第五章 数值积分

5.1 牛顿-科茨公式 (Newton - Cotes)

插值函数 $P(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x)$

积分公式 $\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x)\,dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\, w_n(x)\,dx$

令 $A_i = \int_a^b l_i(x)\,dx$

则 $\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

1. 梯形求积公式 (Trapezoidal rule)

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

精度为1阶

2. 抛物线求导公式 (Simposon 公式)

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

在 a, $\frac{a+b}{2}$, b 三点取值.

精度为3阶.

3. Newton - Cotes 公式

$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{w(x)}{(x-x_i)\, w'(x_i)} f(x_i)$ ，等分区间取值，作 n 次多项式插值.

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b \frac{w(x)}{(x-x_i)\, w'(x_i)}\,dx\right) f(x_i)$$

$$= \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

其中 $A_i = \int_a^b \frac{w(x)}{(x-x_i)\, w'(x_i)}\,dx$

令 $x = a + th$，则

$$A_i = \int_0^n \frac{h^{n+1} t(t-1)\cdots(t-n)}{h(t-i)(-1)^{n-i} h^n (i!)\,(n-i)!}\, h\,dt$$

$$= \frac{(-1)^{n-i} h}{(i!)\,(n-i)!} \int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-i}\,dt$$

定义 Newton-Cotes 系数 $C_i^{(n)}$

$$C_i^{(n)} = \frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot(i!)\cdot(n-i)!} \int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-i}\,dt.$$

则 $A_i = (b-a)\, C_i^{(n)}$

$\therefore \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} (b-a)\, C_i^{(n)} f(x_i)$

5.2 误差估计

代数精确度：$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 对 $\forall f(x) \in P_n(x)$ 成立，

则最大的 n 称为求积公式的代数精确度。

注：代数精确度提供了一种通常可行的计算精确度的判确依据。

定理1：由 $n+1$ 个节点确定的牛顿-科茨公式至少有 n 次代数精确度。

证明：若 $f(x) \in P_n(x)$，则 $f^{(n+1)}(x) = 0$

$$\therefore f(x) = \varphi_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_n(x) = \varphi_n(x)$$

$$\therefore \int_a^b f(x) = \int_a^b \varphi_n(x)\,dx \quad \square.$$

定理2：若 n 为偶数，则牛顿-科茨公式至少有 $(n+1)$ 次代数精确度。

证明：若 $\partial f(x) = n+1$，则 $f^{(n+1)}(x) = (n+1) b_{n+1}$

$$\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx = b_{n+1}\int_a^b \omega(x)dx = b_{n+1}h^{n+2}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)\,dt$$

令 $n=2k$，$u=t-k$.

$$\text{原式} = b_{n+1}h^{n+2}\int_0^{2k} t(t-1)\cdots(t-n)\,dt = b_{n+1}h^{n+2}\int_{-k}^{k}(u+k)(u+k-1)\cdots(u-k)\,du = 0$$

（被积函数是奇函数）. $\square$.

注：1° 代数精确度高不保证结果一定好

2° 当 $n \geq 8$ 时，Newton-Cotes 系数出现负数，产生数值不稳定。所以通常不用 $n=8$ 及以上的 Newton-Cotes 公式。

又因为六阶与七阶精度相同，所以一般也不用七阶。

最终，通常用到的是 $n=2,4,6$ 的 Newton-Cotes 公式，分别称为 Simpson 公式，Cotes 公式，（$n=6$ 时没名字）

~~带误差项的求积公式：~~

带误差项的 Newton-Cotes 公式

梯形公式：$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] - \frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$

Simpson：$\int_a^b f(x)dx = \frac{(b-a)}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)] - \frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$

梯形求积公式的误差估计：

若 $f(x)\in C^2_{[a,b]}$，则

$$R_1(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

3阶量 vs 1次代数精确度？（无关）

$(\eta\in[a,b])$

证明：

$$f(x)-P_1(x)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)$$

$$R_1(f)=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,dx$$

$\because$ $f''(\xi(x))$ 在 $[a,b]$ 上连续

$\frac{1}{2}(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上不变号.

利用积分中值定理

$$R_1(f)=f''(\eta)\int_a^b\frac{1}{2}(x-a)(x-b)\,dx$$

$$=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\qquad(\eta\in[a,b])$$

附：积分中值定理

若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，$g(x)$ 在 $[a,b]$ 上有界，可积且不变号，

则 $\exists\,\xi\in(a,b)$，st.

$$\int_a^b f(x)g(x)dx=f(\xi)\int_a^b g(x)dx$$

注：$g(x)$ 在这里可以视为权函数，定理的证明不困难.

抛物形求积公式的误差估计：

若 $f(x)\in C^4_{[a,b]}$，则

$$R_2(f)=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

$$=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta)$$

$n\geq 3$ 的 N-C 公式的误差估计结论不显然，要考么？

证明：因为 Simpson 公式有三次代数精度，所以应构造三次多项式来估计误差.

令 $P_3(x)$ 满足：$P_3(a)=f(a)$，$P_3(b)=f(b)$，$P_3\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{a+b}{2}\right)$，

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

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

又 $\int_a^b P_3(x)dx=\frac{b-a}{6}\left[P_3(a)+4P_3\left(\frac{a+b}{2}\right)+P_3(b)\right]=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$

$\therefore R_2(f)=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b P_3(x)dx=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,dx$

$\because$ $f^{(4)}(\xi)$ 连续，$\frac{1}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上有界、可积、不变号.

由积分中值定理 $R_2(f)=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\cdot\frac{(b-a)^5}{\ldots}=-\frac{(b-a)^5}{\ldots}f^{(4)}(\eta)$

5.3 复化公式及其误差估计.

复化公式：分段低次多项式插值积分公式.

1° 等分区间$[a,b]$为n等分，步长$h=\frac{b-a}{n}$

2° 在子区间$[x_k, x_{k+1}]$上用低次Newton - Cotes公式积分，得I_k

3° $I=\sum_k I_k$.

复化梯形求积公式 T_n：（T for trapezium）

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

注：$T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+H_n)$，其中$H_n=h\sum_{k=1}^{n} f\left(a+\frac{(2k-1)h}{2}\right)$

$(h=\frac{b-a}{n})$

复化抛物线求积公式 S_n：（S for Simpson）

$$S_n = \frac{h}{3}\left[f(a)+4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k})+f(b)\right]$$

其中 $m=\frac{n}{2}$，n为偶数．n为取点区间数，m为积分区间数．

$(h=\frac{b-a}{n})$

复化梯形求积公式的误差估计

$$R(f,T_n)=\int_a^b f(x)dx - T_n = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta) \qquad (\eta\in[a,b])$$

$(h=\frac{a-b}{n})$

（证明：$R(f,T_n) = -\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)$ 　（$\eta_k\in[x_k, x_{k+1}]$）.

$\because f''(x)\in C^0_{[a,b]}$

由连续函数的介值定理.

$\exists\ \eta\in[a,b]$ ： $\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) = n f''(\eta)$

$\therefore R(f,T_n) = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta)$）

复化抛物线公式的误差估计：

$$R(f,S_n)=\int_a^b f(x)dx - S_n = -\frac{m h_1^5}{2880}f^{(4)}(\eta) \qquad (\eta\in[a,b])$$

h_1：积分区间长，　h：取点步长，　$2h=h_1$

m：积分区间数，n：取点区间数，　$n=2m$

5.4 逐次分半法

1° 逐次对分，比较前后两次计算值

2° 误差合要求则停止，否则继续做1°.

梯形求积公式的逐次分半法：

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + h_{2n}\sum_{i=1}^{n} f[a+(2i-1)h_{2n}]$$

误差估计：

$$I - T_n = -\frac{n h_n^3}{12} f''(\eta_n)$$

$$I - T_{2n} = -\frac{(2n) h_{2n}^3}{12} f''(\eta_{2n})$$

$$\therefore T_{2n} - T_n = -\frac{(2n) h_{2n}^3}{12}\left[4 f''(\eta_n) - f''(\eta_{2n})\right]$$

$$\because f''(\eta_n) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i)$$

$$f''(\eta_{2n}) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{2n} f''(\eta_i) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{f''(\eta_{2i-1}) + f''(\eta_{2i})}{2}$$

当 n 充分大时，由于 $f''(\eta)$ 的连续性， 不一定，$f''(\eta)$ 的连续是分区间的

$$f''(\eta_n) \approx f''(\eta_{2n})$$

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

（停止准则）∴ 当 $|T_{2n} - T_n| < 3\varepsilon$ 时，T_{2n} 满足精度要求.

抛物线求积公式的逐次分半法：

$$S_{2n} = \frac{h_{2n}}{3}\left[f(a) + 4S_{2n}^{(2)} + 2S_{2n}^{(1)} + f(b)\right] \quad (n = 1, 2, 4, \cdots)$$

其中 $S_{2n}^{(1)}$ 是上一次内部分点上的函数值之和. $S_{2n}^{(1)} = \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i})$

$S_{2n}^{(2)}$ 是这次新生成的内部分点上的函数值之和。$S_{2n}^{(2)} = \sum_{i=1}^{n} f(x_{2i-1})$

误差估计：

$$I - S_{2n} = -\frac{n \cdot h_{2n}^5}{2880} f^{(4)}(\eta_{2n})$$

$$I - S_n = -\frac{(\frac{n}{2}) \cdot h_n^5}{2880} f^{(4)}(\eta_n)$$

$$\therefore S_{2n} - S_n = -\frac{n h_{2n}^5}{2880}\left[16 f^{(4)}(\eta_n) - f^{(4)}(\eta_{2n})\right]$$

$$\approx 15 (I - S_{2n})$$

（停止准则）∴ 当 $|S_{2n} - S_n| \le 15\varepsilon$ 时，S_{2n} 满足精度要求.

5.5 Romberg 积分法

复化Simpson求积公式： $S_{2n} = \frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$

复化Cotes求积公式： $C_{2n} = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2-1}$

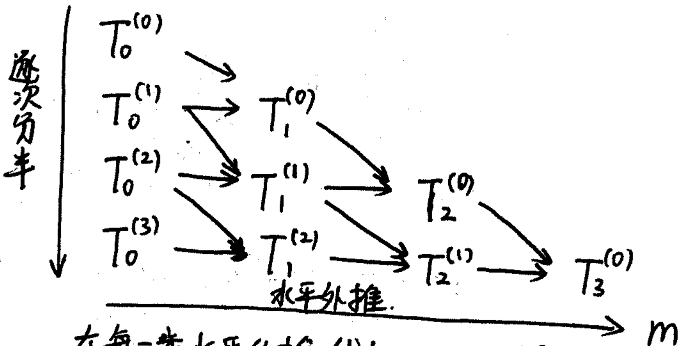
复化Romberg求积公式： $R_{2n} = \frac{4^3 C_{2n}-C_n}{4^3-1}$

Richardson外推法：

$$T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1}.$$

其中,m是外推次数，k是一个指标。

T图如下：



在每一步水平外推线上，m+k 守恒。

k的意义在于，

5.6 高斯型求积公式.

① 对一般的n个节点的求积公式 $I=\sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$,

如果有m次代数精确度则对 $\forall\, a_0 \sim a_m$,

$$\int_a^b \sum_{i=0}^{m} a_i x^i dx = \sum_{k=1}^{n} A_k \sum_{i=0}^{m} a_i x_k^i$$

有方程组

$$\sum_{k=1}^{n} A_k x_k^i = \mu_i \quad (i=0,\cdots,m)$$

其中 $\mu_i = \int_a^b x^i dx$

则要有唯一解，则 $m+1 = 2n$.

结论：n个节点的求积公式最高代数精确度为$(2n-1)$.

② 高斯型积分法

给定节点数 n 时，代数精确度最高的求积公式.（$m=2n-1$）

这样的求积节点为 Gauss 点。

①中已经论证了高斯型积分法的可行性，现求此法中的 x_k 与 a_k.

假设高斯点为 $x_1,\cdots,x_n$，构造函数

$$w_n(x)=(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

如果 $f(x)$ 是次数不高于 $(2n-1)$ 的多项式，由多项式带余除法，得

$$f(x)=q(x)w_n(x)+r(x)$$

其中 $q(x)$，$r(x)$ 是次数均不高于 $(n-1)$ 的多项式.

因为高斯型积分法有 $(2n-1)$ 次代数精确度，得

$$\int_a^b W(x)f(x)\,dx=\sum_{k=1}^{n}A_kf(x_k)$$

$$\because \int_a^b W(x)f(x)\,dx=\int_a^b W(x)q(x)w_n(x)\,dx+\int_a^b W(x)r(x)\,dx$$

$$f(x_k)=q(x_k)w_n(x_k)+r(x_k)=r(x_k)$$

$$\therefore \int_a^b W(x)q(x)w_n(x)\,dx+\int_a^b W(x)r(x)\,dx=\sum_{k=1}^{n}A_kr(x_k)$$

选取不同的 $f(x)$，使得 $q(x)$ 不同，$r(x)$ 相同。则对任意不高于 $(n-1)$ 次的多项式 $q(x)$

$$\int_a^b W(x)q(x)w_n(x)\,dx=\int_a^b W(x)\,0\cdot w_n(x)\,dx=0$$

所以 n 次多项式 $w_n(x)$ 与任意次数不高于 $(n-1)$ 的多项式在 $[a,b]$ 上关于权函数 $W(x)$ 正交，

所以 $w_n(x)$ 是在 $[a,b]$ 上关于权函数 $W(x)$ 的正交多项式族 $\{Q_n(x)\}$ 中的 $Q_n(x)$，于是确定了 x_k.

用 $(n-1)$ 次多项式插值，得

$$r(x)=\sum_{k=1}^{n}\frac{w_n(x)}{(x-x_k)w_n'(x_k)}r(x_k)$$

$$\therefore \int_a^b W(x)r(x)=\sum_{k=1}^{n}r(x_k)\int_a^b W(x)\frac{w_n(x)}{(x-x_k)w_n'(x_k)}\,dx$$

又 $\because \int_a^b W(x)r(x)=\sum_{k=1}^{n}A_kr(x_k)$，且 $r(x_k)$ 是任意的

$$\therefore A_k=\int_a^b\frac{W(x)w_n(x)}{(x-x_k)w_n'(x_k)}\,dx$$，于是确定了 A_k.

③ 高斯型求积公式的误差.

定理：若 $f(x) \in C^{2n}_{[a,b]}$，则

$$R(f, G_n) = \int_a^b w(x) f(x) dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

$$= \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!} \int_a^b w(x) \omega_n^2(x)\, dx \qquad (\eta \in (a,b))$$

证明：在高斯点上作 Hermite 插值，得 $2n-1$ 次多项式 $H_{2n-1}(x)$.

Hermite 插值的截断误差为

$$f(x) - H_{2n-1}(x) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \omega_n^2(x) \qquad (\xi \in [a,b])$$

则 $\int_a^b W(x) f(x) dx = \int_a^b W(x) H_{2n-1}(x) dx + \frac{1}{(2n)!}\int_a^b W(x) f^{(2n)}(\xi) \omega_n^2(x) dx$

∵ 高斯型积分法有 $2n-1$ 次代数精确度

∴ $\int_a^b W(x) H_{2n-1}(x) dx = \sum_{k=1}^{n} A_k H_{2n-1}(x_k)$

又 $f(x_k) = H_{2n-1}(x_k) \quad (k=1, \cdots, n)$

∴ $R(f, G_n) = \int_a^b W(x) f(x) dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$

$$= \frac{1}{(2n)!} \int_a^b W(x) f^{(2n)}(\xi) \omega_n^2(x) dx$$

∵ $f^{(2n)}(\xi)$ 在 $[a,b]$ 上连续，$W(x)\,\omega_n^2(x)$ 在 $[a,b]$ 上有界，可积，不变号.

由积分中值定理，得

$$\int_a^b W(x) f^{(2n)}(\xi) \omega_n^2(x) dx = f^{(2n)}(\eta) \int_a^b W(x) \omega_n^2(x) dx$$

∴ 误差函数

$$R(f, G_n) = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{2n!} \int_a^b W(x) \omega_n^2(x) dx$$

注：这个误差估计的证明只对有界区间上的积分成立，对形如 $[0,+\infty)$，$(-\infty,+\infty)$ 上的积分不行。

④ 常用的高斯型求积公式.

1° Gauss - Legendre 求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx$$

2° Gauss - Laguerre 求积公式

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x) dx$$

3° Gauss - Hermit 求积公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x) dx.$$

高斯型求积公式的优缺点：

优点：1° 代数精确度最高

2° 可计算广义积分

缺点：1° 节点位置 x_k 和系数 A_k 计算麻烦

2° 节点加密时，不能利用前面的计算结果.