第四章　数值积分

哈尔滨工业大学数学学院
http://homepage.hit.edu.cn/LiuWenjie

§4.1 数值积分的一般概念: 为什么数值积分

积分是实际问题中经常遇到的问题. 由 Newton-Leibniz 公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

知，若 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 能求出，那么积分是容易求出的.

- 然而有相当一些函数的原函数是不能用初等函数来表示的. 如 $\sqrt{1+x^3}$, $\frac{\sin(x)}{x}$, e^{-x^2} 等就属于这一类. 有时甚至 $F(x)$ 能求出，但计算 $F(a)$ 和 $F(b)$ 时也可能得不到精确值，或者即使能求出精确值，但是需要涉及大量运算，大大降低了运算效率.
- $f(x)$ 表达式未知，只有通过测量或实验得来的数据表

§4.1 数值积分的一般概念: 数值积分思想

由积分中值定理知，总存在一点 $\xi \in (a, b)$ 使得

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

怎么选取 ξ? 不同的选取方法 $\Longrightarrow$ 不同的求积方法

矩形公式

- **左矩形公式**: $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(a)$
- **右矩形公式**:$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f(b)$
- **中矩形公式**: $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$

§4.1 数值积分的一般概念：数值积分思想

换一种思路：怎么近似 $f(\xi)$ 的值?

梯形公式

$$f(\xi) \approx \frac{1}{2}[f(a)+f(b)] \quad \Longrightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)]$$

抛物线公式

$$f(\xi) \approx \frac{1}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \Longrightarrow$$

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

§4.1 数值积分的一般概念: 数值求积公式

一般地,我们可以用 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的一些离散点 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ 上的函数值的加权平均作为 $f(\xi)$ 的近似值。

这样做的目的：利用 $f(x)$ 的尽可能多的信息，来获得尽可能好的近似值

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f\left(x_i\right) \tag{1}$$

叫做**机械求积公式**，其中 $A_i(i=0,1,2,\ldots,n)$ 称为**求积系数**(它与 $f(x)$ 无关),$x_i \in [a,b](i=0,1,2,\ldots n)$ 称为**求积节点**.

§4.1 数值积分的一般概念：数值求积公式

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

- 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
- 求积公式并不局限于机械求积公式，有些求积公式可能会包含导数等信息

数值积分主要研究内容

(1) 求积公式的构造
(2) 精确程度的衡量
(3) 误差的估计（余项的估计）

§4.1 数值积分的一般概念：求积公式的代数精度

代数精度是衡量求积公式精确程度的一个重要指标。

定义

若求积公式对所有次数不超过 m 的多项式都精确成立，而对于某个 $m+1$ 次多项式不能精确成立，则称此求积公式具有 m 次代数精度.

代数精度的验证方法

(1) 将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^m$ 依次代入，公式精确成立；

(2) 将 $f(x) = x^{m+1}$ 代入，公式不精确成立。

§4.1 数值积分的一般概念: 求积公式的代数精度

若求积公式对 $f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$ 均精确成立，而对 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立，则称此求积公式具有 m 次代数精度.

$$
\begin{cases}
\sum\limits_{i=0}^{n} A_i = b-a \\
\sum\limits_{i=0}^{n} A_i x_i = \frac{1}{2}\left(b^2-a^2\right) \\
\vdots \\
\sum\limits_{i=0}^{n} A_i x_i^m = \frac{1}{m+1}\left(b^{m+1}-a^{m+1}\right) \\
\sum\limits_{i=0}^{n} A_i x_i^{m+1} \neq \frac{1}{m+2}\left(b^{m+2}-a^{m+2}\right)
\end{cases}
$$

定理 对于任意给定的 $n+1$ 个互异节点

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b,$$

总存在求积系数 $A_0, A_1, \ldots, A_n$，使求积公式(1)至少具有 n 次代数精度.

§4.1 数值积分的一般概念: 插值型求积公式

以点 $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ 为插值节点, 作 $f(x)$ 的 n 次插值多项式, 把它写成 Lagrange 插值多项式的形式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f\left(x_i\right)$$

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

求积系数

$$A_i = \int_a^b l_i(x) \mathrm{d}x, \quad (i = 0, 1, 2, \ldots, n)$$

§4.1 数值积分的一般概念：插值型求积公式

对于求积公式

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

如果求积系数

$$A_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}\mathrm{d}x$$

则称求积公式为插值型求积公式.
其余项

$$R[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n}\left(x-x_j\right)\mathrm{d}x$$

若插值公式是插值型求积公式，则它**至少具有 n 次代数精度**.

反之，若求积公式(1)至少具有 n 次代数精度，则求积公式(1)对 $l_k(x), k = 0, 1, 2, \ldots, n$. 精确成立，即

$$\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k\left(x_i\right) = A_k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots, n$$

综上有

定理 求积公式(1)至少具有 n 次代数精度的充分必要条件是它是插值型的.

§4.1 数值积分的一般概念：例

例 确定求积公式中的待定参数，使其代数精确度尽量高，并指明求积公式所具有代数精度.

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

解 求积分公式中含有三个待参数，即 A_{-1}, A_0, A_1. 令求积公式对 $f(x) = 1, x, x^2$ 精确成立，即

$$\begin{cases} A_{-1} + A_0 + A_1 = 2h \\ -h\left(A_{-1} - A_1\right) = 0 \\ h^2\left(A_{-1} + A_1\right) = \frac{2}{3}h^3 \end{cases}$$

解得

$$A_{-1} = A_1 = \frac{1}{3}h, \quad A_0 = \frac{4}{3}h$$

所求公式至少具有 2 次代数精确度. 再将 $f(x) = x^3, x^4$ 代入所确定的求积公式，有

$$\int_{-h}^{h} x^3\mathrm{d}x = 0 = \frac{h}{3}(-h)^3 + \frac{h}{3}\left(h^3\right)$$

§4.1 数值积分的一般概念：例

$$\int_{-h}^{h} x^4 \mathrm{d}x = \frac{2}{5}h^5 \neq \frac{h}{3}(-h)^4 + \frac{h}{3}h^4$$

故 $\int_{-h}^{h} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}f(-h) + \frac{4h}{3}f(0) + \frac{h}{3}f(h)$ 具有 3 次代数精度.

§4.1 数值积分的一般概念：收敛性、稳定性

定义 在求积公式(1)中，若

$$\lim_{h\to 0}\sum_{k=0}^{n} A_k f\left(x_k\right)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

其中 $h=\max\limits_{1\le i\le n}\{x_i-x_{i-1}\}$ 则称求积公式(1)是收敛的.

设精确值为 $f(x_i)$ 的计算值为 $\tilde{f}(x_i)$

定义 若 $\forall\varepsilon>0,\exists\delta>0$，只要

$$\left|f\left(x_i\right)-\tilde{f}\left(x_i\right)\right|\le\delta,\quad i=0,1,2,\cdots,n$$

就有

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

则称求积公式(1)是数值稳定的。

§4.1 数值积分的一般概念: 求积公式的稳定性

定理 若求积公式(1) 中系数 $A_k > 0(k = 0, 1, \cdots, n)$, 则此求积公式是稳定的.

证明 设精确值为 $f(x_i)$ 的计算值为 $\tilde{f}(x_i)$ ，且

$$\left|f\left(x_i\right)-\tilde{f}\left(x_i\right)\right| \leq \delta=\frac{\varepsilon}{b-a}$$

那么

$$\left|\sum_{i=0}^n A_i f\left(x_i\right)-\sum_{i=0}^n A_i \tilde{f}\left(x_i\right)\right| \leq \sum_{i=0}^n\left|A_i\right|\left|f\left(x_i\right)-\tilde{f}\left(x_i\right)\right| \leq \frac{\varepsilon}{b-a} \sum_{i=0}^n\left|A_i\right|$$

若每个 $A_i(i = 0, 1, 2, \ldots, n)$ 都为正, 则

$$\left|\sum_{i=0}^n A_i f\left(x_i\right)-\sum_{i=0}^n A_i \tilde{f}\left(x_i\right)\right| \leq \frac{\varepsilon}{b-a} \sum_{i=0}^n A_i=\varepsilon$$

这时数值计算是稳定的.

§4.2 Newton-Cotes 公式：梯形求积公式

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

以 $x_0=a, x_1=b$ 以为插值节点, 作线性插值多项式

$$L_1(x)=\frac{(x-b)}{(a-b)}f(a)+\frac{(x-a)}{(b-a)}f(b)$$

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_1(x)\mathrm{d}x &= \int_a^b \left[\frac{(x-b)}{(a-b)}f(a)+\frac{(x-a)}{(b-a)}f(b)\right]\mathrm{d}x \\ &= \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]\end{aligned}$$

称为梯形求积公式.

几何意义: 用梯形面积近似代替曲边梯形面积.

§4.2 Newton-Cotes 公式:Simpson 公式

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

将区间 $[a,b]$ 二等分，以分点 $x_0=a, x_1=(a+b)/2, x_2=b$ 为插值节点, 作线二次插值多项式

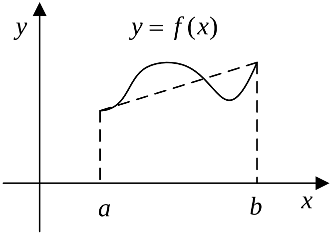
$$\begin{aligned}L_2(x)=&f(a)\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)}+f\left(\frac{a+b}{2}\right)\frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}\\&+f(b)\frac{(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b-\frac{a+b}{2}\right)}\end{aligned}$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_2(x)\mathrm{d}x=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

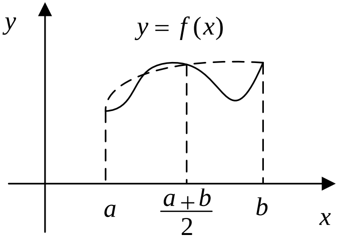
称为 Simpson 公式.

几何意义: 用抛物线围成的曲边梯形的面积近似代替 $f(x)$ 围成的曲边梯形面积.

§4.2 Newton-Cotes 公式: 梯形公式和 Simpson 公式



(a) 梯形公式



(b) Simpson 公式

§4.2 Newton-Cotes 公式

将区间 $[a, b]$ n 等分，其分点为 $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$, $h = (b - a)/n$, 以这 $n + 1$ 个等距分点为插值节点, 作 n 次插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f\left(x_i\right) l_i(x)$$

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

求积系数

$$A_i = \int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x, \quad (i = 0, 1, 2, \cdots, n)$$

§4.2 Newton-Cotes 公式

称等距节点的插值型求积公式

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

为 n 阶牛顿—柯特斯（Newton-Cotes）公式.

$$C_i^{(n)} = \frac{(-1)^{n-i}}{n \cdot i!(n-i)!}\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)\mathrm{d}t, \quad (i=0,1,2,\ldots,n)$$

称为柯特斯（Cotes）系数.

§4.2 Newton-Cotes 公式

当 $n=1$ 时, Newton-Cotes 公式为梯形求积公式

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

$$A_0 = A_1 = (b-a)/2, C_0 = C_1 = 1/2$$

当 $n=2$ 时, Newton-Cotes 公式为 Simpson 求积公式

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

$$A_0 = A_2 = (b-a)/6, A_1 = 2(b-a)/3, C_0 = C_2 = 1/6, C_1 = 2/3$$

§4.2 Newton-Cotes 公式

当 $n=4$ 时, Newton-Cotes 公式为 Cotes 公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{90}\left[7f\left(x_0\right)+32f\left(x_1\right)+12f\left(x_2\right)+32f\left(x_3\right)+7f\left(x_4\right)\right]$$

$$\begin{aligned}&A_0=A_4=7(b-a)/90, A_1=A_3=32(b-a)/90, A_2=12(b-a)/90\\&C_0=C_4=7/90, \quad C_1=C_3=32/90, C_2=12/90\end{aligned}$$

其它情形可通过查 Cotes 系数表，给出具体公式.
当 $n=8$ 时，Newton-Cotes 公式中求积系数出现负数. 实际计算并不用高阶 Newton-Cotes 公式，一方面余项含高阶导数；另一方面其收敛性、稳定性都差.

当 $n \leq 7$ 时，Newton-Cotes 公式是稳定的

§4.2 Newton-Cotes 公式

定理 对于 n 阶的 Newton-Cotes 公式当 n 为奇数时，至少具有 n 次代数精度；当 n 为偶数时，至少具有 $n+1$ 次代数精度.

梯形求积公式的代数精度为 1

Simpson 求积公式的代数精度为 3

定理 若 $f(x) \in C^2[a,b]$，则梯形求积公式有余项估计

$$\begin{aligned} R_T(f) &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta) \quad \eta \in [a,b] \end{aligned}$$

证 由插值余项定理知

$$f(x) - L_1(x) = \frac{1}{2} f''(\xi)(x-a)(x-b) \quad \xi \in (a,b)$$

等式两边从 a 到 b 积分得

$$R_T(f) = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

由于 $f(x) \in C^2[a,b]$，且 $(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上非正 (不变号), 故根据积分中值定理知, 至少存在一点 $\eta \in [a,b]$, 使

$$R_T(f) = \frac{1}{2} f''(\eta) \int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\eta)$$

若 $f(x) \in C^4[a,b]$，则 Simpson 求积公式有余项估计

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

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

证 Simpson 求积公式的代数精度为 3, 为此构造三次多项式 $P_3(x)$，满足 $P_3(a) = f(a)$,

$$P_3\left(\frac{a+b}{2}\right) = f\left(\frac{a+b}{2}\right), P_3(b) = f(b), P_3'\left(\frac{a+b}{2}\right) = f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

则

$$f(x) - P_3(x) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b) \quad \xi \in (a,b)$$

等式两边从 a 到 b 积分得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \int_a^b P_3(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b)\mathrm{d}x$$

§4.2 Newton-Cotes 公式

由于 $P_3(x)$ 是三次多项式，故 Simpson 求积公式对它准确成立. 即

$$\begin{aligned}\int_a^b P_3(x)\mathrm{d}x =& \frac{b-a}{6}\left[P_3(a)+4P_3\left(\frac{a+b}{2}\right)+P_3(b)\right]\\ =& \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\end{aligned}$$

由于 $f(x)\in C^4[a,b]$，且 $(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上非正 (不变号), 故根据积分中值定理知, 至少存在一点 $\eta\in[a,b]$, 使

$$\begin{aligned}R_s(f) &= \frac{1}{4!}f^{(4)}(\eta)\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\mathrm{d}x\\ &= -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)\end{aligned}$$

§4.3 复化求积公式

与分段插值的想法类似，为了提高计算精度，也可以将积分区间分割成若干小区间，然后在每个小区间使用低次求积公式，称**复化求积公式**.

§4.3 复化求积公式：复化梯形求积公式

将区间 $[a,b]$ n 等分，其分点为

$$x_i = a + ih(i=0,1,2,\ldots,n), \quad h=(b-a)/n$$

在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ $(k=0,1,\ldots,n-1)$，上利用梯形求积公式

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

则

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}\left[f\left(x_k\right)+f\left(x_{k+1}\right)\right] \\ &= \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)\right] = T_n\end{aligned}$$

称 $T_n = \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)\right]$ 为复化梯形求积公式

§4.3 复化求积公式：复化梯形求积公式的误差

定理 若 $f(x) \in C^2[a,b]$, 则

$$R(f;T_n) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \quad \eta \in [a,b]$$

证 由于 $f(x) \in C^2[a,b]$ ，利用连续函数的性质知存在一点 $\eta \in [a,b]$, 使

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) = f''(\eta)$$

这样

$$R(f;T_n) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \quad \eta \in [a,b]$$

$$\lim_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

即复化梯形求积公式是收敛的

T_n 的求积系数均为正，故是数值稳定的.

§4.3 复化求积公式：复化 Simpson 求积公式

将区间 $[a,b]$ n 等分，其分点为 $x_i = a + ih(i = 0,1,2,\ldots,n)$，$h = (b-a)/n$. 在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ $(k = 0,1,\ldots,n-1)$，上利用 Simpson 求积公式

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

则

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

称为复化 Simpson 求积公式

§4.3 复化求积公式：复化 Simpson 求积公式

定理 若 $f(x) \in C^4[a,b]$，则

$$E\left(f; S_n\right) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - S_n = -\frac{(b-a)}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta), \eta \in (a,b)$$

$$\lim_{n\to\infty} S_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

即复化 Simpson 求积公式是收敛的.

S_n 的求积系数均为正，故复化 Simpson 求积公式是数值稳定的.

§4.4 Romberg 求积法：梯形法的递推化

复合求积方法可提高求积精度，实际计算时若精度不够可将步长逐次分半. 设将区间 $[a,b]$ 分为 n 等份，共有 $n+1$ 个分点，如果将求积区间再二分一次，则分点增至 $2n+1$ 个，我们将二分前后两个积分值联系起来加以考察. 注意到每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 经过二分只增加了一个分点 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$，用复合梯形公式求得该子区间上的积分值为

$$\frac{h}{4}\left[f(x_k) + 2f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + f(x_{k+1})\right]$$

注意，这里 $h = \frac{b-a}{n}$ 代表二分前的步长. 将每个子区间上的积分值相加得

$$\begin{aligned} T_{2n} =& \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k) + f(x_{k+1})\right] + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) \\ =& \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right). \end{aligned} \tag{2}$$

§4.4 Romberg 求积法

$T_0(h)$ 为复化梯形公式

$$T_0(h) = h\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + \frac{1}{2}f(b)\right\}, h = \frac{b-a}{n} \tag{3}$$

定理 设 $f(x) \in C^\infty[a,b]$, 则有

$$T_0(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_l h^{2l} + \cdots, \tag{4}$$

其中系数 $I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$, $\alpha_l (l = 1, 2, \cdots)$ 与 h 无关.
公式(4) 表明 $T_0(h) \approx I$ 是 $\mathcal{O}(h^2)$ 阶, 在(4)式中, 若用 $h/2$ 代替 h, 有

$$T_0\left(\frac{h}{2}\right) = I + \alpha_1 \frac{h^2}{4} + \alpha_2 \frac{h^4}{16} + \cdots + \alpha_l \left(\frac{h}{2}\right)^{2l} + \cdots \tag{5}$$

若用 4 乘(5)式减去(4)式再除 3 后所得的式子记为 $T_1(h)$, 则有

$$T_1(h) = \frac{4T_0(h/2) - T_0(h)}{3} = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots \tag{6}$$

这里 $\beta_1, \beta_2, \cdots$ 是与 h 无关的系数.

§4.4 Romberg 求积法

用 $T_1(h)$ 近似积分值 I, 其误差阶为 $\mathcal{O}(h^4)$, 这比复合梯形公式的误差阶 $\mathcal{O}(h^2)$ 提高了, 容易看到 $T_1(h) = S_n$, 即将 $[a, b]$ 分为 n 等份得到的复合辛普森公式.
与上述做法类似, 从(4)式出发，当 n 再增加一倍, 即 h 减少一半时, 有

$$T_1\left(\frac{h}{2}\right) = I + \beta_1\left(\frac{h}{2}\right)^4 + \beta_2\left(\frac{h}{2}\right)^6 + \cdots \tag{7}$$

用 16 乘(7)式再减去(6)式后除以 15, 将所得的式子记为 $T_2(h)$, 则有

$$T_2(h) = \frac{16T_1(h/2) - T_1(h)}{15} = I + r_1h^6 + r_2h^8 + \cdots \tag{8}$$

类似的做下去 $m = 3, 4, \ldots,$

$$T_m(h) = \frac{4^m}{4^m - 1}T_{m-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{4^m - 1}T_{m-1}(h) \tag{9}$$

§4.4 Romberg 求积法

余项便取下列形式:

$$T_m(h) = I + \delta_1 h^{2(m+1)} + \delta_2 h^{2(m+2)} + \cdots$$

设以 $T_0^{(k)}$ 表示二分 k 次后求得的梯形值，以 $T_m^{(k)}$ 表示序列 $\{T_0^{(k)}\}$ 的 m 次加速值，则依递推公式(9)可得

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m}{4^m - 1} T_{m-1}^{(k+1)} - \frac{1}{4^m - 1} T_{m-1}^{(k)}, \quad k = 1, 2, \cdots \tag{10}$$

公式(10)也称为 Romberg 求积算法。

§4.4 Romberg 求积法

计算过程如下:

(1) 取 $k=0, h=b-a$, 求 $T_0^{(0)}=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]$

(2) 令 $1\to k$(k 记区间 $[a,b]$ 的二分次数), 求梯形值 $T_0\left(\frac{b-a}{2^k}\right)$, 即按递推公式(2) 计算 $T_0^{(k)}$

(3) 求加速值, 按公式(10)逐个求出 $T_m^{(k)}$.

§4.4 Romberg 求积法

$$
\begin{tikzcd}
T_0^{(0)} \arrow[r] \arrow[d] & T_0^{(1)} \arrow[r] \arrow[d] \arrow[dl] & T_0^{(2)} \arrow[r] \arrow[d] \arrow[dl] & T_0^{(3)} \arrow[r] \arrow[d] \arrow[dl] & \cdots \arrow[r] \arrow[d] & T_0^{(n)} \arrow[dl] \\
T_1^{(0)} \arrow[d] & T_1^{(1)} \arrow[d] \arrow[dl] & T_1^{(2)} \arrow[d] \arrow[dl] & \cdots \arrow[d] \arrow[dl] & \iddots \arrow[dl] & \\
T_2^{(0)} \arrow[d] & T_2^{(1)} \arrow[d] \arrow[dl] & \cdots \arrow[d] \arrow[dl] & \iddots \arrow[dl] & & \\
T_3^{(0)} \arrow[d] & \cdots \arrow[d] \arrow[dl] & \iddots \arrow[dl] & & & \\
\vdots \arrow[d] & \iddots \arrow[dl] & & & & \\
T_n^{(0)} & & & & &
\end{tikzcd}
$$

(c) 过程图

§4.4 Romberg 求积法

当 $f(x) \in C^{2m+2}[a,b]$ 时, $T_m^{(k)}$ 的余项为

$$
\begin{aligned}
E_m^{(k)}(f) &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - T_m^{(k)} \\
&= -\frac{B_{2m+2}}{2^{(m+1)(m+2k)}\cdot(2m)!}(b-a)^{2m+3}f^{(2m+2)}(\zeta)
\end{aligned}
$$

其中, B_{2m+2} 是只与 m 有关而与 k 无关的常数, 且 $\zeta \in (a,b)$

$$
\lim_{m\to+\infty} T_m^{(0)} = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x
$$

$$
\lim_{k\to+\infty} T_m^{(k)} = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x
$$

例 应用 Romberg 积分法，计算定积分 $\int_1^3 \frac{\mathrm{d}x}{x}$, 并与真值 $\ln 3 = 1.098612289$ 比较.

解 计算 T 数表如下

1.333333333	1.166666667	1.116666667	1.103210678	1.099767702
1.111111112	1.100000000	1.098725349	1.098620043	
1.099259259	1.098640372	1.098613022		
1.098630548	1.098612588			
1.098612518				

故

$\int_1^3 \frac{1}{x}\mathrm{d}x \approx 1.098612518$, 与真值比较, 可见精确到六位小数.

§4.5 Gauss 求积公式: 为什么 Gauss 求积

在 NewtonCotes 公式中, 我们选取的是等距节点, 这样做的好处就是计算方便. 但等距节点不一定是最好的选择, 事实上, 我们可以更好地选取节点, 使得求积公式具有更高的代数精度.

§4.5 Gauss 求积公式: 一般理论

求积公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{11}$$

定理 $n+1$ 个节点的机械求积公式(11)的代数精度不能超过 $2n+1$.

证 令

$$f(x)=\omega_{n+1}^2(x)=(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2$$

其中 $x_i(i=0,1,\ldots,n)$ 是求积节点,

$$\sum_{k=0}^{n} A_k\omega_{n+1}^2(x_k)=0$$

而

$$\int_a^b \omega_{n+1}^2(x)\mathrm{d}x>0$$

§4.5 Gauss 求积公式: 一般理论

问题: 固定节点数目为 $n+1$ 的情况下，适当选取一组节点 $x_0, x_1, \ldots, x_n$，及求积系数 $A_0, A_1, \ldots, A_n$，使求积公式

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

具有 $2n+1$ 次代数精度.

定义 若求积公式 (11) 具有 $2n+1$ 次代数精度，则称该求积公式为 Gauss 求积公式，相应的求积节点称为 Gauss 点. Gauss 求积公式一定是插值型求积公式

由定义公式(11)对 $f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^{2n+1}$ 精确成立，得

$$\begin{cases} A_0+A_1+\cdots+A_n=\int_a^b 1\mathrm{d}x \\ A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=\int_a^b x\mathrm{d}x \\ \vdots \\ A_0x_0^{2n+1}+A_1x_1^{2n+1}+\cdots+A_nx_n^{2n+1}=\int_a^b x^{2n+1}\mathrm{d}x \end{cases}$$

得关于 $\{x_i,A_i\}_{i=0}^n$ 的非线性方程组，求解比较困难.

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

建立两点 Gauss 公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f\left(x_0\right) + A_1 f\left(x_1\right)$$

由定义对 $f(x)=1, x, x^2, x^3$ 准确成立，有

$$\left\{\begin{aligned} A_0 + A_1 &= 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 &= 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 &= \tfrac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 &= 0 \end{aligned}\right.$$

$$\left\{\begin{aligned} A_1(x_0 - x_1) &= 2x_0 \\ A_1(x_0 x_1 - x_1^2) &= -\tfrac{2}{3} \\ A_1(x_1^2 x_0 - x_1^3) &= \tfrac{2}{3} x_0 \end{aligned}\right.$$

$$\begin{cases} 2x_0x_1 = -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3}x_1 = \frac{2}{3}x_0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_0x_1 = -\frac{1}{3} \\ x_0 + x_1 = 0 \end{cases}$$

x_0 x_1 是 $x^2 = \frac{1}{3}$ 的根
解得 $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0x_0 + A_1x_1 = 0 \end{cases}$$

解得 $A_0 = A_1 = 1$, 两点 Gauss 公式为

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

§4.5 Gauss 求积公式

定理 插值型求积公式(11)中，求积节点 $x_k,(k=0,1,\ldots,n)$ 是 Gauss 点的充分且必要条件是：以这组节点为零点的多项式

$$\omega_{n+1}(x)=\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)\cdots\left(x-x_n\right)$$

在 $[a,b]$ 上与一切次数不超过 n 的多项式 $P(x)$ 关于权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 正交，即

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\mathrm{d}x=0$$

证 必要性: 若 $x_k(k=0,1,\ldots,n)$ 是 Gauss 点, 作 n 次多项式

$$\omega_{n+1}(x)=\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)\cdots\left(x-x_n\right)$$

对任意次数 $\leq n$ 的次多项式 $P(x),P(x)\omega_{n+1}(x)$ 是次数 $\leq 2n+1$ 的多项式, Gauss 公式(11) 对它精确成立，从而

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}A_kP\left(x_k\right)\omega_{n+1}\left(x_k\right)=0$$

§4.5 Gauss 求积公式

充分性: 设 $f(x)$ 是任意次数 $\leq 2n+1$ 的次多项式,

$$f(x) = P(x)\omega_{n+1}(x) + q(x)$$

其中 $P(x), q(x)$ 均是次数 $\leq n$ 的多项式，且 $f(x_k) = q(x_k)$.
故(11)为 Gauss 公式，$x_k(k=0,1,\ldots,n)$ 是 Gauss 点.

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\mathrm{d}x + \int_a^b q(x)\mathrm{d}x = \int_a^b q(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=0}^{n} A_k q\left(x_k\right) = \sum_{k=0}^{n} A_k f\left(x_k\right)\end{aligned}$$

故(11)为 Gauss 公式，$x_k(k=0,1,\ldots,n)$ 是 Gauss 点.

例 建立两点 Gauss 公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f\left(x_0\right) + A_1 f\left(x_1\right)$$

解 设 Gauss 点为 x_0, x_1 由定理

$$\begin{cases} \int_{-1}^{1}\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)\mathrm{d}x = 0 \\ \int_{-1}^{1} x\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)\mathrm{d}x = 0 \end{cases}$$

解得 $x_0 = -x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$

对 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 准确成立，有

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \end{cases}$$ 解得 $A_0 = A_1 = 1$

两点 Gauss 公式为

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

§4.5 Gauss 求积公式

定理 Gauss 求积公式的系数 $A_k(k=0,1,2,\ldots,n)$ 全是正的.

证 考虑 Lagrange 基函数

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

它是一个 n 次多项式，因而 $l_k^2(x)$ 是 $2n$ 次多项式 Gauss 求积公式对其精确成立，故 $k=0,1,2,\ldots,n$

$$0<\int_a^b l_k^2(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}A_i l_k^2\left(x_i\right)=A_k$$

推论 Gauss 求积公式是数值稳定的.

定理 若 $f(x)\in C[a,b]$ ，则 Gauss 求积公式是收敛的. 即

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n}A_k f\left(x_k\right)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

区间 $[-1,1]$ 上的 Gauss 求积公式 Legendre 多项式序列 $P_n(x)$ 是区间 $[-1,1]$ 上的关于权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 的正交多项式序列，Gauss 点应选为 $P_{n+1}(x)$ 的零点，这样构成的求积公式称为 Gauss-Legendre 求积公式. Legendre 多项式的递推公式为

$$P_{n+1}(x)=\frac{2n+1}{n+1}xP_n(x)-\frac{n}{n+1}P_{n-1}(x)$$

Legendre 多项式

$$P_0(x)=1, P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[\left(x^2-1\right)^n\right]$$

其中

$$\begin{aligned}
P_1(x)&=x\\
P_2(x)&=\left(3x^2-1\right)/2\\
P_3(x)&=\left(5x^3-3x\right)/2\\
P_4(x)&=\left(35x^4-30x^2+3\right)/8\\
&\vdots
\end{aligned}$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

定理 设 $\{x_k\}_{k=0}^{n}$ 是 $n+1$ 次 Legendre 多项式 $P_{n+1}(x)$ 的零点，

$$A_k = \frac{2}{\left(1-x_k^2\right)\left[P'_{n+1}\left(x_k\right)\right]^2}, \quad 0 \leq k \leq n$$

则

$$x_k = -x_{n-k}, \quad A_k = A_{n-k}, \quad k = 0, 1, \ldots, n$$

对任意的次数小于等于 $2n+1$ 的多项式 $p(x)$ 下式子精确成立

$$\int_{-1}^{1} p(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} p\left(x_k\right) A_k$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

Gauss-Legendre 求积公式的求积节点确定后，可利用其具有的代数精度确定求积系数.

两点 Gauss-Legendre 公式为

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

三点 Gauss-Legendre 公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

建立三点 Gauss-Legendre 公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f\left(x_0\right) + A_1 f\left(x_1\right) + A_2 f\left(x_2\right)$$

求三次 Legendre 多项式的零点

$$P_3(x) = \left(5x^3 - 3x\right)/2 = 0$$

解得 $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$ 对 $f(x) = 1, x, x^2, x^3, x^4, x^5$ 准确成立，有

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \frac{2}{3} \end{cases}$$ 解得 $A_0 = \frac{5}{9}, A_1 = \frac{8}{9}, A_2 = \frac{5}{9}$

三点 Gauss-Legendre 公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

我们可以通过变量替换

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$$

将区间 $[a, b]$ 上的积分转化为区间 $[-1, 1]$ 上的积分, 然后通过 Gauss-Legendre 公式计算出它的近似值.

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

设 $\{t_k\}_{k=0}^n$ 为区间 $[-1, 1]$ 的 Gauss 积分点, $\{A_k\}_{k=0}^n$ 为相应的求积系数

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}(b-a)\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)\mathrm{d}t\\ \approx\ &\frac{1}{2}(b-a)\sum_{k=0}^{n} A_k f\left(\frac{b-a}{2}t_k + \frac{b+a}{2}\right)\end{aligned}$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

则 $x_k=\frac{b-a}{2}t_k+\frac{b+a}{2}, k=0,1,\ldots,n$ 为区间 $[a,b]$ 上的 Gauss 点，$\widetilde{A}_k=\frac{1}{2}(b-a)A_k$ 为相应的求积系数

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} \widetilde{A}_k f\left(x_k\right)$$

§4.5 Gauss 求积公式:Gauss-Legendre 求积公式

Gauss 公式最突出的优点就是具有最高的代数精度. 但缺点是 Gauss 点比较难计算, 而且当节点增加时, 需要重新计算 Gauss 点. 因此我们在实际应用中, 通常是将积分区间分割成若干小区间, 然后在每个小区间上使用低次的 Gauss 公式, 这就是复化 Gauss 公式

设 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是区间 $[a,b]$ 的一个划分，满足

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{m-1} < x_m = b$$

得到

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\mathrm{d}x$$

设 $\{t_{k,i}, A_{k,i}\}_{k=0}^{n_i}$ 为 $[-1,1]$ 区间相应的 Gauss 求积节点和求积系数。

记

$$x_{k,i}=\frac{x_{i+1}-x_i}{2}t_{k,i}+\frac{x_{i+1}+x_i}{2},\quad k=0,1,\ldots,n_i$$

$$\widetilde{A}_{k,i}=\frac{x_{i+1}-x_i}{2}A_{k,i},\quad k=0,1,\ldots,n_i$$

用数值积分

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n_i}\widetilde{A}_{k,i}f\left(x_{k,i}\right)$$

则

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{i=0}^{m-1}\sum_{k=0}^{n_i}\widetilde{A}_{k,i}f\left(x_{k,i}\right)$$