^2,$

$$left = \frac{1}{3}(b^3-a^3), \quad right = \frac{a^2+b^2}{2}(b-a)$$

<u>李庆扬教材 p100, 例1</u>

Theorem 5

形如(*)求积公式具有至少n次代数精度 $\Longleftrightarrow$ 该公式是插值型的。

证明：充分性略；必要性：若求积公式

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (*)$$

具有至少n次代数精度，则对特殊的n次多项式 – Lagrange插值基函数$l_k(x)$ 精确成立. 即，

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

上式用到$l_k(x_j) = \delta_{kj}$ 果然是插值型的.

收敛性和稳定性

Definition 6

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$h = \max_j |x_{j+1} - x_j|$ 则称该积分公式收敛.

Definition 7

$\forall \varepsilon > 0$, 若 $\exists \delta > 0$, 只要$|f(x_k) - \bar{f}_k| < \delta$, 就有

$$|I_n(f) - I_n(\bar{f})| = \left| \sum_k A_k \left[f(x_k) - \bar{f}_k \right] \right| < \varepsilon$$

则称该积分公式是稳定的.

Theorem 8

若求积系数A_k非负，则该求积公式是稳定的。

简单证明并举例说明高阶Newton-Cotes公式不适合实际计算(求积系数有负的)。

李庆扬教材p104 表4-1

代数精度与积分余项之间的关系

标注

若如下求积公式 具有m次代数精度, 则其求积公式余项必可表达为如下形式:

$$R[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = K \cdot f^{(m+1)}(\eta)$$

其中K是与f无关的待定参数，$\eta \in (a,b)$.

说明： 该结论在李庆扬《数值分析》第五版第101页(1.8)式，结论不对。刘长剑给了反例

Theorem 9

若积分公式有m次代数精度，则积分误差(积分余项)满足下式

$$R[f]=\int_a^b f(x)dx-\sum A_k f(x_k)=\int_a^b K_m(t)f^{(m+1)}(t)dt$$

where

$$K_m(t)=\frac{1}{m!}\Big[\int_a^b (x-t)_+^m dx-\sum_{k=0}^{n} A_k(x_k-t)_+^m\Big],$$

$$(x-t)_+=\begin{cases} x-t, & x\geq t \\ 0, & x<t \end{cases}$$

$$R[f]=\int_a^b f(x)dx-\sum A_k f(x_k)=\int_a^b K_m(t)f^{(m+1)}(t)dt$$

说明: $K_m(t)$是关于t的函数，因此

$$|R(f)|=\left|\int_a^b K_m(t)f^{(m+1)}(t)dt\right|\leq \|f^{(m+1)}\|_c\int|K_m(t)|dt$$

K_m称为Peano核，具有唯一性。上式可用于估计。但是对于一般的积分公式，积分余项还要通过其它方法得到. 一般情况下（好用的公式），如果具有m次代数精度，则积分余项基本上等于$\mathcal{O}[(b-a)^{m+1}]$.

Contents

数值积分的关注点

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

1. 计算复杂度：$(n+1)$次乘法
2. 稳定性: 系数 $A_k > 0$即稳定
3. 代数精度：逐次检验积分公式对 $f(x) = x^j$, $j = 0, 1, 2, \ldots$ 是否精确?
4. 误差（积分余项） $R[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) =?$

$$R[f] = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)dx$$

Newton-Cotes公式：等距选点！！

将积分区间[a,b] 进行n等分，所得插值型积分公式为Newton-Cotes公式

$n=1$时，梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = f(a) * A_0 + f(b) * A_1$$

$$A_0 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx = \frac{b-a}{2}, \quad A_1 = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = \frac{b-a}{2}$$

1. 代数精度？　稳定性？
2. 积分余项（误差）

$$R_T[f] = \int_a^b [f(x) - p_1(x)]dx = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx$$

$$= \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{f''(\eta)}{2}\frac{(b-a)^3}{6}$$

n = 2的Newton-cotes公式：Simpson公式

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &\approx \int_a^b P_2(x)dx \\
&= \int_a^b \left[f(a)l_0(x) + f(\frac{a+b}{2})l_1(x) + f(b)l_2(x) \right] dx \\
&= \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b) \right]
\end{aligned}
$$

问题

稳定性？代数精度？误差（积分余项）？

Example 10

验证 Simpson公式 代数精度为3

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

Simpson公式是插值型的，至少有两次代数精度！！只需验证3次以上的情况

1. $f(x)=x^3$精确成立
$$\frac{b^4-a^4}{4}=\int_a^b x^3dx=\frac{b-a}{6}\left[a^3+4(\frac{a+b}{2})^3+b^3\right]$$
2. $f(x)=x^4$不精确成立

思考：

二次插值所得积分公式为何对三次多项式精确成立？

考虑三点做二次插值

$$R_S[f] = \int_a^b \frac{f^{(3)}(\eta)}{3!} \underline{(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)}dx$$

横线部分在[a,b]积分为零，貌似很好，但是无法使用积分中值定理，整体积分无法估计。 麻烦!!

思考

1) 二次插值所得积分公式为何对三次多项式精确成立?
2) 对所有三次多项式精确成立；却只有三个插值节点？ 是否矛盾?
3) 若不矛盾，如何解释并给出误差估计式?

Simpson公式的推导方法2

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_2(x)dx = \underline{\underline{\int_a^b \left[f(a)l_0(x) + f(\frac{a+b}{2})l_1(x) + f(b)l_2(x) \right] dx}}$$

$$= \underline{\underline{\int_a^b \left[f(a) + f[a, x_1](x-a) + f[a, x_1, b](x-a)(x-x_1) \right] dx}}$$

考虑三点的Hermite插值 记

$$a, \; x_1 = \frac{a+b}{2}, \; b, \; x_1$$

为插值节点，其中x_1是重节点，则积分公式的Newton型表达式如下

$$\int_a^b \left[\underline{\underline{f(a) + f[a, x_1](x-a) + f[a, x_1, b](x-a)(x-x_1)}} \right.$$

$$\left. + f[a, x_1, b, x_1](x-a)(x-x_1)(x-b) \right] dx$$

上式红色部分的积分为零，即三次多项式所得积分公式与Simpson公式一样。

Hermite插值余项

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

划线部分不变号，类似梯形公式可用积分中值定理估计.

$$\int_a^b f(x)dx - \int_a^b P_2(x)dx = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b H_3(x)dx$$

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

$$\frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx = \frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!}\frac{-1}{120}(b-a)^5$$

偶数次Newton-Cotes公式代数精度

Theorem 11

当n为偶数时，Newton-Cotes公式对 $f(x) = x^{n+1}$ 精确成立

证明： 令 $f(x) = x^{n+1}$, 考虑积分误差

$$R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) dx = \int_a^b \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) dx = 0$$

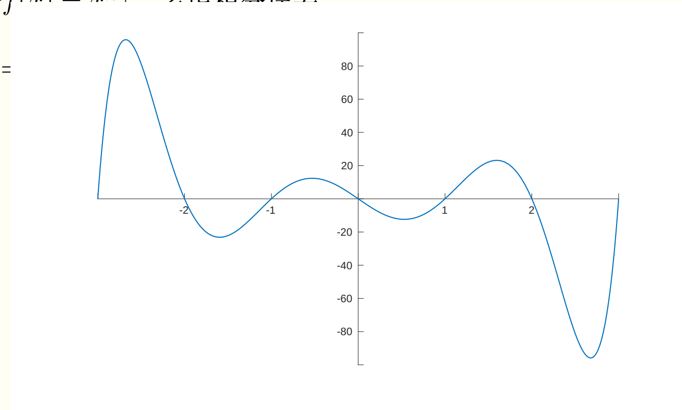
偶数次Newton-Cotes公式代数精度

Theorem 11

当n为偶数时，Newton-Cotes公式对 $f(x) = x^{n+1}$ 精确成立

证明： 令 $f(x) = x^{n+1}$，考虑积分误差

$R[f] =$



n	$coef.s$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17286}$	$\frac{751}{17380}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10498}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{998}{28350}$

梯形公式和Simpson公式更受欢迎！！

Contents

梯形公式及误差

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

将[a,b]进行n等分， 记

$$x_j = a + jh,\ h = \frac{b-a}{n},\ j = 0, 1, ..., n$$

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

$$= \frac{h}{2}\sum_{j=0}^{n-1}\Big[f(x_j) + f(x_{j+1})\Big] + R_n(f)$$

复合梯形公式

记

$$\boxed{T_n = \frac{f(a)+f(b)}{2}h + h\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j)}$$

为复合梯形公式，余项

$$R_n(f) = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{-h^3}{12} f''(\eta_j)$$

由介值定理 $\exists \eta$, s.t.,

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

则

$$\boxed{R_n(f) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)}$$

考查

1. 如何计算？计算复杂度
2. 稳定性
3. 收敛性

复合梯形公式举例

Example 12

取不同节点数，利用复合梯形公式计算

$$\int_{-1}^{1} e^x dx = e - e^{-1} = 2.350402387287603$$

查看精度并检验收敛性。

给定节点等分数n, 计算过程如下

1. 网格节点 x_j, 并取出函数值 $f(x_j)$
2. 给出求积系数A_k,
$$\frac{1}{2}, 1, 1, ..., 1, \frac{1}{2}$$
3. 求和算出结果 $\sum_k A_k * f(x_k)$

复合Simpson公式

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\Big[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\Big]+\frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!}\frac{-1}{120}(b-a)^5$$

将区间[a,b]进行2n等分，记 $x_j = a + jh$

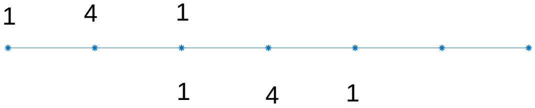
$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=0}^{n-1}\int_{x_{2j}}^{x_{2j+2}} f(x)dx \\ &\approx \frac{h}{3}\sum_{j=0}^{n-1}\Big[f(x_{2j})+4f(x_{2j+1})+f(x_{2j+2})\Big]\end{aligned}$$

$$\boxed{S(f) = \frac{h}{3}\Big[f(a)+f(b)+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_{2j})+4\sum_{j=0}^{n-1}f(x_{2j+1})\Big]}$$

$$\int_a^b f(\quad \cdots \quad a)^5$$

将区间[a,b]

$$\int_a^b f($$



$$\boxed{S(f) = \frac{h}{3}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=0}^{n-1} f(x_{2j+1})\right]}$$

复合Simpson公式误差

根据Simpson公式的积分余项，可知

$$R_n(S) = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{f^{(4)}(\zeta_j)}{4!} \frac{-1}{120}(2h)^5 = \frac{-1}{120*4!}(2h)^5 * \underline{\underline{n * f^{(4)}(\zeta)}}$$

$$= \frac{-1}{120*4!}(2h)^4 * (b-a) * f^{(4)}(\zeta) = \frac{h^4}{180} * (b-a) * f^{(4)}(\zeta)$$

思考： 复合Simpson公式的 稳定性 和 收敛性 如何？如何编程实现？

Example 13

例3 教材108页

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

已知$\|f^{(k)}\|_c \le \frac{1}{k+1}$ 如果积分误差要求为10^{-6}, 复合Simpson公式的等分数n取多少？

小结

1. 复合梯形公式和Simpson公式是最受欢迎的数值积分公式！！
2. 计算简单！稳定性好！精度也不差！

进一步学习：

学习要贪得无厌，还有更好的公式，但是理论复杂一些！！

1. 理查德森外推和自适应积分
2. 正交多项式和gauss积分

Contents

复合梯形公式有如下形式的误差估计式(Euler-Maclaurin公式), 比较麻烦

$$(1) \qquad I(f) - T_n(f) = \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \alpha_3 h^6 + \mathcal{O}(h^8)$$

思考: 能否利用上式，结合 T_n, T_{2n}的结果得到更为精确的积分值?

$$(2) \qquad I(f) - T_{2n}(f) = \alpha_1 (\frac{h}{2})^2 + \alpha_2 (\frac{h}{2})^4 + \alpha_3 (\frac{h}{2})^6 + \mathcal{O}(h^8)$$

化简得到

$$\frac{1}{3}\Big[4 * (2) - (1)\Big] = I(f) - \Big[\frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f)\Big] = \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots$$

化简 $\frac{4}{3}T_2(f)-\frac{1}{3}T_1(f)=S(f)$

节点	T_1	T_2	$\frac{4}{3}T_2(f)-\frac{1}{3}T_1(f)$
$f(a)$	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{b-a}{4}$	$\frac{b-a}{6}$
$f(\frac{a+b}{2})$	0	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{2(b-a)}{3}$
$f(b)$	$\frac{b-a}{2}$	$\frac{b-a}{4}$	$\frac{b-a}{6}$

进而得到Simpson公式的误差估计式

$$I(f)-S_n(f)=\beta_1 h^4+\beta_2 h^6+\mathcal{O}(h^8)$$

思考： 能否利用类似外推思想，借助于Simpson公式 构造更高精度的求积公式?

Romberg积分

$$I(f) - S_n(f) = \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \mathcal{O}(h^8)$$

$$I(f) - S_{2n}(f) = \beta_1 (\frac{h}{2})^4 + \beta_2 (\frac{h}{2})^6 + \mathcal{O}(h^8)$$

思考：

能否利用外推思想，借助于Simpson公式 构造更高精度的求积公式?

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

Romberg积分的编程实现

T_n		
T_{2n}	S_n	
T_{4n}	S_{2n}	R_n

Romberg积分的编程实现

T_n		
T_{2n}	S_n	
T_{4n}	S_{2n}	R_n

T_n		
T_{2n}	S_n	
T_{4n}	S_{2n}	R_n

Romberg积分的编程实现

T_n		
T_{2n}	S_n	
T_{4n}	S_{2n}	R_n

T_n		
T_{2n}	S_n	
T_{4n}	S_{2n}	R_n

T_n		
T_{2n}	S_n	
T_{4n}	S_{2n}	R_n

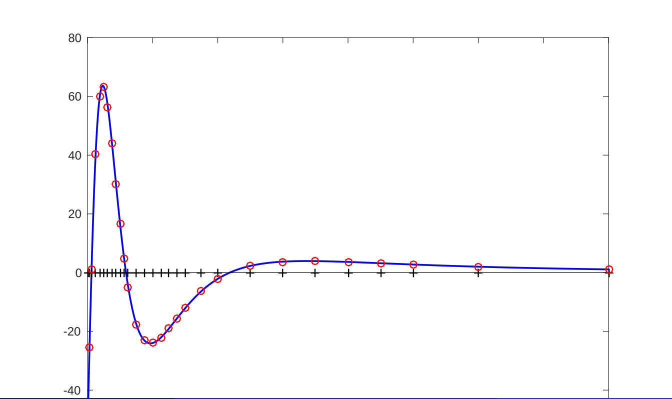
小结

1. 对于光滑的被积函数，Romberg积分近乎完美解决问题！
2. 对于光滑的周期函数，梯形公式完美解决！WHY?

Contents

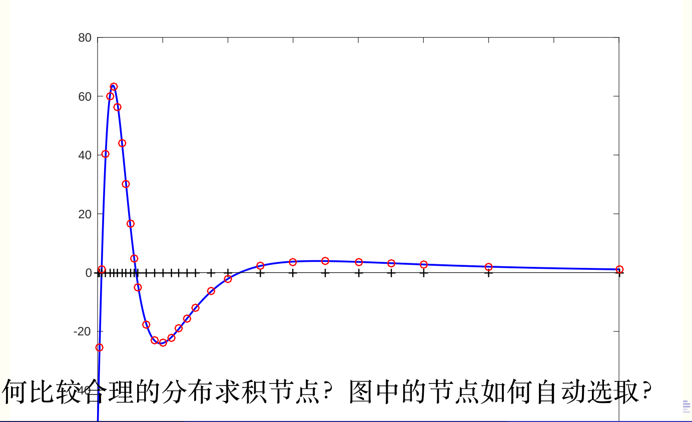
考查利用中点公式计算积分

$$\int_a^b \frac{100}{x^2}\sin(\frac{10}{x})dx$$



考查利用中点公式计算积分

$$\int_a^b \frac{100}{x^2}\sin(\frac{10}{x})dx$$



问题： 如何比较合理的分布求积节点？图中的节点如何自动选取？

Algorithm1 递归算法的解释

1. procedure integrate (f, a, b, τ)
2. $$Q \approx \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$
3. $$\varepsilon \approx \left| Q - \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \right|$$
4. if $\varepsilon > \tau$ then
5. m = (a + b) / 2
6. Q = integrate(f,a,m,tau/2) + integrate(f,m,b,tau/2)
7. endif
8. return Q

Algorithm2: procedure integrate (f, a, b, τ)

1. $I : Q_n \approx \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 2. $\varepsilon : \left|Q_n - \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\right|$
3. initialize heap H with interval [a, b], integral Q_n and error ε
4. <u>while</u> $\varepsilon > \tau$ <u>do</u>
5. k: index of interval with largest ε_k in H
6. $m = (a_k + b_k)/2$
7. $I_l = \int_{a_k}^{m} f(x)dx; \quad I_r = \int_m^{b_k} f(x)dx$
8. $\varepsilon_l = \left|Q_n[a_k, m] - \int_{a_k}^{m} f(x)dx\right|; \quad \varepsilon_r = \left|Q_n[m, b_k] - \int_m^{b_k} f(x)dx\right|$
9. $I : I - I_k + I_l + I_r \quad \varepsilon : \varepsilon - \varepsilon_k + \varepsilon_l + \varepsilon_r$
10. push interval $[a_k, m],\ [m, b_k]$ with the integral $I_l,\ I_r$ and errors $\varepsilon_l,\ \varepsilon_r$ onto H
11. <u>endwhile</u>   12. <u>return</u> I

思考： 在构造自适应积分时，哪一步是关键?

思考： 在构造自适应积分时，哪一步是关键？后验误差！

如何快速有效的计算后验误差？ 以Simpson公式为例：

$$I(f) - S_n(f) = \alpha_1 h^4 + \alpha_2 h^6 + \mathcal{O}(h^8)$$

$$I(f) - S_{2n}(f) = \alpha_1 (\frac{h}{2})^4 + \alpha_2 (\frac{h}{2})^6 + \mathcal{O}(h^8)$$

第二式乘以16减去第一式得到：

$$15\Big[I(f) - S_{2n}(f)\Big] - \Big[S_{2n}(f) - S_n(f)\Big] = \mathcal{O}(h^6)$$

则$\frac{1}{15}\Big[S_{2n}(f) - S_n(f)\Big]$可作为$S_{2n}(f)$的后验误差

Contents

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

目标：

求积节点的最优选取！！

学习目标：

- 参考教材中几类特殊的求积公式，特别是奇异积分，无穷区间积分。
- 了解Gauss 积分的思想，掌握用法; 会计算简单的两点gauss积分公式。

给定如下数值积分公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{1}$$

求积节点和求积系数待定；

针对（2n+2）个待定参数，可以期望该公式有 (2n+1) 次代数精度；即对

$$f(x) = \{1, x, x^2, ..., x^{2n+1}\}$$

精确成立.

可以证明：代数精度不会达到(2n+2)；f(x)取如下(2n+2)阶多项式

$$f(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)^2$$

则

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

积分公式(1)不会超过(2n+2)次代数精度.

gauss积分公式也是插值型的

针对更一般的带权积分

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

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

有如下定义

Definition 14

如果上述求积公式具有 (2n+1)次代数精度，则称其节点x_k 为gauss点，相应公式称为 高斯型求积公式.

从定义出发推导求积公式比较复杂； 一些特殊的权函数有相关结果。

Example 15

推导单点、

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) = 2 * f(0)$$

两点高斯积分公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) = f(-\sqrt{\frac{1}{3}}) + f(\sqrt{\frac{1}{3}}) \qquad (\star)$$

两点gauss公式（n=1）具有3次代数精度，依次取$f(x) = 1,\ x,\ x^2,\ x^3$ 代入$(\star)$，令其精确成立，得到四个方程，解出A_0, A_1, x_0, x_1系数即可。

Remark 6.1

教材有解答过程，应该感觉比较麻烦！

记

$$W(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j)$$

x_j是某些正交多项式的零点，$W(x)$是(n+1)次正交多项式。

由插值余项可知

$$\begin{aligned} E(f) &= \int_a^b f(x)\rho(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))W(x)\rho(x)dx \\ &= \int_a^b \underline{\underline{\rho(x)f[x_0, x_1, ..., x_n, x] \cdot W(x)}}dx \end{aligned}$$

Gauss求积公式推导

$$
\begin{aligned}
E(f) &= \int_a^b f(x)\rho(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\
&= \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))W(x)\rho(x)dx \\
&= \int_a^b \underline{\underline{\rho(x)f[x_0,x_1,...,x_n,x]\cdot W(x)}}dx
\end{aligned}
$$

观察上式右端，当

$$f(x)=x^m,\ m=0,1,...,n;\quad \Rightarrow f^{(n+1)}=0$$

求积公式精确成立. 当

$$m=n+1,n+2,...,2n+1$$

$f[x_0,x_1,...,x_n,x]$ 是次数不超过n的多项式； 与$W(x)$带权正交；则$E(f)$ 为零。

Theorem 16

插值型求积公式的求积节点是高斯点 $\Leftrightarrow$ W(x) 与任何次数不超过n的多项式带权$\rho(x)$正交. gauss积分公式 具有(2n+1)代数精度，达到最高次！！

Remark 6.2

最佳求积节点（gauss点）= 带权$\rho(x)$正交多项式零点！！！

如何计算gauss点?

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

(1) 利用

$$W(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j) = x^{n+1} + c_0 x^n + c_1 x^{n-1} + \ldots + c_n$$

与次数不超过n的Poly带权正交， 列出方程，

$$\int_a^b x^m * W(x)\rho(x)dx = 0, \quad m = 0, 1, \ldots, n$$

得到多项式系数c_k

(2) 根据系数计算多项式零点也是求积节点x_j 解决问题！！

(3) 由求积公式对$f(x) = 1, x, \ldots, x^n$精确成立，计算系数$A_0, A_1, \ldots, A_n$.

Example 17

确定求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

的系数及节点使其具有最高代数精度.

Example 17

确定求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

的系数及节点使其具有最高代数精度.

解答： 构造Gauss型积分公式，权函数$\rho(x) = x^{\frac{1}{2}}$ 令

$$w(x) = (x - x_0)(x - x_1) = x^2 + bx + c$$

则 $w(x)$ 与 $1, x$带权正交，也即：

$$\int_0^1 \sqrt{x} \cdot 1 \cdot w(x)dx = \int_0^1 \sqrt{x} \cdot 1 \cdot (x^2 + bx + c)dx = 0$$

$$\int_0^1 \sqrt{x} \cdot x \cdot w(x)dx = \int_0^1 \sqrt{x} \cdot x \cdot (x^2 + bx + c)dx = 0$$

解得：$b = -10/9, \quad c = 5/21$ 进而求出：$x_0, x_1;$

利用该公式有3次代数精度，对f(x) = 1，x 是准确的，求解关于系数 A_k的线性方

Example 18

确定求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

的系数及节点使其具有最高代数精度.

解答： $x_0 = 0.2899, x_1 = 0.8212;$

利用该公式有3次代数精度，对f(x) = 1，x 是准确的， 则：当$f(x) = 1$,

$$A_0 + A_1 = \int_0^1 \sqrt{x} dx = 2/3$$

当$f(x) = x$,

$$A_0 * x_0 + A_1 * x_1 = \int_0^1 \sqrt{x} x dx = 2/5$$

求解出系数 $A_0 = 0.2776, A_1 = 0.3891$.

利用f(x) 在结点x_j的函数值及其导数值，构造Hermite插值 $H_{2n+1}(x)$, 满足：

$$H(x_j) = f(x_j), \quad H'(x_j) = f'(x_j), \quad 0 \le j \le n$$

由插值余项可得：

$$f(x) - H(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!} W^2(x)$$

上式乘以权函数并积分

$$R_G(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx - \int_a^b \rho(x) H(x) dx$$

$$R_G(f) = \int_a^b \rho(x)f(x)dx - \int_a^b \rho(x)H(x)dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\rho(x)W^2(x)dx$$

由于Gauss积分公式具有(2n+1)次代数精度，Hermite插值多项式$H(x)$是2n+1阶的，上式可写成

$$\begin{aligned} R_G(f) &= \int_a^b \rho(x)f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k H(x_k) \\ &= \int_a^b \rho(x)f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\rho(x)W^2(x)dx = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)W^2(x)dx \end{aligned}$$

Theorem 19

Gauss求积公式都是稳定的.

证明：只需要说明求积系数是非负的即可. 取Lagrange插值基函数

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

则l_k^2是次数为2n的多项式，进而

$$0 < \int_a^b \rho(x) l_k^2(x) dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k^2(x_j) = A_k$$

Gauss 公式收敛性

Gauss 公式都是收敛的: $R(f) \to 0$ as $n \to \infty$

实际计算是n很小，一般不超过10

取权函数$\rho(x) = 1$, 利用Legendre 多项式在[-1,1] 区间的正交性，得到:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

说明:

1. 常用n = 1, 2 , 3, 也即时两点，三点，四点高斯公式
2. 当n较大时，系数与节点都是位数较多的小数，实际计算效果并不好
3. 当积分区间较大，被积函数不够理想，应当将1、2、3、4点gauss积分与复化求积和自适应积分配合使用！！

Table: Abscissae and weight factors for some Gauss – Legendre quadrature

	x_i	w_i
n = 3	0	0.88888 88888 88889
	±0.774596669241483	0.55555 55555 55556
n = 4	±0.339981043584856	0.65214 51548 62546
	±0.861136311594053	0.34785 48451 37454

对于正则函数的积分，Simpson，Romberg，4点Gauss-Lengdre都可用 但是对于奇异积分效果不好！以下介绍两类特殊的奇异积分

当权函数取$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，所建立高斯公式:

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \sum_{k=1}^{n}A_k f(x_k)=\frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n}f(x_k)$$

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi$$

其中，节点即是Chebyshev零点，求积系数是常数，计算效率很高.

说明：该公式针对奇异积分效果相对较好，但是对于正则性较好的被积函数，没必要折腾，即使折腾，效果也未必好！

思考

当你需要计算上述积分时，你的第一反应是怎么做?

换元法！+ 梯形公式求解周期函数积分！

Gauss – Laguerre、 Gauss – Hermite quadrature

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)dx, \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx$$

以上两个积分，李庆扬教材都有表格数据可查，根据经验，想得到高精度不容易，因为 节点和权重太繁琐，不好用且只能取近似值. 算是没有办法的办法吧!!

小结

1. 光滑函数：复合Simpson、Romberg、复合2点、4点Gauss（小区间求积节点由标准节点给出）
2. 光滑周期函数：复合梯形，复合中点公式、左右矩形公式都可以，本质一样！
3. 会查表应用已知的Gauss求积公式：如Gauss – Laguerre、 Gauss – Hermite
4. 会计算带简单权重如$\rho(x) = x^\alpha$的2点Gauss公式，或利用软件编程求解 4点以上的Gauss积分公式

Gauss公式优势明显，但最最常用的依然是梯形公式、Simpson！！WHY? 简单！！

数学的重要性！！

定积分的计算门道很多，好的被积函数各种方法都行， 性质不好的函数需要仔细分析，最好 能利用数学知识化繁为简. 例如：

$$I = \int_1^{\infty} x^{-\frac{3}{2}} \sin \frac{1}{x} dx$$

如果直接在区间[1,100]积分, 剩余做截断，误差很大1e-2

如果利用数学知识可改善计算效果. 令$x = 1/t$，得到

$$I = \int_1^0 t^{3/2} \sin t \cdot d(\frac{1}{t}) = \int_0^1 \frac{\sin t}{\sqrt{t}} dt$$

上述被积函数f(x)性质很好，可以中点公式或者带权$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$ 的Gauss积分.

还可进一步做改进

$$I = \int_0^1 \frac{\sin t - t + t^3/6}{\sqrt{t}} dt + \int_0^1 \frac{t - t^3/6}{\sqrt{t}} dt$$

上式第一项积分被积函数更加平滑；第二项直接求出即可.

小结

1. 光滑函数：复合Simpson、Romberg、复合2点、4点Gauss（小区间求积节点由标准节点给出）
2. 光滑周期函数：复合梯形，复合中点公式、左右矩形公式都可以，本质一样！
3. 会查表应用已知的Gauss求积公式：如Gauss – Laguerre、 Gauss – Hermite
4. 会计算带简单权重如$\rho(x) = x^{\alpha}$的2点Gauss公式，或利用软件编程求解 4点以上的Gauss积分公式

Remark 6.3

Gauss公式优势明显，但最最常用的依然是梯形公式、Simpson！！WHY?

简单！！

上机题目

1. 取n = 8, 16；用复合梯形公式，Simpson公式，Romberg积分计算

$$\int_{0.5}^{5} \frac{\sin x}{x} dx$$

2. 用两点，四点Gauss公式计算上述积分并与上题结果比较。
3. 利用Romberg积分公式和自适应积分公式计算积分

$$\int_{0.5}^{5} \frac{100}{x^2} \sin \frac{10}{x} dx$$

可选择自适应Simpson，自适应中点公式，或者自适应两点Gauss公式.

Contents

矩形区域上的积分公式

考查二重积分

$$I(f)=\iint_{\Omega}f(x,y)d\Omega=\int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy$$

将积分区域均匀分割成$M\times N$个小矩形，记网格节点(x_i,y_j)以及小矩形中心$(x_{i+1/2},y_{j+1/2})$，记f_{ij}，$f_{i+1/2,j+1/2}$为相应的函数值.

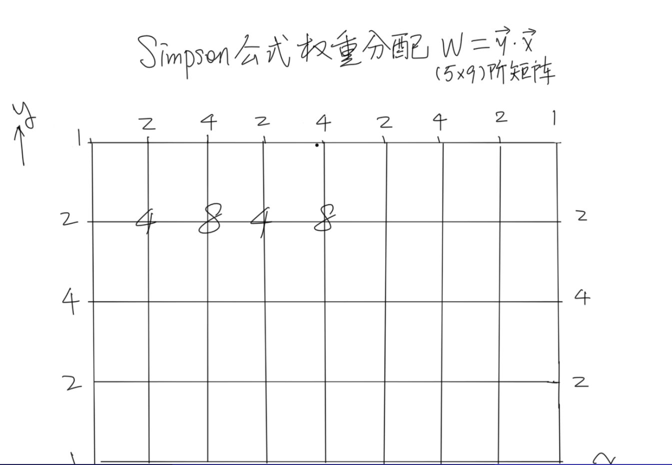
中点公式

$$I(f)\approx\frac{1}{MN}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{j=0}^{N-1}f_{i+1/2,j+1/2}$$

梯形公式

$$I(f) \approx \frac{1}{4MN}\Big[\sum_{cornerP} f_{ij} + 2\sum_{innerPedge} f_{ij} + 4\sum_{innerP} f_{ij}\Big]$$

Simpson公式



Simpson 公式算法实现

1. 按梯形公式做网格剖分$(N+1)\times(M+1)$, 提取节点处函数值f_{ij}
2. 如图生成节点的权重矩阵w：列向量$[1,2,4,2,1]$乘以$[1,2,4,2,4,2,4,2,1]$
3. 求和$f.*w$并乘以网格系数$h_1*h_2/9$

Gauss公式

考查如下积分

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)dxdy = \frac{(b-a)(d-c)}{4} \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} g(s,t)\, ds\, dt$$

1. 查表选择Gauss点 $x = \{x_1, ..., x_4\}$, 坐标变换

$$t = [(b-a)*x + a + b]/2, \quad s = [(d-c)*x + d + c]/2,$$

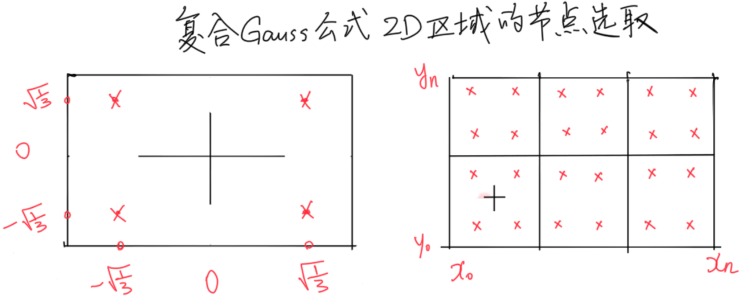
   meshgrid (s,t) 生成二维Gauss坐标；提取节点处函数值f_{ij}

2. 查表得到 $w_1 = [A_1, A_2, A_3, A_4]$, 生成节点的权重矩阵w
3. 求和$f.*w$ 乘以网格系数$\frac{(b-a)(d-c)}{4}$

Remark 7.1

同样可以考虑复合2点或者4点高斯公式，因为节点无重复，Matlab方便

1. 区域等分为N*M块，在每个小矩形上生成Gauss点，及其 权重矩阵
2. 组装成整个区域的Gauss节点，提取节点处的函数值 ，repmat生成整体节点权重　参考 myCompGauss2.m
3. f与w点积即可，（若是两个节点的Gauss公式，w = 1 直接求和）



在路上...