第四章

数 值 积 分

—— **基本概念**

—— **Newton-Cotes 公式**

内容提要

- **数值积分**
  - **基本概念**
  - **Newton-Cotes 求积公式**
  - **复合求积公式**
  - **Romberg 求积公式**
  - **Gauss 求积公式**
- **数值微分**

本讲内容

- 数值积分基本概念
  - 为什么要数值积分
  - 数值积分基本思想
  - 代数精度
  - 插值型求积公式
  - 收敛性与稳定性
- Newton-Cotes 公式
  - 公式介绍，代数精度
  - 余项表达式

数值积分

$$\boxed{I(f)=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x}$$

- 微积分基本公式：$\boxed{\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b)-F(a)}$
- 但是在许多实际计算问题中

(1) $F(x)$ 表达式较复杂时，计算较困难。如 $f(x)=\dfrac{1}{1+x^6}$

(2) $F(x)$ 难求！甚至有时不能用初等函数表示。

如 $f(x)=\dfrac{1}{x}\sin x,\quad e^{-x^2}$

(3) $f(x)$ 表达式未知，只有通过测量或实验得来的数据表

几个简单公式

demo_4_0.m

基本思想

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = (b-a)f(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

- **矩形公式**

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(a)$$ （左矩形公式，左点法）

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(b)$$ （右矩形公式，右点法）

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$ （中矩形公式，中点法）

- **梯形公式**

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{2}(b-a)\left[f(a)+f(b)\right]$$

- **抛物线公式**（Simpson公式）

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{6}(b-a)\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

数值积分一般公式

一般地，用 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的一些离散点

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$$

上的函数值的加权平均作为 $f(\xi)$ 的近似值，可得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \underbrace{A_i}_{\text{求积系数}} f(\underbrace{x_i}_{\text{求积节点}}) \longrightarrow \boxed{\text{机械求积公式}}$$

- 将定积分计算转化成被积函数的**函数值**的计算
- 无需求原函数，易于计算机实现

注：求积公式并不局限于机械求积公式!

代数精度

定义： 如果对于所有次数不超过 m 的多项式 $f(x)$，求积公式都精确成立，但对次数为 $m+1$ 的多项式不精确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度

- **代数精度的验证方法**
  - 将 $f(x) = 1,\ x,\ x^2, \ldots,\ x^m$ 依次代入，公式精确成立;
  - 将 $f(x) = x^{m+1}$ 代入，公式不精确成立。

举例

例： 试确定 A_i，使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度

$$I(f) \triangleq \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \triangleq I_n(x)$$

解： 依次将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^n$ 代入求积公式，使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + \cdots + A_n x_n = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 + \cdots + A_n x_n^2 = \dfrac{1}{3}(b^3 - a^3) \\ \cdots \quad \cdots \\ A_0 x_0^n + A_1 x_1^n + \cdots + A_n x_n^n = \dfrac{1}{n+1}(b^{n+1} - a^{n+1}) \end{cases} \Rightarrow$$

存在唯一解：

$$A_0^*,\ A_1^*,\ \ldots,\ A_n^*$$

所以求积公式为：

$$\boxed{\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i^* f(x_i)}$$

具有至少 n 次代数精度

举例

例： 试确定系数 A_i，使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度，并求出此求积公式的代数精度。

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(-1) + A_1 f(0) + A_2 f(1)$$

解：将 $f(x)=1, x, x^2$ 代入求积公式，使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = (b-a)/1 = 2 \\ -A_0 + A_2 = (b^2-a^2)/2 = 0 \\ A_0 + A_2 = (b^3-a^3)/3 = 2/3 \end{cases}$$

解得 $A_0=1/3$，$A_1=4/3$，$A_2=1/3$。所以求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}\left[f(-1)+4f(0)+f(1)\right]$$

将 $f(x)=x^3$ 代入可得：公式左边=0，公式右边=0，公式精确成立。

将 $f(x)=x^4$ 代入可得：公式左边=2/5，公式右边=2/3，公式不精确成立。

所以此求积公式具有 3 次代数精度。

举例

例：(教材第100页，非机械求积公式) 试确定下面求积公式中的系数，使其具有尽可能高的代数精度。

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + B_0 f'(0)$$

解：将 $f(x)=1, x, x^2$ 代入求积公式，使其精确成立，可得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 1 \\ A_1 + B_0 = 0.5 \\ A_1 = 1/3 \end{cases}$$

解得 $A_0=2/3$，$A_1 = 1/3$，$B_0=1/6$。所以求积公式为

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{2}{3} f(0) + \frac{1}{3} f(1) + \frac{1}{6} f'(0)$$

将 $f(x)=x^3$ 代入可得，公式左边=1/4，公式右边=1/3，公式不精确成立。所以该求积公式具有 2 次代数精度。

代数精度

- 可以验证：
  - 左矩形公式 和 右矩形公式 具有 零次 代数精度
  - 中矩形公式 和 梯形公式 具有 一次 代数精度

性质： 任意具有 $m\ (\geq 0)$ 次代数精度的机械求积公式一定满足

$$\sum_{i=0}^{n} A_i = A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b - a$$

练习： 抛物线公式 具有 几次 代数精度？

插值型求积公式

设求积节点为：$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$

若 $f(x_i)$ 已知，则可做 n 次多项式插值：$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x \equiv \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

其中 $A_i = \int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x$

余项：$R[f] = \int_a^b \big(f(x) - L_n(x)\big)\,\mathrm{d}x = \int_a^b R_n(x)\,\mathrm{d}x$

其中 $R_n(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

插值型求积公式

当 $f(x)=1, x, x^2, \ldots, x^n$ 时，有 $R_n(x)\equiv 0 \Longrightarrow R[f]=0$

即公式精确成立

性质： 插值型求积公式具有至少 n 次代数精度

定理： 下面的求积公式具有至少 n 次代数精度的充要条件是该公式是插值型的

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

当机械求积公式具有尽可能高的代数精度时，它总是插值型的

插值型求积公式是机械求积公式中最好的求积公式

求积公式的收敛性

设求积节点为：$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，令 $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$

定义： 如果求积公式 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 满足

$$\lim_{h\to 0}\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \qquad \boxed{h = \max_{1\le i\le n}\Delta x_i}$$

则称该求积公式是 **收敛的**。

求积公式的稳定性

定义： 对 $\forall \varepsilon > 0$，若存在 $\delta > 0$，使得当 $\left|\tilde{f}_i - f(x_i)\right| \le \delta$ $(i = 0, 1, \dots, n)$ 时，有

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

则称该求积公式是 **稳定的**。

定理： 若 $A_i > 0$，$i = 0, 1, \dots, n$，则下面的求积公式是稳定的

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

Newton-Cotes 公式

基于**等分节点**的插值型求积公式就称为 **Newton-Cotes 公式**

- 积分区间：$[a,\ b]$
- 求积节点：$x_i = a + i \times h$

$$\boxed{h = \frac{b-a}{n}}$$

- 求积公式：

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)}$$

$$C_i^{(n)} = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_i^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{b-a}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{t-k}{i-k}\,\mathrm{d}t$$

$$\boxed{x = a + th}$$

$$= \frac{1}{n}\cdot\frac{(-1)^{n-i}}{i!\,(n-i)!}\int_0^n \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n}(t-k)\,\mathrm{d}t$$

$\boxed{\text{Cotes 系数}}$

Newton-Cotes 公式

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

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

梯形公式

代数精度 $=1$

$n=2$: $C_0^{(2)}=\frac{1}{6}$, $C_1^{(2)}=\frac{2}{3}$, $C_2^{(2)}=\frac{1}{6}$

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\tfrac{a+b}{2})+f(b)] \equiv S}$$

抛物线公式
Simpson公式

代数精度 $=3$

$n=4$: **科特斯 (Cotes) 公式** 代数精度 $=5$

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] \equiv C}$$

$x_i=a+i\cdot h,\quad h=(b-a)/4$

- **Cotes 系数与被积函数 $f(x)$ 及积分区间 $[a, b]$ 无关**
- **Cotes 系数可通过查表获得**

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

N-C 公式

- Cotes 系数具有以下特点：

(1) $\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} = 1$

(2) $C_i^{(n)} = C_{n-i}^{(n)}$

(3) 当 $n \geq 8$ 时，出现负数，稳定性得不到保证。而且当 n 较大时，由于Runge现象，收敛性也无法保证。

一般不采用高阶的牛顿-科特斯求积公式

- 当 $n \leq 7$ 时，Newton-Cotes 公式是稳定的

demo_4_1.m

N-C 公式代数精度

定理： n 阶 Newton-Cotes 公式至少有 n 次代数精度

定理： 当 n 为偶数时，Newton-Cotes 公式至少有 $n+1$ 次代数精度

证：只要证明当 n 为偶数时，公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 精确成立。

$$R[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x=\int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

$\boxed{x=a+t\,h}$

$$=h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}(t-i)\,\mathrm{d}t$$

$\boxed{t=n-s}$

$$=(-1)^{n+1}h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}\big(s-(n-i)\big)\,\mathrm{d}s$$

$$=(-1)^{n+1}h^{n+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{n}\big(s-i\big)\,\mathrm{d}s$$

$\Rightarrow$ $R[f]=-R[f]$

即 $R[f]=0$

余项估计

例： 试确定梯形公式的余项表达式

$$R[f]=-\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\eta)$$

例： 试确定 Simpson 公式的余项表达式

$$R[f]=-\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\eta)$$