数值积分

定积分的计算可以使用牛顿-莱布尼茨公式计算，但是在实际生活中，往往会有被积函数用函数表格提供，或是原函数难以求解的情况，这种时候只能运用数值积分求积分的近似值

数值积分基本方法

数值积分的思路是在被积区间 $[a,b]$ 中取 $n+1$ 个点 $x_1,x_2,\dots,x_n$ ，利用被积函数在这些点的函数值的某种线性组合来作为待求的定积分，即

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

其中 x_k 称为积分结点，A_k 称为求积系数，积分公式的关键在于积分结点的选取和积分系数的确定，其中积分系数与被积函数无关，称为机械求积公式

矩形公式

用 $f(x)$ 的零次多项式 $y=L_0(x)=f(x_0)$ 近似代替 $f(x)$ ，得到的积分公式为

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &\approx \int_{x_0}^{x_1} f\left(x_0\right)dx \\ &= f\left(x_0\right)\left(x_1-x_0\right)\end{aligned}$$

称为左矩公式

同理可得到右矩公式

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &\approx \int_{x_0}^{x_1} f\left(x_1\right)dx \\ &= f\left(x_1\right)\left(x_1-x_0\right)\end{aligned}$$

和中矩公式

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &\approx \int_{x_0}^{x_1} f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)dx \\ &= f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)\left(x_1-x_0\right)\end{aligned}$$

梯形公式

若使用 $f(x)$ 的一次多项式 $L_1(x)$ 来近似代替 $f(x)$，则

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

得到梯形公式

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx &\approx \int_{x_0}^{x_1} L_1(x)dx \\ &= \frac{1}{2}(x_1 - x_0)\left[f(x_0) + f(x_1)\right]\end{aligned}$$

Simpson 公式

进一步推广，若使用 $f(x)$ 的二次插值多项式代替 $f(x)$，即可得到 Simpson 公式

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} L_2(x)dx$$

当 $x' = \frac{1}{2}(x_0 + x_1)$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{(x_1 - x_0)}{6}\left[f(x_0) + 4f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) + f(x_1)\right]$$

代数精度

若积分 $\int_a^b f(x)dx$ 的数值积分公式

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

对任意 $f(x) = x^i (i = 0, 1, \cdots, m)$ 多项式都精确成立，但对 $f(x) = x^{m+1}$ 不精确成立，则称该数值积分有 m 次代数精度

梯形公式的代数精度为 1

Simpson 公式的代数精度为 3

矩形公式的代数精度为 0

插值求积法

利用插值多项式近似 $f(x)$，如在 $[a, b]$ 上取 $a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$，做 $f(x)$ 的 n

次多项式 $L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f\left(x_k\right) l_k(x)$，则可得到

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

其中 $\int_a^b l_k(x)dx$ 即为求积系数 A_k，即

$$A_k=\int_a^b \prod_{k\neq j} \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}dx$$

而插值求积法余项即为

$$\begin{aligned} R[f] &= \int_a^b R_n(x)dx \\ &= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}\left(\xi_x\right)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n}\left(x-x_k\right) dx \end{aligned}$$

可得

$$\begin{aligned} |R[f]| &\leqslant \int_a^b \left| \frac{f^{(n+1)}\left(\xi_x\right)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n}\left(x-x_k\right) \right| dx \\ &\leqslant \frac{M}{(n+1)!} \int_a^b \left|\omega_{n+1}(x)\right| dx \end{aligned}$$

其中 $M=\max_{x\in[a,b]} \left|f^{(n+1)}(x)\right|$

一个 $N+1$ 个节点的插值求积公式至少有 N 次代数精度，因为对于次数不超过 N 的多项式，余项为 0

Newton-Cotes 公式

Newton-Cotes 公式

Newton-Cotes 公式是在等距节点下使用 Lagrange 插值多项式建立的求积公式

设节点 $x_k=a+kh, k=0,1,\ldots,n$，其中 $h=\frac{b-a}{n}$ 为步长

则 Lagrange 插值多项式和余项为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f\left(x_k\right) l_k(x) \quad R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

其中

$$l_k(x)=\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\neq k}}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\quad \xi\in[a,b]\quad \omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

而 $f(x)=L_n(x)+R_n(x)$，故

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b\left[L_n(x)+R_n(x)\right]dx$$

则 n 阶 Newton-Cotes 求积公式为

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k f\left(x_k\right)$$

其中

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

而余项为

$$R\left(I_n\right)=\int_a^b R_n(x)dx$$

注意到节点等距，假设 $x=a+th$，可知

$$\begin{aligned}A_k&=\frac{h\cdot(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\neq k}}(t-j)dt\\&=(b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\neq k}}(t-j)dt\end{aligned}$$

记

$$C_k^{(n)}=\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\neq k}}(t-j)dt$$

为 Cotes 系数，Newton-Cotes 公式可化为

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

使用 n 次 Lagrange 的 Newton-Cotes 公式至少有 n 次代数精度，当 n 为偶数时至少有 $n+1$ 次代数精度

低阶 Newton-Cotes 公式及其余项

一般 $n=1,2,4$ 是最常用也最重要的三个公式，称为低阶公式

梯形公式

$n=1, x_0=a, x_1=b, h=b-a$，此时的 Newton-Cotes 公式为

$$T=I_1(f)=\frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$$

即为梯形公式，也称为两点公式，其余项为

$$R(T)=R\left(I_1\right)=\int_a^b R_1(x)dx=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

可得

$$|R(T)|\leqslant\frac{(b-a)^3}{12}M_2\qquad M_2=\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|$$

有 1 次代数精度

Simpson 公式

取 $n=2$，有 $x_0=a, x_1=\frac{b+a}{2}, x_2=b, h=\frac{b-a}{2}$，得到的即是 Simpson 公式

$$S=I_2(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

也成为三点公式或抛物线公式，其余项为

$$R(S)=R\left(I_2\right)=\int_a^b R_2(x)dx=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4f^{(4)}(\eta)$$

有 3 次代数精度

Cotes 公式

取 $n=4, h=\frac{b-a}{4}$，得到 Cotes 公式

$$C=\frac{b-a}{90}[7f\left(x_0\right)+32f\left(x_1\right)+12f\left(x_2\right)+32f\left(x_3\right)+7f\left(x_4\right)]$$

也成为五点公式，其余项为

$$R(C)=R\left(I_4\right)=\int_a^b R_4(x)dx=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$$

有 5 次代数精度

复化求积公式

高次插值有 Runge 现象，故采用低次分段插值，即使用分段低次合成的 Newton-Cotes 复化求积公式

复化梯形公式

将整个求积区间分为 n 份，共取 $n+1$ 个节点，$x_i=a+ih$ ，在每个区间 $[x_{k-1},x_k]$ 上应用梯形公式，即

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

故可得整个区间的积分为

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

记为

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

而在每个区间上余项为

$$-\frac{h^3}{12}f''\left(\xi_k\right)$$

故总的余项为

$$R[f]=\sum_{k=1}^n\left[-\frac{h^3}{12}f''\left(\xi_k\right)\right]=-\frac{h^2}{12}(b-a)\frac{\sum_{k=1}^n f''\left(\xi_k\right)}{n}$$

由介值定理得

$$R[f]=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)$$

复化 Simpson 公式

将整个求积区间分为 n 份，共取 $n+1$ 个节点，$x_i = a + ih$，在每个区间 $[x_{k-1}, x_k]$ 上应用 Simpson 公式，设区间 $[x_{k-1}, x_k]$ 的中点为 $x_{k+\frac{1}{2}}$，则有

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

整个区间的积分为

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

记为

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

同理可得余项为

$$R[f] = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left(f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right)$$

> 为方便编程，有另一种记法，记 $n' = 2n, h' = \frac{b-a}{n'} = \frac{h}{2}, x_k = a + kh'$，则有
>
> $$S_n = \frac{h'}{3}\left[f(a) + 4\sum_{\text{odd } k} f\left(x_k\right) + 2\sum_{\text{even } k} f\left(x_k\right) + f(b)\right]$$

复化 Cotes 公式

将整个求积区间分为 n 份，共取 $n+1$ 个节点，$x_i = a + ih$，在每个区间 $[x_{k-1}, x_k]$ 上应用 Cotes 公式，设区间 $[x_{k-1}, x_k]$ 的四等分点为 $x_{k+\frac{1}{4}}, x_{k+\frac{1}{2}}, x_{k+\frac{3}{4}}$，则复化 Cotes 公式为

$$\begin{aligned} C_n = &\frac{h}{90}[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{4}}\right) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) \\ &+ 32\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{3}{4}}\right) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_k\right) + 7f(b)] \end{aligned}$$

其余项为

$$R[f] = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi)$$

复化求积公式的收敛阶

考虑复化梯形的余项

$$I-T_n=-\frac{h^2}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

有

$$\frac{I-T_n}{h^2}=-\frac{1}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''\left(\xi_k\right)\cdot h]$$

当 n 充分大，$h\to 0$ 时，有

$$-\frac{1}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''\left(\xi_k\right)\cdot h]\to-\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx=-\frac{1}{12}[f'(b)-f'(a)]$$

即

$$\frac{I-T_n}{h^2}\to-\frac{1}{12}[f'(b)-f'(a)]$$

同理对复化 Simpson 公式和复化 Cotes 公式有

$$\begin{aligned}\frac{I-S_n}{h^4}&\to-\frac{1}{180\times 2^4}\left[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right]\\\frac{I-C_n}{h^6}&\to-\frac{2}{945\times 4^6}\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right]\end{aligned}$$

定义若一个积分公式的误差满足

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-I_n}{h^p}=C<\infty$$

并且 $C\neq 0$ 则称该公式是 p 阶收敛的。显然，复化梯形法是 2 阶收敛，复化 Simpson 是 4 阶收敛，而复化 Cotes 是 6 阶收敛，并且当 h 很小时有误差估计式

$$\begin{aligned}\frac{I-T_n}{h^2}&\approx-\frac{1}{12}[f'(b)-f'(a)]\\\frac{I-S_n}{h^4}&\approx-\frac{1}{180\times 2^4}\left[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right]\\\frac{I-C_n}{h^6}&\approx-\frac{2}{945\times 4^6}\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right]\end{aligned}$$

> 当步长减半时，$R(T),R(S),R(C)$ 分别降至原有误差的 $\frac{1}{4},\frac{1}{16},\frac{1}{64}$

变步长求积公式及其加速收敛技巧

给定精度 ε，如何确定划分的区间数 n？实际计算中常采用变步长的计算方案，即在步长逐次分半的过程中，反复利用复化求积公式计算，直至所求积分值满足精度要求为止。

复化梯形公式递推

考虑将区间 n 等分，共有 $n+1$ 个分点，此时的复化梯形公式为

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

此时将区间二分，分点增加至 $2n+1$ 个，此时复化梯形积分为

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

比较 T_n, T_{2n}，可得

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

且有

$$R_{2n}[f] \approx \frac{1}{4}R_n[f]$$

即

$$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4}$$

故

$$I - T_{2n} = R_{2n}[f] \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$$

Romberg 积分

根据

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

可得 T_{2n} 的误差大约为 $\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$，将其作为 T_{2n} 的一种补偿，即

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

实际上容易验证

$$S_n=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n$$

同理，可导出加速公式

$$\begin{aligned}\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}&=S_n\\\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}&=C_n\\\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}&=R_n\end{aligned}$$

最终得到 Romberg 值 R_n，Romberg 算法即是

- 首先使用梯形公式算出 T_1
- 使用复化梯形公式的递推公式求出 $T_2,T_4,T_8,\dots$
- 根据求出的梯形公式值使用加速公式逐步求出 Simpson 值，Cotes 值，最终得到 Romberg 值

事实上这个加速过程可以一直继续下去，理论依据即为 Richardson 外推加速法

Richardson 逐次外推加速法

是 Romberg 算法的一般化

$$\begin{aligned}T_0^{(0)}&=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]\\T_0^{(k)}&=\frac{1}{2}\left[T_0^{(k-1)}+\frac{b-a}{2^{k-1}}\sum_{i=0}^{2^{k-1}}f\left(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^k}\right)\right],\quad(k=1,2,\cdots)\\T_m^{(k)}&=\frac{4^mT_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1}\qquad(m=1,2,\dots,k;\quad k=1,2,\dots)\end{aligned}$$

不难看出求 $T_0^{(1)},T_0^{(2)},\dots T_0^{(k)}$ 即为复化梯形公式的递推过程，而求 $T_1^{(k)},T_2^{(k)},\dots T_m^{(k)}$ 的过程即为加速过程的一般化，只要 $\left|T_m^{(0)}-T_{m-1}^{(0)}\right|<\varepsilon$ 即可停止

T_m 的误差为 $O(h^{2(m+1)})$