

# Python 数值分析 算法实践



Python Numerical Analysis Algorithm Practice

## 第4章 数值积分



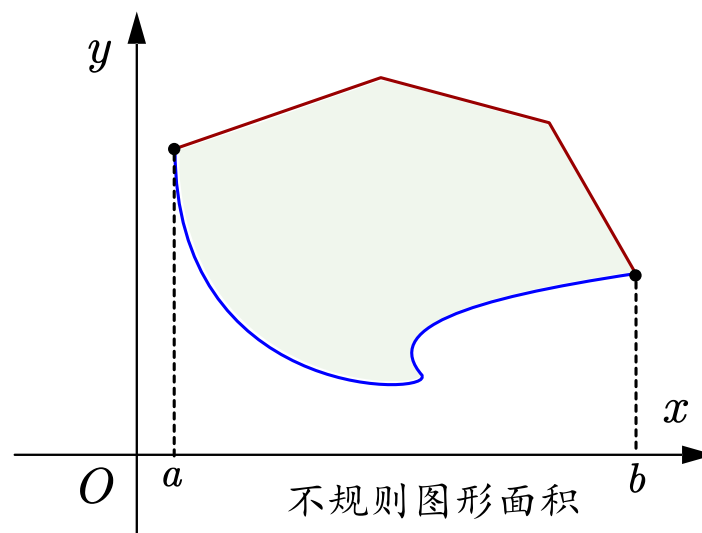
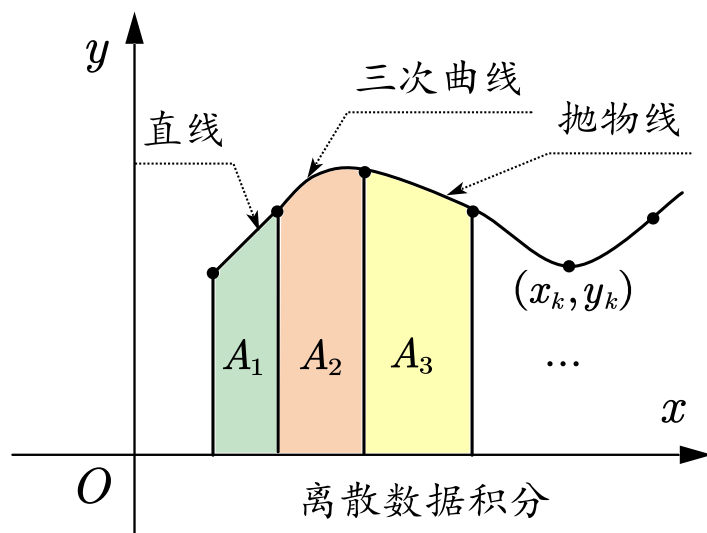
讲授：XXX



日期：2024年4月19日

## 第4章 数值积分

几何意义如图(左)所示, 两点之间可用直线、抛物线或三次曲线等近似, 如直线近似则为梯形公式积分, 抛物线近似则为辛普森公式积分. 不仅如此, 实际应用中, 还会遇到被积函数未知, 只知某些特定点的离散取值  $(x_k, y_k), k = 1, 2, \dots, n$ , 估算离散数值积分, 如估算一段时间内的车流量或降雨量, 估算煤炭的储量. 又如在土地丈量中会遇到各种各样不规则地块, 图(右)所示, 由于无法知道其边缘曲线满足何种函数关系, 因此计算它的面积存在一定的困难. 可采样特征数据, 然后对特征数据进行插值, 进而用插值多项式近似被积函数, 估计积分值.



## 第4章 数值积分

数值积分方法就是在积分区间  $[a, b]$  选取若干节点  $x_0, x_1, \dots, x_n$ , 用  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$  的线性组合作为积分的近似值, 称之为**机械求积**. 故数值积分的一般形式为

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad R[f] = \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=0}^n A_i f(x_i).$$

其中  $x_i$  称为求积节点,  $A_i$  称为求积系数,  $R[f]$  为数值积分公式的余项.  $A_i$  不依赖被积函数  $f(x)$  的具体形式. 代数精度是间接地反应某一数值积分公式对被积函数逼近能力的一个参数, 故可采用代数精度评价机械求积公式的适用范围, 如中矩形公式和梯形公式:

$$I_{\text{中矩形}} = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad I_{\text{梯形}} = (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2},$$

具有1次代数精度, 而左矩形公式  $I = (b-a) f(a)$  和右矩形公式  $I = (b-a) f(b)$  具有0次代数精度.

## 第4章 数值积分

4.1 牛顿-科茨积分公式

4.2 复合求积公式

4.3 龙贝格求积公式

4.4 自适应积分方法

4.5 高斯型求积公式

4.5.1 高斯-勒让德求积公式

4.5.2 高斯-切比雪夫求积公式

4.5.3 高斯-拉盖尔求积公式

4.5.4 高斯-埃尔米特求积公式

4.7 多重数值积分

4.7.1 自适应复合辛普森  
多重积分(矩形区域)

4.7.2 高斯-勒让德法求解  
多重积分(矩形区域)

4.7.3 一般区域的多重积分

4.6 离散数据积分

4.6.1 平均抛物插值  
离散数据积分法

4.6.2 \* 样条函数插值  
离散数据积分法

4.8 \* 一般区间的蒙特卡罗高维数值积分法

## 4.1 牛顿—科特斯积分公式

设将积分区间 $[a, b]$ 划分为 $n$ 等分, 步长 $h = \frac{b-a}{n}$ , 选取等距节点构造出的插值型求积公式

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

称为牛顿—科特斯(Newton – Cotes)公式, 式中 $C_k^{(n)}$ 称为科特斯系数, 计算方法为

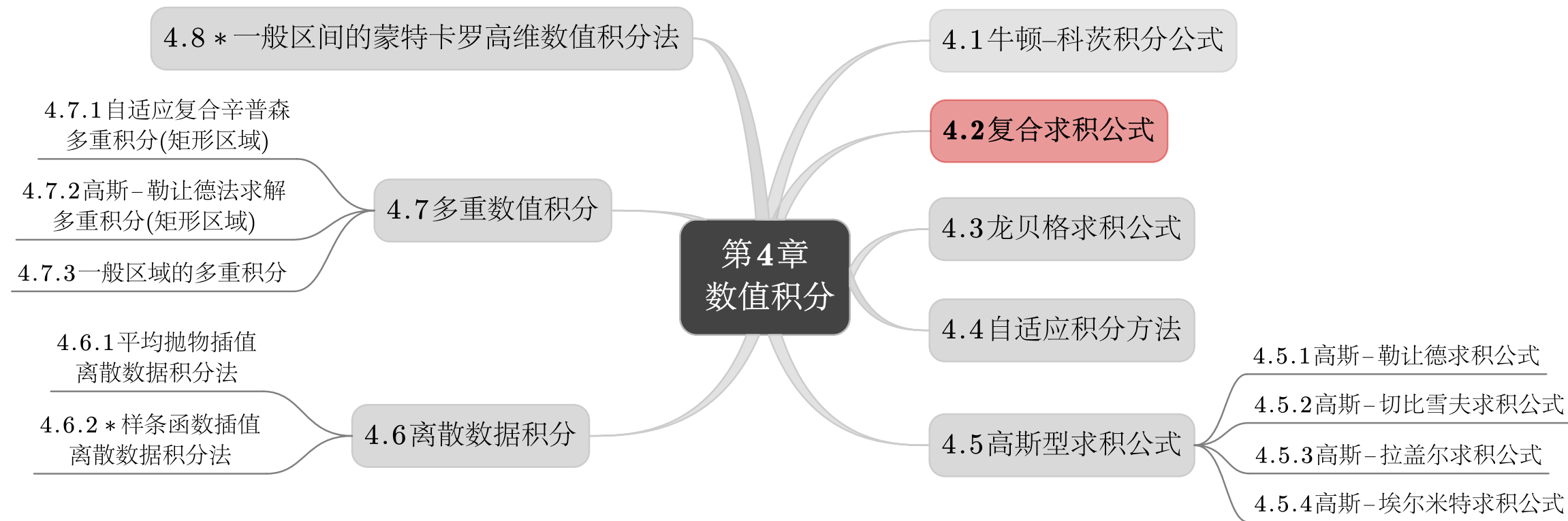
$$C_k^{(n)} = \frac{h}{b-a} \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n \frac{t-j}{k-j} dt = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!} \int_0^n \prod_{j=0, j \neq k}^n (t-j) dt.$$

## 4.1 牛顿—科特斯积分公式

例1:求  $\int_0^{3\pi} e^{-0.5x} \sin\left(x + \frac{\pi}{6}\right) dx$ , 划分区间数为2到9, 已知高精度积分值为0.900840787818886.

表 4-1 牛顿—科茨积分在不同划分区间数下的近似值以及绝对值误差

| $n$         | 积分近似值      | 绝对值误差          | $n$ | 积分近似值      | 绝对值误差          |
|-------------|------------|----------------|-----|------------|----------------|
| 2 (辛普森)     | 0.26260577 | 6.38235019e-01 | 6   | 0.95078779 | 4.99469999e-02 |
| 3 (辛普森 3/8) | 0.29276879 | 6.08071998e-01 | 7   | 0.93137721 | 3.05364217e-02 |
| 4 (科茨)      | 0.62154235 | 2.79298438e-01 | 8   | 0.90069084 | 1.49948568e-04 |
| 5           | 0.76629772 | 1.34543072e-01 | 9   | 0.90060991 | 2.30876999e-04 |



## 4.2 复合求积公式

为了提高积分精度,通常可把积分区域分成若干子区间(通常等分),再在每个区间上用低阶求积公式,这种方法称为复合求积法,具体又分为复合梯形公式、复合辛普森公式和复合科特斯公式.

将区间 $[a, b]$ 划分为 $n$ 等份,分点 $x_k = a + kh$ ,  $h = \frac{b-a}{n}$ ,  $k = 0, 1, \dots, n$ , 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$  ( $k = 0, 1, \dots, n-1$ )上采用梯形公式,得复合梯形公式

$$T_n = \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} [f(x_k) + f(x_{k+1})] = \frac{h}{2} \left[ f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) \right].$$

$$\text{积分余项 } R_n(f) = \frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta), \quad \eta \in (a, b).$$



## 4.2 复合求积公式

将区间 $[a, b]$ 划分为 $n$ 等份, 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}] (k = 0, 1, \dots, n-1)$ 上采用辛普森公式, 若记 $x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{h}{2}$ , 则得复合辛普森公式

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

$$\text{积分余项 } R_n(f) = -\frac{b-a}{180} \left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a, b).$$

## 4.2 复合求积公式

将区间 $[a, b]$ 划分为 $4n$ 等份, 求积节点共有 $4n + 1$ 个, 记为 $x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, 4n$ ,

步长 $h = \frac{b-a}{4n}$ , 等距节点复合科特斯公式

$$C_n = \frac{2h}{45} \left[ 7(f(a) + f(b)) + 14 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_{4j}) + 32 \sum_{j=0}^{n-1} (f(x_{4j+1}) + f(x_{4j+3})) + 12 \sum_{j=0}^{n-1} f(x_{4j+2}) \right].$$

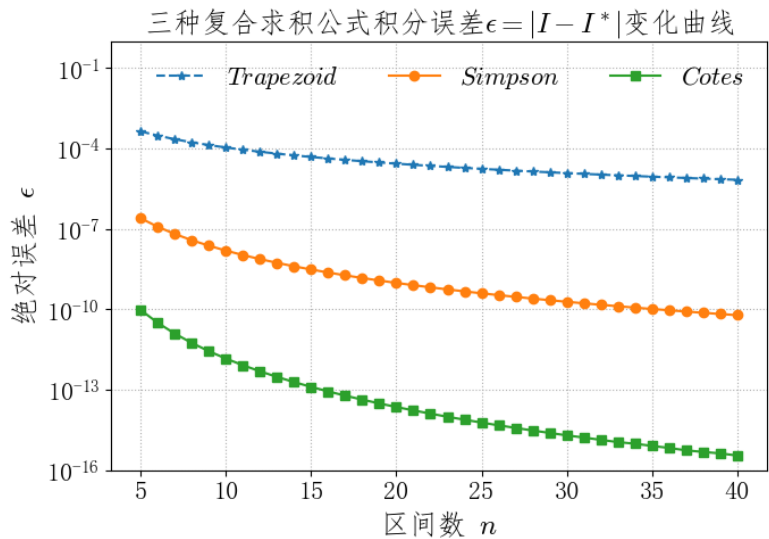
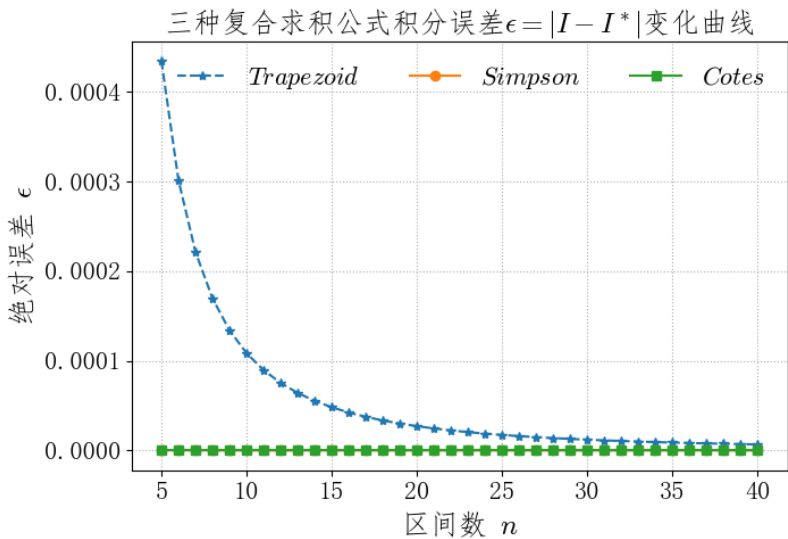
$$\text{积分余项 } R_n(f) = -\frac{b-a}{945} 2h^6 f^{(6)}(\eta), \eta \in (a, b).$$

## 4.2 复合求积公式

例2： $\int_0^1 \frac{x}{4+x^2} dx$ ，分别用复合梯形、复合辛普森和复合科特斯公式求积，精确值为 $0.5\ln \frac{5}{4}$ 。

表 4-2 复合求积公式积分结果

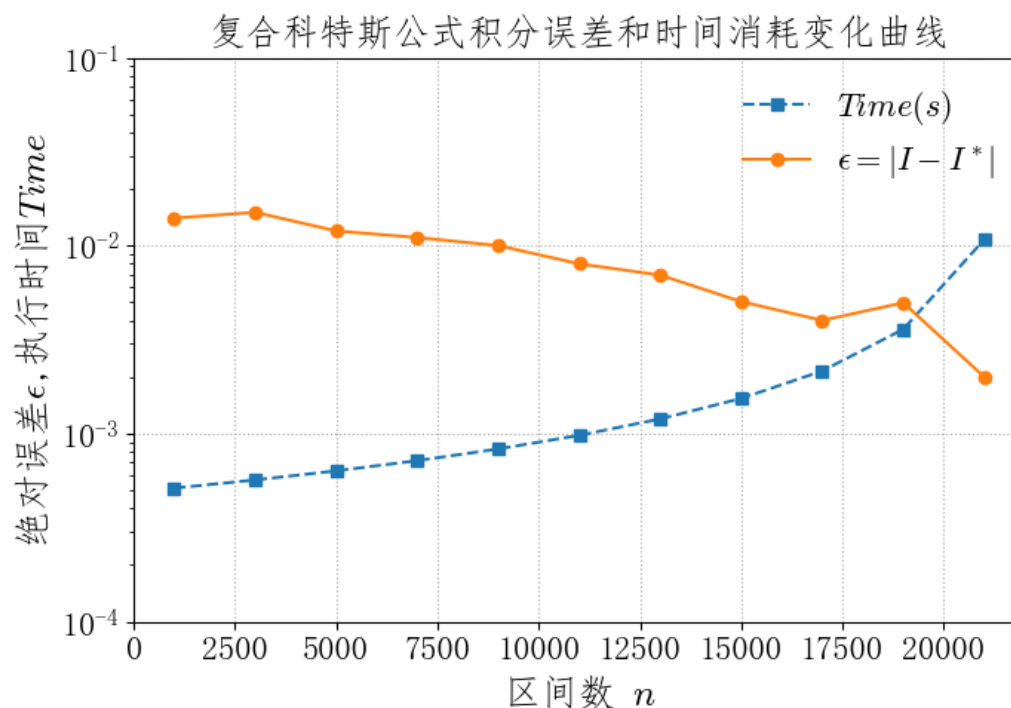
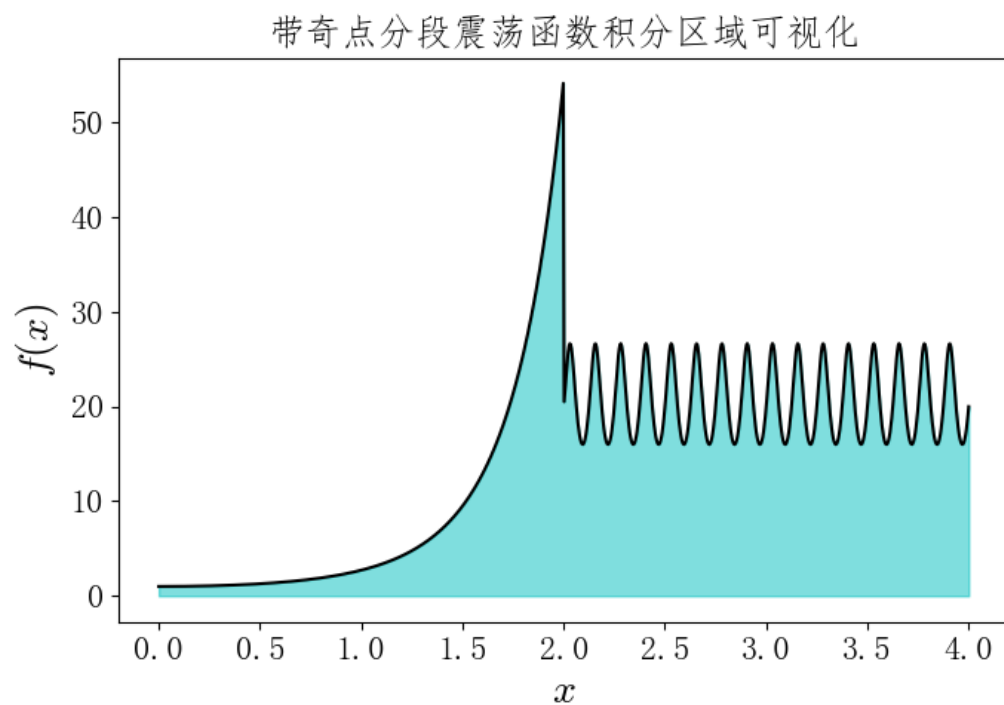
| 积分公式    | 积分近似值             | 余项 (绝对值)                       | 误差 (绝对值)                       |
|---------|-------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| 复合梯形公式  | 0.111529448571860 | $5.928982670271697\text{e}-05$ | $4.232708524488926\text{e}-05$ |
| 复合辛普森公式 | 0.111571778001675 | $3.227389941551568\text{e}-09$ | $2.344569968726340\text{e}-09$ |
| 复合科茨公式  | 0.111571775657019 | $1.483311564779078\text{e}-13$ | $8.551492847175268\text{e}-14$ |

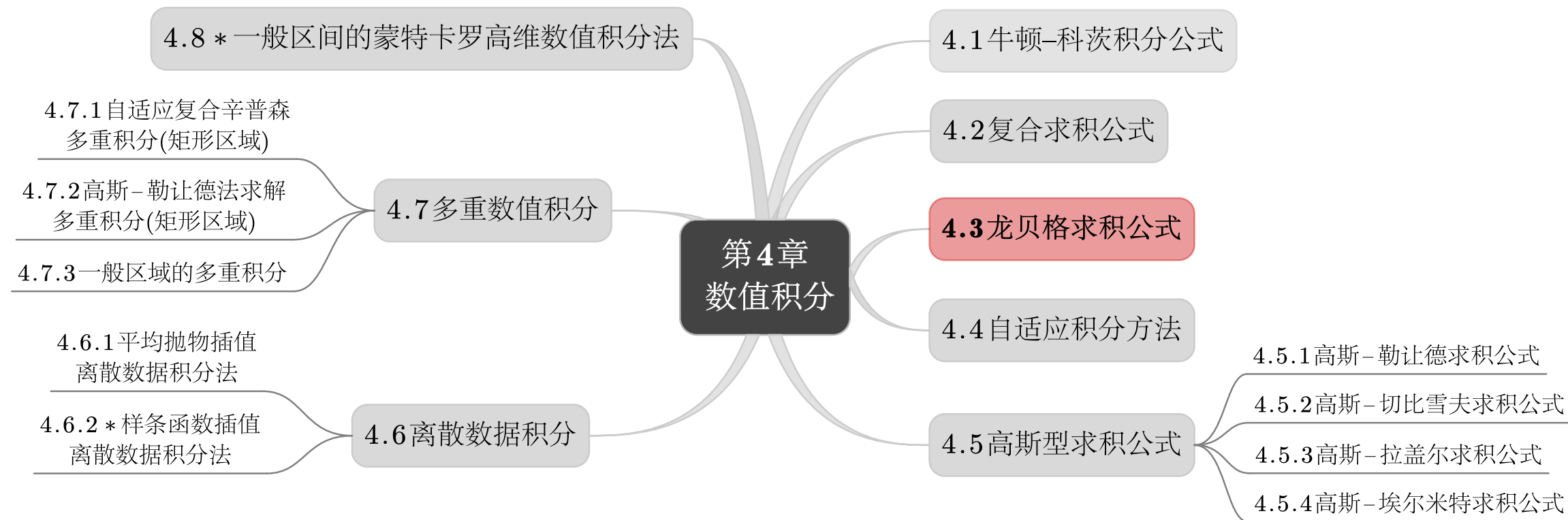


## 4.2 复合求积公式

例3:  $I = \int_0^4 f(x) dx$ , 其中  $f(x) = \begin{cases} e^{x^2}, & 0 \leq x \leq 2, \\ \frac{80}{4 - \sin(16\pi x)}, & 2 < x \leq 4 \end{cases}$ , 试用复合科特斯公式求近似积分值,

已知高精度积分值57.764450125048512.





## 4.3 龙贝格求积公式

龙贝格Romberg求积公式也称为逐次分半加速法, 是在梯形公式、辛普森公式和科特斯公式之间关系的基础上, 构造出的一种加速计算积分的方法. 龙贝格求积公式作为一种外推算法, 在不增加计算量的前提下提高了求积的精度.

龙贝格积分法是用理查森外推算法  $T_m(h) = \frac{4^m}{4^m - 1} T_{m-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{4^m - 1} T_{m-1}(h)$  来加快复合梯形求积公式的收敛速度. 龙贝格求积公式

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m}{4^m - 1} T_{m-1}^{(k+1)} - \frac{1}{4^m - 1} T_{m-1}^{(k)}, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$\text{或 } R_{n,m} = \frac{4^m R_{n+1,m-1} - R_{n,m-1}}{4^m - 1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{其中逐次分半梯形公式 } T_{2n} = \frac{1}{2} T_n + \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right).$$

## 4.3 龙贝格求积公式

$$R_{n,m} = \frac{4^m R_{n+1,m-1} - R_{n,m-1}}{4^m - 1}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots, \quad m = 0, 1, 2, \cdots.$$

表 4-3 龙贝格外推求积计算过程

| 加速前             | 第一次外推  | 第二次外推   | 第三次外推   | ... |
|-----------------|--|---|---|-----|
| $R_{0,0} = T_1$ | $R_{0,1} = \frac{4R_{1,0} - R_{0,0}}{4 - 1}$ | $R_{0,2} = \frac{4^2 R_{1,1} - R_{0,1}}{4^2 - 1}$ | $R_{0,3} = \frac{4^3 R_{1,2} - R_{0,2}}{4^3 - 1}$ | ... |
| $R_{1,0} = T_2$ | $R_{1,1} = \frac{4R_{2,0} - R_{1,0}}{4 - 1}$ | $R_{1,2} = \frac{4^2 R_{2,1} - R_{1,1}}{4^2 - 1}$ | $\vdots$  |     |
| $R_{2,0} = T_4$ | $R_{2,1} = \frac{4R_{3,0} - R_{2,0}}{4 - 1}$ | $\vdots$  |   |     |
| $R_{3,0} = T_8$ | $\vdots$                                     |   |   |     |
| $\vdots$        |  |   |   |     |

## 4.3 龙贝格求积公式

例4:用龙贝格算法计算积分 $\int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx$ , 外推到6, 其精确值为0.4.

表 4-4 龙贝格外推算法求解积分计算结果

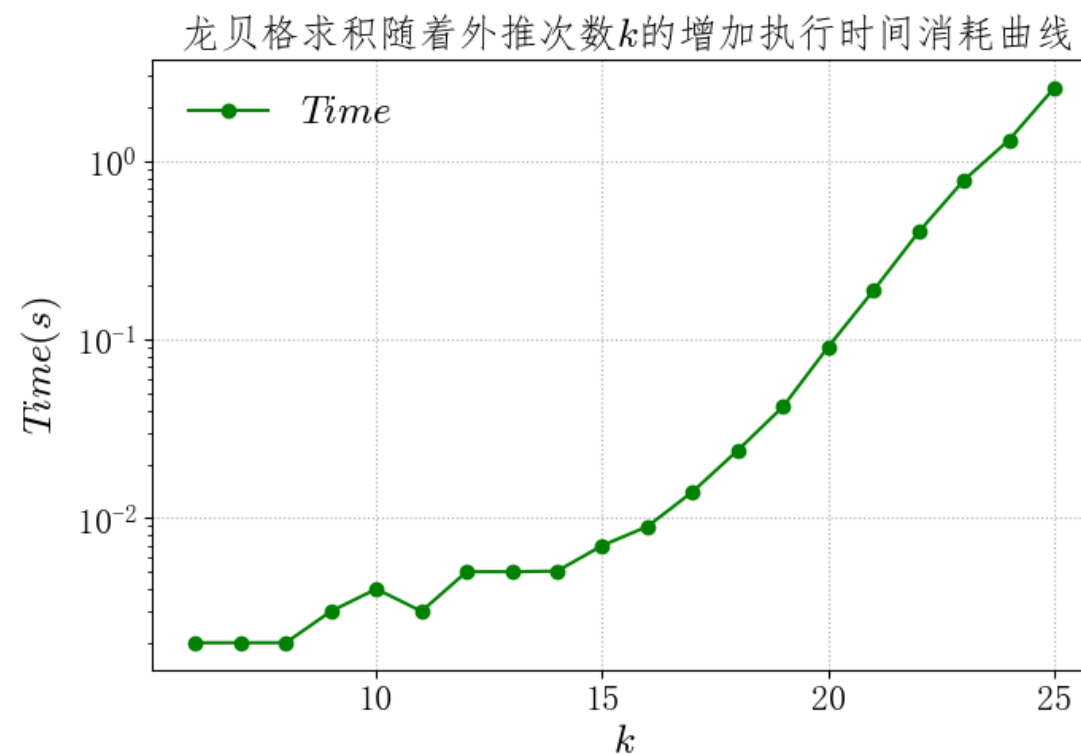
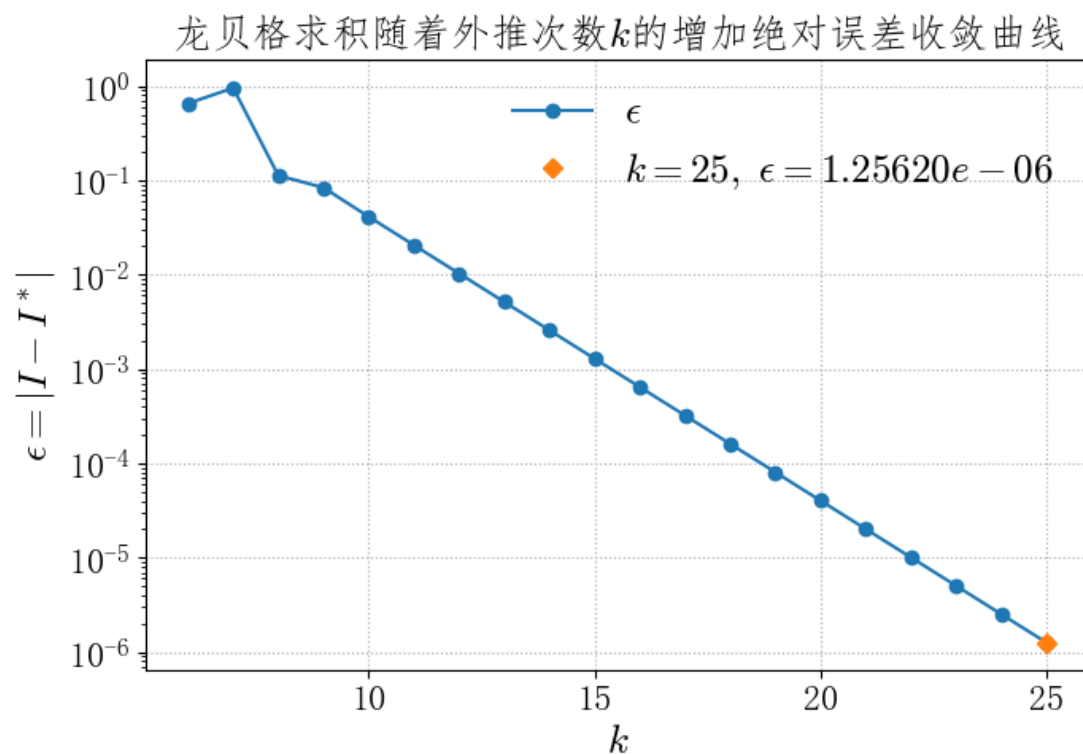
| $k$ | $R_{k,0}$  | $R_{k,1}$  | $R_{k,2}$  | $R_{k,3}$  | $R_{k,4}$  | $R_{k,5}$  | $R_{k,6}$  |
|-----|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| 0   | 0.5        | 0.40236893 | 0.40030278 | 0.40004965 | 0.40000862 | 0.40000152 | 0.40000027 |
| 1   | 0.4267767  | 0.40043192 | 0.40005361 | 0.40000878 | 0.40000152 | 0.40000027 |            |
| 2   | 0.40701811 | 0.40007725 | 0.40000948 | 0.40000155 | 0.40000027 |            |            |
| 3   | 0.40181246 | 0.40001371 | 0.40000168 | 0.40000027 |            |            |            |
| 4   | 0.4004634  | 0.40000243 | 0.40000030 |            |            |            |            |
| 5   | 0.40011767 | 0.40000043 |            |            |            |            |            |
| 6   | 0.40002974 |            |            |            |            |            |            |

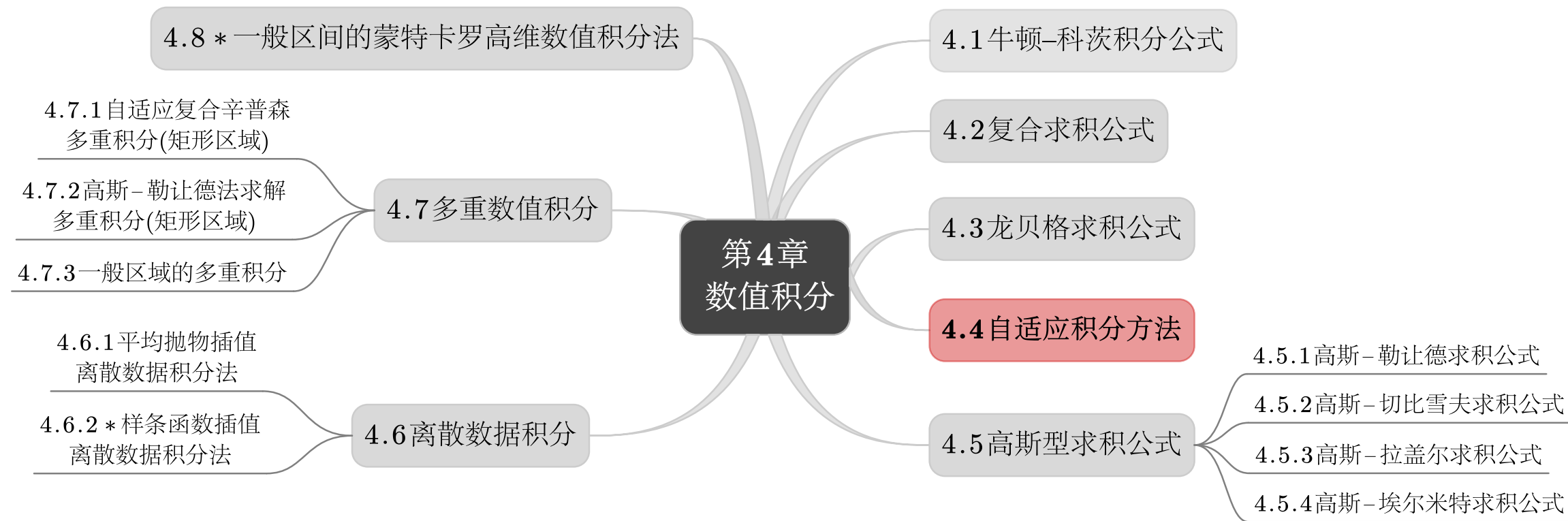
外推到6, 积分近似值为0.40000027. 外推 $k=10$ 的积分值为 $I^* \approx 0.400000000026137733$ , 外推 $k=20$ 的积分值为 $I^* \approx 0.400000000000000001$ .



## 4.3 龙贝格求积公式

针对例3积分示例, 当外推次数为17时, 积分近似值为  $I^* \approx 57.764771710946214$ , 绝对误差为  $\varepsilon = 3.215859 \times 10^{-4}$ , 已经超过复化科特斯21000个区间划分的积分精度, 加速效果较为明显. 下图为其外推次数6到25的绝对误差收敛曲线和时间消耗.





## 4.4 自适应积分方法

自适应积分法计算步骤如下:

(1) 将积分区间  $[a, b]$  分成两个相等的1级子区间  $\left[a, a + \frac{h}{2}\right]$  和  $\left[a + \frac{h}{2}, a + h\right]$ , 且  $h = b - a$ ;

(2) 在上述两个1级子区间上采用辛普森积分得到积分值  $I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(1)}$  和  $I_{a + \frac{h}{2}, a + h}^{(1)}$ ;

(3) 将第1个子区间分成两个相等的2级子区间  $\left[a, a + \frac{h}{2^2}\right]$  和  $\left[a + \frac{h}{2^2}, a + \frac{h}{2}\right]$ , 并采用辛普森积分计算得到

$$I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(2)} = I_{a, a + \frac{h}{2^2}}^{(1)} + I_{a + \frac{h}{2^2}, a + \frac{h}{2}}^{(1)};$$

(4) 比较  $I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(1)}$  和  $I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(2)}$ : 如果  $\left|I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(1)} - I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(2)}\right| < 15 \times \frac{\varepsilon}{2}$ , 其中  $\varepsilon$  为整体积分所需精度, (保险起见,

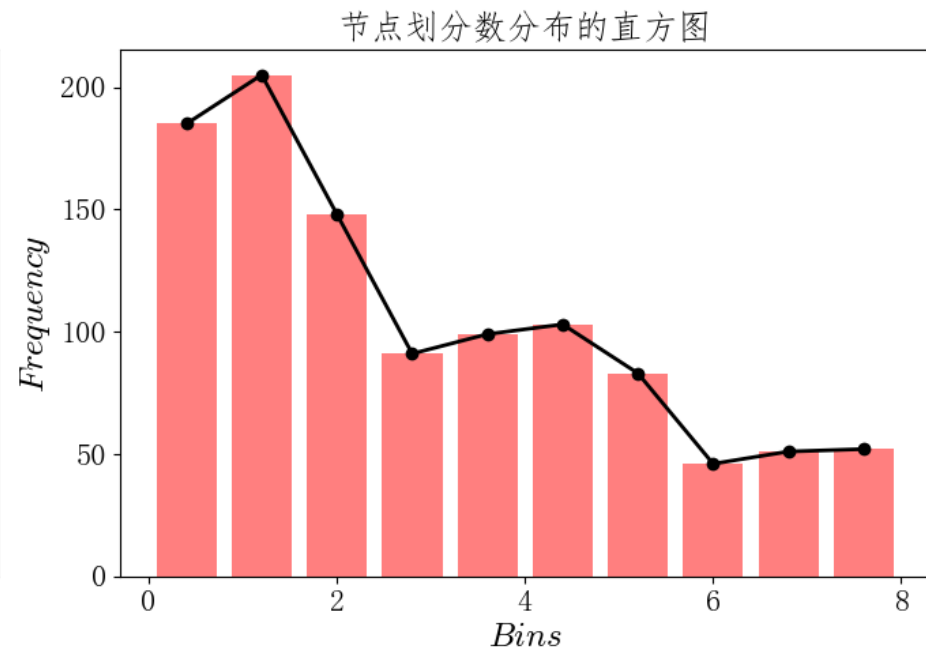
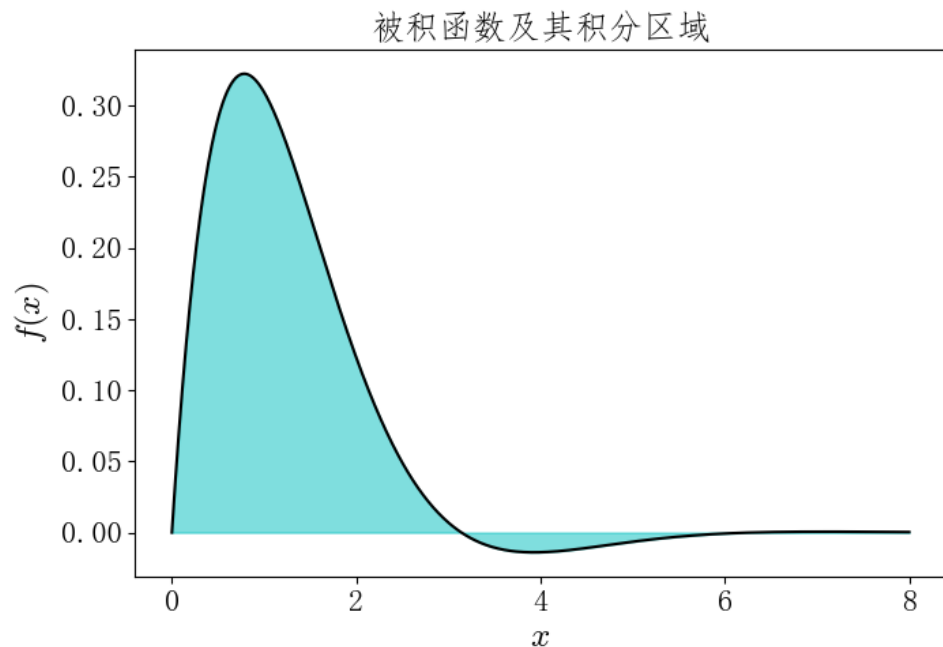
$\left|I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(1)} - I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(2)}\right| < 10 \times \frac{\varepsilon}{2}$ ), 则认为子区间  $\left[a, a + \frac{h}{2}\right]$  上的积分  $I_{a, a + \frac{h}{2}}^{(1)}$  已达到所需精度, 不需要再细分; 否则

就需要再细分, 对每个2级子区间做同样的判断.

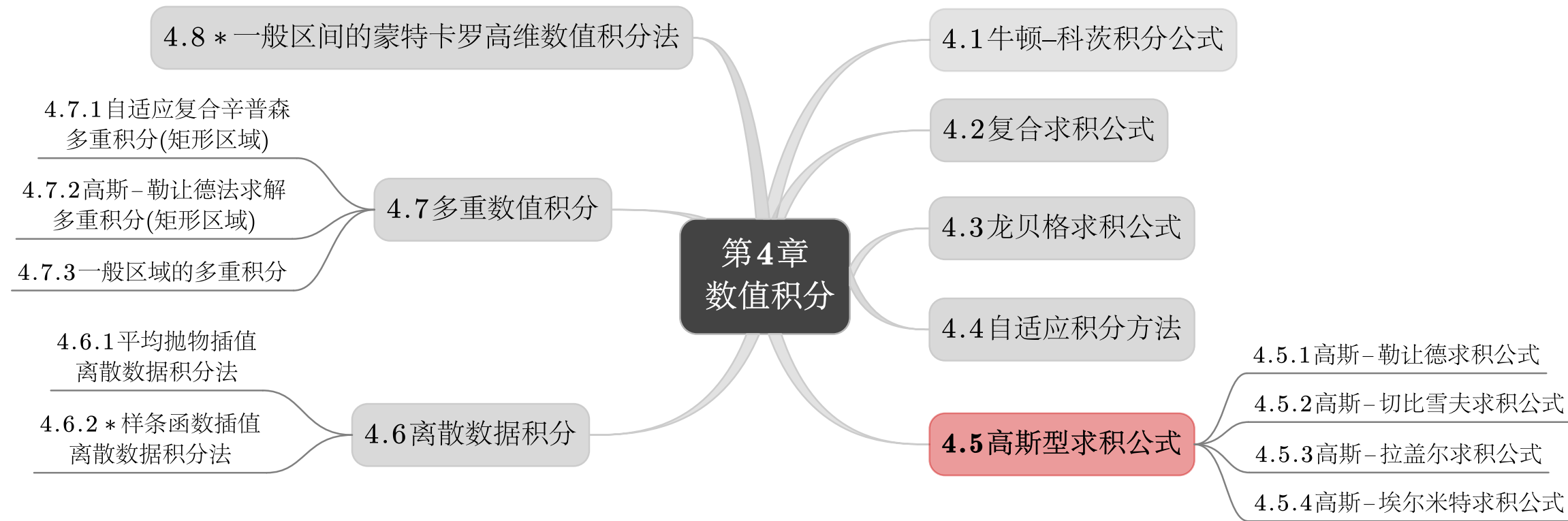
1级子区间  $\left[a + \frac{h}{2}, a + h\right]$  的操作过程与上述完全相同.

## 4.4 自适应积分方法

例5：用自适应算法计算积分  $\int_0^8 e^{-x} \sin x dx$ ，精度要求  $10^{-15}$ ，精确值为  $0.5(1 - e^{-8}(\sin 8 + \cos 8))$ 。



自适应划分的节点并非均匀的，即子区间非等距划分，尤其在  $x \in [1, 2]$  区间节点分布较为密集。最终积分近似值  $I^* \approx 0.4998584585531552$ ，误差绝对值  $2.081668 \times 10^{-14} < 5\epsilon$ 。满足精度要求的情况下共划分区间数1063个。



## 4.5 高斯型求积公式

当用不等距节点进行计算时, 常用高斯型求积公式, 它在节点数目相同情况下, 代数精度较高, 稳定性好, 且可计算无穷积分.

设  $x_0, x_1, \dots, x_n$  是区间  $[a, b]$  上, 权函数为  $\rho(x)$  的  $n+1$  次正交多项式  $P_{n+1}(x)$  的  $n+1$  个零点, 则插值型求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad A_k = \int_a^b \rho(x) \cdot \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} dx$$

是高斯(Gauss)型求积公式.

## 4.5.1 高斯—勒让德求积公式

勒让德Legendre多项式  $P_{n+1}(x) = \frac{1}{(n+1)! 2^{n+1}} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} (x^2 - 1)^{n+1}$  的  $n+1$  个零点作为区间  $[-1, 1]$  上的高斯点  $x_k$ ,  $k = 0, 1, \dots, n$ , 插值系数求解公式

$$A_k = \int_{-1}^1 \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} dx = \frac{2}{(1 - x_k^2) [P'_{n+1}(x_k)]^2}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

当一般的区间  $[a, b]$  时, 做变换  $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$ , 使得  $[a, b] \mapsto [-1, 1]$ , 这时

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

## 4.5.2 高斯—切比雪夫求积公式

第一类切比雪夫Chebyshev多项式的  $n + 1$  个零点作为区间  $[-1, 1]$  上的带权  $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

高斯点  $x_k$ , 插值型积分公式

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \\ x_k = \cos \frac{(2k+1)\pi}{2n+2}, \quad A_k = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} l_k(x) dx = \frac{\pi}{n+1}, \quad k=0, 1, \dots, n. \end{array} \right.$$

第二类切比雪夫多项式的  $n$  个零点作为区间  $[-1, 1]$  上的带权  $\rho(x) = \sqrt{1-x^2}$  高斯点  $x_k$ , 插值型积分公式

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k), \\ x_k = \cos \frac{k\pi}{n+1}, \quad A_k = \frac{\pi}{n+1} \sin^2 \left( \frac{k\pi}{n+1} \right), \quad k=1, 2, \dots, n. \end{array} \right.$$



### 4.5.3 高斯—拉盖尔求积公式

区间为 $[0, +\infty)$ 、权函数 $\rho(x) = e^{-x}$ 的正交多项式为拉盖尔Laguerre多项式

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}), \quad n = 0, 1, \dots$$

$x_0, x_1, \dots, x_n$ 为 $n+1$ 次拉盖尔多项式的零点, 对应的高斯型求积公式为

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad A_k = \frac{[(n+1)!]^2}{x_k [L_{n+1}(x_k)]^2}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

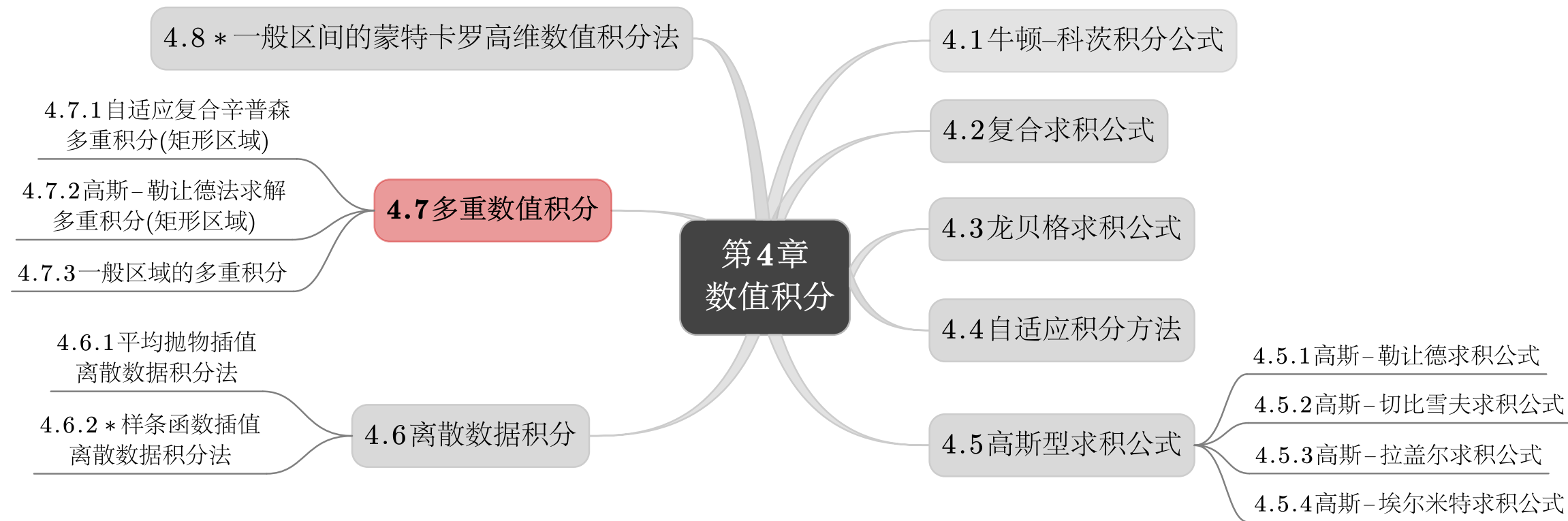
## 4.5.4 高斯—埃尔米特求积公式

区间为 $(-\infty, +\infty)$ 、权函数 $\rho(x) = e^{-x^2}$ 的正交多项式为埃尔米特Hermite多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad n = 0, 1, \dots$$

$x_0, x_1, \dots, x_n$  为  $n+1$  次埃尔米特多项式的零点, 对应的高斯型求积公式为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k), \quad A_k = 2^{n+2} (n+1)! \frac{\sqrt{\pi}}{[H'_{n+1}(x_k)]^2}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$



## 4.7.2 高斯—勒让德求解多重积分 (矩形区域)

设矩形区域的二重积分一般形式为  $I = \int_c^d \int_a^b f(x, y) dx dy$ , 高斯—勒让德求解二重积分步骤:

(1) 根据零点数  $n + 1$ , 求解勒让德多项式零点  $x_k$  以及插值系数  $A_k$ .

(2) 对  $n + 1$  个零点  $x_k$  和系数  $A_k$ , 根据各变量积分区间, 做区间积分变换, 即

$$x_k^* = \frac{b-a}{2} x_k + \frac{b+a}{2}, y_k^* = \frac{d-c}{2} y_k + \frac{d+c}{2}, A_x = \frac{b-a}{2} A_k, A_y = \frac{d-c}{2} A_k.$$

(3) 对零点  $(x_k^*, y_k^*)$  生成二维网格点  $(x_i, y_j)$ ,  $i, j = 0, 1, \dots, n$ , 并求被积函数的函数值  $f(x_i, y_j)$ . 记  $A_{x,i}$  为对应  $x$  积分的第  $i$  个插值系数  $A_i$  做积分变换后的插值系数,  $A_{y,j}$  含义同  $A_{x,i}$ .

(4) 根据如下公式求解积分:

$$I \approx \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n A_{x,i} A_{y,j} f(x_i, y_j) = (A_{x,0} \ A_{x,1} \ \cdots \ A_{x,n}) \begin{pmatrix} f(x_0, y_0) & f(x_0, y_1) & \cdots & f(x_0, y_n) \\ f(x_1, y_0) & f(x_1, y_1) & \cdots & f(x_1, y_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f(x_n, y_0) & f(x_n, y_1) & \cdots & f(x_n, y_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{y,0} \\ A_{y,1} \\ \vdots \\ A_{y,n} \end{pmatrix}$$

## 4.7.3 一般区域的多重积分

对于非矩形区域的二重积分, 转换为累次积分, 可用类似矩形域求得其近似积分值. 用辛普森公式可转化一般区域二重积分的一般形式为

$$\int_a^b \int_{c(x)}^{d(x)} f(x, y) dy dx \approx \int_a^b \frac{d(x) - c(x)}{6} \left[ f(x, c(x)) + 4f\left(x, \frac{d(x) + c(x)}{2}\right) + f(x, d(x)) \right] dx.$$

然后对每个积分使用辛普森公式或科特斯公式, 则可求得二重积分的近似值.

### 4.7.3 一般区域的多重积分

对 $[a, b]$ 内的每个 $x$ , 在区间 $[c(x), d(x)]$ 中取值的变量 $y$ 要被变换到区间 $[-1, 1]$ 上取值的新变量 $t$ , 即

$$f(x, y) = f\left(x, \frac{(d(x) - c(x))t + d(x) + c(x)}{2}\right), \quad dy = \frac{d(x) - c(x)}{2} dt.$$

对 $[a, b]$ 内的每个 $x$ , 应用高斯求积公式就得到

$$\int_{c(x)}^{d(x)} f(x, y) dy = \int_{-1}^1 f\left(x, \frac{(d(x) - c(x))t + d(x) + c(x)}{2}\right) dt$$

从而产生

$$\int_a^b \int_{c(x)}^{d(x)} f(x, y) dy dx \approx \int_a^b \frac{d(x) - c(x)}{2} \sum_{j=1}^n c_{n,j} f\left(x, \frac{(d(x) - c(x))r_{n,j} + d(x) + c(x)}{2}\right) dx$$

其中 $c_{n,j}$ 和 $r_{n,j}$ 分别为勒让德多项式插值系数和高斯点. 进而, 变换区间 $[a, b] \mapsto [-1, 1]$ , 高斯求积公式用于近似计算中右端的积分.