第六章 数值积分

数值积分的基本概念

- 数值积分的基本思想
- 代数精度
- 插值型求积公式

Newton-Cotes 求积公式

- 梯形公式、辛普森公式、一般的 Newton-Cotes 公式
- 复化积分公式：复化梯形公式、复化辛普森公式
- 区间逐次分半法

Romberg（龙贝格）积分

高斯型求积公式

数值积分的基本概念

数值积分的基本思想：

考察 $\int_a^b f(x)dx$，若其原函数为 $F(x)$，即 $F'(x)=f(x)$，则有 $I:=\int_a^b f(x)dx=F(b)-F(a)$。

困难：在可积函数中能够解析积分的函数相当少，而且即使可以解析积分，让机器模拟人的思维也比较麻烦。借助于数值方法离散化后计算积分的近似值，称为数值积分。

数值积分的基本概念

微积分中定积分的定义为： $\int_a^b f(x)dx=\lim\limits_{\substack{n\to\infty\\ \max\Delta x_k\to 0}}\sum_{k=1}^{n}\Delta x_k f(\xi_k)$，

可用 $\sum_{k=1}^{n}\Delta x_k f(x_k)$ 作为原积分的近似：$\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{k=1}^{n}\Delta x_k f(x_k)$。

进一步推广得到更一般的公式： $\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)=:I_n$，

其中，x_k 为求积节点，A_k 为求积系数，A_k 仅与 x_k 的选取有关，与 $f(x)$ 的具体形式无关。

代数精度

定义(代数精度)：若某个求积公式对次数 $\le m$ 的代数多项式都能精确成立，但对 $m+1$ 次多项式不一定精确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

例：$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)f(a)$ 左矩形公式，具 0 次代数精度；

$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)f(b)$ 右矩形公式，具 0 次代数精度；

$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)f(\frac{a+b}{2})$ 中矩形公式，具 1 次代数精度。

例：给定求积结点 $-h,0,h$,试确定系数 A_{-1},A_0,A_1,使

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)dx\approx A_{-1}f(-h)+A_0 f(0)+A_1 f(h)$$

具尽可能高代数精度,并指出代数精度是多少.

解：令公式对 $f=1,x,x^2$ 精确成立,则

$$\begin{cases}\int_{-2h}^{2h}1\cdot dx=A_{-1}+A_0+A_1\\ \int_{-2h}^{2h}x\cdot dx=-hA_{-1}+hA_1\\ \int_{-2h}^{2h}x^2\cdot dx=(-h)^2A_{-1}+h^2A_1\end{cases}$$

解得 $A_0=-\frac{4}{3}h \qquad A_{-1}=A_1=\frac{8}{3}h$

令 $f=x^3$, 左=右；令 $f=x^4$, 左 $\ne$ 右.

故代数精度为3.

插值型求积公式

插值型求积公式：

想法：给定函数 $f(x)$，若 $f(x)\approx g(x)$，且 $g(x)$ 积分比较好算，那么有

$$\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b g(x)dx。$$

若取 $g(x)$ 为 $f(x)$ 的插值多项式，则对应的求积公式称为插值型求积公式。

插值型求积公式

给定区间$[a,b]$，取插值节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，我们有

Lagrange 插值多项式 $L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)$。

因此，有 $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b L_n(x)dx=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\int_a^b l_k(x)dx$。

对应的**求积公式**为 $I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$，其中 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx$。

而对应的**误差**为

$$I-I_n=\int_a^b (f(x)-L_n(x))dx=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx$$

Newton-Cotes公式

当节点为等距节点时，对应的插值型求积公式称为 Newton-Cotes 公式。

梯形公式：最简单的 Newton-Cotes 公式

取$n=1$，节点为$x_0=a$，$x_1=b$。有$l_0(x)=\frac{b-x}{b-a}$，$l_1(x)=\frac{x-a}{b-a}$.

因此，

$$A_0=\int_a^b l_0(x)dx=\frac{1}{2}(b-a),$$

$$A_1=\int_a^b l_1(x)dx=\frac{1}{2}(b-a),$$

对应的求积公式为$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) =: T$.

梯形公式的误差

梯形公式的误差为:

$$E=I-T=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx$$

注意到对任意的$x\in[a,b]$，有$(x-a)(x-b)\le 0$，根据积分中值定理，

若$f''(x)\in C[a,b]$，有

$$E=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

辛普森公式

辛普森公式:

取$n=2$，节点为$x_0=a, x_1=\frac{a+b}{2}, x_2=b$。

节点x_0,x_1,x_2处基函数为

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},\quad l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\quad l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

对应的系数为

$$A_0=\int_a^b l_0(x)dx=\frac{b-a}{6},\quad A_1=\int_a^b l_1(x)dx=\frac{4(b-a)}{6},\quad A_2=\int_a^b l_2(x)dx=\frac{b-a}{6}.$$

对应的求积公式为$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)) =: S$.

辛普森公式的误差

思考：辛普森公式的代数精度为 3 次?

例：利用辛普森公式求$\int_a^b x^3dx$。

解：$S=\frac{b-a}{6}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b))=\frac{b^4-a^4}{4}$,

而精确积分有$\int_a^b x^3dx=\frac{1}{4}x^4|_a^b=\frac{1}{4}(b^4-a^4)$。

故辛普森公式有 3 次代数精度!

辛普森公式的误差

$$\begin{aligned}
E&=\int_a^b \frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx\\
&=\int_a^b f[x,a,\frac{a+b}{2},b](x-a)(x-\frac{a+b}{2})(x-b)dx\\
&=\int_a^b f[x,a,\frac{a+b}{2},b]d\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}\\
&=-\int_a^b \frac{\partial f[x,a,\frac{a+b}{2},b]}{\partial x}\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}dx+f[x,a,\frac{a+b}{2},b]\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}\Big|_a^b\\
&=-\int_a^b f[x,x,a,\frac{a+b}{2},b]\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}dx\\
&=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b \frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}dx\\
&=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)
\end{aligned}$$

一般的Newton-Cotes公式

$h=\dfrac{b-a}{n}$， $x_k=x_0+kh$， $k=0,1,\cdots,n$， $f(x)=L_n(x)+R_n(x)$。

$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} l_k(x)f(x_k)$，

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx=(b-a)\left[\frac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}dt\right]$$

记 $C_k^{(n)}=\left[\dfrac{1}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\dfrac{t-j}{k-j}dt\right]$

求积公式：$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$.

注：A_k 称为求积系数，$C_k^{(n)}$ 称为 Cotes 系数。

注：

$n=1$ **梯形公式**

$n=2$ **辛普森公式**

$n=3$ **第二辛普森公式**

$n=4$ **Cotes 公式**

Newton-Cotes 公式性质：

1. 求积系数和为 $(b-a)$，Cotes 系数和为 1；
2. 系数是对称的；
3. 当 $n\le 7$ 时，系数全部为正数；当 $n\ge 8$，系数有正有负。

Newton-Cotes公式

Newton-Cotes 公式误差公式：

n 为奇数 （节点个数为偶数）

$$\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b \prod_{k=0}^{n}(x-x_k)dx，代数精度为 n；$$

n 为偶数 （节点个数为奇数）

$$\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b x\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)dx，代数精度为 n+1。$$

Newton-Cotes公式

Newton-Cotes 公式的稳定性：

设 $I=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$， $\tilde{I}=\sum_{k=0}^{n} A_k(f(x_k)+\epsilon_k)$，

则 $|I-\tilde{I}|=|\sum_{k=0}^{n} A_k\epsilon_k|\le\sum_{k=0}^{n}|A_k||\epsilon_k|\le\epsilon\sum_{k=0}^{n}|A_k|$，这里假设了 $\max_k|\epsilon_k|=\epsilon$，

若求积系数全为正数，则 $|I-\tilde{I}|\le(b-a)\epsilon$， 公式是稳定的；

若求积系数有正有负，则 $|I-\tilde{I}|$ 控制不住，公式不稳定。

因此，高次积分至多用到 7 次。

复化积分公式

高次积分是不稳定的，因此实际当中我们并不用基于等距节点的高次 Newton-Cotes 积分公式。我们可以利用基于分片多项式插值的数值积分，从而获得高精度。

复化梯形公式

(1) 利用等距节点 $a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b$ 将 $[a,b]$ 分成 n 个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$；

(2) 在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上采用梯形公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx\approx\frac{h}{2}(f(x_k)+f(x_{k+1}))，其中\ h=\frac{b-a}{n}.$$

(3) 将所有区间相加

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

复化梯形公式

复化梯形公式又可以写为：

$$T_n=\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}(f(x_k)+f(x_{k+1}))=\frac{h}{2}(f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k))$$

复化梯形公式误差：

$$E_{T_n}=I-T_n=-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=-\frac{h^2}{12}\frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta)$$

19

复化辛普森公式

(1) 利用等距节点 $a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b$ 将 $[a,b]$ 分成 n 个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$；

(2) 在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上采用辛普森公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)dx\approx\frac{h}{6}(f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1}))，\text{其中 } h=\frac{b-a}{n}.$$

(3) 将所有区间相加

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

20

复化辛普森公式

复化辛普森公式误差：

$$E_{S_n}=I-S_n=-\frac{h^5}{2880}\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k)$$
$$=-\frac{h^4}{2880}\frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k)=-\frac{b-a}{2880}h^4f^{(4)}(\eta)$$

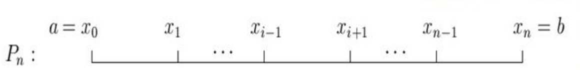
21

区间逐次分半法

我们首先来考虑复化梯形公式的递归算法：
具有 n 个子区间的复化梯形公式为

$$T_n=\frac{h_n}{2}(f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)),$$

其中 $h_n=\dfrac{b-a}{n},x_k=a+kh_n$.



22

我们通过在每个子区间 $[x_{k-1},x_k]$ 增加中点 $x_{k-1/2}$ 从而对 P_n 进行加密，得到更细的网格 P_{2n}。

P_{2n} 上的复化梯形公式可以写为

$$T_{2n}=\frac{T_n}{2}+\frac{h_n}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2}).$$

23

考察复化梯形公式误差：

$$I-T_n=-\frac{f''(\eta_1)}{12}(b-a)h^2,$$
$$I-T_{2n}=-\frac{f''(\eta_2)}{12}(b-a)(\frac{h}{2})^2\approx\frac{1}{4}(I-T_n),$$

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

可以用 $|T_{2n}-T_n|<\epsilon$ 作为迭代终止条件。

24

Romberg（龙贝格）积分

该递归算法法是由龙贝格最早发现的，因此以其命名。

从区间逐次分半法可以知道对梯形公式有 $I-T_{2n}\approx\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$

因此，我们可以将近似误差 $\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$ 加到 T_{2n} 以获得精度更高的公式：

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

问题：在剖分 P_{2n} 上，$\overline{T}_{2n}$ 与 S_n 什么关系？

可以证明：

$$S_n=\overline{T}_{2n}=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$$

$C_n=\overline{S}_{2n}=\dfrac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}$，对应的为复化 Cotes 公式；

注意：$\overline{C}_{2n}=\dfrac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$，并不是 $n=8$ 所对应的复化 Newton-Cotes 公式。

记 $R_n:=\overline{C}_{2n}=\dfrac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}$，称为龙贝格积分。

Romberg（龙贝格）算法

k	区间等分数 $N=2^k$	梯形序列	辛普森序列	柯特斯序列	龙贝格序列
0	2^0	T_1			
1	2^1	T_2	S_1		
2	2^2	T_4	S_2	C_1	
3	2^3	T_8	S_4	C_2	R_1
4	2^4	T_{16}	S_8	C_4	R_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Romberg（龙贝格）算法

问题：什么时候终止加密？（注意：精确积分值 I 是未知的）

以复化梯形公式为例：$I-T_{2n}\approx\dfrac{T_{2n}-T_n}{3}$.

因此当 $|T_{2n}-T_n|$ 充分小时即可停止加密，注意到 $|S_n-T_n|=\frac{4}{3}|T_{2n}-T_n|$，

$|S_n-T_n|$ 可作为迭代终止条件。

类似地，在两相邻对角线值充分接近时，比如 $|S_1-T_1|$，$|C_1-S_1|$，$|R_1-C_1|$ 充分小时，即可停止加密过程。

高斯型求积公式

目标：求数值积分公式 $\int_a^b\rho(x)f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$，其中 $\rho(x)$ 为给定的权函数。

给定插值节点 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$，

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

对应的**求积公式**为

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

而对应的误差为

$$\int_a^b\rho(x)f(x)dx-\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\rho(x)w_{n+1}(x)dx$$

插值型求积公式至少具有 n 次代数精度。

高斯型求积公式

问题：是否可以选取节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$，使得对应求积公式具有更高阶的代数精度？

例. $n=0$，$\rho(x)=1$，若取 $x_0=0,A_0=2$. 那么求积公式为 $\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx2f(0)$，

其对所有 1 次多项式精确成立（具有 1 次代数精度）。

例. $n=1$，$\rho(x)=1$，取 $x_0=-\frac{\sqrt{3}}{3},x_1=\frac{\sqrt{3}}{3},A_0=A_1=1$. 求积公式为

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx f(-\frac{\sqrt{3}}{3})+f(\frac{\sqrt{3}}{3}),$$

其对所有 3 次多项式精确成立（具有 3 次代数精度）。

高斯型求积公式

猜想：是否可以选取节点$x_0, x_1, \cdots, x_n$，使得求积公式具有$2n+1$次代数精度？

注：不存在$2n+2$次代数精度的求积公式。否则，取

$$f(x) = w_{n+1}^2(x) = (x-x_0)^2 \cdots (x-x_n)^2,$$

则$\int_a^b \rho(x) f(x) dx > 0$，而$\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = 0$，矛盾。

定义：若$n+1$个节点$x_0, x_1, \cdots, x_n$对应的求积公式具有$2n+1$次代数精度，则称该求积公式为高斯型求积公式；对应的节点称为高斯点，求积系数为高斯系数。

高斯型求积公式

定理：高斯积分定理

对于插值型求积公式，节点$x_k (k=0,\cdots,n)$是高斯点的充要条件是$w_{n+1}(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n)$与所有的$n$次多项式关于权函数$\rho(x)$正交。

定义：设$f(x)$和$g(x)$是区间$[a,b]$上的连续函数，若其满足$\int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0$，则称$f(x)$和$g(x)$在$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)$是正交的。

高斯型求积公式-两个问题

1. 高斯点如何取，也就是正交多项式如何选取？
   a) 三步递推法；
   b) 待定系数法；
2. 高斯系数如何得到？

   a)利用代数精度，取$f(x) = 1, x, \cdots, x^n$，使积分公式精确成立，列出$n+1$个方程；

   b)利用插值多项式$l_i(x)$，$A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx$；

注：由于高斯型求积公式代数精度为$2n+1$，而$l_i(x)$为n次多项式，$l_i^2(x)$为$2n$次多项式，故积分公式对其精确成立：

$$0 < \int_a^b \rho(x) l_k^2(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i) = A_k l_k^2(x_k) = A_k,$$

故高斯型求积公式的求积系数全是正的，保证了积分公式的稳定性。

Legendre多项式

Legendre 多项式：$\rho(x) = 1$，在区间$[-1,1]$上的正交多项式为

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n].$$

性质

(1) $\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn} = \begin{cases} \frac{2}{2n+1}, & m=n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$；

(2) 递推公式 $(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$；

(3) $\int_{-1}^{1} P_n(x) q(x) dx = 0$，对所有的次数$\le n-1$的多项式$q(x)$；

(4) $P_n(x)$具有n个零点$-1 < x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < 1$；

(5) $P_k(-x) = (-1)^k P_k(x)$，$P_k^2(1) = P_k^2(-1) = 1$；

Legendre多项式

性质

(6)

$P_0(x) = 1,$ 没有零点

$P_1(x) = x,$ 零点为$x_0 = 0$

$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$ 零点为$x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$

$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x),$ 零点为$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$

$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3),$ 有四个零点

(7) 若 Legendre 多项式$P_{n+1}(x)$的零点为$x_0, x_1, \cdots, x_n$，那么相应的求积系数为：

$$A_k = \frac{2}{(1-x_k^2)(P_{n+1}'(x_k))^2}$$

Legendre多项式

注：对于一般区间$[a,b]$上的积分$\int_a^b f(x) dx$，可通过变换$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$将区间$[a,b]$化为$[-1,1]$上的积分

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)\frac{b-a}{2} dt,$$

然后再利用 Legendre 公式。

例：用三点 Gauss-Legendre 公式求$\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2\cos(x)dx$的近似值。

解：$\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2\cos(x)dx=\int_{-1}^{1}(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}t)^2\cos(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}t)\frac{\pi}{4}dt$

$$\approx\frac{\pi}{4}(\frac{5}{9}(\frac{\pi}{4}-\frac{\pi}{4}\sqrt{0.6})^2\cos(\frac{\pi}{4}-\frac{\pi}{4}\sqrt{0.6})$$
$$+\frac{8}{9}(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}\sqrt{0})^2\cos(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}\sqrt{0})$$
$$+\frac{5}{9}(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}\sqrt{0.6})^2\cos(\frac{\pi}{4}+\frac{\pi}{4}\sqrt{0.6}))$$

=0.4672