数值分析与计算软件

第13课

刘帆

南京大学工程管理学院

2020年5月25日

0. 引言



■ 由微积分的基本定理可知,若函数 f(x) 在区间 (a, b) 上连续,且原函数为 F(x),则可用牛顿-莱布尼兹公式来求定积分

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = F(b) - F(a) \tag{1}$$

0. 引言



■ 由微积分的基本定理可知,若函数 f(x) 在区间 (a,b) 上连续,且原函数为 F(x),则可用牛顿-莱布尼兹公式来求定积分

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = F(b) - F(a) \tag{1}$$

■ 然而,某些原函数无法用初等函数表示;有些被积函数的原函数虽然能够用初等函数表示,但表达式却非常复杂,不便于计算;许多实际问题中,仅仅是由测量或数值计算给出的一张数据表,而没有解析表达式,这时也无法求出原函数。

1.1 机械求积公式



■ 若已知积分区间 (a, b) 内的一组节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 和对应的函数值 $f(x_k)$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$, 为计算定积分

$$I = \int_{a}^{b} f(x)dx \tag{2}$$

构造如下的数值型求积公式

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{3}$$

其中, A_{k} 称为求积系数, 仅与节点有关, x_{k} 称为求积节点。

1.1 机械求积公式



■ 若已知积分区间 (a, b) 内的一组节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 和对应的函数值 $f(x_k), k = 0, 1, 2, ..., n$,为计算定积分

$$I = \int_{a}^{b} f(x)dx \tag{2}$$

构造如下的数值型求积公式

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{3}$$

其中, A_{k} 称为求积系数, 仅与节点有关, x_{k} 称为求积节点。

■ 公式 (3) 称为机械求积公式。



1.2 代数精度



定义

如果某个求积公式对于次数不超过 m 的多项式均能准确成立,但对于 m+1 次多项式不能准确成立,则称该求积公式具有 m 次代数精度.



■ 常用的一类构造求积公式的方法是用简单函数对被积函数 *f*(*x*) 作 插值逼近。



- 常用的一类构造求积公式的方法是用简单函数对被积函数 *f(x)* 作 插值逼近。
- 构造 f(x) 的 n 次 Lagrange 插值多项式:

$$L_{n}(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_{k}) I_{k}(x)$$
 (4)



■ 用 $L_n(x)$ 作为被积函数 f(x) 的近似,有

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{a}^{b} L_{n}(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_{k}) \int_{a}^{b} I_{k}(x)dx$$
 (5)



■ 用 $L_n(x)$ 作为被积函数 f(x) 的近似,有

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{a}^{b} L_{n}(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_{k}) \int_{a}^{b} I_{k}(x)dx$$
 (5)

■ 记 $A_k = \int_a^b I_k(x) dx$ 为求积系数。



■ 用 *L*_n(x) 作为被积函数 *f*(x) 的近似, 有

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{a}^{b} L_{n}(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_{k}) \int_{a}^{b} I_{k}(x)dx$$
 (5)

- 记 $A_k = \int_a^b I_k(x) dx$ 为求积系数。
- 按照上述方式构造的求积公式 (5) 称为插值型求积公式。



■ 插值型求积公式(5)的截断误差为

$$R_n(f) = I - I_n = \int_a^b (f(x) - L_n(x)) dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x) dx$$
 (6)

其中, $\xi \in (a,b)$ 且与 x 有关,

$$W_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)_{\bullet}$$



定理

n+1 个插值节点的求积公式 $I_n = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 为插值型求积公式的充分必要条件是它至少具有 n 次代数精度。



■ Newton-Cotes 公式是指等距节点下使用 Lagrange 插值多项式 建立的数值求积公式。



- Newton-Cotes 公式是指等距节点下使用 Lagrange 插值多项式 建立的数值求积公式。
- 将区间 (a, b) 划分为 n 等分,步长为 h = (b a)/n,其分点 $x_k = a + kh(k = 0, 1, \cdots, n)$ 。以此分点为节点构造出的插值型求积 公式

$$I_n = (b - a) \sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$$
 (7)

称为牛顿-柯特斯公式, 其中 $C_k^{(n)}$ 称为科特斯系数。



$$I_k(x) = I_k(\alpha + th) = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \prod_{i=0, i \neq k}^{n} (t-i)$$
 (8)



$$I_k(x) = I_k(a + th) = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \prod_{i=0, i \neq k}^{n} (t-i)$$
 (8)

■ 从而,

$$\int_{a}^{b} I_{k}(x) dx = \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \int_{0}^{n} \prod_{i=0, i \neq k}^{n} (t-i) dt$$
 (9)



$$I_k(x) = I_k(\alpha + th) = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \prod_{i=0}^n (t-i)$$
 (8)

■ 从而,

$$\int_{a}^{b} I_{k}(x) dx = \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \int_{0}^{n} \prod_{i=0, i \neq k}^{n} (t-i) dt$$
 (9)

■ 因此,

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!} \int_0^n \prod_{i=0}^n (t-i)dt$$
 (10)



常见的牛顿-柯特斯公式:

■ 当 n = 1 时,只有两个求积节点 x₀ = a, x₁ = b,柯特斯系数为

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2}, C_1^{(1)} = \int_0^1 tdt = \frac{1}{2},$$
 (11)

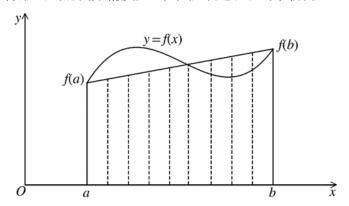
于是,相应的求积公式为

$$I_1 = \frac{b - a}{2} (f(a) + f(b)) \tag{12}$$

称公式 (12) 为梯形公式,通常用 / 表示 /1。



■ 梯形公式的代数精度为 1, 其几何意义如下图所示:





■ 当 n = 2 时,三个求积节点为 $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$, 柯特斯系数为

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{6}, C_1^{(2)} = \frac{4}{6}, C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$$
 (13)

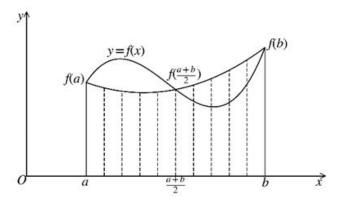
于是,相应的求积公式为

$$I_2 = \frac{b - a}{6} (f(a) + 4f(\frac{a + b}{2}) + f(b)) \tag{14}$$

称公式 (12) 为辛普森公式,通常用S来表示b。



■ 辛普森公式的代数精度为 3 (偶数阶牛顿柯特斯公式具有更高一阶的代数精度),其几何意义如下图所示:





■ 当 n = 4 时,相应的求积公式为

$$C = I_4 = \frac{b - a}{90} (7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4))$$
 (15)

称公式(12)为柯特斯公式,代数精度为5。



■ 当 n = 4 时,相应的求积公式为

$$C = I_4 = \frac{b - a}{90} (7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4))$$
 (15)

称公式(12)为柯特斯公式,代数精度为5。

■ 由于柯特斯系数与被积函数和积分区间均没有关系,因此可以事先 计算出柯特斯系数,做成表格的形式,方便进行查阅。



16/35

■ 柯特斯系数表

n	$C_k^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	7 90	$\frac{32}{90}$	12 90	$\frac{32}{90}$	7 90				
5	19 288	$\frac{75}{288}$	50 288	50 288	75 288	19 288			
6	41 840	216 840	$\frac{27}{840}$	272 840	$\frac{27}{840}$	216 840	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	2989 17280	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	5888 28350	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	5888 28350	$\frac{989}{28350}$



■ 分别用梯形公式、辛普森公式和柯特斯公式计算积分

$$I = \int_0^1 e^x dx$$



■ 分别用梯形公式、辛普森公式和柯特斯公式计算积分

$$I = \int_0^1 e^x dx$$

■ 直接代入之前的公式进行计算,有

$$T = \frac{1}{2}(e^{0} + e^{1}) \approx 1.85914091$$

$$S = \frac{1}{6}(e^{0} + 4e^{\frac{1}{2}} + e^{1}) \approx 1.71886115$$

$$C = \frac{1}{90}(7e^{0} + 32e^{\frac{1}{4}} + 12e^{\frac{1}{2}} + 32e^{\frac{3}{4}} + 7e^{1}) \approx 1.71828269$$

2.1 复化求积



■ 数值积分公式与多项式插值有很大的关系。因此 Runge 现象的存在,使得我们不能用太多的积分点计算。

2.1 复化求积



- 数值积分公式与多项式插值有很大的关系。因此 Runge 现象的存在,使得我们不能用太多的积分点计算。
- 改善方法: 采用与插值时候类似的方法—分段、低阶

2.1 复化求积



- 数值积分公式与多项式插值有很大的关系。因此 Runge 现象的存在,使得我们不能用太多的积分点计算。
- 改善方法: 采用与插值时候类似的方法—分段、低阶
- <mark>复化求积</mark>,先把积分区间分成一些长度较小的子区间,在每个子区间上使用低阶的牛顿-柯特斯公式,再对结果进行求和。

2.1 复化求积公式



■ 复化梯形公式

$$T_n = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2} (f(x_k) + f(x_{k+1})) = \frac{h}{2} (f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b))$$
 (16)

2.1 复化求积公式



■ 复化梯形公式

$$T_n = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2} (f(x_k) + f(x_{k+1})) = \frac{h}{2} (f(a) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b))$$
 (16)

■ 复化辛普森公式

$$S_{n} = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{6} (f(x_{k}) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1}))$$

$$= \frac{h}{6} (f(\alpha) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k}) + f(b))$$
(17)

2.1 复化求积公式



■ 复化柯特斯公式

$$C_{n} = \frac{h}{90} (7f(a) + 32 \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12 \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$$

$$+ 32 \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 14 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k}) + 7f(b))$$
(18)

2.2 余项



■ 复化梯形公式的余项如下

$$R_{n} = I - T_{n} = -\sum_{k=0}^{n-1} (\frac{h^{3}}{12}) f''(\eta_{k})$$
 (19)

其中, $\eta_k \in (x_k, x_{k+1})$ 。

2.2 余项



■ 复化梯形公式的余项如下

$$R_{n} = I - T_{n} = -\sum_{k=0}^{n-1} (\frac{h^{3}}{12}) f''(\eta_{k})$$
 (19)

其中, $\eta_k \in (X_k, X_{k+1})$ 。

■ 由介质定理可知,假设 $f(x) \in C^2(a,b)$,则存在 η ,使得 $\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) = nf''(\eta)$ 。因此有

$$R_n = I - T_n = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta_k) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\eta)$$
 (20)



2.2 余项



■ 复化梯形公式的余项如下

$$R_{n} = I - T_{n} = -\sum_{k=0}^{n-1} (\frac{h^{3}}{12}) f''(\eta_{k})$$
 (19)

其中, $\eta_k \in (x_k, x_{k+1})$ 。

■ 由介质定理可知,假设 $f(x) \in C^2(a,b)$,则存在 η ,使得 $\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) = nf''(\eta)$ 。因此有

$$R_n = I - T_n = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta_k) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\eta)$$
 (20)

■ 可以看出,复化梯形公式是收敛的。



2.2 余项



■ 采用类似的方法,可以证明复化辛普森公式和复化柯特斯公式均收 敛到所求的积分值。

2.2 余项



- 采用类似的方法,可以证明复化辛普森公式和复化柯特斯公式均收 敛到所求的积分值。
- 以上证明,留作作业。

例 2



■ 计算积分 $I = \int_0^1 e^x dx$,要求保留 5 位有效数字。若用复合梯形计算,需要将积分区间多少等分?



- 计算积分 $I = \int_0^1 e^x dx$,要求保留 5 位有效数字。若用复合梯形计算,需要将积分区间多少等分?
- 由 $f(x) = e^x$,可知在 (0, 1) 上, $|f''(x)| \le e$ 。那么,用复合梯形计算,由余项公式可以得到

$$|R| = |-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\eta)| \le \frac{e}{12n^2}$$
 (21)

若要求积分有 5 位有效数字,只要取 $\frac{e}{12n^2} \le \frac{1}{2} * 10^{-4}$ 。可以得到,n = 68 即可满足要求。

3.1 变步长求积



■ 复合求积公式的截断误差随 n 的增大而减小,但对于一个给定的积分,选定了某种求积方法后,如何确定适当的 n,使得计算结果达到预先给定的精度要求呢?

3.1 变步长求积



- 复合求积公式的截断误差随 n 的增大而减小,但对于一个给定的积分,选定了某种求积方法后,如何确定适当的 n,使得计算结果达到预先给定的精度要求呢?
- 通常将步长 h 逐次折半,反复利用复化求积公式进行计算,直到相 邻两次计算结果之差的绝对值小于给定的精度要求为止。



■ 将求积区间 (a, b)n 等分,可按复化梯形公式计算积分

$$T_n = \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} (f(x_k) + f(x_{k+1}))$$
 (22)



■ 将求积区间 (a, b)n 等分,可按复化梯形公式计算积分

$$T_n = \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} (f(x_k) + f(x_{k+1}))$$
 (22)

■ 如果将每个小区间一分为二,即在每个子区间 (x_k, x_{k+1}) 中增加了一个分点 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$ 。此时,在区间 (x_k, x_{k+1}) 上,复化梯形公式的积分值为

$$\frac{h}{4}(f(x_k) + 2f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})) \tag{23}$$



■ 将每个子区间上的积分值相加得

$$T_{2n} = \frac{h}{4} \sum_{k=0}^{n-1} (f(x_k) + f(x_{k+1})) + \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$$
 (24)



■ 将每个子区间上的积分值相加得

$$T_{2n} = \frac{h}{4} \sum_{k=0}^{n-1} (f(x_k) + f(x_{k+1})) + \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})$$
 (24)

■ 得到递推公式:

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})$$
 (25)



■ 复化梯形公式 To 和 Too 的误差分别为

$$I - T_0 = -\frac{b - a}{12} h^2 f''(\eta_1), a < \eta_1 < b$$
 (26)

$$I - T_{2n} = -\frac{b - a}{12} (\frac{h}{2})^2 f''(\eta_2), a < \eta_2 < b$$
 (27)



■ 若 f''(x) 在 (a,b) 上变化不大,可近似地认为 $f''(\eta_1) \approx f''(\eta_2)$,则有

$$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4} \tag{28}$$

整理得,

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$$
 (29)



■ 若 f''(x) 在 (a,b) 上变化不大,可近似地认为 $f''(\eta_1) \approx f''(\eta_2)$,则有

$$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4} \tag{28}$$

整理得,

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$$
 (29)

■ 这表明可以用二分前后两次计算结果的差来估计复化梯形公式的误差。



■ 先对整个区间 (0,1) 使用梯形公式

$$T_1 = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) \approx 0.9207355$$



■ 先对整个区间 (0,1) 使用梯形公式

$$T_1 = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) \approx 0.9207355$$

■ 对区间(0,1)二等分,可以得到

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) \approx 0.9397933$$



■ 先对整个区间 (0,1) 使用梯形公式

$$T_1 = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) \approx 0.9207355$$

■ 对区间(0,1)二等分,可以得到

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) \approx 0.9397933$$

■ 进一步二等分,可以得到

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}(f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})) \approx 0.9445135$$



■ 先对整个区间 (0,1) 使用梯形公式

$$T_1 = \frac{1}{2}(f(0) + f(1)) \approx 0.9207355$$

■ 对区间(0,1)二等分,可以得到

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}f(\frac{1}{2}) \approx 0.9397933$$

■ 进一步二等分,可以得到

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}(f(\frac{1}{4}) + f(\frac{3}{4})) \approx 0.9445135$$

■ 不断二分下去。。





■ 公式 (30) 可以看做是对复化梯形误差的事后估计,用该误差作为对 T₂₀ 的补偿,即

$$\bar{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$
 (30)



■ 公式 (30) 可以看做是对复化梯形误差的事后估计,用该误差作为对 T₂₀ 的补偿,即

$$\bar{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$
 (30)

■ 再进一步,发现

$$\frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n = S_n \tag{31}$$



■ 公式 (30) 可以看做是对复化梯形误差的事后估计,用该误差作为 对 T₂₀ 的补偿,即

$$\bar{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$
 (30)

■ 再进一步,发现

$$\frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n = S_n \tag{31}$$

■ 也就是说,用梯形法二分前后的两个积分值 T_n 与 T_{2n} 进行线性组合,即得到 Simpson 法的积分值。



■ 同样的想法,我们可以得到

$$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16} \tag{32}$$



■ 同样的想法,我们可以得到

$$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16} \tag{32}$$

■ 以此作为补偿,即

$$\bar{S} = S_{2n} + \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n = C_n$$
 (33)



■ 类似的

$$\bar{C} = C_{2n} + \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n) = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n = R_n$$
 (34)

其中, Rn 称为 Romberg 积分。



Romberg 求积的计算步骤如下:

计算 f(a)、f(b), 算出 T₁;



- 计算 f(a)、f(b), 算出 T₁;
- 型 把 (a, b)2等分,算出 T₂与 S₁;



- 计算 f(a)、f(b), 算出 T₁;
- 型 把 (a, b)2等分,算出 T₂与 S₁;
- **3** 把 (a,b)4等分,算出 T₄、S₂与 C₁;



- 计算 f(a)、f(b), 算出 T₁;
- 型 把 (a,b)2等分,算出 T₂与 S₁;
- **3** 把 (a,b)4等分,算出 T₄、S₂与 C₁;
- ☑ 把 (a, b)8等分,算出 T₈、S₄、C₂与 R₁;



- 1 计算 f(a)、f(b), 算出 T₁;
- 型 把 (a,b)2等分,算出 √2 与 S₁;
- 3 把 (a,b)4等分,算出 T₄、S₂与 C₁;
- ☑ 把 (a,b)8等分,算出 T₈、S₄、C₂与 R₁;
- 5 把 (a,b)16 等分,算出 I_{16} 、 S_8 、 C_4 与 R_2 ; 重复以上步骤,直到 $|R_{2n}-R_n|<\varepsilon$,停止计算。

内容



■ 牛顿科特斯求积公式

内容



- 牛顿科特斯求积公式
- 复化求积公式

内容



- 牛顿科特斯求积公式
- 复化求积公式
- Romberg 求积公式

谢谢!

A&Q