数值积分

《计算方法》课程笔记

2024 年 11 月 20 日

§1 引言

在定积分的学习中, 我们根据定积分的定义采取分割、近似、求和、取极限四步骤获取了最后的积分值. 如下例子:

例 1. 求曲线 $y=x^2$、直线 $x=1$ 和 x 轴所围成的曲边三角形的面积.

(1) 分割: 将区间 $[0,1]$ 等分成 n 个小区间, 直线 $x=i/n(i=1,2,...,n-1)$ 把曲边三角形分成 n 个小曲边梯形, $S=\Delta s_1+\Delta s_2+\ldots+\Delta s_i+\ldots+\Delta s_{n-1}+\Delta s_n$;

(2) 近似: 第 i 个小曲边梯形面积: $\Delta \mathrm{s}_i \approx \frac{1}{n}\cdot\left(\frac{i-1}{n}\right)^2 \quad (i=1,2,\ldots,n)$;

(3) 求和: 小曲边梯形面积的总和:

$$\begin{aligned} S_n &= \frac{1}{n}\cdot 0+\frac{1}{n}\cdot\left(\frac{1}{n}\right)^2+\frac{1}{n}\cdot\left(\frac{2}{n}\right)^2+\ldots+\frac{1}{n}\cdot\left(\frac{n-1}{n}\right)^2 \\ &= \frac{1}{3}\left(1-\frac{1}{n}\right)\left(1-\frac{1}{2n}\right) \end{aligned}$$

(4) 取极限: 取得 S_n 的极限, 得曲边三角形面积 $S=\lim_{n\to\infty} S_n=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{3}\left(1-\frac{1}{n}\right)\left(1-\frac{1}{2n}\right)=\frac{1}{3}$.

后来我们掌握了 Newton-Lebniz 公式. 然而, Newton-Leibniz 公式并不能完全解决定积分的实际计算问题, 因为实际问题极其复杂: 首先, 不一定能够找到用初等函数的有限形式表示的原函数 $F(x)$, 如 $\int\frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$; 其次, 虽然原函数能用初等函数表示, 但表达式太复杂. 第三, 被积函数 f(x) 表达式未知, 是用函数表/图形的形式给出的. 对于这些情况, 要计算积分的准确值十分困难. 可见, 通过原函数来计算积分有其局限性, 需要研究新的积分计算方法来解决牛顿-莱布尼兹公式难以解决的积分问题. 具体地我们可以利用数值方法来近似计算定积分.

我们回到积分的定义. 定积分的几何意义是: 由曲线 $y=f(x), x=a, x=b$ 与 x 轴所围成的曲边梯形的面积. 此前我们采用如下的方法进行计算:

矩形法: 用点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, 将区间 $[a,b]$ 进行划分, 记 $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i, f(x_i) = f_i$.

- 若取 f_i 为矩形的高, 得左矩形公式:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \Delta x_0 f_0 + \Delta x_1 f_1 + \cdots + \Delta x_{n-1} f_{n-1}.$$

- 若取 f_{i+1} 为矩形的高, 得左矩形公式:

$$I(f) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \Delta x_0 f_1 + \Delta x_1 f_2 + \cdots + \Delta x_{n-1} f_n.$$

- 取两式的平均值, 得梯形公式:

$$\begin{aligned} I(f) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx & \frac{\Delta x_0}{2} f_0 + \frac{\Delta x_0 + \Delta x_1}{2} f_1 + \cdots \\ & + \frac{\Delta x_{n-2} + \Delta x_{n-1}}{2} f_{n-1} + \frac{\Delta x_{n-1}}{2} f_n \end{aligned}$$

实际上, 上述三式的共同特点是: 将定积分的计算转换为计算各点函数值的线性组合, 只是系数选取不同而已. 由此我们导出数值积分的基本形式.

1.1. 数值积分的基本形式. 数值积分实际上是取 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上一些离散点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 处的函数值的线性组合作为定积分的近似值, 将求积过程转化为涉及到这些点相关的乘法与加法的代数运算. 即

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

该公式称为数值求积公式 (机械求积公式), x_k 为求积节点, A_k 为求积系数, 该方法称为数值积分. 和以往一样, 其截断误差或余项定义做 $E(f) := I(f) - Q(f)$.

于是, 我们接下来要考虑的问题主要有:

- 如何选择合适的求积节点 x_k;
- 如何确定合适的求积系数 A_k;

使误差 $E(f) = I(f) - Q(f)$ 尽可能的小.

实际上, 一个最简单的思路是采用被积函数 f 简单易积的插值函数近似替代 f 进行积分. 最简单的想法是采用插值多项式替代 f 进行积分.

§2 插值求积. 衡量标准

2.1. 使用多项式插值近似原函数. 我们希望用插值多项式近似原函数, 用插值函数的积分作为 $I(f)$ 的近似值. 不妨设插值函数为 Lagrange 多项式, 可得到插值型求积公式

$$I(f) \approx \int_a^b \underbrace{\sum_{k=0}^n l_k(x) f(x_k)}_{L_n(x)} \mathrm{d}x = \sum_{k=0}^n \left(\int_a^b l_k(x)dx \right) f(x_k).$$

其中求积系数 $A_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x, k = 0, 1, 2, \ldots, n$. 有 $Q(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$, 从而

$$E(f) = I(f) - Q(f) = \int_a^b R_n(x)\mathrm{d}x = \boxed{\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\mathrm{d}x}.$$

若被积函数 $f(x)$ 是不超过 n 次的多项式函数, 则 $f^{(n+1)} = 0$ 恒成立, $E(f) = 0$. 相应的插值型求积公式不是近似公式, 而是精确公式.

通过上述的论述, 我们可得到求积公式对多项式类函数的精确程度. 任何连续函数都可由某个多项式函数一致逼近, 一个求积公式对多项式类函数的精确程度如何, 能反映该求积公式的"优劣". 为衡量数值求积公式的"优劣"程度, 引入"代数精度"的概念作为评价指标.

2.2. 衡量标准: 代数精度.

定义 1. 如果某个数值求积公式 $Q(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 对 $f(x)$ 取**所有**次数不超过 m 次的多项式均能精确成立, 但至少对某个 $m+1$ 次的多项式不精确成立, 则称该求积公式具有 m 次代数精度.

这定义立马说明代数精度越高说明公式越能对更多的多项式函数准确成立, 即对更多的被积函数都能准确成立.

要验证一个求积公式具有 m 次代数精度, 只需验证其对 $f(x)=1, x, x^2, \ldots, x^m$ 精确成立, 但对 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立. (即: $\begin{cases} \sum_{i=0}^n A_i x_i^k = \int_a^b x^k dx \\ \sum_{i=0}^n A_i x_i^{m+1} \neq \int_a^b x^{m+1} dx \end{cases}$ $(k = 0, 1, \ldots, m)$). 这是因为 $\{1, x, x^2, x^3, \cdots, x^m\}$ 是 $\mathbb{F}[x^m]$ 空间的一组基. 由于积分是线性算子, 因此只要判定基底的精确性, 就可以得知其对于全空间的精确性.

例 2. 试确定系数 ω_i, 使下面的求积公式具有至少 2 次代数精度, 并求出此求积公式的代数精度.

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_0 f(-1) + \omega_1 f(0) + \omega_2 f(1).$$

有可能作为填空题出现.

$$\begin{matrix} f(x)=1 \\ f(x)=x \\ f(x)=x^2 \end{matrix} \quad \begin{cases} \omega_0 + \omega_1 + \omega_2 = \int_{-1}^1 1\mathrm{d}x & = 2 \\ -\omega_0 + \omega_2 = \int_{-1}^1 x\mathrm{d}x & = 0(\text{奇函数}) \\ \omega_0 + \omega_2 = \int_{-1}^1 x^2\mathrm{d}x & = 2/3 \end{cases}$$

从而 $\omega_0 = 1/3 = \omega_2, \omega_1 = 4/3$. 以求积公式为 $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx [f(-1) + 4f(0) + f(1)]/3$. 并且可以立即得到其具有三次代数精度: $\int_{-1}^1 x^3\mathrm{d}x = 0 = -1 + 1$; 但是不具有四次代数精度: $\int_{-1}^1 x^4\mathrm{d}x \neq 0 = -1 + 1$. 所以此求积公式具有 3 次代数精度.

那么代数精度似乎与被插值的节点数有关. 实际上, 根据上例的探索, 发现含有 $n+1$ 个互异节点的插值型求积公式对 $f(x)=1, x, x^2, \ldots, x^n$ 精确成立, 所以其代数精度至少为 n 次. 这可以从误差的角度看到: 毕竟 $E(f) =$

$I(f)-Q(f)=\int_a^b R_n(x)dx=\int_a^b \underbrace{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}}_{\text{为}0}\omega_{n+1}(x)\mathrm{d}x$. 反之, 还可以知道如果求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ 的代数精度至少为 n 次, 则它必定是插值型的. 这是因为求积公式对 n 次 Lagrange 插值基函数 $l_k(x)$ 精确成立, 就是说 $\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^n \omega_i l_k(x_i)$. 注意到 $l_k(x_i)=[k=i]$, 于是求和记号中只剩下第 k 项, 变为了 $\omega_k=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x$. 由此我们给出定理:

定理 1. *求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ 至少具有 n 次代数精度的充要条件是: 它是插值型的.*

根据求积节点的选择不同, 常见的求积公式可分为两大类:

- Newton-Cotes 型公式, 基于等距分布的求积节点.
- Gauss 型公式, 取相应的正交多项式的根作为求积节点.

§3 Newton-Cotes 求积公式

3.1. 公式导出. 在插值型求积公式中, 节点 xk 按等距分布, 令步长 $h=\frac{b-a}{n}, x_k=a+kh \quad (k=0,1,2,\cdots,n)$. 以这些等距节点为插值节点的插值型求积公式称为 Newton-Cotes 求积公式.

a) 使用待定系数法确定公式 实际上, 如果我们采用待定系数法, 把 Cotes 系数写作

$$\int_a^b f(x)dx = A_0\cdot f(a)+A_1\cdot f\left(a+\frac{b-a}{n}\right)+A_2\cdot f\left(a+2\cdot\frac{b-a}{n}\right)+\cdots+A_n\cdot f(b)$$

的形式, 这些积分系数 $\{A_0,A_1,\cdots,A_n\}$ 可能与 a,b 有关. 为了简化计算, 我们干脆把上述内容统一平移到 $[0,n]$ 并且除以区间的长度. 这样, 我们得到一组新的系数 $\{a_0,a_1,\cdots,a_n\}$, 满足 $A_i=(b-a)a_i$. 因此, 上述的估计就变成了

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\cdot\sum_{i=0}^n a_i\cdot f\left(a+i\cdot\frac{b-a}{n}\right).$$

我们现在来求解这些系数. 令 $\mathbf{M}=\begin{pmatrix}1&0&0&\cdots&0\\1&1&1&\cdots&1\\1&2&2^2&\cdots&2^n\\\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\1&n&n^2&\cdots&n^n\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}, \mathbf{A}=n\begin{pmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{(n+1)\times 1}, \mathbf{B}=\begin{pmatrix}\int_0^n x^0\mathrm{d}x\\\int_0^n x^1\mathrm{d}x\\\int_0^n x^2\mathrm{d}x\\\vdots\\\int_0^n x^n\mathrm{d}x\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{(n+1)\times 1}$ 从而让 $\mathbf{M}'\mathbf{A}=\mathbf{B}$. 由于 $\mathbf{A}=(\mathbf{M}')^{-1}\mathbf{B}$, 所以我们的系数就是 $\frac{1}{n}\mathbf{A}$. 因此就得到的 Cotes 公式的表达.

b) 找规律得到的公式

例 3. 下面对于 Newton-Cotes 的 n 取值进行初步探究. 实际上, n 通常取 1, 2, 3, 4 等值.

(1) $n=1$ 时, $x_0=a, x_1=b$. 插值函数为 $p_1(x)=\frac{x-b}{a-b}f(a)+\frac{x-a}{b-a}f(b)$. 对这个式子从 a 到 b 的积分, 就有

$$\begin{aligned}\int_a^b \underbrace{\frac{x-b}{a-b}}_{l_0(x)}f(a)+\underbrace{\frac{x-a}{b-a}}_{l_1(x)}f(b)\mathrm{d}x &= \left[\frac{(x-b)^2}{2(a-b)}f(a)\right]_a^b+\left[\frac{(x-a)^2}{2(b-a)}f(b)\right]_a^b \\ &= \underbrace{-\frac{a-b}{2}}_{A_0}f(a)+\underbrace{\frac{b-a}{2}}_{A_1}f(b) \\ &= \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)).\end{aligned}$$

这就是早些时候得到的梯形求积公式/两点公式.

(2) $n=2$ 时, $h=\frac{b-a}{2}, x_0=a, x_1=\frac{a+b}{2}, x_2=b$. 插值多项式为

$$\begin{aligned}p_2(x)=&\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)\\&+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)\end{aligned}$$

实际上像上例一样, 由于积分的线性性, 求积系数 A_k 可以直接由 Lagrange 基函数积分得到. 它具有一次代数精度. 即 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx, k=0,1,2,\dots,n$. 使用 Wolfram Alpha 的符号积分功能, 可以得到 $A_0=h/3, A_1=4h/3, A_2=h/3$. 化简得到

$$\boxed{Q(f)=S_1=\frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right)}.$$

这就是 Simpson 求积公式. 它具有三次代数精度.

(3) $n=3$ 时, $h=\frac{b-a}{3}, x_0=a, x_1=\frac{2a+b}{3}, x_2=\frac{a+2b}{3}, x_3=b$. 插值多项式为

$$\begin{aligned}p_3(x)=&\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f(x_1)\\&+\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f(x_2)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f(x_3)\end{aligned}$$

可求得 $A_0=\frac{3h}{8}, A_1=\frac{9h}{8}, A_2=\frac{9h}{8}, A_3=\frac{3h}{8}$. 求积公式为

$$\boxed{Q(f)=S_{3/8}=\frac{b-a}{8}\left(f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{2b+a}{3}\right)+f(b)\right)}.$$

这是 Simpson 3/8 求积公式, 具有 3 次代数精度.

(4) $n=4$ 时, $h=\frac{b-a}{4}, x_0=a, x_1=a+h, x_2=a+2h, x_3=a+3h, x_4=b$. 插值多项式为 $p_4(x)=l_0(x)f(x_0)+l_1(x)f(x_1)+l_2(x)f(x_2)+l_3(x)f(x_3)+l_4(x)f(x_4)$, 可以求得 $A_0=\frac{14h}{45}, A_1=\frac{64h}{45}, A_2=\frac{24h}{45}, A_3=\frac{64h}{45}, A_4=\frac{14h}{45}$. 对应

的求积公式为

$$\boxed{\begin{aligned}Q(f)=C_1=\frac{b-a}{90}&[7f(a)+32f(a+h)+12f(a+2h)\\&+32f(a+3h)+7f(b)]\end{aligned}}.$$

这是 Cotes 求积公式, 具有 5 次代数精度.

观察前面求积公式, 等距节点条件下, 可以得到 $I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)\sum_{i=0}^n C_i^{(n)}f(x_i)$, 其中 $C_i^{(n)}=\frac{A_i}{b-a}=\frac{1}{b-a}\int_a^b\prod_{j=0,j\neq i}^n\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\mathrm{d}x$.

为简化计算, 可以使用起始值 a 和步长 h 来表示. 令 $x:=a+th$, 这就有 $\mathrm{d}x=h\mathrm{d}t$, $x-xj=(t-j)h, xi-xj=(i-j)h$. 于是上述的积分公式可以变为

$$\begin{aligned}C_i^{(n)}&=\frac{1}{b-a}\int_a^b\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\mathrm{d}x\\&=\frac{h}{b-a}\int_0^n\frac{t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)h^n}{i(i-1)\cdots2\times1\times(-1)(-2)\cdots(-(n-i))h^n}\mathrm{d}t\qquad\text{(把}x\text{代换为}t\text{)}\\&=\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t\end{aligned}$$

这就表明 Cotes 系数只依赖被积区间的等分数 n, 与积分区间 $[a,b]$ 和被积函数 $f(x)$ 都无关. 只要给出了等分数就能算出 $C_i^{(n)}$.

3.2. 误差分析. 像上文一样, 数值积分的误差主要来自于各个插值点之间的部分与原函数的差别. 早在第2.1节的时候我们说明了 $E(f)=\boxed{\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\mathrm{d}x}$. 下面我们由于积分中值定理导出积分加权平均值定理, 这就给后续误差的估计带来了方便.

回顾积分中值定理:

定理. *若函数 $f(x)$ 在闭区间 $[a,b]$ 连续, 在积分区间内至少存在一个数 ξ, 满足 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=f(\xi)(b-a)$,$(a\le\xi\le b)$.*

倘若我们对积分区间的每一点乘上一个权重, 不同点的权重可以不同, 但是必须同号. 我们同样可以导出类似的结论.

定理 2. *如果函数 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 内连续; 积分权重函数 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 可积且不变号. 那么在积分区间内至少存在一点 ξ 使得 $\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x=f(\xi)\int_a^b g(x)\mathrm{d}x$.*

证明. 不失一般性考虑 $g(x)>0$. 由于 f 在 $[a,b]$ 内是连续函数, 因此设其最小值和最大值为 m,M, 且满足 $m\le f(t)\le M, t\in[a,b]$. 取到最小值和最大值的自变量值记作 x_m,x_M. 我们记左手边为 $C:=\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x$, 定义函数 $\theta:[a,b]\to\mathbb{R}$, 满足 $\theta(t)=f(t)\int_a^b g(x)\mathrm{d}x$. θ 是连续的, 因为 f 是连续的, 而后面红色部分是一个常数.

考虑 $x \in [a,b]$, 由于 $g(x) > 0$ 恒成立. 注意到 $mg(x) \le f(x)g(x) \le Mg(x)$. 所以

$$\int_a^b mg(x)dx \le \int_a^b f(x)g(x)dx \le \int_a^b Mg(x)dx.$$

即 $\theta(x_m) \le C \le \theta(x_M)$. 根据连续函数的介值定理, 存在某个常数 ξ, 使得 $\theta(\xi) = C$. 即 $\int_a^b f(x)g(x)dx = f(c)\cdot\int_a^b g(x)dx$.

同理可证 $g(x) \le 0$ 的情形. □

例 4. 考虑上述例子的误差.

(1) 首先考虑梯形求积公式的误差. 写出对应的公式:

$$E_1 = \int_a^b R_1(x)dx = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

如果我们认为 f'' 在 $[a,b]$ 连续, 由于 $x \in [a,b]$, 说明 $(x-a)(x-b) \le 0$. 根据上述的中值定理, 存在 $\eta \in (a,b)$, 满足

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x \\ &= \frac{f''(\eta)}{2!}\frac{1}{6}(a-b)^3 \\ &= \boxed{-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3, \eta \in (a,b).} \end{aligned}$$

(2) 然后考虑 Simpson 求积公式. 考虑写出对应误差函数:

$$E_2(x) = \int_a^b \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)\mathrm{d}x$$

但是问题在于, 上述蓝色部分在区间 $[a,b]$ 内并不保号. 不能直接用积分中值定理. 所以我们考虑采用另外的插值法. 由于 Simpson 公式具有三次代数精度, 故其对于满足以下条件的 Hermite 三次插值多项式 $H(x)$ 也能够精确成立. 即令

$$\begin{cases} H(a) = f(a) & H(b) = f(b) \\ H(c) = f(c) & H'(c) = f'(c) \end{cases} \quad \left(c = \frac{a+b}{2}\right)$$

故有 $\int_a^b H(x)\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6}[H(a) + 4H(c) + H(b)]$. 这就表明 Simpson 求积公式所求的积分可以用 $\int_a^b H(x)\mathrm{d}x$ 表示, 这时候求积公式的截断误差为 $E(f) = I(f) - S_1 = \int_a^b (f(x) - H(x))\mathrm{d}x$. 利用 Hermite 多项式的余项公式得到 $E(f) = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)\mathrm{d}x$. 这时候 $(x-a)(x-c)^2(x-b) \le 0$ 具有保号性, **补充 $f^{(4)}$ 连续的条件之后**, 利用积分中值定理:

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

使用 Wolfram Alpha 计算这个积分表达式, 就可以得到 $E = \boxed{-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)}$.

(3) 对于 $n=3$ 的情况, 实际推导就已经过于复杂, 这里直接给出结果: 设 $f^{(4)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续, 则 Simpson 3/8 求积公式的误差是 $E_3=-\frac{(b-a)^5}{6480}f^{(4)}(\eta), a<\eta<b$.

(4) 对于 $n=4$ 的情况, 我们有: 设 $f^{(6)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续, 则 Cotes 求积公式的误差是 $E_4=-\frac{8}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^7 f^{(6)}(\eta), a<\eta<b$.

3.3. 系数特点和稳定性. 我们下面重点看 Cotes 系数 $C_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq i}^n(t-j)\mathrm{d}t$. 其具有如下的性质

定理 3. *Cotes 系数满足*

- *代数和为 1, 即 $\sum_{i=0}^n C_i^{(n)}=1$;*
- *具有对称性, 即 $C_i^{(n)}=C_{n-i}^{(n)}$.*

证明. 对于 (1), 把常数项拿进积分号, $C_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq i}^n(t-j)\mathrm{d}t=\int_0^n\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\prod_{j=0,j\neq i}^n(t-j)\mathrm{d}t$. 考虑

$$F_i(t)=\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\prod_{j=0,j\neq i}^n(t-j).$$

这个式子对于 $t=0,1,2,\cdots,n$ 只有当 $t=i$ 的时候, $F_i(t)\neq 0$. 即原式变为 $\frac{(-1)^{n-i}}{(n-i)!n}(-1)^{n-i}(n-i)!=1/n$. $\sum_{i=0}^n F_i(t)$ 是一个 n 次多项式, 当 $t=0,1,2,3,\cdots,n$ 这 $n+1$ 个点的时候, 多项式的值都是 $1/n$. 由于代数基本定理, 除非 $F_i(t)$ 恒为 $1/n$, 否则多项式的次数会更高.

所以可以知道

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^n C_i^{(n)}&=\sum_{i=0}^n\int_0^n F_i(t)dt\\&=\int_0^n\sum_{i=0}^n F_i(t)dt\\&=\int_0^n\frac{1}{n}dt\\&=1.\end{aligned}$$

注意到

(2) 这是因为, $\sum_{i=0}^n\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq i}^n(t-j)\mathrm{d}t$ 将 i 代为 $n-i$ 之后原式不变. □

实际上, 当 $n\geq 8$ 时, Cotes 系数出现负数, 稳定性得不到保证. 另外, 由于 Runge 现象, 收敛性也无法保证. 故一般不采用高阶的牛顿-柯特斯求积公式.

§4 复化 (复合/组合) 求积公式

由梯形/辛普森/柯特斯公式知, 求积节点数增多, 公式精度也会相应提高. $n>7$ 时, Cotes 系数开始出现负值, 可能会导致舍入误差增大, 并且往往难以估计. 因此, 不能用增加求积节点数的方法来提高计算精度. 在实际应用中, 提高积分计算精度常用两种方法:

- 用复化 (组合) 公式;
- 用非等距节点.

复化求积公式大体的流程是:

1. 将积分区间分割成多个小区间
2. 每个小区间上使用低次 Newton-Cotes 求积公式
3. 所有小区间上的计算结果相加得到整个区间上的求积公式

4.1. 预先选定步长.

a) 复化梯形公式 首先我们定小区间: 将 $[a,b]$ 分成 n 等分 $[x_i,x_{i+1}]$, 其中节点:

$$x_i = a + i\cdot h, \quad k=\frac{b-a}{n} \quad (i=0,1,\cdots,n)$$

在每个小区间 $[x_k,x_{k+1}](k=0,1,\ldots,n-1)$ 上应用梯形公式

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

对于每个区间上都这样做, 累加求和就得到

$$\begin{aligned} I=\int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}(f(x_k)+f(x_{k+1})) \\ &= \frac{h}{2}\left(f(x_0)+2(f(x_1)+f(x_2)+\ldots+f(x_{n-1}))+f(x_n)\right) \\ &= \boxed{\frac{h}{2}\left(f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right)}. \end{aligned}$$

这就是复化梯形公式.

要估计这种方法的误差, 只需要考察每个估计区间之间的误差. 譬如, 在子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上梯形公式的余项 R_{T_k} 是

$$R_{T_k} = -\frac{h^3}{12}f''(\eta_k) \quad \eta_k\in[x_k,x_{k+1}].$$

于是, 在 $[a,b]$ 上的余项 R_n 就是他们的和:

$$\begin{aligned} R_n(f)=I-T_n(f) &= \sum_{k=0}^{n-1}\left(-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right) \\ &= -\frac{h^2}{12}(b-a)\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k) \end{aligned}$$

由于 $\min_{0\le k\le n-1} f''(\eta_k) \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k) \le \max_{0\le k\le n-1} f''(\eta_k)$, 倘若 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续, 根据介值定理知, 存在 $\eta\in[a,b]$, 使 $\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=f''(\eta)$. 因此余项

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

b) 复化 Simpson 公式 和上述例子一样, 将 $[a,b]$ 分成 n 等分 $[x_i, x_{i+1}]$, 其中节点:

$$x_k = a + k \cdot h, \quad h = \frac{b-a}{n} \quad (k = 0, 1, \cdots, n).$$

在区间 $[x_k, x_{k+1}], k = 0, 1, \cdots, n-1$ 上采用 Simpson 公式 $Q(f) = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$ 然后对每个小区间相加就得到

$$\begin{aligned} I = \int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{6}\left(f(x_k) + 4f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + f(x_{k+1})\right) \\ &= \frac{h}{6}\left(f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right) \end{aligned}$$

这就是复化 Simpson 公式. 与上例子类似的误差分析显示如果 $f \in C^{(4)}[a,b]$, 那么 $R_n(f) = I - S_n(f) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$.

4.2. 步长的选取. 使用复化求积公式前, 首先要确定合适的步长 h. 若太大, 计算精度难以保证; 若太小, 计算量增加甚至浪费. 实际上, 更加实际的做法是采取将区间不断对分的方法, 即取 $n = 2^k (k = 0, 1, 2, ...)$, 反复使用复化求积公式, 直到相邻两次前后两次近似值的小于指定的精度, 即 $|I_{2n} - I_n| < \epsilon$ 为止.

a) 复化梯形公式应对变化的步长做出的改动

步长折半产生的计算量 若要把 $[x_i, x_{i+1}]$ 分成两半 $[x_i, x_{i+1/2}], [x_{i+1/2}, x_{i+1}]$, 根据复化梯形公式, 有

$$\begin{aligned} T_{2n} &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{4}\left(\left(f(x_i) + f\left(x_{i+1/2}\right)\right) + \left(f\left(x_{i+1/2}\right) + f(x_{i+1})\right)\right) \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{4}\left(f(x_i) + 2f\left(x_{i+1/2}\right) + f(x_{i+1})\right) \\ &= \frac{1}{2}\underbrace{\frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}(f(x_i) + f(x_{i+1}))}_{T_n} + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2}) \end{aligned}$$

从而便得到了递推式.

终止条件的选取 由复化梯形公式的余项 (误差) 知

$$\begin{aligned} I - T_n &= -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\eta_1) \\ I - T_{2n} &= -\frac{b-a}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2 f''(\eta_2) \end{aligned}$$

因此假若 f'' 变化不大, $\frac{I-T_n}{I-T_{2n}} \approx 4$. 因此可以根据 T 估计 I. 即 $I \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)$. 于是误差控制条件就为 $\left|\frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)\right| < \varepsilon$. 上述条件满足, 程序终止; 否则, 继续分半计算.

4.3. Romberg 求积公式. 上文 I 的估计值值得拿出来仔细研究. 具体来讲, 自动选步长的梯形积分公式终止条件得到的近似关系式实际上揭示了我们可以拿 T_n, T_{2n} 的某一个线性组合更好地估计积分值. 比如, 我们可以提出

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

考查 $\overline{T}$ 与 n 等分辛普森公式 S_n 之间的关系, 有

$$\begin{aligned}
\overline{T} &= \frac{4T_{2n} - T_n}{4-1} \\
&= \frac{1}{3}\left(T_n + 2h\sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k-1}+x_k}{2}\right)\right) \\
&= \frac{1}{3}\left(\frac{h}{2}\left(f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)\right) + 2h\sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k-1}+x_k}{2}\right)\right) \\
&= \frac{h}{6}\left(f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 4\sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k-1}+x_k}{2}\right)\right) = S_n \\
&= \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n
\end{aligned}$$

可见, 用梯形法二分前后两个积分值 T_n 和 T_{2n}, 按照上式所做的线性组合, 可得到具有更高精度的由复化辛普森公式计算的积分值 $\boxed{S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n}$.

继续这样做, 也可以得到自动选步长的复化 Simpson 公式. 根据的就是他们的误差关系得到

$$\begin{aligned}
I - S_n &= -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta_1) \\
I - S_{2n} &= -\frac{b-a}{2880}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_2)
\end{aligned}$$

当 $f^{(4)}$ 变化不大的时候, 可以知道 $\frac{I-S_n}{I-S_{2n}} \approx 4^2$. 因此, 取 $I \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n)$ 得到自动选步长的 Simpson 公式. 同样, 用可以用这个得到更高精度积分的估计式子:

$$\bar{S} = \frac{4^2}{4^2-1}S_{2n} - \frac{1}{4^2-1}S_n.$$

我们发现这正是复化 Cotes 公式. 即 S_n 和 S_{2n} 线性组合可以得到计算精度为 $O(h^6)$, 代数精度为 5 的复化 Cotes 公式.

同理, 由复化 Cotes 公式重复上述的过程就可以得到精度更高的公式. 即

$$\bar{C} = \frac{4^3}{4^3-1}C_{2n} + \frac{1}{4^3-1}C_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n =: R_n$$

即 C_n 和 C_{2n} 线性组合可以得到计算精度为 $O(h^8)$, 代数精度为 7 的近似公式 R_n, 我们称之为 Romberg 公式.

注. (1) 上述加速技巧统称为 Romberg 求积方法; (2) 每加速一次, 计算精度提高二阶.

例 5. 用 Romberg 算法计算 $\int_0^1 \frac{\sin(x)}{x}\mathrm{d}x$, 要求精度 $\epsilon = 10^{-7}$. 可以补充定义 $f(0) = \lim_{x\to 0}\frac{\sin x}{x} = 1$, 表格中 $h = \frac{b-a}{2^i}$.

k	T_{2^k}	S_{2^k}	C_{2^k}	R_{2^k}
0	$\frac{(b-a)}{2}(f(a)+f(b))$	\	\	\
1	$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2})$	$S_1 = \frac{4}{3}T_2 - \frac{1}{3}T_1$	\	\
2	$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2})$	$S_2 = \frac{4}{3}T_4 - \frac{1}{3}T_2$	$C_1 = \frac{16}{15}S_2 - \frac{1}{15}S_1$	\
3	$T_8 = \frac{1}{2}T_4 + \frac{1}{8}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1/2})$	$S_3 = \frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4$	$C_2 = \frac{16}{15}S_4 - \frac{1}{15}S_2$	$R_1 = \frac{64}{63}C_2 - \frac{1}{63}C_1$

分别计算可得

k	T_{2^k}	S_{2^k}	C_{2^k}	R_{2^k}
0	0.920735492	\	\	\
1	0.939793285	0.946145882	\	\
2	0.944513520	0.946086932	0.946083002	\
3	0.945690864	0.94608331	0.946083070	0.946083071

§5 Gauss 型求积公式

定义 2. 采用 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 估计的时候, 若存在 $n+1$ 个节点 $x_i \in [a,b]$ 及求积系数 A_i, 使得求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度, 则称节点 x_i 为高斯点, A_i 为高斯系数, 求积公式为高斯 (Gauss) 求积公式.

注. (1)Gauss 求积公式仍然是插值型求积公式 (2)Gauss 系数可通过 Gauss 点和 Lagrange 基函数得到.

下面看一个例子.

例 6. 试确定 x_0 , x_1 以及系数 ω_0, ω_1, 导出两点 Gauss 求积公式.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \omega_0 f(x_0) + \omega_1 f(x_1)$$

将 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 代入有 $\begin{cases} \omega_0 + \omega_1 = \int_{-1}^1 1\mathrm{d}x = 2 \\ \omega_0 x_0 + \omega_1 x_1 = \int_{-1}^1 x\mathrm{d}x = 0 \\ \omega_0 x_0^2 + \omega_1 x_1^2 = \int_{-1}^1 x^2\mathrm{d}x = 2/3 \\ \omega_0 x_0^3 + \omega_1 x_1^3 = \int_{-1}^1 x^3\mathrm{d}x = 0 \end{cases}$, 使其精确成立得 $\begin{cases} \omega_0 = \omega_1 = 1 \\ x_0 = -x_1 = \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{cases}$. 这是因为对称性. 因此, $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i) = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$.

类似可得到, 在区间 $[-1,1]$ 上, Gauss 型求积公式如 $\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i) = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})}$.

例 7. 用两点 Gauss 求积公式计算 $I = \int_0^1 \frac{\sin(x)}{x}\mathrm{d}x$.

令 $x = (t+1)/2$, 则 $t \in [-1,1]$. 两点公式记为 $I \approx \frac{\sin\left(\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}+1\right)/2\right)}{\frac{-1}{\sqrt{3}}+1} + \frac{\sin\left(\left(\frac{1}{\sqrt{3}}+1\right)/2\right)}{\frac{1}{\sqrt{3}}+1} = 0.9460411$.