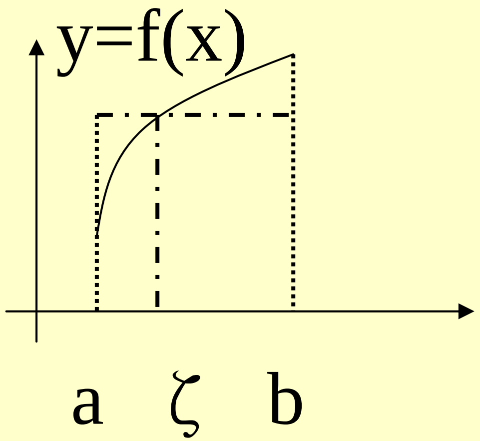
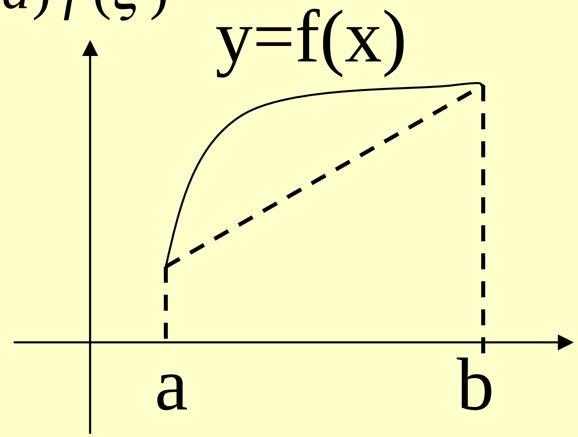
第四章 数值积分 /* Numerical Integration */

积分中值定理 $\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\zeta)$





梯形公式 $T = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

中矩形公式 $R = (b-a)f(\frac{a+b}{2})$

一般情况，在区间[a,b]上适当选取某些节点x_k，然后用$f(x_k)$加权平均,得到

求积系数,权

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

求积节点

该数值积分方法通常称为机械求积

特点：积分求值问题 → 函数值的计算问题

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

例：对于$[a, b]$上1次插值，有 $L_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b)$

$$\Rightarrow A_1 = A_2 = \frac{b-a}{2} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

梯形公式 /* trapezoidal rule*/

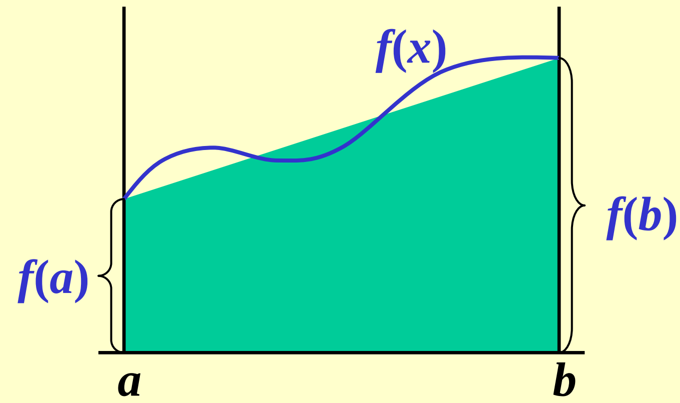
考察其代数精度。

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



代数精度 = 1

例1 给定求积公式 $\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + B_0 f'(0)$

确定求积系数使公式具有尽可能高的代数精度。

解：

$$\left.\begin{aligned} \int_0^1 1dx &= A_0 + A_1 = 1 \\ \int_0^1 xdx &= A_1 + B_0 = 1/2 \\ \int_0^1 x^2dx &= A_1 = 1/3 \end{aligned}\right\} A_1 = 1/3, A_0 = 2/3, B_0 = 1/6$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{2}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1) + \frac{1}{6} f'(0)$$

$$\int_0^1 x^3 dx = \frac{1}{4} \neq \frac{1}{3}$$

该积分公式的代数精度为2

■插值型求积公式

给定一组节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$

以及函数f(x)在这些节点的值f(

做插值函数$L_n(x)$，并积分

$$I_n = \int_a^b L_n(x)\,dx \quad = \int_a f(x)\,dx$$

由节点决定与函数无关

所构造的求积公式 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

插值型求积公式

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

求积误差

$$R(f) = I - I_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x)\,dx$$

定理1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：$A_k = \int_a^b l_k(x)dx$ ）

■求积公式的余项

保号

$$R(f) = I - I_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x)dx = f^{(n+1)}(\eta)\int_a^b \frac{w(x)}{(n+1)!}dx = \boxed{K} f^{(n+1)}(\eta)$$

$$K = \frac{1}{(m+1)!}\left[\int_a^b x^{m+1}dx - \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1}\right]$$

梯形公式的余项

$$K = \frac{1}{2}\left[\int_a^b x^2 dx - \frac{b-a}{2}(a^2+b^2)\right] = -\frac{1}{12}(b-a)^3$$

$$R(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta)$$

中矩形公式的余项

$$K=\frac{1}{2}[\int_a^b x^2dx-(\frac{b+a}{2})^2(b-a)]=-\frac{1}{24}(b-a)^3$$

$$R(f)=-\frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta)$$

例2 求积公式 $\int_a^b f(x)dx\approx\frac{2}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1)+\frac{1}{6}f'(0)$ 的余项

解：由于求积公式的代数精度为2，于是

$$K=\frac{1}{3!}[\int_a^b x^3dx-(\frac{2}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1)+\frac{1}{6}f'(0))]=\frac{1}{3!}(\frac{1}{4}-\frac{1}{3})=-\frac{1}{72}$$

$$R(f)=-\frac{1}{72}f''(\eta)$$

■求积公式的收敛性与稳定性

定义2 在求积公式中，若

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

$$h = \max_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1})$$

则称求积公式收敛。

$$f(x_k) = \tilde{f}_k + \delta_k$$

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \longrightarrow I_n(\tilde{f}) = \sum_{k=0}^{n} A_k \tilde{f}_k$$

定义3 对任给 ε >0,若存在 δ >0, 只要 $|f(x_k) - \tilde{f}_k| \le \delta$

就有 $$|I_n(f) - I_n(\tilde{f})| = |\sum_{k=0}^{n} A_k [f(x_k) - \tilde{f}_k]| \le \varepsilon$$

则称求积公式是稳定的。

定理2 若求积系数$A_k>0$,则此求积公式是稳定的。

证明: 任给 ε >0, 若 $\delta=\dfrac{\varepsilon}{b-a}$ 且 $|f(x_k)-\tilde{f}_k|\le\delta$

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

$$\le\delta\sum_{k=0}^{n}A_k=\delta(b-a)=\varepsilon$$

§2 Newton-Cotes 公式

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

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$$

$$A_i = \int_{x_0}^{x_n} \prod_{j\neq i} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} dx \qquad \text{令 } x = a + th$$

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

Cotes系数 $C_i^{(n)}$

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

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

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

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, $R[f] = -\frac{3}{80}h^5 f^{(5)}(\xi)$

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

定理3 **n 为偶数阶的*Newton-Cotes*公式至少有 n+1 次代数精度**

证明：验证当n为偶数时，Newton-Cotes公式对 $f(x)=x^{n+1}$的余项为零.

$$R[f]=\int_a^b \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)dx \xrightarrow{x_j=a+jh} R[f]=h^{(n+2)}\int_0^n \prod_{j=0}^{n}(t-j)dx$$

$$\Big\downarrow\; t=u+n/2$$

$$R[f]=h^{(n+2)}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)du$$

$$H(u)=\prod_{j=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}(u-j)$$

H(u)是奇函数，其在对称区间上积分为零。

- **当n≥8时，Cotes系数出现负值，导致数值积分公式数值不稳定。**

Simpson公式的截断误差

Simpson求积公式代数精度至少是3次的.

可以验证R(x^4)≠0. → **它的代数精度是3次的.**

构造三次多项式H(x)，满足

$$H(a)=f(a) \qquad H(b)=f(b)$$

$$H(c)=f(c) \qquad H'(c)=f'(c)$$

c=(a+b)/2

且 $$\int_a^b H(x)dx=\frac{b-a}{6}[H(a)+4H(c)+H(b)]$$

$$f(x)-H(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)$$

积分误差 $$R_S=I-S=\int_a^b[f(x)-H(x)]dx$$

$$R_S=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)dx=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$$

Simpson公式的余项

Simpson求积公式代数精度至少是3次的.

可以验证R(x^4)≠0. → **它的代数精度是3次的.**

$$K=\frac{1}{4!}\left[\int_a^b x^4dx-\frac{b-a}{6}\left(a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4\right)\right]=\frac{1}{4!}\frac{(b-a)^5}{120}=\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4$$

$$R(f)=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$$

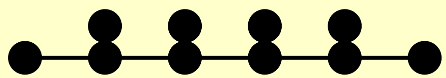
§3 复合求积 /* Composite Quadrature */

高次插值有**Runge 现象**，故采用分段低次插值

⇒ 分段低次合成的 *Newton-Cotes* 复合求积公式。

➢ 复合梯形公式： $h=\dfrac{b-a}{n},\ x_k=a+k\,h\quad (k=0,\dots,n)$

在每个 $[x_{k-1}, x_k]$ 上用梯形公式：



$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx \frac{x_k - x_{k-1}}{2}[f(x_{k-1})+f(x_k)],\quad k=1,\dots,n$$

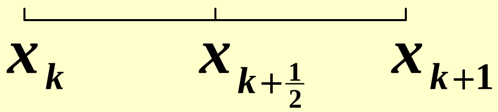
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n}\frac{h}{2}[f(x_{k-1})+f(x_k)] = \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] = T_n$$

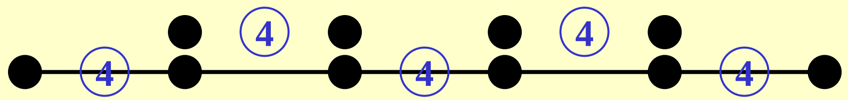
$$R[f]=\sum_{k=1}^{n}[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)] = -\frac{h^2}{12}(b-a)\frac{\sum_{k=1}^{n}f''(\xi_k)}{n}$$ /*介值定理*/

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

➢ 复化 Simpson 公式: $h = \dfrac{b-a}{n},\ x_k = a + kh \quad (k = 0, \ldots, n)$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})]$$





$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1}) + f(b)] = S_n$$

$$R[f] = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi)$$

注: 为方便编程，可采用另一记法：令 $n' = 2n$ 为偶数，

这时 $h' = \dfrac{b-a}{n'} = \dfrac{h}{2},\ x_k = a + kh'$，有

$$S_n = \frac{h'}{3}[f(a) + 4\sum_{\text{odd } k} f(x_k) + 2\sum_{\text{even } k} f(x_k) + f(b)]$$

➢ 收敛性与误差估计:

复化梯形公式的收敛性 $\lim\limits_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x)dx$

复化Simpson公式的收敛性 $\lim\limits_{n\to\infty} S_n = \int_a^b f(x)dx$

$$T_n \sim O(h^2),\ S_n \sim O(h^4),\ C_n \sim O(h^6)$$

例: 计算 $\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

运算量基本相同

解: $T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1) \right]$ 其中 $x_k = \frac{k}{8}$

$= 3.138988494$

$S_4 = \frac{1}{24}\left[f(0) + 4\sum_{odd} f(x_k) + 2\sum_{even} f(x_k) + f(1) \right]$ 其中 $x_k = \frac{k}{8}$

$= 3.141592502$

例1 利用复化梯形公式和复化Simpson公式计算

$$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

I=0.9460831

解:

$$T_8 = \frac{1}{16}[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1)] = 0.9456909$$

$$S_4 = \frac{1}{24}[f(0) + 4\sum_{odd} f(x_k) + 2\sum_{even} f(x_k) + f(1)] = 0.9460832$$

求f(x)的高阶导数

$$f(x) = \frac{\sin x}{x} = \int_0^1 (\cos xt) dt \Longrightarrow f^{(k)}(x) = \int_0^1 \frac{d^k}{dx^k}(\cos xt) dt = \int_0^1 t^k \cos(xt + \frac{k\pi}{2}) dt$$

$$\max_{0 \le x \le 1} | f^{(k)}(x) | \le \int_0^1 | \cos(xt + \frac{k\pi}{2}) | t^k dt \le \int_0^1 t^k dt = \frac{1}{k+1}$$

$$| R_8(f) | = | I - T_8 | \le \frac{h^2}{12} \max_{0 \le x \le 1} | f''(x) | \le \frac{1}{12} (\frac{1}{8})^2 \frac{1}{3} = 0.000434$$

$$| R_4(f) | = | I - S_4 | \le \frac{1}{2880} (\frac{1}{4})^4 \frac{1}{5} = 0.271 \times 10^{-6}$$

例4 计算积分 $I=\int_0^1 e^x dx$，若用复合梯形公式，区间**[0,1]**应分多少等份才能使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$

若用**Simpson**公式，要达到同样的精度，应分多少等份?

解：
$$R(f)=\left|-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)\right|\le\frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 e\le\frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

解得，**n ≥ 212.85, 取n=213,** 可使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$

$$\left|R(f)\right|=\frac{b-a}{2880}h^4\left|f^{(4)}(\xi)\right|\le\frac{1}{2880}\left(\frac{1}{n}\right)^4 e\le\frac{1}{2}\times 10^{-5}$$

解得，**n>3.707,取n=4,** 可达到精度要求。

§4 Romberg求积 和Richardson外推法 /* Romberg Integration and Richardson's extrapolation */

■梯形法的递推化

将[a,b]分为n等份，共有n+1个分点，其梯形公式为

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

将[a,b]分为2n等份，共有2n+1个分点，新增加的节点是$[x_k, x_{k+1}]$的二分分点，$x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$

$[x_k, x_{k+1}]$上的积分值 $\frac{h}{4}[f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})]$

整个区间上的积分值 $T_{2n} = \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k) + f(x_{k+1})] + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$

$$\Downarrow$$

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

例2 计算积分值 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$

n=1 $T_1 = \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] = [1 + 0.8414709]/2 = 0.9207355$ h=1-0=1

n=2 $T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2} f(\frac{1}{2}) = 0.9397933$ h=1/2

n=3 $T_3 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{0.5}{2}[f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})] = 0.9445135$ h=1/4

n=4 T_4=0.9459850

⋮

n=10 T_{10}=0.9460831

共有分点1025

计算量很大

■龙贝格算法

例：计算 $\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$

已知对于 $\varepsilon = 10^{-6}$ 须将区间对分 9 次，得到 $T_{512} = 3.14159202$

考察 $\frac{I-T_{2n}}{I-T_n} \approx \frac{1}{4}$　由 $I \approx \frac{4T_{2n}-T_n}{4-1} = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$ 来计算 I 效果是否好些?

$$\frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4 = 3.141592502 = S_4$$

Romberg 序列

一般有：

$$\boxed{\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1} = S_n} \quad \boxed{\frac{4^2 S_{2n}-S_n}{4^2-1} = C_n} \quad \boxed{\frac{4^3 C_{2n}-C_n}{4^3-1} = R_n}$$

➢ 理查德森外推法 /* Richardson's extrapolation */

利用低阶公式产生高精度的结果。

α_i 与 h 无关

设对于某一 $h \neq 0$，有公式 $T_0(h)$ 近似计算某一未知值 I。由 Taylor展开得到: $T_0(h) - I = \alpha_1 h + \alpha_2 h^2 + \alpha_3 h^3 + \ldots$

现将 h 对分，得: $T_0(\frac{h}{2}) - I = \alpha_1\left(\frac{h}{2}\right) + \alpha_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + \alpha_3\left(\frac{h}{2}\right)^3 + \ldots$

Q: 如何将公式精度由 $O(h)$ 提高到 $O(h^2)$？

$$\frac{2T_0(\frac{h}{2}) - T_0(h)}{2-1} - I = -\frac{1}{2}\alpha_2 h^2 - \frac{3}{4}\alpha_3 h^3 - \ldots$$

即: $$T_1(h) = \frac{2T_0(\frac{h}{2}) - T_0(h)}{2-1} = I + \beta_1 h^2 + \beta_2 h^3 + \ldots$$

$$T_2(h) = \frac{2^2 T_1(\frac{h}{2}) - T_1(h)}{2^2 - 1} = I + \gamma_1 h^3 + \gamma_2 h^4 + \ldots$$

$$\Rightarrow\quad T_m(h) = \frac{2^m T_{m-1}(\frac{h}{2}) - T_{m-1}(h)}{2^m - 1} = I + \delta_1 h^{m+1} + \delta_2 h^{m+2} + \ldots$$

➢ 理查德森外推法 /* Richardson’s extrapolation */

定理4 设f(x)∈C^∞[a, b], 有

与h无关

$$T(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_l h^{2l} + \cdots$$

Q: 如何将公式精度由 ***O*(*h*)** 提高到 ***O*(h^2)** ?

$$T(\frac{h}{2}) = I + \alpha_1 (\frac{h}{2})^2 + \alpha_2 (\frac{h}{2})^4 + \cdots + \alpha_l (\frac{h}{2})^{2l} + \cdots$$

与h无关

$$T_1(h) = \frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots$$

$o(h^4)$

Simpson公式

$$T_1(\frac{h}{2}) = I + \beta_1 \frac{h^4}{16} + \beta_2 \frac{h^6}{2^6} + \cdots$$

$$T_2(h) = \frac{16T_1(\frac{h}{2}) - T_1(h)}{15}$$

Romberg求积算法

$$T_m(h) = \frac{4^m T_{m-1}(\frac{h}{2}) - T_{m-1}(h)}{4^m - 1} = I + \delta_1 h^{2(m+1)} + \cdots$$

➢ **Romberg 算法:**

① $T_1 = T_0^{(0)}$ $\quad < \varepsilon ?$

② $T_2 = T_0^{(1)}$ ③ $S_1 = T_1^{(0)}$ $\quad < \varepsilon ?$

④ $T_4 = T_0^{(2)}$ ⑤ $S_2 = T_1^{(1)}$ ⑥ $C_1 = T_2^{(0)}$ $\quad < \varepsilon ?$

⑦ $T_8 = T_0^{(3)}$ ⑧ $S_4 = T_1^{(2)}$ ⑨ $C_2 = T_2^{(1)}$ ⑩ $R_1 = T_3^{(0)}$

… … … … … …

1.取k=0,h=b-a,求$T_0^{(0)} = \frac{h}{2}[f(a) + f(b)]$ k=1

2.求梯形值 $T_0(\frac{b-a}{2^k})$ **,计算**$T_0^{(k)}$

3.求加速值$T_j^{(k-j)}, (j = 1, 2, \ldots, k)$

4.若$|T_k^{(0)} - T_{k-1}^{(0)}| < \varepsilon$ 终止计算，取 $T_k^{(0)} \approx I$ 否则继续计算

可以证明 $\lim\limits_{k\to\infty} T_m^{(k)} = I$

$$\lim_{k\to\infty} T_m^{(0)} = I$$

自适应积分方法

给定精度ε，计算 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$

应用Simpson公式 $I(f)=\int_a^b f(x)dx=S(a,b)-\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta)$

误差如何估计？

把[a,b]对分，在每个区间上分别应用Simpson公式

$$S_2(a,b)=S(a,\frac{a+b}{2})+S(\frac{a+b}{2},b)$$

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx=S_2(a,b)-\frac{b-a}{180}(\frac{h}{4})^4 f^{(4)}(\xi)$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{I(f)-S(a,b)}{I(f)-S_2(a,b)} \approx 16$$

事后误差估计

$$\Longrightarrow \quad |I(f)-S_2(a,b)| \approx \frac{1}{15}|S(a,b)-S_2(a,b)| = \frac{1}{15}|S_1-S_2|$$

若 $|S_1-S_2| \le 15\varepsilon$ ，可得到 $|I(f)-S_2(a,b)| \le \varepsilon$

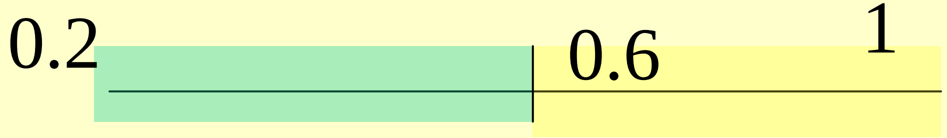
若不成立，则分别对子区间应用Simpson公式，再分别在子区间上考虑是否满足精度ε /2，对不满足的继续细分，直到满足为止，然后利用Romberg法求出相应的积分近似值。

例7 计算积分 $\int_{0.2}^{1} \frac{1}{x^2} dx$ 　精度不超过0.02

方法一：利用Simpson公式计算，S_4=4.002164，S_5=4.000154,采用Romberg法得到

$$RS[0.2,1] = S_5 + \frac{S_5 - S_4}{15} = 4.00002$$

将区间划分为32等分，计算33个f(x)值.

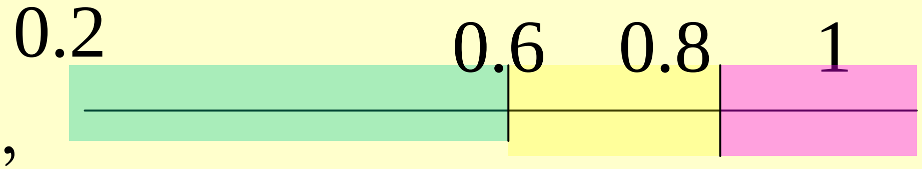


方法二：利用自适应方法 $S_1 = 4.948148$

$S_2[0.2, 0.6] = 3.51851852$ 　　$S_2[0.6,1] = 0.66851852$

$|S_1 - S_2| = \boxed{0.761111}$ $\Rightarrow$ 不满足精度要求细分下去

考虑区间[0.6,1]的细分，



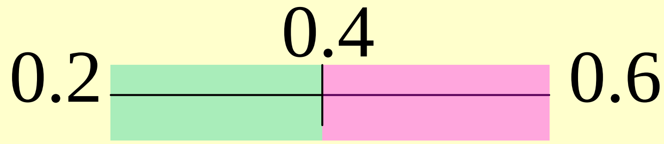
$$S_3[0.6,0.8]=0.41678477 \qquad S_3[0.8,1]=0.25002572$$

$$S_2[0.6,1]-(S_3[0.6,0.8]+S_3[0.8,1])=0.001708$$

满足精度要求，计算该区间积分值

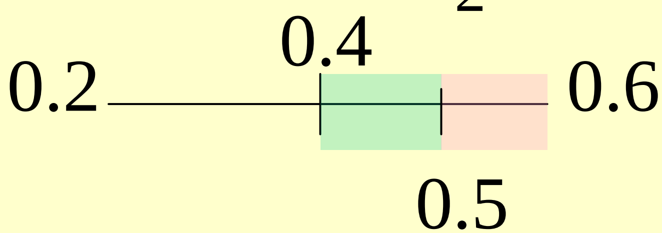
$$RS[0.6,1]=\frac{4^2(S_3[0.6,0.8]+S_3[0.8,1])-S_2[0.6,1]}{16-1}=0.66669662$$

$$S_2[0.2, 0.6] = 3.51851852$$



$$S_3[0.2, 0.4] = 2.52314815 \qquad S_3[0.4, 0.6] = 0.83425926$$

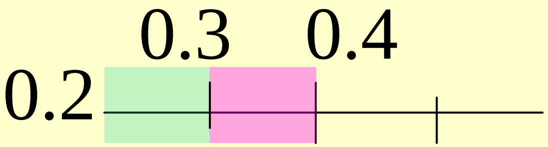
$$S_2[0.2, 0.6] - (S_3[0.2, 0.4] + S_3[0.4, 0.6]) = 0.161111 > \frac{\varepsilon}{2}$$



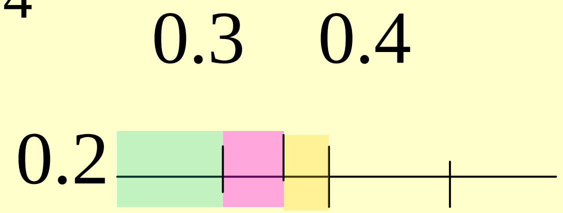
$$S_4[0.4, 0.5] = 2.52314815 \qquad S_4[0.5, 0.6] = 0.83425926$$

$$S_3[0.4, 0.6] - (S_4[0.4, 0.5] + S_4[0.5, 0.6]) = 0.000859 < \frac{\varepsilon}{4}$$

$$RS[0.4, 0.6] = 0.83333428$$



$$S_3[0.2,0.4]-(S_4[0.2,0.3]+S_4[0.3,0.4])>\frac{\varepsilon}{4}$$



$$S_4[0.3,0.4]=0.83356954$$

$$S_5[0.3,0.35]=0.47620166 \qquad S_5[0.35,0.4]=0.35714758$$

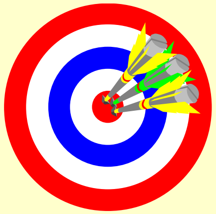
$$S_4[0.3,0.4]-(S_5[0.3,0.35]+S_5[0.35,0.4])=0.00022<\frac{\varepsilon}{8}$$

$$RS[0.3,0.4]=0.83333492 \qquad RS[0.2,0.3]=1.666686$$

$$I(f)\approx RS[0.2,0.3]+RS[0.3,0.4]+RS[0.4,0.6]+RS[0.6,1]=4.00005957$$

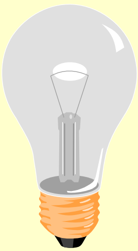
只用了17个f(x)值.

§5 高斯型积分 /* Gaussian Quadrature */



构造具有$2n+1$次代数精度的求积公式

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



将节点 $x_0 \dots x_n$ 以及系数 $A_0 \dots A_n$ 都作为待定系数。令 $f(x) = 1, x, x^2, \dots, x^{2n+1}$ 代入可求解，得到的公式具有$2n+1$ 次代数精度。这样的节点称为Gauss 点，公式称为Gauss 型求积公式。

例：求 $\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx$ 的 2 点 Gauss 公式。

解：设 $\int_0^1 \sqrt{x} f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$，应有 3 次代数精度。

代入 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$

$$\begin{cases} \frac{2}{3} = A_0 + A_1 \\ \frac{2}{5} = A_0 x_0 + A_1 x_1 \\ \frac{2}{7} = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 \\ \frac{2}{9} = A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} x_0 &\approx 0.8212 \\ x_1 &\approx 0.2899 \\ A_0 &\approx 0.3891 \\ A_1 &\approx 0.2776 \end{aligned}$$

不是线性方程组，不易求解。

利用第一式，可将第二式化为 $$\frac{2}{3}x_0+(x_1-x_0)A_1=\frac{2}{5}$$

利用第二式，可将第三式化为 $$\frac{2}{5}x_0+(x_1-x_0)x_1A_1=\frac{2}{7}$$

利用第三式，可将第四式化为 $$\frac{2}{7}x_0+(x_1-x_0)x_1A_1=\frac{2}{9}$$

从上三个式子消去**(x_1-x_0)A_1**,

$$\begin{cases}\frac{2}{5}x_0+(\frac{2}{5}-\frac{2}{3}x_0)x_1=\frac{2}{7}\\ \frac{2}{7}x_0+(\frac{2}{7}-\frac{2}{5}x_0)x_1=\frac{2}{9}\end{cases}$$

$$\begin{cases}\frac{2}{5}(x_0+x_1)-\frac{2}{3}x_0x_1=\frac{2}{7}\\ \frac{2}{7}(x_0+x_1)-\frac{2}{5}x_0x_1=\frac{2}{9}\end{cases}$$

$$x_0x_1=\frac{5}{21}$$

$$x_0+x_1=\frac{10}{9}$$

$$\boldsymbol{x_0\approx 0.8212}$$

$$\boldsymbol{x_1\approx 0.2899}$$

$$\boldsymbol{A_0\approx 0.3891}$$

$$\boldsymbol{A_1\approx 0.2776}$$

定理 $x_0 \ldots x_n$ 为 Gauss 点 ⇔ $w(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$ 与任意次数不大于n 的多项式 $P(x)$ （带权）正交。

求 Gauss 点 ⇔ 求$w(x)$

证明： "⇒" $x_0 \ldots x_n$ 为 ...s 点, 则公式 $\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

至少...

...)， $P_m(x)\, w(x)$的次数

不...成立：

$$\int_a^b \rho(x)P_m(x)w(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k P_m(x_k)\underbrace{\cancel{w(x_k)}}_{0} = 0$$

"⇐" 要证明 $x_0 \ldots x_n$ 为 Gauss 点，即要证公式对任意次数不大于$2n+1$ 的多项式 $P_m(x)$ 精确成立，

$r(x)\in H_n(x)$

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

设 $P_m(x)=w(x)q(x)+r(x)$

$$\int_a^b \rho(x)P_m(x)dx = \underbrace{\int_a^b \rho(x)\cancel{w(x)}q(x)dx}_{0} + \int_a^b \rho(x)r(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k r(x_k)$$

$$= \sum_{k=0}^{n} A_k P_m(x_k)$$

正交多项式族$\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n, \ldots\}$有性质：任意次数不大于$n$ 的多项式 $P(x)$ 必与φ_{n+1}正交。

若取 $w(x)$ 为其中的φ_{n+1}，则φ_{n+1}的根就是 Gauss 点。

再解上例: $\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$

Step 1: 构造正交多项式φ_2

设 $\varphi_0(x) = 1$, $\varphi_1(x) = x + a$, $\varphi_2(x) = x^2 + bx + c$

$$(\varphi_0, \varphi_1) = 0 \;\Rightarrow\; \int_0^1 \sqrt{x}(x + a)dx = 0 \;\Rightarrow\; a = -\frac{3}{5}$$

$$(\varphi_0, \varphi_2) = 0 \;\Rightarrow\; \int_0^1 \sqrt{x}(x^2 + bx + c)dx = 0$$

$$(\varphi_1, \varphi_2) = 0 \;\Rightarrow\; \int_0^1 \sqrt{x}(x - \frac{3}{5})(x + bx + c)dx = 0$$

$$b = -\frac{10}{9} \qquad c = \frac{5}{21}$$

即: $\varphi_2(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21}$

Step 2: 求 $\varphi_2 = 0$ 的 2 个根，即为 Gauss 点 x_0，x_1

$$x_{0;1} = \frac{10/9 \pm \sqrt{(10/9)^2 - 20/21}}{2}$$

解线性方程组，简单。

Step 3: 代入 $f(x) = 1, x$ 以求解 A_0，A_1

结果与前一方法相同：$x_0 \approx 0.8212,\ x_1 \approx 0.2899,\ A_0 \approx 0.3891,\ A_1 \approx 0.2776$

利用此公式计算 $\int_0^1 \sqrt{x}\, e^x\, dx$ 的值

$$\int_0^1 \sqrt{x} e^x\, dx \approx A_0 e^{x_0} + A_1 e^{x_1} = 0.3891 \times e^{0.8212} + 0.2776 \times e^{0.2899} \approx 1.2555$$

注：构造正交多项式也可以利用 *L-S* 拟合中介绍过的递推式进行。

➢ Gauss 公式的余项:

$$R[f]=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$$ /* 设 P 为 f 的过 $x_0 \dots x_n$ 的插值多项式 */

$$=\int_a^b f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_k P(x_k)$$ /*只要 P 的阶数不大于 $2n+1$，则下一步等式成立*/

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

插值多项式的余项

Q: 什么样的插值多项式在 $x_0 \dots x_n$ 上有 $2n+1$ 阶?

A: **Hermite** 多项式！ 满足 $H(x_k)=f(x_k),\ H'(x_k)=f'(x_k)$

$$\Rightarrow R[f]=\int_a^b [f(x)-H(x)]dx$$

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

$$=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b w^2(x)dx, \qquad \xi\in(a,b)$$

定理6 Gauss 求积公式的求积系数A_k(k=0,1,…,n)全是正的。

n次多项式

证明:

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

$$0<\int_a^b l_k^2(x)\rho(x)dx=\sum_{i=0}^{n}A_i l_k^2(x_i)=\sum_{i=0}^{n}A_i\delta_{ik}=A_k$$

推论 Gauss求积公式是稳定的.

定理7 设f(x) ∈ C[a, b], 则Gauss求积公式是收敛的，即

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

➢ 特殊正交多项式族:

① **Legendre** 多项式族：定义在$[-1, 1]$上，$\rho(x)\equiv 1$

$$\boxed{P_k(x)=\frac{1}{2^k k!}\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k}$$

满足：$(P_k, P_l)=\begin{cases} 0 & k\neq l \\ \frac{2}{2k+1} & k=l \end{cases}$

由 $P_0=1$, $P_1=x$ 有递推 $(k+1)P_{k+1}=(2k+1)xP_k-kP_{k-1}$

以 P_{n+1} 的根为节点的求积公式称为 *Gauss-Legendre* 公式。

取$P_1(x)=x$，构造高斯型求积公式 $\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx 2f(0)$

取$P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$ 构造高斯型求积公式 $\int_{-1}^{1}f(x)dx=f(-\frac{1}{\sqrt{3}})+f(\frac{1}{\sqrt{3}})$

公式余项 $R_n[f]=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_{-1}^{1}\tilde{P}_{n+1}(x)dx$

$$=\frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}f^{(2n+2)}(\eta)$$

注意到积分端点 ±1 可能是积分的奇点，用普通*Newton-Cotes*公式在端点会出问题。而*Gauss*公式可能避免此问题的发生。

② Chebys

$T_k(x) = \cos(k \times \arccos$

T_{n+1} 的根为 $x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right)$ $k = 0, \ldots, n$

以此为节点构造公式 $\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} \boxed{A_k} f(x_k)$

称为 **Gauss-Chebyshev 公式，其中**

$$x_k = \cos\frac{(2k-1)}{2n}\pi \qquad A_k = \frac{\pi}{n}$$

公式余项 $R[f] = \frac{2\pi}{2^{2n}(2n)!} f^{(2n)}(\eta)$

例6 用4点的Gauss-Legendre求积公式计算

$$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2\cos x\,dx$$

解:

$$I=\int_{-1}^{1}(\frac{\pi}{4})^3(1+t)^2\cos\frac{\pi}{4}(1+t)dt$$

$$\approx 0.3478548\times(\frac{\pi}{4})^3(1+0.8611363)^2\cos\frac{\pi}{4}(1+0.8611363)$$

$$+0.3478548\times(\frac{\pi}{4})^3(1-0.8611363)^2\cos\frac{\pi}{4}(1-0.8611363)$$

$$+0.6521452\times(\frac{\pi}{4})^3(1+0.3399810)^2\cos\frac{\pi}{4}(1+0.3399810)$$

$$+0.6521452\times(\frac{\pi}{4})^3(1-0.3399810)^2\cos\frac{\pi}{4}(1-0.3399810)$$

$$\approx 0.467402$$

例7 用5点的Gauss-Chebyshev求积公式计算

$$I=\int_{-1}^{1}\frac{e^{x}}{\sqrt{1-x^{2}}}dx$$

解

$$I=\frac{\pi}{5}\sum_{k=1}^{5}e^{\cos\frac{2k-1}{10}\pi}=3.977463$$

$$|R[f]|\le\frac{\pi}{2^{9}\bullet 10!}e\le 4.6\times10^{-9}$$

例 $I=\int_{0}^{2}\frac{x^{2}-1}{\sqrt{x(2-x)}}dx$

化为能用m点Gauss-Chebyshev求积公式的积分，当m取多大时，能得到积分的准确值，并计算该值。

多重积分

考虑二重积分 $\iint\limits_R f(x,y)dxdy = \int_a^b (\int_c^d f(x,y)dy)dx$

[a,b],[c,d]分为N，M等份，步长h=(b-a)/N,k=(d-c)/M

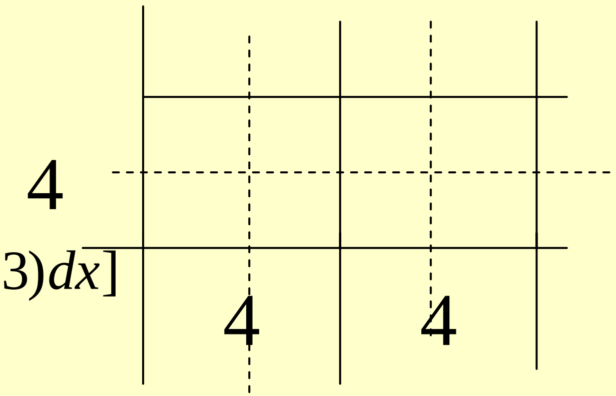
先对积分 $\int_c^d f(x,y)dy$ 应用复合Simpson公式，

$$\int_c^d f(x,y)dy = \frac{k}{6}[f(x,y_0) + 4\sum_{i=0}^{M-1} f(x,y_{i+1/2}) + 2\sum_{i=1}^{M-1} f(x,y_i) + f(x,y_M)]$$

其中 $y_i = c + ik, y_{i+1/2} = c + (i + \frac{1}{2})k$

$$\int_c^d f(x,y)dy = \frac{k}{6}[\int_a^b f(x,y_0)dx + 4\sum_{i=0}^{M-1}\int_a^b f(x,y_{i+1/2})dx + 2\sum_{i=1}^{M-1}\int_a^b f(x,y_i)dx + \int_a^b f(x,y_M)dx]$$

例14 求二重积分 $\int_{1.4}^{2}\int_{1.0}^{1.5}\ln(x+2y)dydx$



$$I=\frac{0.5}{6}[\int_{1.4}^{2}\ln(x+2)dx+4\int_{1.4}^{2}\ln(x+2.5)dx+\int_{1.4}^{2}\ln(x+3)dx]$$

$$=\frac{0.5}{6}\times\frac{0.3}{6}[\ln 3.4+4(\ln 3.55+\ln 3.85)+2\ln 3.7+\ln 4]$$

$$+\frac{0.5}{6}\times\frac{1.2}{6}[\ln 3.9+4(\ln 4.05+\ln 4.35)+2\ln 4.2+\ln 4.5]$$

$$+\frac{0.5}{6}\times\frac{0.3}{6}[\ln 4.4+4(\ln 4.55+\ln 4.85)+2\ln 4.7+\ln 5]$$

$$=0.42955244$$

对于非矩形区域的二重积分，只要化为累次积分，也可类似矩形域情形求得其近似值

$$\int_a^b \int_{c(x)}^{d(x)} f(x,y)dydx \approx \int_a^b \frac{k(x)}{3}[f(x,c(x))+4f(x,c(x)+k(x))+f(x,d(x))]d$$

$$k(x)=\frac{d(x)-c(x)}{2}$$

数值微分

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

根据导数定义,用差商近似导数

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

中点法

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} = G(h)$$

$O(h^2)$

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

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

截断误差

$$|f'(a) - G(h)| \le \frac{h^2}{6} M \qquad M \ge \max_{|x-a| \le h} |f'''(x)|$$

从舍入误差的角度，步长不宜太小。

假设f(a+h),f(a-h)分别有舍入误差ε$_1$，ε$_2$,则计算f’(a)的舍入误差估计为

ε =max{ε$_1$，ε$_2$}

$$\delta(f'(a)) = |G(a) - \tilde{G}(a)| \le \frac{|\varepsilon_1| + |\varepsilon_2|}{2h} = \frac{\varepsilon}{h}$$

h越小，舍入误差越大

计算总误差估计 $E(h) = |f'(a) - \tilde{G}(a)| \le \frac{h^2}{6}M + \frac{\varepsilon}{h}$

最优步长 $h_{opt} = \sqrt[3]{3\varepsilon / M}$

插值型求导公式

建立函数f(x)的插值多项式P_n

插值型求导公式

$$f'(x) \approx P_n'(x)$$

求导余项 $f'(x) - P_n'(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}'(x) + \dfrac{w_{n+1}(x)}{(n+1)!} \dfrac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi)$

$$w_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$$

未知

在节点上的导数值

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}'(x_k)$$

两点公式

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

两点插值

$$P_1'(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

$$\begin{cases} P_1'(x_0) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] \\ P_1'(x_1) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] \end{cases}$$

求导余项

$$\begin{cases} f'(x_0) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \dfrac{h}{2} f''(\xi) \\ f'(x_1) = \dfrac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \dfrac{h}{2} f''(\xi) \end{cases}$$

三点公式

已知三点$x_0, x_1=x_0+h, x_2=x_0+2h$

$$P_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)]$$

$$P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]$$

$$R(f'(x_0))=\frac{h^2}{3}f'''(\xi_0)$$

$$P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]$$

$$R(f'(x_1))=\frac{h^2}{6}f'''(\xi_1)$$

$$P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]$$

$$R(f'(x_2))=\frac{h^2}{3}f'''(\xi_2)$$

建立高阶数值微分公式

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x)$$

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)]$$

$$P_2''(x_0+th)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]$$

二阶三点公式

$$f''(x_1)=\frac{1}{h^2}[f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)]-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi)$$

利用数值积分求导

设f(x)是一个充分光滑的函数,设

$$f(x_{k+1})-f(x_{k-1})=\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}}\varphi(x)dx$$

可采用不同的数值积分公式

采用中矩形公式

$$\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}}\varphi(x)dx=2h\varphi(x_k)+\frac{1}{24}(2h)^3\varphi''(\xi_k)$$

中点微分公式

$$f'(x_k)=\frac{f(x_{k+1})-f(x_{k-1})}{2h}-\frac{1}{6}h^2f'''(\xi_k)$$

采用Simpson积分公式

$$f(x_{k+1})-f(x_{k+1})=\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}}\varphi(x)dx=\frac{h}{3}[\varphi(x_{k-1})+4\varphi(x_k)+\varphi(x_{k+1})]-\frac{h^5}{90}\varphi^{(4)}(\eta_k)$$

$$m_{k-1}+4m_k+m_{k+1}=\frac{3}{h}[f(x_{k+1})-f(x_{k-1})]$$

Simpson数值微分公式

三次样条求导

$$\left\| f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x) \right\|_\infty \le C_k \left\| f^{(4)} \right\|_\infty h^{4-k}$$

$$f^{(k)}(x) \approx S^{(k)}(x)$$

$$f'(x_k) \approx S'(x_k) = -\frac{h_k}{3} M_k - \frac{h_k}{6} M_{k+1} + f[x_k, x_{k+1}]$$

$$f''(x_k) = M_k$$

数值微分的外推法

$$f'(x) \approx G(h) = \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)]$$

$$f'(x) = G(h) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots$$

$$G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}(\frac{h}{2}) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}$$

$$f'(x) - G_m(h) = O(h^{2(m+1)})$$