数值积分与微分

数值计算方法课程组

中国石油大学-华东

（课堂专属 切勿网传）

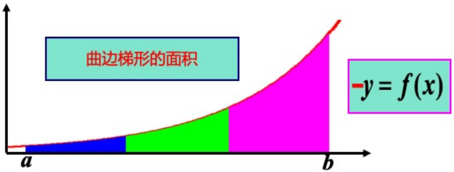
目 录

目 录

引例

计算 $I = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$.

几何意义



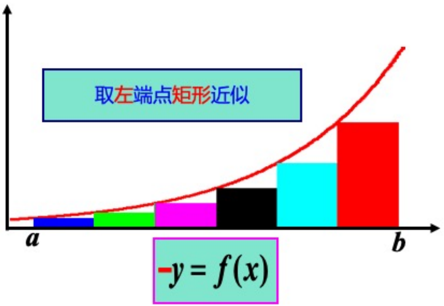
存在的问题

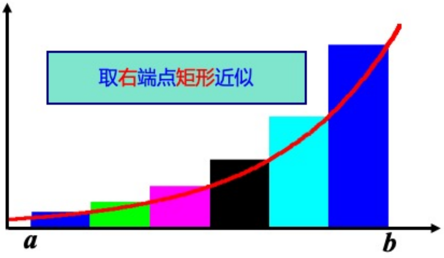
在许多实际问题经常遇到下列情况:

- 原函数存在但不能用初等函数表示;
- 原函数可以用初等函数表示，但结构复杂;
- 被积函数没有表达式，仅仅是一张函数表。

求定积分的思想

求定积分的思想： 分割、近似、求和





积分分别定义为

$$I(f) = \lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n-1}(x_{k+1}-x_k)f(x_k), \quad I(f) = \lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n-1}(x_{k+1}-x_k)f(x_{k+1}).$$

数值积分公式的一般形式

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \approx \int_a^b f(x)\,dx \tag{1.1}$$

其中求积节点

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$$

求积系数 A_k 仅与求积节点有关.
求积公式的截断误差或余项为

$$R_n(f) = \int_a^b f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

定义（求积公式的代数精度）

此处的f(x) 没有给出具体的函数形式，所以我们可以将不同的多项式带入

如果求积公式 $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$ 对一切不高于 m 次的多项式恒成立，而对于某个 $m+1$ 次的多项式不能精确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度.

定理

求积公式 $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$ 具有 m 次代数精度的充要条件是 $f(x)$ 为

$$1,\quad x,\quad x^2,\quad \cdots,\quad x^m$$

时都精确成立，而 $f(x)=x^{m+1}$ 时求积公式不能成立.

求积系数的基本特征

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a.$$

定义 (收敛性)

若

$$\lim_{n\to+\infty} \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)\,dx$$

则称求积公式是收敛的.

例 求下面求积公式的代数精度：$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{1}{4}f(0) + \frac{3}{4}f(\frac{2}{3})$.
当 $f(x) = 1$ 时，公式左端 $= 1$，右端 $= 1$，求积公式准确成立。
当 $f(x) = x$ 时，公式左端 $= 1/2$，右端 $= 1/2$，求积公式准确成立。
当 $f(x) = x^2$ 时，公式左端 $= 1/3$，右端 $= 1/3$，求积公式准确成立。
当 $f(x) = x^3$ 时，公式左端 $= 1/4$，右端 $= 2/9$，求积公式不准确成立。
从而该求积公式具有 2 次代数精度。

例 确定求积公式 $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx A_1 f(-\sqrt{0.6}) + \frac{8}{9} f(0) + A_3 f(x_3)$ 中的参数 A_1, A_3 和 x_3 使公式具有最高代数精度，并求出其代数精度.
当 $f(x) = 1, x, x^2$ 时使得求积公式准确成立，得方程组：

$$\begin{aligned} A_1 + \frac{8}{9} + A_3 &= 2, \\ -\sqrt{0.6}A_1 + A_3 x_3 &= 0, \\ 0.6A_1 + A_3 x_3^2 &= \frac{2}{3}. \end{aligned}$$

求解得： $x_3 = \sqrt{0.6}$， $A_1 = A_3 = \frac{5}{9}$.
该求积公式至少具有 2 次代数精度。
当 $f(x) = x^3, x^4, x^5$ 时，公式左端=右端，求积公式准确成立。
当 $f(x) = x^6$ 时，公式左端 $= 2/7$，右端 $= 0.24$，求积公式不准确成立。
该求积公式具有 5 次代数精度。

设 $f(x_k)$ 有舍入误差 ε_k, 实际计算求积公式与原求积公式有误差

$$
\begin{aligned}
E_n &= |\sum_{k=0}^{n} A_k(f(x_k)+\varepsilon_k) - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)| \\
&= |\sum_{k=0}^{n} A_k\varepsilon_k| \le \sum_{k=0}^{n} |A_k||\varepsilon_k| \le \varepsilon \sum_{k=0}^{n} |A_k| \\
&= \varepsilon(b-a), \quad A_k > 0, \quad \varepsilon = \max \varepsilon_k
\end{aligned}
$$

这说明，求积系数全为正时，求积公式

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

是稳定的.

目 录

§5.2.1 插值型求积公式

思想： 用被积函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的插值多项式近似代替计算.
设已知函数 $f(x)$ 在节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 上的函数值为 $f(x_k), k = 0, 1, \cdots, n$, 作 n 次 Lagrange 插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)$$

从而可得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_a^b L_n(x)\,dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)\,dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b l_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\end{aligned}$$

插值型求积公式:

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

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\, dx = \int_a^b \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}(x)\, dx$$

余项为

$$R_n[f] = \int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\, dx.$$

定理

形如 $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的求积公式至少有 n 次代数精度的充要条件是它是插值型求积公式.

证明：充分性. 设它是插值型求积公式，则当 $f(x)=1,x,\cdots,x^n$ 时，代入余项公式

$$R_n[f]=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx=0.$$

故此求积公式至少 n 次代数精度.
必要性. 设求积公式至少 n 次代数精度，则对所有不超过 n 次的多项式求积公式精确成立. 故取 $f(x)=l_k(x)$

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

结论成立.

§5.2.2 Newton-Cotes 公式的讨论

Newton-Cotes 公式是插值型求积公式的特殊形式：节点为等距分布

$$x_k = a + kh, \quad k = 0, 1, \cdots, n, \quad h = \frac{b-a}{n}.$$

从而可知

$$\begin{aligned} A_k &= \int_a^b l_k(x)\,dx = \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}\,dx \\ (x = a + th) &= \frac{b-a}{n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{t-j}{k-j}\,dt = \frac{(b-a)(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t-j)\,dt \end{aligned}$$

记 Cotes 系数为

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

则

$$A_k = (b-a)\,C_k^{(n)},$$

Newton-Cotes 公式为

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(a+kh) = I_n(f)$$

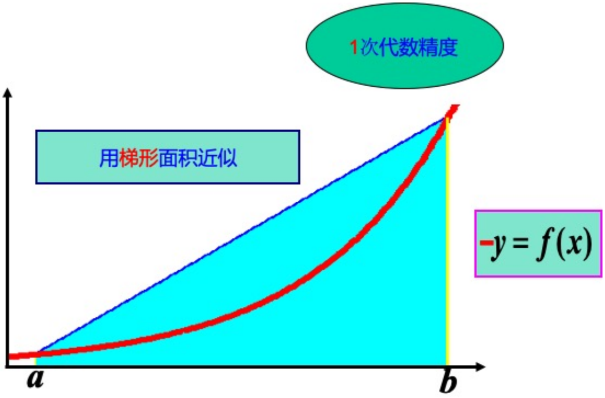
部分 Cotes 系数

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	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

从上可知，Newton-Cotes 公式在 $n = 8$ 时不稳定 $(A_k < 0)$.

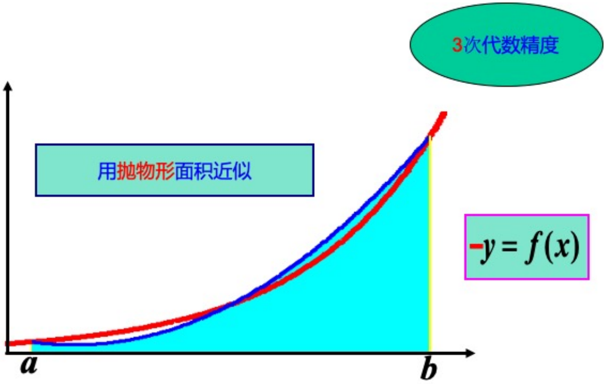
特别地，$n=1$, 求积公式称为梯形公式:

$$I_1(f)=A_0f(x_0)+A_1f(x_1)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=T(f),$$



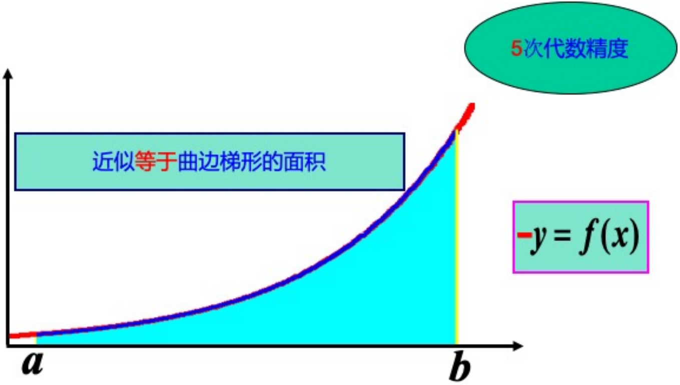
$n=2$, 求积公式称为 Simpson 公式:

$$
\begin{aligned}
I_2(f) &= A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) \\
S(f) &= \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f((a+b)/2) + f(b)],
\end{aligned}
$$



$n=4$, 求积公式称为 Cotes 公式:

$$
\begin{aligned}
I_4(f) &= A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2)+A_3 f(x_3)+A_4 f(x_4) \\
C(f) &= \frac{b-a}{90}[7f(a)+32f(a+h)+12f(a+2h)+32f(a+3h)+7f(b)]
\end{aligned}
$$



定理

对于 *Newton-Cotes* 求积公式

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

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.

证明：易知，插值型求积公式至少有 n 次代数精度. 只需要证明当 $f = x^{n+1}$(n为偶数) 时，余项为零即可. 由余项公式

$$R_n[f] = \int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)\,dx = \int_a^b \omega_{n+1}(x)\,dx.$$

因 $x = a + th, x_k = a + kh$, 从而可知

$$\begin{aligned} R_n[f] &= \int_a^b \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)\,dx = h^{n+2}\int_0^n \prod_{k=0}^{n}(t-k)\,dt \\ (t = u + \frac{n}{2}) &= h^{n+2}\int_{-n/2}^{n/2}(u+\frac{n}{2})\cdots(u+1)u(u-1)\cdots(u-\frac{n}{2})\,du \\ &= h^{n+2}\int_{-n/2}^{n/2} u(u^2-1)(u^2-4)\cdots(u^2-\frac{n^2}{4})\,du = 0 \end{aligned}$$

故而可知，当 n 为偶数时至少具有 $n+1$ 次代数精度.

例 分别用梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式计算积分 $I = \int_{0.5}^{1} \sqrt{x}\, dx$ 的近似值。

解：用梯形公式

$$I \approx T = \frac{1-0.5}{2}(\sqrt{0.5} + \sqrt{1.0}) = 0.4267766953$$

用 Simpson 公式

$$I \approx S = \frac{1-0.5}{6}(\sqrt{0.5} + 4\sqrt{0.75} + \sqrt{1.0}) = 0.4309340330$$

用 Cotes 公式

$$I \approx T = \frac{1-0.5}{90}(7\sqrt{0.5} + 32\sqrt{0.625} + 12\sqrt{0.75} + 32\sqrt{0.875} + 7\sqrt{1.0})$$
$$= 0.4309640705$$

真实值 $I = 0.4309644062711508\cdots$

§5.2.3 几种低阶求积公式的余项

1. 梯形公式. 设 $f''(x)$ 连续

$$
\begin{aligned}
R_T &= \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,dx \\
&= \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3.
\end{aligned}
$$

2. Simpson 公式. 设 $f^{(4)}(x)$ 连续，构造次数不超过 3 次的多项式 $H_3(x)$ 满足

$$
\begin{aligned}
&H_3(a) = f(a), \quad H_3(b) = f(b) \\
&H_3(c) = f(c), \quad H_3'(c) = f'(c), \quad c = \frac{a+b}{2}
\end{aligned}
$$

$$\int_a^b H_3(x)dx = \frac{b-a}{6}[H_3(a)+4H_3(c)+H_3(b)]$$

注意到

$$f(x)-H_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)$$

从而可知 Simpson 公式余项

$$\begin{aligned}
R_S &= \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)dx \\
&= \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx \\
&= -\frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2})^4 f^{(4)}(\eta) = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)
\end{aligned}$$

3. Cotes 公式. 有如下的余项

$$R_C = \frac{2(b-a)}{945}(\frac{b-a}{4})^6 f^{(6)}(\eta) = -\frac{(b-a)^7}{1935360} f^{(6)}(\eta).$$

例 分别估计用梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式计算积分 $I=\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$ 的近似值的误差。

解：被积函数 $f(x)=x^{\frac{1}{2}}$, 则

$$f''(x)=-\frac{1}{4}x^{-\frac{3}{2}},\quad f^{(4)}(x)=-\frac{15}{16}x^{-\frac{7}{2}},\quad f^{(6)}(x)=-\frac{945}{64}x^{-\frac{11}{2}}$$

则

$$|I-T|=|-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3|\leq\frac{0.5^3}{12}\frac{0.5^{-1.5}}{4}\leq 0.7366\times10^{-2},$$

$$|I-S|=|-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}|\leq|\frac{0.5^5}{2880}f^{(4)}(0.5)|<0.1151\times10^{-3},$$

$$|I-C|=|-\frac{(b-a)^7}{1935360}f^{(6)}(\eta)|\leq|-\frac{0.5^7}{1935360}f^{(6)}(0.5)|<0.2698\times10^{-5}.$$

Newton-Cotes 求积公式的缺陷

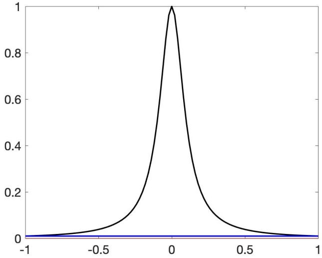
从余项公式可以看出，要提高求积公式的代数精度，必须增加节点个数，而节点个数的增加，会导致

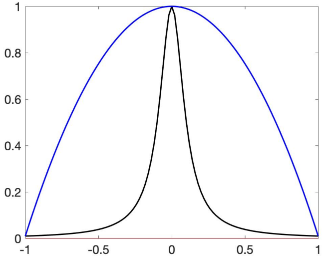
- 插值多项式出现 Runge 现象；
- Newton-Cotes 数值稳定性不能保证.(如 $n = 8$ 时，积分系数有负值)

例 $\int_{-1}^{1} \frac{1}{1+100x^2}\,dx = 0.29422553$

梯形求积公式： $T = 0.01980198$

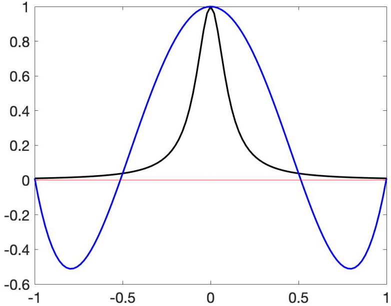
辛普森求积公式： $S = 1.33993399$

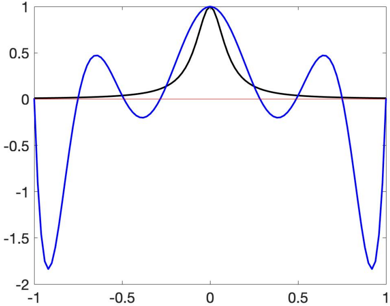




科特斯求积公式：$C = 0.3244478293$

9 个节点求积公式 $(n = 8)$：-0.10516104818





目 录

§5.3.1 复化梯形公式

复化求积公式的基本思想

将积分区间 $[a, b]$ 分成若干个小区间，然后在每个小区间上采用低阶的 Newton-Cotes 公式.

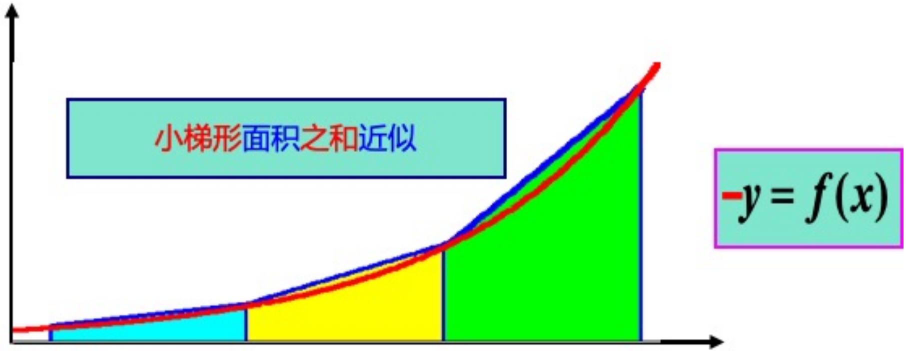
将积分区间 $[a, b]$ 分成 n 等份： 节点 $x_k = a + kh$, $h = (b - a)/n$. 在区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上采用梯形公式

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

从而可得复化梯形公式

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

复化梯形公式的几何意义



复化梯形公式的余项

设 $f(x) \in C^2[a,b]$

$$R_n(f) = I - T_n(f) = \sum_{k=0}^{n-1}[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)]$$

注意到

$$m = \min_{a \le x \le b} f''(x) \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \le \max_{a \le x \le b} f''(x) = M$$

由介值定理可知，存在 $\eta \in [a,b]$, 使得 $f''(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)$，从而可得复化梯形公式的余项

$$R_n(f) = I - T_n(f) = -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\eta)$$

复化梯形公式的收敛性

设 $f(x) \in C[a, b]$,

$$\begin{aligned} T_n(f) &= \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] \\ &= \frac{1}{2}[\frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k) + \frac{b-a}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)] \\ &\to \int_a^b f(x)\,dx \quad (n \to +\infty) \end{aligned}$$

这里运用了定积分定义：定积分与区间分法和 η_k 的取法无关

$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\|\Delta\| \to 0} \sum_{k=1}^{n} f(\eta_k)\Delta x_k.$$

§5.3.2 复化 Simpson 公式

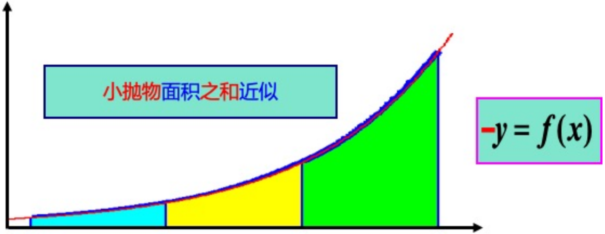
将积分区间 $[a, b]$ 分成 n 等份：节点 $x_k = a + kh$, $h = (b - a)/n$. 在区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上采用 Simpson 公式

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \\ &= \frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k) + 4f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})] + R_n(f). \end{aligned}$$

从而可得复化 Simpson 公式

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

复化 Simpson 公式的几何意义



复化 Simpson 公式的余项: 设 $f(x) \in C^4[a,b]$

$$R_n(f) = I - S_n(f) = \sum_{k=0}^{n-1}[-\frac{h}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta_k)]$$

注意到

$$m = \min_{a \le x \le b} f^{(4)}(x) \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k) \le \max_{a \le x \le b} f^{(4)}(x) = M$$

由介值定理可知，存在 $\eta \in [a, b]$, 使得 $f^{(4)}(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k)$，从而可得

复化 Simpson 公式的余项

$$R_n(f) = I - S_n(f) = -\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta)$$

复化 Simpson 公式的收敛性

$$\begin{aligned} S_n(f) &= \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] \\ &\to \int_a^b f(x)dx \quad (n \to +\infty) \end{aligned}$$

类似地可以得到复化 Cotes 公式

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

其截断误差为

$$
R_n(f) = I - C_n(f) = -\frac{2(b-a)}{945}(\frac{h}{4})^6 f^{(6)}(\eta).
$$

例题

分别利用复化梯形公式、复化 Simpson 公式和复化 Cotes 公式计算积分 $I=\int_0^1 e^x dx$ 的近似值，要求误差限不超过 0.5×10^{-7}，则需将积分区间分成多少等份？ 需要多少个求积节点？

解：（1）复化梯形公式

首先来确定步长 $h=\frac{b-a}{n}=1/n$, 复化梯形公式的余项

$$|I-T_n|=\frac{(b-a)}{12}h^2|f''(\eta)|=\frac{e^\eta}{12n^2}\le\frac{e}{12n^2},$$

若上界 $\frac{e}{12n^2}<0.5\times 10^{-7}$，即 $n\ge 2129$, 则 $|I-T_n|<0.5\times 10^{-7}$. 从而复化梯形公式需要 2129 个等分积分区间，2130 个求积节点。

（2）复化 Simpson 公式的余项

$$|I - S_n| = |\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta)| \leq \frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^4(\eta) \leq \frac{e}{2880n^4}$$

若上界 $\frac{e}{2880n^4} < 0.5 \times 10^{-7}$，即 $n \geq 12$, 则 $|I - S_n| < 0.5 \times 10^{-7}$. 从而复化 Simpson 公式需要 12 个等分积分区间，25 个求积节点。

（2）复化 Cotes 公式的余项

$$|I - C_n| = |\frac{2(b-a)}{945}(\frac{h}{4})^6 f^{(6)}(\eta)| \leq \frac{e}{1935360n^6},$$

若上界 $\frac{e}{1935360n^6} < 0.5 \times 10^{-7}$，即 $n \geq 2$, 则 $|I - C_n| < 0.5 \times 10^{-7}$. 从而复化 Cotes 公式需要 2 个等分积分区间，9 个求积节点。

例题

分别利用复化梯形公式、复化 Simpson 公式计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$ 的近似值，要求按复化 Simpson 公式计算时误差不超过 0.5×10^{-6}.

解： 首先来确定步长 $h=\frac{b-a}{n}=1/n$, 复化 Simpson 公式的余项

$$|R_n(f)|=|\frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta)|\leq \frac{b-a}{180}(\frac{h}{2})^4 M_4$$

其中

$$M_4=\max_{a\leq x\leq b}|f^{(4)}(x)|$$

由

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos tx dt$$

从而可得

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= -\int_0^1 t\sin tx dt = \int_0^1 t\cos(tx+\pi/2)\,dt \\
f''(x) &= -\int_0^1 t^2\cos tx dt = \int_0^1 t^2\cos(tx+2\pi/2)\,dt \\
\cdots & \\
f^{(k)}(x) &= \int_0^1 t^k\cos(tx+k\pi/2)\,dt \\
\Rightarrow \quad & |f^{(k)}(x)| \le \int_0^1 t^k\,dt = \frac{1}{k+1}
\end{aligned}
$$

由上可知

$$M_4 \le \frac{1}{5}.$$

$$|R_n(f)| \le \frac{b-a}{180}(\frac{b-a}{2n})^4 M_4 \le \frac{b-a}{900}(\frac{b-a}{2n})^4 \le 0.5\times 10^{-6}$$

解得

$$n \ge 4。$$

因此，取 $n=4$, 将区间 $[0,1]8$ 等分，可得

x_i	0	1/8	1/4	3/8	1/2
$f(x_i)$	1.0000000	0.997398	0.989688	0.976727	0.958851
x_i		5/8	3/4	7/8	1
$f(x_i)$		0.936156	0.908858	0.877193	0.841471

分别采用复化 Simpson、梯形公式计算相应积分.

复化梯形公式

$$T_8(f) = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{8-1} f(x_k) + f(b)] \approx 0.945692.$$

复化 Simpson 公式

$$S_4(f) = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=1}^{4-1} f(x_{k+1/2}) + 2\sum_{k=1}^{4-1} f(x_k) + f(b)] \approx 0.9460832.$$

复化 Cotes 公式

$$\begin{aligned} C_2(f) = \quad & \frac{h}{90}[7f(a) + 32\sum_{k=1}^{2-1} f(x_{k+1/4}) + 12\sum_{k=1}^{2-1} f(x_{k+1/2}) \\ & +32\sum_{k=1}^{2-1} f(x_{k+3/4}) + 14\sum_{k=1}^{2-1} f(x_k) + f(b)] \approx 0.9460830. \end{aligned}$$

§5.3.3 自动选取积分步长

这一部分本应该在计算机上迭代实现, 去选择良好的步长

注意事项

- 使用复化梯形公式、Simpson 公式，首先要确定步长;
- 步长要根据余项确定, 涉及到高阶导数的估计;
- 高阶导数的估计一般比较困难, 且估计值往往偏大;
- 计算机上实现起来不方便, 通常采用 "事后估计法" .

事后估计法的思想

将积分区间逐次分半，利用前后两次近似值的误差小于已知精度, 自动确定 n

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

具体过程：以复化梯形公式为例

1. 将积分区间 $[a,b]$ 分成 n 等份： $h=(b-a)/n.$

这一部分其实是在推导 Richardson 外推，构造一个更高精度的积分近似.

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

2. 再将积分区间 $[a,b]$ 分成 $2n$ 等份： 即步长减半 $h_1=h/2.$

$$\begin{aligned} T_{2n}(f) &= \frac{h_1}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+2\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})+f(b)] \\ &= \frac{1}{2}T_n(f)+\frac{b-a}{2n}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2}) \end{aligned}$$

3. 终止条件. 由复化梯形公式的余项知

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

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

当 $f''(x)$ 变化不大时, 可知

$$\frac{I - T_n(f)}{I - T_{2n}(f)} \approx 4 \Rightarrow I \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)$$

因此误差控制条件

$$\left|\frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)\right| < \varepsilon$$

上述条件满足, 程序终止; 否则, 继续分半计算.

对于复化梯形公式

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

对于复化 Simpson 公式、Cotes 公式可以类推

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

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

目 录

由上节分析知，用复化梯形公式计算积分值 I，T_{2n} 的误差大约为 $\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)$，令

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

由复化梯形公式可知

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

从而可知

$$\begin{aligned}\frac{4T_{2n}-T_n}{3} &= \frac{1}{3}T_n + \frac{2(b-a)}{3n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) \\ &= \frac{b-a}{6n}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) + f(b)\right] = S_n\end{aligned}$$

即是

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

注释

- 上述公式说明，利用复化梯形公式前后两次积分近似值 T_n 和 T_{2n}，按照上式作出的线性组合得到了具有更高精度的积分值.
- 上公式称为梯形加速公式.
- Romberg 积分公式正是由此思想产生.

同理可知 Simpson 加速公式

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

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

通过上述 3 个积分值序列求积分近似值的方法，称之为 Romberg 积分法.

注释

4 个积分值序列：梯形值序列 $\{T_{2^k}\}$、Simpson 值序列 $\{S_{2^k}\}$、Cotes 值序列 $\{C_{2^k}\}$、Romberg 值序列 $\{R_{2^k}\}$ 满足

$$\begin{aligned} S_{2^k} &= \frac{4}{4-1} T_{2^{k+1}} - \frac{1}{4-1} T_{2^k} \\ C_{2^k} &= \frac{4^2}{4^2-1} S_{2^{k+1}} - \frac{1}{4^2-1} S_{2^k} \\ R_{2^k} &= \frac{4^3}{4^3-1} C_{2^{k+1}} - \frac{1}{4^3-1} C_{2^k} \end{aligned} \tag{4.2}$$

例题

用龙贝格求积算法计算 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$, 要求误差不超过 0.5×10^{-6}.

解：计算结果如下表

k	T_{2^k}	S_{2^k}	C_{2^k}	R_{2^k}
0	0.9207355	0.9461459	0.9460830	0.9460831
1	0.9397933	0.9460869	0.9460831	0.9460830
2	0.9445135	0.9460834	0.9460830	
3	0.9456909	0.9460830		
4	0.9459850			

注意到

$$|R_2 - R_1| = 0.1 \times 10^{-6}$$

故

$$I \approx R_2 = 0.9460830$$

龙贝格算法优点

- 格式简单：从最简单的梯形序列开始逐步线性加速;
- 占用内存小、精度高.

龙贝格算法计算过程

- 由公式 (4.2) 计算 T_{2^k}, 再计算 S_{2^k}， C_{2^k}， R_{2^k};
- 如果 $|R_{2^k} - R_{2^{k-1}}| \le \varepsilon$, 则输出 R_{2^k}; 否则将区间分半，再由 (4.2) 计算 $R_{2^{k+1}}$，再验证 $|R_{2^{k+1}} - R_{2^k}| \le \varepsilon$.

目录

§5.5.1 Gauss 积分问题的提法

积分公式的一般形式

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

1. 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；
2. 为了提高代数精度，需要适当选择求积节点:

问题

- 当求积节点个数确定后，不管这些求积节点如何选取，求积公式的代数精度最高能达到多少?
- 具有最高代数精度的求积公式中求积节点如何选取?

定理

形如如下积分公式

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

代数精度最高不超过 $2n+1$ 次.

证明：只需证明：对于上述插值型求积公式，存在一个 $2n+2$ 次多项式，使得求积公式不能精确成立. 令 $f(x) = \omega^2(x)$, 其中 $\omega = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$, 因为

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \omega^2(x)dx > 0, \quad \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = 0.$$

故求积公式不能精确成立.

下面讨论更具一般性的加权积分的积分公式

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \quad \rho(x)\text{为权函数}, \tag{5.3}$$

其中, 求积节点:

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$$

求积系数:

$$A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x)\,dx = \int_a^b \rho(x) \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}\,dx, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

选取合适节点 x_k 及系数 A_k 可使 (5.3) 具有 $2n+1$ 次代数精度.

定义 (Gauss 点及求积公式)

若一组节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a, b]$ 使得插值型求积公式 (5.3) 具有 $2n+1$ 次代数精度，则称此组节点为 *Gauss* 点，相应的求积公式为 *Gauss* 求积公式.

显然，构造 Gauss 求积公式的关键是求高斯点. 由代数精度定义，当 $f(x) = 1, x, \cdots, x^{2n+1}$ 时，求积公式恒成立, 即

$$\int_a^b x^j \rho(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^j, \quad j = 0, 1, \cdots, 2n+1$$

$2n+2$ 个未知数, $2n+2$ 个方程的非线性方程组, 似乎可以得到相应的 Gauss 积分公式. 当 n 很大时，计算复杂，通常则是利用正交多项式的特性来构建 Gauss 积分公式.

例：构造如下形式的高斯求积公式：

$$\int_0^1 \sqrt{x}f(x)\,dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

解：求未知量 $A_0, A_1, A_2, x_0, x_1, x_2$. 分别取 $f(x) = 1, x, x^2, x^3, x^4, x^5$，令公式准确成立，得

$$A_0 + A_1 + A_2 = \frac{2}{3}, \quad A_0 x_0 + A_1 x_1 + A_2 x_2 = \frac{2}{5},$$
$$A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \frac{2}{7}, \quad A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = \frac{2}{9},$$
$$A_0 x_0^4 + A_1 x_1^4 + A_2 x_2^4 = \frac{2}{11}, \quad A_0 x_0^5 + A_1 x_1^5 + A_2 x_2^5 = \frac{2}{13},$$

求解此方程组得

$$A_0 = 0.125782677, \quad A_1 = 0.307602358, \quad A_2 = 0.233281631,$$
$$x_0 = 0.164710292, \quad x_1 = 0.549868493, \quad x_2 = 0.900805827.$$

Matlab 程序示例：

```
AX0=rands(1,6);
f=@Fun; x=fsolve(f, AX0)

function F=Fun(AX)
A0=AX(1);   A1=AX(2);   A2=AX(3);   x0=AX(4);   x1=AX(5);   x2=AX(6);
F(1)=A0+A1+A2-2/3;
F(2)=A0*x0+A1*x1+A2*x2-2/5;
F(3)=A0*x0^2+A1*x1^2+A2*x2^2-2/7;
F(4)=A0*x0^3+A1*x1^3+A2*x2^3-2/9;
F(5)=A0*x0^4+A1*x1^4+A2*x2^4-2/11;
F(6)=A0*x0^5+A1*x1^5+A2*x2^5-2/13;
end
```

注释

- 当 n 很大时，求 $2n+2$ 个未知量的非线性方程组计算非常复杂，
- 考虑先求积分节点，再求求积系数。

§5.5.2 Gauss 积分公式

定理

插值求积公式 (5.3) 的节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a, b]$ 是高斯点的充要条件是 以这些节点为零点的多项式

$$\omega_{n+1} = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)$$

与任何不超过 n 次的多项式 $p(x)$ 带权正交，即

$$\int_a^b p(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)\,dx = 0.$$

证明： 必要性. 设 $p(x) \in H_n(x)$，则 $p(x)\omega_{n+1}(x) \in H_{2n+1}$. 因为 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a, b]$ 是高斯点，故而

$$\int_a^b p(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k p(x_k)\omega_{n+1}(x_k) = 0.$$

充分性. 对任意的 $f(x) \in H_{2n+1}$,

$$f(x) = p(x)\omega_{n+1}(x) + q(x), \quad p(x), q(x) \in H_n$$

所以

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx &= \int_a^b [p(x)\omega_{n+1}(x) + q(x)]\rho(x)\,dx \\ &= \int_a^b q(x)\rho(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k q(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).\end{aligned}$$

即求积公式 (5.3) 对一切不超过 $2n+1$ 次的多项式精确成立, 所以节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a, b]$ 是高斯点.

注释

上述定理表明: $[a, b]$ 上带权的 $n+1$ 次正交多项式的零点就是求积公式 (5.3) 的 Gauss 点.

Gauss 求积公式中求积系数的求法: 设 $x_0, x_1, \cdots, x_n \in [a, b]$ 是高斯点，由代数精度定义，得到 $n+1$ 阶线性方程组

$$\int_a^b x^j \rho(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^j, \quad j = 0, 1, \cdots, n$$

从而可得系数 A_k.
或者 $A_k = \int_a^b l_k(x)\rho(x)\, dx$.

Gauss 求积公式的余项

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

证明： 设 $H_{2n+1}(x)$ 是 $f(x)$ 在节点 x_k 的 Hermite 插值

$$H_{2n+1}(x_k) = f(x_k), \quad H'_{2n+1}(x_k) = f'(x_k), \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

于是

$$f(x) = H_{2n+1}(x) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)$$

从而

$$
\begin{aligned}
R_n(f) &= \int_a^b f(x)\rho(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\
&= \int_a^b f(x)\rho(x)\,dx - \int_a^b H_{2n+1}(x)\rho(x)\,dx \\
&= \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\rho(x)\,dx
\end{aligned}
$$

定理（稳定性）

Gauss 积分公式 (5.3) 总是稳定的.

证明：只需要证明系数 $A_k > 0, k = 0, 1, \cdots, n.$

因为 Gauss 型求积公式 (5.3) 对所有不超过 $2n+1$ 次的多项式都精确成立，取 $f(x) = l_k^2(x)$, 则

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx = \int_a^b l_k^2(x)\rho(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k l_k^2(x_k) = A_k > 0.$$

定理（收敛性）

若 $f(x) \in C[a,b]$, 则 *Gauss* 积分公式 (5.3) 是收敛的.

证明： 由 Weierstrass 定理知，对任意 $\varepsilon > 0$, 存在 m 次的多项式 $p(x)$ 使得

$$\|f(x) - p(x)\|_\infty < \frac{\varepsilon}{2\int_a^b \rho(x)\,dx}.$$

由插值公式可知

$$\begin{aligned}\left|\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\right| \le\ & \left|\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx - \int_a^b p(x)\rho(x)\,dx\right| \\ & + \left|\int_a^b p(x)\rho(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k p(x_k)\right| \\ & + \left|\sum_{k=0}^{n} A_k p(x_k) - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\right|\end{aligned}$$

注意到

$$\left|\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx - \int_a^b p(x)\rho(x)\,dx\right| \le \|f(x) - p(x)\|_\infty \int_a^b \rho(x)\,dx \le \frac{\varepsilon}{2}$$

$$
\begin{aligned}
\left|\sum_{k=0}^{n} A_k(p(x_k) - f(x_k))\right| &\leq \|f(x) - p(x)\|_\infty \sum_{k=0}^{n} A_k \\
&= \|f(x) - p(x)\|_\infty \int_a^b \rho(x)\,dx \leq \frac{\varepsilon}{2}
\end{aligned}
$$

当 $n \geq (m-1)/2, 2n+1 \geq m$ 时,

$$
\left|\int_a^b p(x)\rho(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k p(x_k)\right| = 0
$$

从而有

$$
\left|\int_a^b f(x)\rho(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\right| \leq \varepsilon.
$$

Gauss 求积公式的构造

根据前面的讨论，只需要取 $n+1$ 次正交多项式的 $n+1$ 个零点为求积节点，构造的求积公式即为 Gauss 求积公式.

下面仅以 Legendre 多项式和 Chebyshev 多项式为例.

区间的转化问题: 任意区间 $[a,b]$ 经过下列变换可变为区间 $[-1,1]$

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}, \quad t \in [-1,1]$$

从而积分

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

Gauss-Legendre 求积公式

权函数 $\rho(x)=1$，积分区间为 $[-1,1]$, 求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

其中求积节点 x_k 是 $n+1$ 次 Legendre 多项式的零点,
求积系数 $A_k=\int_{-1}^{1}\prod_{\substack{i=0\\ i\neq k}}^{n}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}\,dx.$

Gauss-Legendre 求积公式举例

1 点 Gauss-Legendre 公式 n=0: 由一次 Legendre 多项式 $P_1(x)=x$，其零点是 0.
系数 A_0 满足 $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = A_0 f(0)$，取 $f(x)=1$，得 $A_0=2$.
则求积公式为 $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx 2f(0)$, 代数精度为 1.
2 点 Gauss-Legendre 公式 n=1: 由二次 Legendre 多项式 $P_2(x)=(3x^2-1)/2$，其零点是 $\pm 1/\sqrt{3}$.
系数 A_0, A_1 满足 $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = A_0 f(-1/\sqrt{3}) + A_1 f(1/\sqrt{3})$，分别取 $f(x)=1, x$，得 $A_0=1, A_1=1$.
则求积公式为 $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$, 代数精度为 3.

Gauss-Legendre 求积公式

- 类似可得到高阶的 Gauss-Legendre 求积公式，先求 Legendre 多项式的零点作为求积节点，再求求积系数
- 求积节点关于原点对称，求积系数均为正
- 用 Gauss-Legendre 求积公式计算积分时在程序中预先定义求积系数和求积节点，注意积分区间的变换

Gauss-Chebyshev 求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\rho(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \quad \rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

其中求积节点 x_k 是 $n+1$ 次 Chebyshev 多项式的零点

$$x_k = \cos\frac{2k+1}{2n+2}\pi, \quad k = 0, 1, \cdots, n,$$

求积系数 $A_k = \pi/(n+1)$, 其余项为

$$R(f) = \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi), \quad \xi \in [-1, 1].$$

知识小结

主要内容

Newton-Cotes 公式、复化积分公式
Gauss 积分公式
数值微分：插值型的求导公式

重点及难点

重点：复化积分公式、Gauss 积分公式
难点：Gauss 积分公式

Many thanks for your attention !