科学计算/计算方法(Scientific Computing)

第五章　数值积分与数值微分

任课老师: Xiao-liang Cheng(程晓良)

Department of Mathematics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, P.R. China.

2023. 4 .4

数值积分

数值积分

数值积分

数值积分

数值积分

数值积分

5.1 Newton-Cotes公式

数值积分：计算$[a, b]$上定义的Riemann可积函数$f(x)$的定积分的近似计算公式

$$\int_a^b f(x)\, dx.$$

直接计算定积分有困难. 假定$f(x)$在$[a, b]$区间上若干个点的值，用插值多项式$P(x)$近似，则

$$\int_a^b f(x)\, dx \approx \int_a^b P(x)\, dx.$$

这就是简单函数代替复杂函数的思想.

1. 梯形求积公式

过a, b两点，作直线(线性插值多项式)

$$P_1(x) = \frac{x-a}{b-a}f(b) + \frac{x-b}{a-b}f(a)$$

用$P_1(x)$代替$f(x)$,得

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_1(x)\,dx = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)).$$

几何意义: 梯形面积代替$f(x)$围成的曲边梯形的面积.

2. 抛物线求积公式

把$[a,b]$区间二等份，过$a, \frac{a+b}{2}, b$三点，作抛物线(2次插值多项式)

$$P_2(x) = \frac{(x-\frac{a+b}{2})(x-b)}{(a-\frac{a+b}{2})(a-b)} f(a) + \cdots ,$$

用$P_2(x)$代替$f(x)$,得

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\Big(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\Big).$$

这个公式也叫Simpson公式.

几何意义: 抛物线围成的曲边梯形面积代替$f(x)$围成的曲边梯形的面积.

3. Newton-Cotes公式

把$[a,b]$区间n等份，其分点为

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, 2, \cdots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

过这$n+1$个节点，构造一个n次多项式

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)} f(x_i)$$

其中$\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$. 用$P_n(x)$代替$f(x)$, 得

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

$$A_i = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}\,dx.$$

这个公式叫Newton-Cotes公式.

计算系数A_i，用变量替换$x=a+th$，于是

$$\omega(x)=\omega(a+th)=h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n),$$
$$\omega'(x_i)=\omega(a+th)=(-1)^{n-i}h^n i!(n-i)!$$

这样

$$A_i=\int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}dx=\int_0^n \frac{h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n)}{(-1)^{n-i}h^n i!(n-i)!h(t-i)}hdt$$
$$=\frac{(-1)^{n-i}h}{i!(n-i)!}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-i}dt$$

引进记号

$$c_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-i}dt$$

则

$$A_i=(b-a)c_i^{(n)}$$

这时$c_i^{(n)}$是不依赖于函数$f(x)$和区间$[a,b]$的常数，可以事先计算出来. 这些数称为**Newton—Cotes系数**.

我们给出取值的Newton－Cotes系数表。

Newton－Cotes系数

n	$C_i^{(n)}$							
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$					
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	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

注意到，当$n=1\sim 7$时的Newton-Cotes系数都是正值，各行和等于1(为什么?)．这样，当计算$f(x_i)$得到$\tilde{f}_i$有误差限ε时，

$$|\sum_{i=0}^{n} A_i\tilde{f}_i-\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)| \le \sum_{i=0}^{n} |A_i||\tilde{f}_i-f(x_i)| \le \sum_{i=0}^{n} A_i\varepsilon = (b-a)\varepsilon.$$

这误差是可控的，常常称这种数值公式是数值稳定的.

当n大于7的Newton-Cotes公式中系数有正有负，

$$\sum_{i=0}^{n} A_i = (b-a),\quad \sum_{i=0}^{n} |A_i| \to \infty,\ n\to\infty.$$

$$\sum_{i=0}^{n} c_i^{(n)} = \frac{1}{b-a}\sum_{i=0}^{n} A_i = \frac{1}{b-a}\sum_{i=0}^{n}\int_a^b l_i(x)\,dx = 1.$$

例

例 试用梯形公式、抛物线公式和Newton-Cotes公式(n=4)计算定积分$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx$.

解. (1)梯形公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \approx \frac{0.5}{2}(\sqrt{0.5}+1) = 0.42677670.$$

(2) 抛物线公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \approx \frac{0.5}{6}(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+1) = 0.43093403.$$

(3) Newton-Cotes公式(取$n=4$)

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \approx \frac{0.5}{90}(7\sqrt{0.5}+...+7) = 0.43096407.$$

精确值:

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx = \frac{2}{3}x^{3/2}|_{0.5}^{1} = 0.430964406271...$$

5.2 梯形求积公式和抛物线求积公式的误差估计

定义 对一个一般的求积公式

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

其中A_k是不依赖于函数$f(x)$的常数，若上述求积公式中的$f(x)$为任意一个次数不高于m次的代数多项式时，等号成立，而当$f(x)$是$m+1$次的代数多项式时，等号不能精确成立，则说求积公式具有m次代数精度.

这是用来衡量数值积分公式近似程度的一个指标量.

对Newton-Cotes公式，我们说代数精度至少是n次，因为$f(x)$是不高于n次的多项式时，插值多项式是恒等的，即积分也相等. 事实上，n是偶数时，有$n+1$次代数精度.

记$n+1$次多项式为$f(x)=\sum_{j=0}^{n+1} a_j x^j$，则其$n+1$次导数为$(n+1)!a_{n+1}$，

$$\int_a^b f(x)dx-\int_a^b P_n(x)dx=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx=a_{n+1}\int_a^b \omega_{n+1}(x)dx$$
$$=a_{n+1}h^{n+2}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt$$

令$n=2k$，k，为正整数，并引进变换$v=t-k$，有

$$\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt=\int_0^{2k} t(t-1)\cdots(t-k)(t-k-1)\cdots(t-2k+1)(t-2k)dt$$
$$=\int_{-k}^{k}(v+k)(v+k-1)\cdots v(v-1)\cdots(v-k+1)(v-k)dv$$

令$I(v)=(v+k)(v+k-1)\cdots v(v-1)\cdots(v-k+1)(v-k)$,则有

$I(-v)=(-v+k)(-v+k-1)\cdots(-v)(-v-1)\cdots(-v-k+1)(-v-k)=(-1)^{2k+1}I(v)=-I(v)$

也即$I(v)$是一个奇函数，所以

$$\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)dt=0$$

亦即当为n偶数时，Newton-Cotes公式对$n+1$次多项式精确成立，代数精确度达到了$n+1$次.

容易验证: 梯形公式的代数精度是1，Simpson公式的代数精度是3.

定理5.1 若$f(x) \in C^2[a,b]$，则梯形求积公式有误差估计

$$\begin{aligned} R_T(f) &= \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \qquad a \le \eta \le b \end{aligned}$$

证明 由Lagrange插值理论及积分中值定理.

构造插值多项式$p_1(x)$满足

$$p_1(a) = f(a),\, p_1(b) = f(b),$$

于是

$$\begin{aligned} R_T(f) &= \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ &= \int_a^b [f(x) - p_1(x)]\, dx \\ &= \int_a^b \frac{1}{2!} f''(\xi)(x-a)(x-b)\, dx \end{aligned}$$

设$f''(x)$在$[a,b]$上的最大最小值分别是M, m, 则

$$-\frac{1}{12}M(b-a)^3 \le R_T(f) \le -\frac{1}{12}m(b-a)^3.$$

由介值定理可证.

定理5.2 若$f(x) \in C^4[a,b]$，则Simpson求积公式有误差估计

$$R_S(f) = \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$
$$= -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta), \qquad a \le \eta \le b$$

证明 比较巧妙！构造插值多项式$p_3(x)$满足

$$p_3(a) = f(a),\, p_3(b) = f(b),$$

$$p_3(\frac{a+b}{2}) = f(\frac{a+b}{2}),\, p_3'(\frac{a+b}{2}) = f'(\frac{a+b}{2}).$$

无需求出具体$p_3(x)$, 插值误差

$$f(x) - p_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b).$$

于是积分

$$\int_a^b \Big(f(x) - p_3(x)\Big)\,dx = \int_a^b \Big(\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\Big)\,dx.$$

因为Simpson积分公式具有三次代数精度，故

$$\int_a^b p_3(x)\,dx = \frac{b-a}{6}(p_3(a) + 4p_3(\frac{a+b}{2}) + p_3(b)),$$

即

$$\int_a^b p_3(x)\,dx = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)).$$

再第一个式子右端，由积分中值定理，计算积分

$$\int_a^b \frac{1}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\,dx = -\frac{1}{2880}(b-a)^5.$$

5.3 复化公式及其误差估计

将区间$[a,b]n$等分，节点$x_k=a+kh,(k=0,1,\cdots,n)$, $h=\frac{b-a}{n}$,
对$[x_k,x_{k+1}]$用梯形求积公式，则得

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

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

称T_n为**复合梯形公式**.

若把区间$2n$等分，在每个区间上仍用梯形求积公式，则可得T_n,T_{2n}之间的关系式

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

$$H_n=h\sum_{k=1}^{n}f\Big(a+(2k-1)\frac{b-a}{2n}\Big).$$

因为Simpson公式用到区间的中点，在构造复合Simpson公式时必须把区间等分为偶数份. 为此，令$n=2m$，m是正整数，在每个小区间$[x_{2k-2},x_{2k}]$上用Simpson求积公式

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

其中$h=\frac{b-a}{n}$，因此

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=1}^{m}\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{m}\frac{h}{3}[f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})] \\ &= \frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k})\right] =: S_n\end{aligned}$$

称S_n为复合**Simpson**公式.

复化梯形公式误差估计

定理5.3 若$f(x) \in C^2[a,b]$, 则

$$R(f,T_n) = \int_a^b f(x)\,dx - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta),\ a < \eta < b$$

其中$h = \frac{b-a}{n}$.

证明 每个小区间上

$$R(f,T_n) = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k),\ \ x_k < \eta_k < x_{k+1}.$$

由于$f''(x)$连续，则存在$\eta \in [a,b]$,

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

复化Simpson公式误差估计

定理5.4 若$f(x) \in C^4[a,b]$, 则存在$\eta \in [a,b]$,

$$R(f,S_n) = \int_a^b f(x)\,dx - T_n = -\frac{b-a}{2880}h_1^4 f^{(4)}(\eta) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\eta)$$

其中$h_1 = 2h$, $h = \frac{b-a}{2n}$.

例 计算积分

$$I = \int_0^1 e^x\,dx$$

要求保证有5位有效数字. 若用复化梯形公式，n至少应取多少? 若用复化Simpson公式，n又至少应取多少?

5.4 逐次分半法

1. 梯形公式的逐次分半法

(1) 取$n=1$, 计算T_1,

$$T_1=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))=(b-a)(\frac{f(a)}{2}+\frac{f(b)}{2}).$$

(2) 取区间$[a,b]$二等分，计算T_2,

$$T_2=\frac{b-a}{2}(\frac{f(a)}{2}+\frac{f(b)}{2}+f(x_1))=\frac{T_1}{2}+\frac{b-a}{2}f(x_1).$$

(3) 一般地，在前一次基础上将区间对分，分点加密一倍，原分点上的函数值不需要重复计算，

$$T_{2n}=\frac{T_n}{2}+\frac{b-a}{2n}\sum_{i=1}^{n}f(a+(2i-1)\frac{b-a}{2n}).$$

由复化梯形公式的误差估计，当区间n等分时，

$$R(f,T_n)\approx ch^2$$

这里c是常数．当取$2n$等分时，截断误差表示为

$$R(f,T_{2n})\approx c(\frac{h}{2})^2.$$

于是

$$T_{2n}-T_n\approx 3c(\frac{h}{2})^2.$$

因此

$$I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n).$$

这是一种后验估计式，可以用来计算过程的停止的判据.

2. Simpson公式的逐次分半法

将区间逐次分半，计算$S_1, S_2, \cdots, S_n, S_{2n}, \cdots$.

$$S_n = \frac{h_n}{3}(f(a) + f(b) + 2S_n^{(1)} + 4S_n^{(2)}),\ n = 1, 2, 4, \cdots$$

其中$h_n = \frac{b-a}{2n}$, $S_n^{(1)}$是原分点上的函数值之和

$$S_n^{(1)} = f(x_2) + f(x_4) + \cdots + f(x_{2n-2})$$

而$S_n^{(2)}$是在新分点上的函数之和

$$S_n^{(2)} = f(x_1) + f(x_3) + \cdots + f(x_{2n-1}),$$

其中$x_i = a + ih_n$, $i = 1, 2, \cdots, 2n-1$.

利用复化Simpson公式，可证

$$I - S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n).$$

右端是可计算的，可用来算法过程中的停止的判据.

例 用复化梯形公式计算积分

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} sin(x)\, dx.$$

书中数值结果表明:

$$T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4T_{2n} - T_n}{3},$$

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

具有更好的精度.

5.5 加速收敛技巧与Romberg积分法

例子：圆周率的计算

刘辉、祖冲之的割圆术：用正n边形的边长和代替圆周长，得到的圆周率用π_n表示，则

$$\begin{aligned}
\pi_6 &= 3.0\\
\pi_{12} &= 3.1058285...\\
\pi_{24} &= 3.1326286...\\
\pi_{48} &= 3.13935020...\\
\pi_{96} &= 3.1410319...\\
\pi_{192} &= 3.14145247...
\end{aligned}$$

$$\frac{4\pi_{96}-\pi_{48}}{3} = 3.1415925...$$

$$\frac{4\pi_{192}-\pi_{96}}{3} = 3.141592653...$$

事实上，用正n边形来计算圆周率π_n就是

$$\pi_n = n \sin \frac{\pi}{n}.$$

用Taylor展开

$$\pi_n = \pi - \frac{1}{3!}\frac{\pi^3}{n^2} + \frac{1}{5!}\frac{\pi^5}{n^4} - \frac{1}{7!}\frac{\pi^7}{n^6} + \cdots$$

则

$$\frac{4\pi_{2n} - \pi_n}{3} = \pi + O(\frac{1}{n^4}).$$

设用某种数值方法求F^*的近似值，它与步长h有关，记$F_1(h)$，F^*与h无关. 假设

$$F^* - F_1(h) = \alpha_1 h^{p_1} + \alpha_2 h^{p_2} + \cdots + \alpha_k h^{p_k} + \cdots$$

其中,$0 < p_1 < p_2 < \cdots < p_k < \cdots$, $\alpha_i \neq 0$.

上式$h \leftarrow qh$, $q \neq 1$,

$$F^* - F_1(qh) = \alpha_1 (qh)^{p_1} + \alpha_2 (qh)^{p_2} + \cdots + \alpha_k (qh)^{p_k} + \cdots$$

两式结合，得

$$(1-q^{p_1})F^* - (F_1(qh) - q^{p_1}F_1(h)) = \alpha_2(q^{p_2} - q^{p_1})h^{p_2} + \cdots + \alpha_k(q^{p_k} - q^{p_1})h^{p_k}$$

$$F^* - \frac{F_1(qh) - q^{p_1}F_1(h)}{1-q^{p_1}} = \alpha_2^{(2)}h^{p_2} + \cdots + \alpha_k^{(2)}h^{p_k} + \cdots$$

也就是说，用

$$F_2(h) = \frac{F_1(qh) - q^{p_1}F_1(h)}{1-q^{p_1}}$$

代替$F_1(h)$, 它近似F^*就有h^{p_2}的阶.

一般地

$$F_m(h) = \frac{F_{m-1}(qh) - q^{p_{m-1}}F_{m-1}(h)}{1-q^{p_{m-1}}},\ m = 2, 3, \cdots.$$

可以归纳证明，

$$F^* - F_m(h) = a_m^{(m)}h^{p_m} + a_{m+1}^{(m)}h^{p_{m+1}} + \cdots$$

这就是Richardson外推法.

Romberg求积法

基于事实: $R(f,T_n)=I-T_n=\alpha_2h^2+\alpha_4h^4+\alpha_6h^6+\cdots$
把$[a,b]$分成n $(h=\frac{b-a}{n})$等份，用复化梯形公式求得近似值T_n，记$T_0(h)$. 将$[a,b]$分成$2n$等份，得T_{2n}，记$T_0(\frac{h}{2})$. 如此等等，得到序列$\{T_0(\frac{h}{2^k})\}$，应用Richardson外推法，得到$T_1(\frac{h}{2^k})$, $T_2(\frac{h}{2^k}),\cdots$.

具体实现: 梯形公式用逐次分半法计算，即
取$n=1,2,4,\cdots,2^k,\cdots$，相应的$T_0(\frac{b-a}{2^k})$简记为$T_0^{(k)}$，外推$m$次的序列简记为$T_m^{(k)}$，则$(q=\frac{1}{2})$，

$$T_1^{(0)}=\frac{4T_0^{(1)}-T_0^{(0)}}{4-1};\qquad T_1^{(1)}=\frac{4T_0^{(2)}-T_0^{(1)}}{4-1};$$

一般的计算公式

$$T_m^{(k)}=\frac{4^mT_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1},\quad k=0,1,2,\cdots.$$

见p. 93表5-4.

例子

用Romberg积分计算积分

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

的近似值，要求误差不超过0.5×10^{-6}.

第二次上机作业:
p.108, 9(2)

梯形公式的展开式的证明*: Euler-Maclaurin公式

引进多项式$q_j(t)$, 它是一个j次多项式，满足:

(1) $q_0(t) = 1$;

(2) $q'_{j+1}(t) = q_j(t),\ \ j \geq 0$;

则此多项式序列有下列性质:

(1) $q_{j+1}(t) = q_{j+1}(0) + \displaystyle\int_0^t q_j(x)\,dx,\ \ j = 0, 1, 2, \cdots$;

(2) $q_j(1) = q_j(0),\ \ j \geq 2$; $\int_0^1 q_j(t)\,dt = 0,\ j \geq 1$;

(3) 令$p_j(t) = q_j(t + \frac{1}{2})$, 则$p_{2j}(t)$为偶函数, $p_{2j+1}(t)$为奇函数;

(4) $q_{2j+1}(0) = q_{2j+1}(1) = 0,\ \ j \geq 1$.

定理: 假设函数$F(t)$在$[0,1]$上有k阶连续导数，$\{q_j(t)\}_0^k$是如前面所定义的多项式序列, 那么有

$$\int_0^1 F(t)dt = \frac{1}{2}[F(0)+F(1)] + \sum_{j=1}^{k-1}(-1)^j q_{j+1}(0)[F^{(j)}(1) - F^{(j)}(0)]$$

$$+(-1)^k \int_0^1 F^{(k)}(t) q_k(t)\, dt.$$

证明. 利用分部积分

$$\int_0^1 F(t)\, dt = \int_0^1 F(t) q_0(t)\, dt = F(t) q_1(t)|_0^1 - \int_0^1 F'(t) q_1(t)\, dt.$$

反复利用分部积分及$q_j(t)$的定义.

复合梯形公式$T_n(f)$的余项

定理: 假设函数$f(x)$在$[a,b]$上有k, $(k \geq 2)$阶连续导数, $x_i = a + (i-1)h$, $h = (b-a)/n$, $i = 1, 2, \cdots, n+1$, 那么Euler-Maclaurin公式:

$$I(f) = T_n(f) - h^2 q_2(0)[f'(b) - f'(a)] - h^4 q_4(0)[f'''(b) - f'''(a)] + \cdots + (-1)^{k-1} h^k q_k(0)[f^{(k-1)}(b) - f^{(k-1)}(a)] + R_k^n(f),$$

其中

$$R_k^n(f) = (-1)^k h^{k+1} \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 f^{(k)}(x_i + th) q_k(t)\, dt.$$

证明. 定义
$$F(t)=f(x_i+th),\ t\in[0,1].$$
则$F(0)=f(x_i)$, $F(1)=f(x_i+h)$,
$$F'(t)=hf'(x_i+th),$$
$$F''(t)=h^2f''(x_i+th),$$
及一般的k
$$F^{(k)}(t)=h^kf^{(k)}(x_i+th).$$
在每个小区间,
$$\int_0^1 F(t)\,dt=\int_0^1 f(x_i+th)\,dt=\frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx.$$
利用上一个定理结论.

5.6 Gauss型求积公式

问题: 在节点数目固定为n的条件下，能否适当地选择节点位置和相应的系数，使得求积公式

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

具有最大的代数精度?

记$\mu_k = \int_a^b x^k\,dx, (k = 0, 1, \cdots, m)$, 取$f(x) = 1, x, \cdots, x^m$, 得

$$\begin{cases} A_1 + A_2 + \cdots + A_n = \mu_0 \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_n x_n = \mu_1 \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + \cdots + A_n x_n^2 = \mu_2 \\ \cdots\cdots \\ A_1 x_1^m + A_2 x_2^m + \cdots + A_n x_n^m = \mu_m \end{cases}$$

能达到且确实找到一组x_k, A_k, 使得求积公式具有$2n-1$次代数精度，这种公式称为Gauss型求积公式.

$n=2$情形

积分区间$[-1,1]$, 否则$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$即可.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2)$$

对任何三次多项式都能精确成立. 解非线性方程组

$$\begin{cases} A_1+A_2=2 \\ A_1x_1+A_2x_2=0 \\ A_1x_1^2+A_2x_2^2=\frac{2}{3} \\ A_1x_1^3+A_2x_2^3=0 \end{cases}$$

初等的方法: 令x_1,x_2是方程$x^2+px+q=0$的根，则

$$\frac{2}{3}+2q=0,\quad \frac{2}{3}p=0.$$

于是$q=-\frac{1}{3}$, 得$x_1=-\frac{\sqrt{3}}{3}$, $x_2=\frac{\sqrt{3}}{3}$. 解出$A_1=A_2=1$.

标准的方法: 给定x_1, x_2, 对于任何三次多项式$f(x)$,

$$f(x) = (x - x_1)(x - x_2)q(x) + r(x),$$

其中$q(x), r(x)$分别是一次多项式. 则

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} (x - x_1)(x - x_2)q(x) + r(x)\,dx$$

如果选取x_1, x_2是正交多项式$P_2(x)$的根，则

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} r(x)\,dx = A_1 r(x_1) + A_2 r(x_2) = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2).$$

这里A_1, A_2就是两点Lagrange插值基函数的积分. 也就是说，这样的积分公式对任何三次多项式$f(x)$准确成立.

一般情形Gauss型求积公式

考虑积分

$$I = \int_a^b w(x)\, f(x)\, dx$$

其中$w(x) \geq 0$是权函数. 问题是如何恰当地选择$x_1, x_2, \cdots, x_n$, 使求积公式

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

当$f(x)$是不高于$2n-1$次的多项式时精确成立.

假设给定$x_1, x_2, \cdots, x_n$, 对于任何$2n-1$次多项式$f(x)$,

$$f(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)q(x) + r(x),$$

其中$q(x), r(x)$分别是$n-1$次多项式. 则

$$\int_a^b w(x)\, f(x)\, dx = \int_a^b w(x)\, [(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)q(x)+r(x)]\, dx$$

如果选取$x_1, x_2, \cdots, x_n$是n次正交多项式$P_n(x)$的根(关于内积$(f, g) = \int_a^b w(x)\, f(x) g(x)\, dx$)，则

$$\int_a^b w(x)\, f(x)\, dx = \int_a^b w(x)\, r(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} A_k r(x_k) = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k).$$

这里$A_1, A_2, \cdots, A_n$就是n点Lagrange插值基函数的积分．也就是说，这样的积分公式对任何$2n-1$次多项式$f(x)$准确成立.

$$r(x) = r(x_1) l_1(x) + r(x_2) l_2(x) + \cdots + r(x_n) l_n(x).$$

系数

$$A_k = \int_a^b w(x) \frac{(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)} dx$$

即

$$A_k = \int_a^b w(x) \frac{\omega_n(x)}{(x - x_k)\omega_n'(x_k)} dx.$$

这里

$$\omega_n(x) = (x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_n).$$

截断误差

定理: 设$f(x) \in C^{2n}[a,b]$, 则Gauss型求积公式的截断误差为

$$R(f, G_n) = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_a^b w(x)\, \omega_n^2(x)\, dx, \quad a < \eta < b.$$

证明 利用在节点$x_1, x_2, \cdots, x_n$上的Hermite插值多项式$H_{2n-1}(x)$, 有

$$f(x) - H_{2n-1}(x) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \omega_n^2(x), \quad a < \xi < b$$

则

$$R(f, G_n) = \int_a^b w(x) \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \omega_n^2(x)\, dx$$

由于$f^{(2n)}(\xi)$是x的连续函数，利用积分中值定理可证.

Notes：插值多项式$H_{2n-1}(x)$不需要具体写出，利用代数精度直接积分.

Gauss-Legendre求积公式

取$w(x) = 1, [a, b] = [-1, 1]$, 此时的正交多项式: $P_0(x) = 1$,

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

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

具体积分节点:

$$n = 2: \quad x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}};$$

$$n = 3: \quad x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \ \ x_2 = 0, \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}};$$

(5.39)的证明

Legendre多项式的一个性质:

$$(1-x^2)P_n'(x) = n(P_{n-1}(x) - xP_n(x)).$$

可得

$$A_k = \frac{2(1-x_k^2)}{(nP_{n-1}(x_k))^2}, \ k = 1, 2, \cdots, n.$$

计算

$$s_k = \int_{-1}^{1} \frac{P_n(x)P_n'(x)}{x-x_k}\,dx = \sum_{j=1}^{n} A_j \frac{P_n(x_j)P_n'(x_j)}{x_j - x_k} = A_k(P_n'(x_k))^2.$$

另一方面, 分部积分

$$s_k = \frac{(P_n(x))^2}{x-x_k}\Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} P_n(x)\Big(\frac{P_n(x)}{x-x_k}\Big)'\,dx = \frac{1}{1-x_k} + \frac{1}{1+x_k}.$$

误差估计

$$R(f, G_n) = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} f^{(2n)}(\xi), \ -1 < \xi < 1.$$

Gauss-Laguerre求积公式

权函数$w(x)=e^{-x}$，$[0,+\infty)$，求积公式

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)\,dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

节点x_k是n次Laguerre多项式$L_n(x)$的根

$$L_n(x)=e^x \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n)$$

系数

$$A_k=\frac{(n!)^2}{x_k(L_n'(x_k))^2}.$$

误差

$$R(f,G_n)=\frac{(n!)^2}{(2n)!}f^{(2n)}(\xi),\ \ 0<\xi<+\infty.$$

Gauss-Hermite求积公式

权函数$w(x) = e^{-x^2}$，$(-\infty, +\infty)$，求积公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)\,dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

节点x_k是n次Hermite多项式$H_n(x)$的零点

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

系数

$$A_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{(H_n'(x_k))^2}.$$

误差

$$R(f, G_n) = \frac{n!\sqrt{\pi}}{2^n (2n)!} f^{(2n)}(\xi), \quad -\infty < \xi < +\infty.$$

Gauss-Chebyshev求积公式

权函数$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, $[-1,+1]$, 求积公式

$$\int_{-1}^{+1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n} f(cos\frac{2k-1}{2n}\pi) + \frac{2\pi}{2^{2n}(2n)!}f^{(2n)}(\xi),\ |\xi| < 1$$

节点x_k是n次Chebyshev多项式的零点

$$T_n(x) = cos(n\,arccosx),\ \ |x| \le 1.$$

即

$$T_n = \cos(n\theta), \quad x = \cos(\theta).$$

典型例题

1. 确定参数$\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1$使得下列数值积分公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \alpha_0 f(a) + \alpha_1 f(b) + \beta_0 f'(a) + \beta_1 f'(b)$$

具有最高次的代数精度; 当$f^{(4)}(x) \in C[a,b]$时导出此数值积分的误差估计.

解答. 用$f(x) = 1, x-a, (x-a)^2, (x-a)^3$代入，解方程可得

$$\alpha_0 = \alpha_1 = \frac{b-a}{2};$$

$$\beta_0 = \frac{(b-a)^2}{12},\ \beta_1 = -\frac{(b-a)^2}{12}.$$

设$f(x)$在a, b的Hermite插值为$H(x)$, 则

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

由于积分公式具有三次代数精度，

$$\int_a^b H(x)\,dx = \frac{b-a}{2}(H(a)+H(b)) + \frac{(b-a)^2}{12}(H'(a)-H'(b)).$$

即

$$\int_a^b H(x)\,dx = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) + \frac{(b-a)^2}{12}(f'(a)-f'(b)).$$

因此

$$\int_a^b (f(x)-H(x))\,dx = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)^2(x-b)^2\,dx = \frac{f^{(4)}(\eta)}{720}(b-a)^5.$$

典型例题

2. (1)验证数值积分公式

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{1}{18}\Big(5f(\frac{5-\sqrt{15}}{10})+8f(\frac{1}{2})+5f(\frac{5+\sqrt{15}}{10})\Big)$$

具有五次代数精度;

(2) 若$p(x)$是任意的次数小于等于**6**且在$[\frac{5-\sqrt{15}}{10},\frac{5+\sqrt{15}}{10}]$上递增的多项式，则必有$p(1)\geq p(0)$.

(3) 设$[0,1]$区间的闭子区间$[a,b]$具有如下性质：若对任意次数小于等于**6**且在$[a,b]$上递增的多项式$p(x)$，必有$p(1)\geq p(0)$. 那么

$$[\frac{5-\sqrt{15}}{10},\frac{5+\sqrt{15}}{10}]\subseteq[a,b].$$

解答.
(1)验证;
(2)因为$p(x)$是≤ 6次的多项式，且在区间$[\frac{5-\sqrt{15}}{10}, \frac{5+\sqrt{15}}{10}]$上是递增的，则

$$p'(x) \geq 0, \ \ x \in [\frac{5-\sqrt{15}}{10}, \frac{5+\sqrt{15}}{10}].$$

由(1)的结论，

$$p(1)-p(0) = \int_0^1 p'(x)\,dx = \frac{1}{18}\Big(5p'(\frac{5-\sqrt{15}}{10})+8p'(\frac{1}{2})+5p'(\frac{5+\sqrt{15}}{10})\Big)$$

(3) 记$x_1 = \frac{5-\sqrt{15}}{10}$, $x_2 = \frac{5+\sqrt{15}}{10}$. 若$x_1 < a$,
取$p'(x) = (x-a)(x-\frac{1}{2})^2(x-x_2)^2$, 则显然$p'(x_1) < 0$,
$p'(x) \geq 0$对任意$x \in [a, b]$, 于是

$$p(1)-p(0) = \int_0^1 p'(x)\,dx = \frac{1}{18}\Big(5p'(x_1)+8p'(\frac{1}{2})+5p'(x_2)\Big) = \frac{5}{18}p'(x_1) \leq$$

得到矛盾. 同理可以说明$x_2 \leq b$.