回顾

第7章 数值积分

- 7.1 数值积分概述
- 7.2 牛顿-柯特斯求积公式
- 7.3 复化求积公式
- 7.4 龙贝格求积公式
- 7.5 高斯型求积公式

7.2 牛顿-柯特斯求积公式

牛顿-柯特斯(Newton-cotes)求积公式



(1)梯形求积公式 n=1, h=b-a

$$Q[f] = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)], R[f] = -\frac{h^3}{12}f''(\xi)$$

(2)Simpson求积公式 n = 2, h = (b - a)/2

$$Q[f] = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \qquad R[f] = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta)$$

(3) Simpson (辛普森) $\frac{3}{8}$ 求积公式 $n = 3, h = \frac{b-a}{3}$

$$Q[f] = \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \quad R[f] = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\eta)$$

(4)Cotes求积公式 n = 4, h = (b - a)/4

$$Q[f] = \frac{2h}{45} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

$$R[f] = -\frac{8h^7}{945}f^{(6)}(\eta)$$

7.2 牛顿-柯特斯求积公式



代数精度

梯形公式的代数精度为1 Simpon求积公式的代数精度为3 Simpon³求积公式的代数精度为3 Cotes求积公式的代数精度为5

7.3 复化求积公式

回顾

由梯形、辛普森和柯特斯求积公式余项可知,随着求积节点数的增多,对应公式的精度也会相应提高。但由于n≥8时的牛顿——柯特斯求积公式开始出现负值的柯特斯系数。根据误差理论的分析研究,当积分公式出现负系数时,可能导致舍入误差增大,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,提高积分计算精度的常用两种方法

✓用 复化公式 ✓用 非等距节点

□ 复化求积公式: 将积分区间分割成多个小区间,然后在每个小区间上使用低次牛顿一科特斯求积公式。然后把所有小区间上的计算结果加起来得到整个区间上的求积公式。

7.3.1 复化梯形公式及其误差分析和算法实现

□ 定步长: 将[a,b] 分成n 等分[x_i , x_{i+1}], 其中节点:

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

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

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

累加求和可得复化梯形公式

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



同样的,若在每个小区间内采用Simpson公式,可得

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

称为复化辛普森公式。

7.3.3 步长的选取

利用复化梯形公式、复化Simpson公式等计算定积分时,对指 定的误差界,如何选取步长力,使之能够达到计算精度?





解决办法:采用 变步长算法

通常采取将区间不断对分的方法,即取 $n=2^k$,反复使用复化求积 公式,直到相邻两次计算结果之差的绝对值小于指定的精度为止。

▶基本思想: | 将积分区间逐次分半

▶终止法则: | 前后两次近似值的误差小于已知精度

$$|I_{2n}-I_n|<\varepsilon$$

变步长梯形法

サ长折半:
$$[x_i, x_{i+1/2}]$$
, $[x_{i+1/2}, x_{i+1}]$

$$T_{2n} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{4} \Big[\Big(f(x_i) + f(x_{i+1/2}) \Big) + \Big(f(x_{i+1/2}) + f(x_{i+1}) \Big) \Big]$$

$$= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{4} \Big[f(x_i) + 2f(x_{i+1/2}) + f(x_{i+1}) \Big]$$

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+1/2})$$
 $n = 2^0, 2^1, 2^2, \cdots$

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

终止条件:

回顾

由复化梯形公式的余项知

$$I - T_n = -\frac{b-a}{12} (\frac{b-a}{n})^2 f''(\eta_1)$$

$$I - T_{2n} = -\frac{b-a}{12} (\frac{b-a}{2n})^2 f''(\eta_2)$$

f''(x) 变化不大时

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

由此得到近似关系式
$$I \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1} (T_{2n} - T_n)$$

误差控制条件
$$\left|\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)\right|<\varepsilon$$

即 当
$$T_{2n}$$
 - T_n < ε , 有 $I(f)$ - T_{2n} < ε

这里构成了一个自 动选步长的梯形积 分公式

上述条件满足,程序终止;否则,继续分半计算。

7.3.3 步长的选取

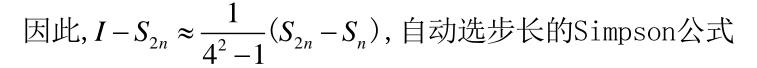
类似于梯形公式,可以得到自动选步长的Simpson公式

$$I - S_n = -\frac{b - a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta)$$

$$I - S_{2n} = -\frac{b - a}{2880} \left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta')$$

假定 $f^{(4)}(x)$ 在[a,b]上变化不大时,可得

$$\frac{I - S_n}{I - S_{2n}} \approx 4^2$$



同理,
$$I - C_{2n} \approx \frac{1}{4^3 - 1} (C_{2n} - C_n)$$
, 自动选步长的Cotes公式



7.4 龙贝格法求积公式

获得高精度积分的方法

- (1)减少步长
- (2)使用高精度公式 缺点是函数计算量较大

自动选步长梯形求积法算法简单,但精度较差, 收敛速度较慢,但可以利用梯形法算法简单的优点, 形成一个新算法,这就是龙贝格求积公式,即考虑使 用低精度公式,计算高精度积分的方法。

龙贝格公式又称逐次分半加速法。

7.4 龙贝格法求积公式

根据自动选步长的梯形积分公式,积分区间分成n等份和2n等份时的误差估计式

$$I - T_n = -\frac{b - a}{12} \left(\frac{b - a}{n}\right)^2 f''(\eta_1)$$

$$I - T_{2n} = -\frac{b - a}{12} \left(\frac{b - a}{2n}\right)^2 f''(\eta_2)$$

$$I - T_{2n} = -\frac{b - a}{12} \left(\frac{b - a}{2n}\right)^2 f''(\eta_2)$$

可得
$$I \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)$$
 即 $I \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$

所以积分值 T_n 的误差大致等于 $(T_{2n}-T_n)/3$,如果用 $(T_{2n}-T_n)/3$ 对 T_{2n} 进行修正时, $(T_{2n}-T_n)/3$ 与 T_{2n} 之和比 T_{2n} 更接近积分真值,所以可以将 $(T_{2n}-T_n)/3$ 看成是对 T_{2n} 误差的一种补偿,因此,可得到具有更好效果的式子:

$$\overline{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$
 (7.4)

考查 \overline{T} 与n等分辛普森公式 S_n 之间的关系, $\overline{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$ 将复化梯形公式 $T_n = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=0}^{n-1}f(x_k) + f(b)]$ 代入式(7.4) 得

$$I(f) = \frac{4T_{2n} - T_n}{4 - 1} = \frac{1}{3} \left[4 \left(\frac{1}{2} T_n + \frac{h}{2} \sum_{k=1}^n f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) \right) - T_n \right]$$

$$= \frac{1}{3} \left[T_n + 2h \sum_{k=1}^n f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) \right]$$

$$= \frac{1}{3} \left[\frac{h}{2} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) \right) + 2h \sum_{k=1}^n f\left(\frac{x_{k-1} + x_k}{2}\right) \right]$$

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

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

上述公式说明:

非常重要

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S_n。

7.4 龙贝格法求积公式

可见,使用复化梯形公式通过适当的组合,可以得到精度更高的Simpson公式,其代数精度可以由1提高到3

同理, 由复化Simpson公式可以得到

$$I \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2 - 1} (S_{2n} - S_n) = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2 - 1} = C_n$$

即,可以得到计算精度为 $O(h^6)$,代数精度为5的Cotes公式

同理, 由复化Cotes公式可以得到

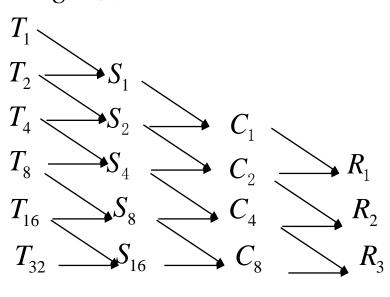
$$I \approx C_{2n} + \frac{1}{4^3 - 1} (C_{2n} - C_n) \neq \frac{4^3 C_{2n} - C_n}{4^3 - 1} = R_n$$

即,可以得到计算精度为 $O(h^8)$,代数精度为7的Romberg公式

Romberg计算图

7.4 龙贝格法求积公式

非常非常重要



设 ε 为给定的误差限,当 $|R_{2^{k+1}}-R_{2^k}|<\varepsilon$ 时,取 $R_{2^{k+1}}$ 为积分的近似值。这样的一个计算过程称为Romberg 积分方法。

• • •

Romberg 积分 方法表格形式

k	区间等分 数n=2 ^k	梯形序 列T* ₂	辛普森 序列S ^{k-1} 2	柯特斯 序列C ^{k-2} ₂	龙贝格 序 列R ^{k-3} 2
0	1	T1			
1	2	T2	S1		
2	4	T4	S2	C1	
3	8	Т8	S4	C2	R1
4	16	T16	S8	C4	R2
5	32	T32	S 16	C8	R4

龙贝格法求积公式的程序实现

J	R(J, 0) 梯形公式	R(J, 1) 辛普森公式	R(J, 2) 布尔公式	R(J, 3) 第3次改进	R(J, 4) 第4次改进
0	R(0, 0)				
1	D(1 0)	$R(1,1)_{-}$			
1	R(1,0)	K(1, 1)			
2	R(1,0) $R(2,0)$	R(1,1) $R(2,1)$	R(2,2)		
2 3			R(2,2) $R(3,2)$	R(3,3)	

程序 7.4(龙贝格积分) 生成 $J \ge K$ 的通近表 R(J,K), 并以 R(J+1,J+1) 为最终解来通近积分

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx R(J, J)$$

逼近 R(J,K)存在于一个特别的下三角矩阵中,第 0 列元素 R(J,0) 用基于 2^J 个 [a,b]子 区间的连续梯形方法计算,然后利用龙贝格公式计算 R(J,K)。当 $1 \leq K \leq J$ 时,第 J 行的元素为

$$R(J, K) = R(J, K - 1) + \frac{R(J, K - 1) - R(J - 1, K - 1)}{4^{K} - 1}$$

当|R(J,J)-R(J+1,J+1)| < to1 时,程序在第(J+1)行结束。

Matlab程序: Romberg.m

```
function [R,quad,err,h]=Romberg(f,a,b,n,tol)
%Input
         - f is the integrand
         - a and b are upper and lower limits of integration
%
         - n is the maximum number of rows in the table
%
         - tol is the tolerance
%
%Output - R is the Romberg table
%
        - quad is the quadrature value
                                                  while((err>tol)&(J<n))|(J<4)
        - err is the error estimate
%
                                                    J=J+1;
%
        - h is the smallest step size used
                                                    h=h/2;
% f=@(x) 20.*x.^3+\sin(x)-6.*x-3;
                                                    s=0;
% a=1; b=3; n=5; tol=1e-6;
                                                    for p=1:M
% [R,quad,err,h]=Romberg(f,a,b,n,tol)
                                                     x=a+h*(2*p-1);
                                                     s=s+f(x);
M=1;
                                                    end
h=b-a;
                                                    R(J+1,1)=R(J,1)/2+h*s:
err=1;
                                                    M=2*M:
J=0;
                                                    for K=1:J
R=zeros(4,4);
                                                     R(J+1,K+1)=R(J+1,K)+(R(J+1,K)-R(J,K))/(4^K-1);
R(1,1)=h*(f(a)+f(b))/2;
                                                    end
                                                    err=abs(R(J,J)-R(J+1,K+1));
                                                  end
                                                  quad=R(J+1,J+1);
```

作业7.3

5. 对 J=2 的情况,证明关系式 B(J)=(16S(J)-S(J-1))/15。利用信息:

$$S(1) = \frac{2h}{3}(f_0 + 4f_2 + f_4)$$

和

$$S(2) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4)$$

算法与程序

3. 正态概率密度函数为 $f(t) = (1/\sqrt{2\pi})e^{-t^2n}$, 而累积分布为由积分 $\Phi(x) = \frac{1}{2} + (1/\sqrt{2\pi})e^{-t^2n}$ dt 定义的函数。计算有 8 位有效数字的 $\Phi(0.5)$, $\Phi(1.0)$, $\Phi(1.5)$, $\Phi(2.0)$, $\Phi(2.5)$, $\Phi(3.0)$, $\Phi(3.5)$ 和 $\Phi(4.0)$ 的值。

7.5 高斯型求积公式

非常重要

7.5.1、Gauss积分问题的提法

积分公式的一般形式:

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

- ▶前述Newton—Cotes求积公式中求积节点是取等距节点,求积系数计算方便,但代数精度要受到限制;
- ▶而Gauss积分问题是指:
- ①当求积节点个数确定后,上述一般形式的积分公式所具有的最高代数精度是多少?
- ②具有最高代数精度的求积公式中求积节点如何选取?

高斯 (Gauss) 求积公式

非常重要

定义7.3 若存在 n+1 个节点 $x_i \in [a, b]$ 及求积系数 ω_i ,使得下面的求积公式具有 2n+1 次代数精度,则称节点 x_i 为高斯点, ω_i 为高斯系数,求积公式为高斯(Gauss)求积公式。

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_{i} f(x_{i}) \tag{*}$$

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.

高斯 (Gauss) 求积公式

定理7.7 用 n+1 个点 x_0, x_1, \cdots, x_n 构造的插值型求积公式

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

的代数精度不超过 2n+1。

即Gauss公式是插值型求积公式中代数精度最高的。

证明:略。

例7.10: 试确定 x_0 , x_1 以及系数 ω_0 , ω_1 , 导出两点Gauss求积

公式:

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

非常重要

注: 两个节点 (n=1) , 代数精度为3

解:将 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 代入,使其精确成立得

$$\begin{cases} \omega_{0} + \omega_{1} = \int_{-1}^{1} 1 \, dx = 2 \\ \omega_{0} x_{0} + \omega_{1} x_{1} = \int_{-1}^{1} x \, dx = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \omega_{0} + \omega_{1} x_{1} = \int_{-1}^{1} x \, dx = 0 \\ \omega_{0} x_{0}^{2} + \omega_{1} x_{1}^{2} = \int_{-1}^{1} x^{2} \, dx = 2/3 \\ \omega_{0} x_{0}^{3} + \omega_{1} x_{1}^{3} = \int_{-1}^{1} x^{3} \, dx = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \omega_{0} + \omega_{1} = 1 \\ x_{0} = -x_{1} = \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

因此,

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_{i} f(x_{i}) = f\left(-1/\sqrt{3}\right) + f\left(1/\sqrt{3}\right)$$

同理: 区间[-1,1]上几个简单的Gauss 公式

非常非常重要

$$n = 1: \quad P_{n}(x) = 2x, \quad x_{0} = 0, \quad \omega_{0} = 2$$

$$\int_{-1}^{1} f(x) \, dx \approx \sum_{i=0}^{n} \omega_{i} f(x_{i}) = 2f(0)$$

$$n = 2$$
: $P_n(x) = 12x^2 - 4$, $x_0 = -1/\sqrt{3}$, $x_1 = 1/\sqrt{3}$, $\omega_0 = \omega_1 = 1$

$$\int_{-1}^1 f(x) \, dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i) = f\left(-1/\sqrt{3}\right) + f\left(1/\sqrt{3}\right)$$
 两点Gauss公式

$$n = 3$$
: $P_n(x) = 120x^3 - 72x$, $x_0 = -\sqrt{3/5}$, $x_1 = 0$, $x_2 = \sqrt{3/5}$

$$\int_{-1}^{1} f(x) \, dx \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{15}/5\right) + \frac{8}{9} f\left(0\right) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{15}/5\right) \quad = 点 Gauss 公式$$

更多的区间[-1,1]上Gauss 公式

非常重要

当 n > 3 时,可用数值方法计算 $P_{n+1}(x)$ 的零点(三项递推)

n	节点个数	Gauss点	Gauss系数	代数精度
0	1	0	2	1
1	2	$\pm 1/\sqrt{3}$	1	3
2	3	$0\\\pm\sqrt{3/5}$	8/9 5/9	5
3	4	±0.8611363 ±0.3399810	0.3478548 0.6521452	7
4	5	±0.9061798 ±0.5384693 0.0000000	0.2369269 0.4786287 0.5688889	9
5	6	±0.93246951 ±0.66120939 ±0.23861919	0.17132449 0.36076157 0.46791393	11

下面讨论一般积分形式:

构造积分公式
$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k)$$
 具有2n+1次代数精度。

其中
求积节点
$$a \le x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n \le b$$

求积系数 ω_k $k=0,1,\dots,n$ 仅与求积节点有关

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

由代数精度定义, 当 $f(x)=1,x,\dots,x^{2n},x^{2n+1}$ 时, 求积公式

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^n \omega_k f(x_k)$$
 精确成立: $\sum_{k=0}^n \omega_k x_k^j = \int_a^b \rho(x) x^j dx$ $j = 0, 1, \dots, 2n+1$

$$\sum_{k=0}^{n} \omega_{k} x_{k}^{j} = \int_{a}^{b} \rho(x) x^{j} dx \quad j = 0, 1, \dots, 2n + 1$$

2n+2个未知数, 2n+2个方程的非线性方程组

定义7.4 如果一组节点 $\{x_0, x_1, \cdots, x_n\} \subseteq [a, b]$,使得上述插值型求积公式具有2n+1次代数精度,则称该组节点为Gauss点,相应的公式为Gauss型求积公式。

➤ Gauss求积公式的余项

$$R_n[f] = I - \sum_{k=0}^{n} \omega_k f(x_k) = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega_{n+1}^2(x) \rho(x) dx$$

证明略.

> Gauss求积公式的稳定性

定理7.8 Gauss型求积公式 $\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ 总是稳定的。证明: 略。

> Gauss求积公式的收敛性

定理7.9 设 $f \in C[a,b]$, Gauss型求积公式是收敛的。

证明: 略。

□ 例7.11: 用Gauss求积公式计算

$$I = \int_0^1 \frac{\sin(x)}{x} \, \mathrm{d}x$$

$$\Rightarrow x = (t+1)/2, \quad \emptyset, \quad t \in [-1, 1]$$

$$\int_0^1 \frac{\sin(x)}{x} dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{\sin((t+1)/2)}{(t+1)/2} dt = \int_{-1}^1 \frac{\sin((t+1)/2)}{t+1} dt$$

两点Gauss公式:
$$I \approx \frac{\sin\left(\left(\frac{-1}{\sqrt{3}} + 1\right)/2\right)}{\frac{-1}{\sqrt{3}} + 1} + \frac{\sin\left(\left(\frac{1}{\sqrt{3}} + 1\right)/2\right)}{\frac{1}{\sqrt{3}} + 1} = 0.9460411$$

三点Gauss公式:

$$I \approx \frac{1}{2} \left[\frac{5}{9} f \left(-\frac{1}{2} \frac{\sqrt{15}}{5} + \frac{1}{2} \right) + \frac{8}{9} f \left(\frac{1}{2} \right) + \frac{5}{9} f \left(\frac{1}{2} \frac{\sqrt{15}}{5} + \frac{1}{2} \right) \right]$$
$$= 0.9460831$$

精确值0.946083070...

Gauss公式的优缺点

□ Gauss求积公式的优点:

计算精度高;可计算无穷区间上的积分和奇异积分。

□ Gauss求积公式的缺点:

需计算Gauss点和Gauss系数;增加节点时需重新计算。

本章教学要求及重点难点

- •理解数值积分的基本思想、方法和理论
- •重点: 代数精度的概念
- 熟练掌握数值求积公式的代数精度的计算方法
- •掌握各类牛顿-柯特斯求积公式构造方法及误差分析
- •重点:复化梯形求积法和复化Simpson求积法的算法 设计思想
- •重点:龙贝格法求积公式的构造与误差分析
- •难点: 高斯型求积公式的构造与误差分析

课堂作业

用Romberg积分方法计算如下定积分

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1 + x^2} \, dx$$

要求精度 $\varepsilon < 10^{-4}$.