§5　数值积分

- §5.1　机械求积公式
- §5.2　Newton_Cotes公式
- §5.3　变步长求积公式及其加速收敛技巧
- §5.4　Gauss公式

§5.1 机械求积公式

第1节　引言

定积分的计算可用著名的牛顿-莱布尼兹公式来计算:

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

其中$F(x)$是$f(x)$的原函数之一，可用不定积分求得

问题:

- 被积函数$f(x)$是用函数表格提供
- $f(x)$极为复杂，求不出原函数
- 大量函数的原函数不容易或根本无法求出

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \qquad \int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx \qquad H(x) = \frac{4Ir}{r^2 - x^2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - \left(\frac{x}{r}\right)^2 \sin^2\theta}\; d\theta$$

只能运用数值积分, 求积分近似值 .

第2节　数值积分的基本方法

1　数值积分的基本思想

$\int_a^b f(x)dx$ 就是在区间[a, b]内取n+1个点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$
利用被积函数 $f(x)$ 在这 n+1 个点的函数值的
某一种线性组合来近似作为待求定积分的值.

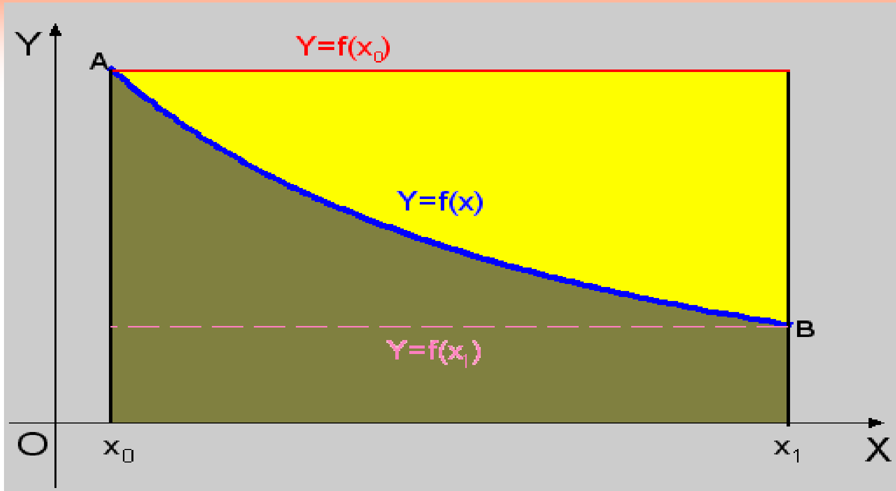
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

其中，x_k 称为积分节点，A_k 称为求积系数。

因此，数值积分公式关键在于积分节点 x_k 的选取和积分系数 A_k 的决定，其中 A_k 与被积函数 $f(x)$ 无关。称为机械求积公式。

2 简单算例

例1： 求积分 $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$



此积分的几何意义相当于如图所示的曲边梯形的面积。

解： 用 $f(x)$ 的零次多项式 $y = L_0(x) = f(x_0)$ 来近似代替 $f(x)$

于是有

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f(x_0)dx$$

$$= f(x_0)(x_1 - x_0)$$

（为左矩公式）

推广1: $$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f(x_1)dx$$

$$= f(x_1)(x_1 - x_0)$$ （为右矩公式）

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} f(\frac{x_0 + x_1}{2})dx$$

$$= f(\frac{x_0 + x_1}{2})(x_1 - x_0)$$ （为中矩公式）

推广2:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$$

用 $f(x)$ 的一次多项式

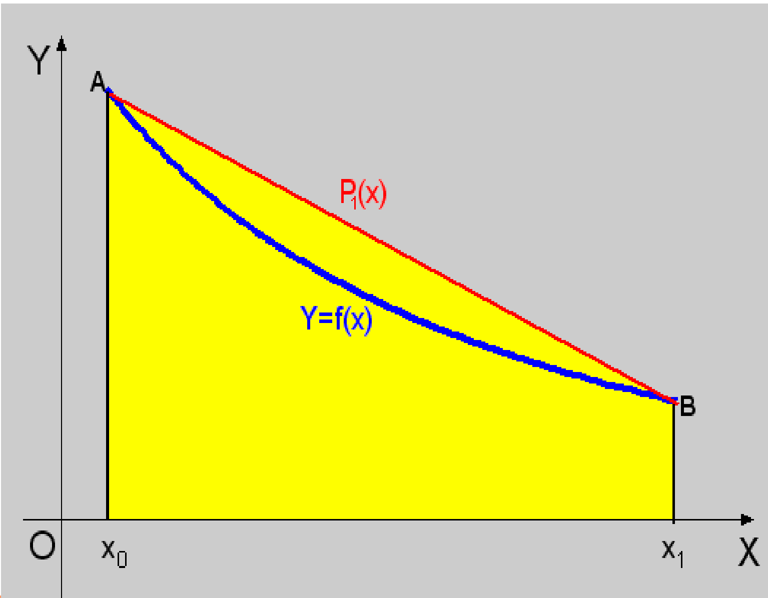
$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)$$

来近似代替$f(x)$，于是，

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} L_1(x)dx$$

$$=\int_{x_0}^{x_1}\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1)\right)dx$$

$$=\frac{1}{2}(x_1-x_0)\left[f(x_0)+f(x_1)\right]$$



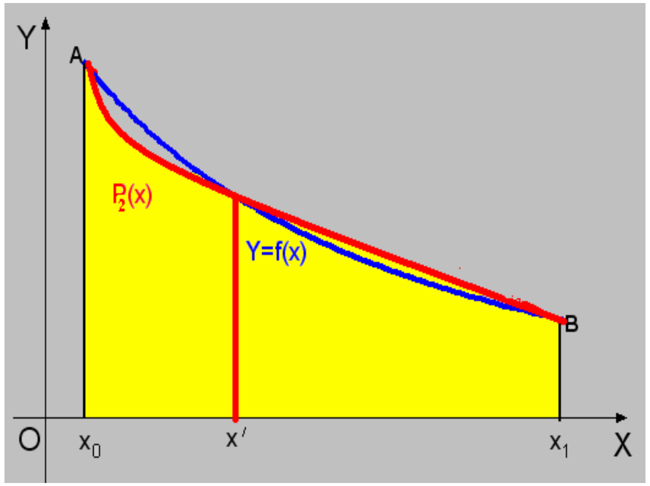
（为梯形公式）

推广3:

用$f(x)$的二次插值多项式, 其中$x_0 < x' < x_1$ $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$

$$L_2(x)=\frac{(x-x')(x-x_1)}{(x_0-x')(x_0-x_1)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x'-x_0)(x'-x_1)}f(x')$$

$$+\frac{(x-x_0)(x-x')}{(x_1-x_0)(x_1-x')}f(x_1)$$ 来近似代替$f(x)$



有 $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_1} L_2(x)dx$

特别地：当 $x'=\frac{1}{2}(x_0+x_1)$ ，于是,

Simpson公式

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{(x_1-x_0)}{6}\left[f(x_0)+4f\left(\frac{x_0+x_1}{2}\right)+f(x_1)\right]$$

第3节　代数精度法

为了使一个求积公式能对更多的积分具有较好的实际计算意义，就要求它对尽可能多的被积函数都准确地成立。因此定义代数精度的概念：

定义　若积分 $\int_a^b f(x)dx$ 的数值积分公式

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

对于任意　$f(x)=x^i(i=0,1,\cdots,m)$　多项式都精确成立，

但对　$f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立，

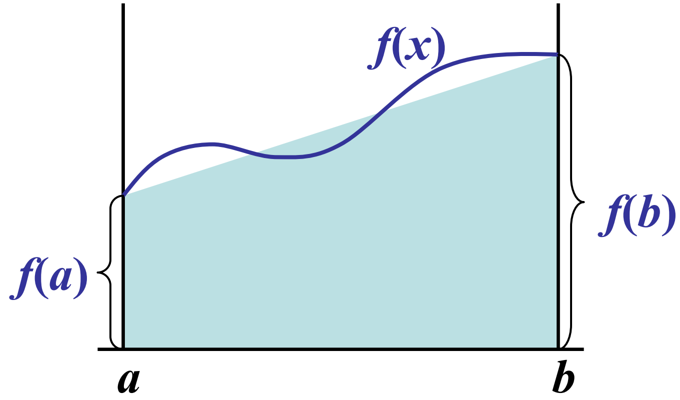
则称该数值积分公式具m 次代数精确度。

例1: 对于$[a, b]$上1次插值，有$L_1(x)=\frac{x-b}{a-b}f(a)+\frac{x-a}{b-a}f(b)$

$$\Rightarrow A_1 = A_2 = \frac{b-a}{2} \Rightarrow \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

考察其代数精度。

梯形公式



解: 逐次检查公式是否精确成立

代入 $L_0=1$: $\int_a^b 1\,dx = b-a = \frac{b-a}{2}[1+1]$

代入 $L_1=x$: $\int_a^b x dx=\frac{b^2-a^2}{2} = \frac{b-a}{2}[a+b]$

代入 $L_2=x^2$:$\int_a^b x^2dx=\frac{b^3-a^3}{3} \neq \frac{b-a}{2}[a^2+b^2]$

代数精度 $=1$

另外, 可以证明矩形公式具0次代数精度,

Simpson公式具3次代数精度.

例2. 试确定下面积分公式中的参数使其代数精确度尽量高.

$$I=\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I_2$$

解:

$f(x)=x^0$ $\quad I=\int_0^h x^0 dx=h \quad I_2=h$

$f(x)=x^1$ $\quad I=\int_0^h x^1 dx=\frac{h^2}{2} \quad I_2=\frac{h^2}{2}$

$f(x)=x^2$

$$I=\int_0^h x^2 dx=\frac{h^3}{3} \qquad I_2=\frac{h^3}{2}+ah^2[0-2h]=(\frac{1}{2}-2a)h^3$$

令$I=I_2$ $\quad a=\frac{1}{12}$

$$I=\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]=I_2$$

$f(x)=x^3$

$$I=\int_0^h x^3dx=\frac{h^4}{4} \qquad I_2=\frac{h^4}{2}+ah^2[0-3h^2]=\frac{h^4}{4}$$

$f(x)=x^4$

$$I=\int_0^h x^4dx=\frac{h^5}{5} \qquad I_2=\frac{h^5}{2}+ah^2[0-4h^3]=\frac{h^5}{6}$$

因此 $\qquad I(x^j)=I_2(x^j) \quad j=0,1,2,3$

$$I(x^4)\neq I_2(x^4)$$

所以该积分公式具有3次代数精确度.

第4节　插值求积法

近似计算 $I=\int_a^b f(x)dx$

利用插值多项式 $P_n(x)\approx f(x)$则积分容易计算。

利用插值多项式来构造数值求积公式，具体步骤如下:

☞ 在$[a, b]$上取 $a\le x_0<$ …… 多

项式 $L_n(x)=\sum\limits^{n} f(x_k)l_k(x)$ …… 到

插值型积分公式

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

A_k

$$A_k=\int_a^b\prod_{j\neq k}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}dx$$

由节点决定，与 $f(x)$ 无关。

不同的插值方法有不同的基函数

误差 $R[f]$

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

$$= \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx = \int_a^b R_n(x)dx$$

$$= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k)\, dx$$

定理5.1: N+1个节点的求积公式 $\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

($A_k = \int_a^b l_k(x)dx$) 为插值型 $\Leftrightarrow$

该求积公式至少有 N 次代数精度.

§5.2 Newton-Cotes公式

第1节　Newton-Cotes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

设函数　$f(x) \in C[a,b]$

将积分区间$[a,b]$分割为n等份

各节点为　$x_k = a + kh$　，　$k = 0,1,\cdots,n$

$$h = \frac{b-a}{n} \text{ 为步长}$$

$f(x)$的*Lagrange*的插值多项式及余项分别为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x) \quad R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

其中 $l_k(x)=\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}$ $\xi\in[a,b]$ $\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$

而 $f(x)=L_n(x)+R_n(x)$

因此对于定积分 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$

有 $I(f)=\int_a^b f(x)dx=\int_a^b [L_n(x)+R_n(x)]dx$

$$I=\int_a^b f(x)dx=\int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)dx+\int_a^b R_n(x)dx$$

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

其中 $A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx$

令 $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ n阶Newton-Cotes求积公式

$R(I_n)=\int_a^b R_n(x)dx$ Newton-Cotes公式的余项(误差)

即有 $I(f)=I_n(f)+R(I_n)$ $I(f)\approx I_n(f)$

A_k计算： $\boxed{\text{注意是等距节点}}$

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx$$

假设 $x = a + th$ 由 $x \in [a,b]$ 可知 $t \in [0,n]$

$$A_k = \int_a^b \prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}} \frac{x-x_j}{x_k-x_j}dx = \int_0^n \left(\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}} \frac{(t-j)h}{(k-j)h} \right) \cdot h \cdot dt$$

$$= \frac{h\cdot(-1)^{n-k}}{k!\cdot(n-k)!} \int_0^n \prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}} (t-j)dt$$

$$=(b-a)\cdot\boxed{\frac{(-1)^{n-k}}{n\cdot k!\cdot(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{0\le j\le n\\ j\ne k}}(t-j)dt}$$

$$A_k \triangleq (b-a)\cdot\boxed{C_k^{(n)}}$$

$C_k^{(n)}$为Cotes系数

所以Newton-Cotes公式化为

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

使用n次Lagrange插值多项式的Newton-Cotes公式至少具有n次代数精度,并且n为偶数时至少具有n+1次代数精度,试以n=1,2,4为例说明该结果。

第二节　低阶Newton-Cotes公式及其余项

在**Newton-Cotes**公式中,**n=1,2,4**时的公式是最常用也最重要三个公式,称为低阶公式

1.梯形(trapezoid)公式及其余项

取 $n=1$, 有 $x_0=a$, $x_1=b$, $h=b-a$

Cotes系数为

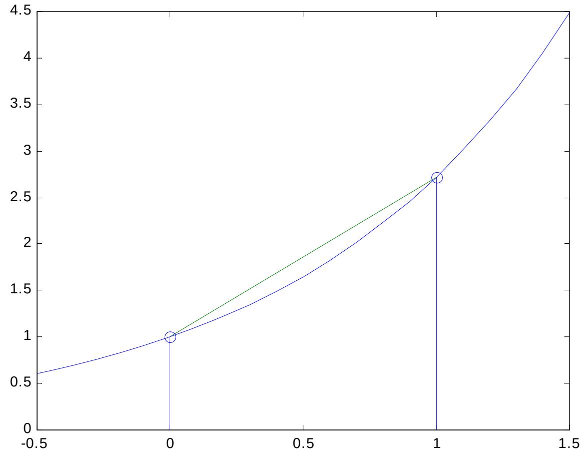
$$C_0^{(1)}=-\int_0^1(t-1)dt=\frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)}=\int_0^1 t dt=\frac{1}{2}$$

求积公式为

$$I_1(f) = (b-a)\sum_{k=0}^{1} C_k^{(1)} f(x_k)$$

$$= \frac{b-a}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$$



即 $$I_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

上式称为**梯形求积公式**,也称**两点公式**，记为

$$T = I_1(f) = \frac{(b-a)}{2}[f(a) + f(b)]$$

梯形公式的余项为

$$R(T) = R(I_1) = \int_a^b R_1(x)dx$$

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$
$$=f[x,x_0,\dots,x_n]\omega_{n+1}(x)$$

$$R(T)=\int_a^b f[x,a,b](x-a)(x-b)dx$$

$$=f[\xi,a,b]\int_a^b (x-a)(x-b)dx \quad \xi\in[a,b]$$

积分第二中值定理

均差性质

$$=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)dx \qquad \eta\in[a,b]$$

$$=-\frac{f''(\eta)}{2}\frac{(b-a)^3}{6}=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

故 $$|R(T)|\le\frac{(b-a)^3}{12}M_2 \qquad M_2=\max_{x\in[a,b]}|f''(x)|$$

梯形(trapezia)公式具有 1 次代数精度。

积分第二中值定理:

设在区间[*a*, *b*]上函数*f* (*x*)连续，而函数φ(*x*)可积且不变号，则在开区间(*a*, *b*)内至少存在一点ξ，使

$$\int_a^b f(x)\cdot\varphi(x)dx = f(\xi)\int_a^b \varphi(x)dx \quad \xi\in(a,b)$$

均差性质:

$$f[x,x_0,\dots,x_n]\omega_{n+1}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

$$\Rightarrow f[x,x_0,\dots,x_k]=\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!},\quad \xi\in(x_{\min},x_{\max})$$

2. Simpson公式及其余项

取 $n = 2$，有 $x_0 = a$，$x_1 = \dfrac{b+a}{2}$，$x_2 = b$，$h = \dfrac{b-a}{2}$

Cotes系数为

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)} = \frac{-1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt = \frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)} = \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)tdt = \frac{1}{6}$$

求积公式为

$$I_2 = (b-a)\sum_{k=0}^{2} C_k^{(2)} f(x_k)$$

$$I_2(f) = (b-a)[\frac{1}{6}f(x_0)+\frac{4}{6}f(x_1)+\frac{1}{6}f(x_2)]$$

$$= \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$$

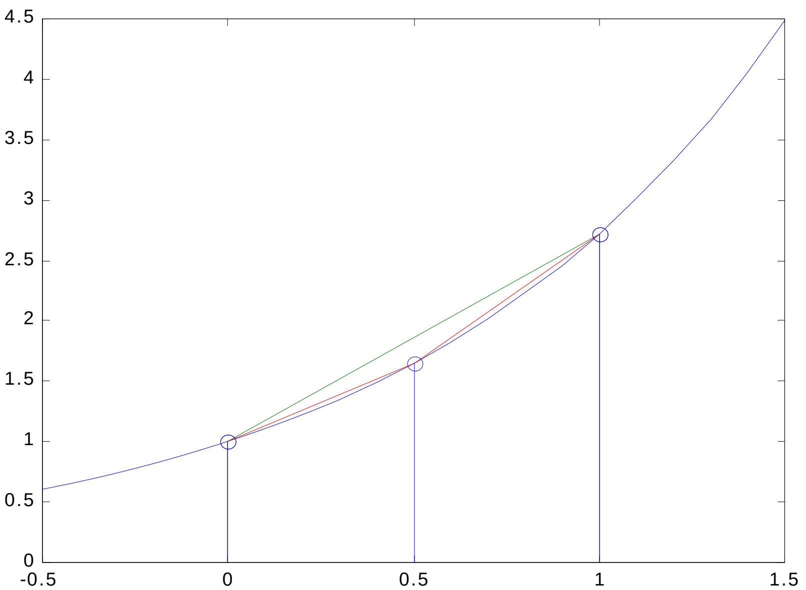
上式称为**Simpson求积公式**，也称**三点公式或抛物线公式**

记为 $S = I_2(f)$

Simpson公式的余项为

$$R(S) = R(I_2) = \int_a^b R_2(x)dx$$

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



Simpson公式具有 3 次代数精度。

3. Cotes公式及其余项

取 $n=4$,有 $x_k=a+kh$, $k=0,1,\cdots,4$, $h=\dfrac{b-a}{4}$

Cotes系数为

$$C_0^{(4)}=\frac{1}{4\cdot4!}\int_0^4(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)dt=\frac{7}{90}$$

$$C_1^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot3!}\int_0^4 t(t-2)(t-3)(t-4)dt=\frac{32}{90}$$

$$C_2^{(4)}=\frac{1}{4\cdot2!\cdot2!}\int_0^4 t(t-1)(t-3)(t-4)dt=\frac{12}{90}$$

$$C_3^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot3!}\int_0^4 t(t-1)(t-2)(t-4)dt=\frac{32}{90}$$

$$C_4^{(4)}=-\frac{1}{4\cdot4!}\int_0^4 t(t-1)(t-2)(t-3)dt=\frac{7}{90}$$

求积公式为

$$
\begin{aligned}
I_4(f) &= (b-a)\sum_{k=0}^{4} C_k^{(4)} f(x_k) \\
&= (b-a)[\frac{7}{90} f(x_0) + \frac{32}{90} f(x_1) + \frac{12}{90} f(x_2) + \frac{32}{90} f(x_3) + \frac{7}{90} f(x_4)] \\
&= \frac{b-a}{90}[7 f(x_0) + 32 f(x_1) + 12 f(x_2) + 32 f(x_3) + 7 f(x_4)]
\end{aligned}
$$

上式称为**Cotes求积公式**，也称**五点公式** 记为 $C = I_4(f)$

Cotes公式的余项为

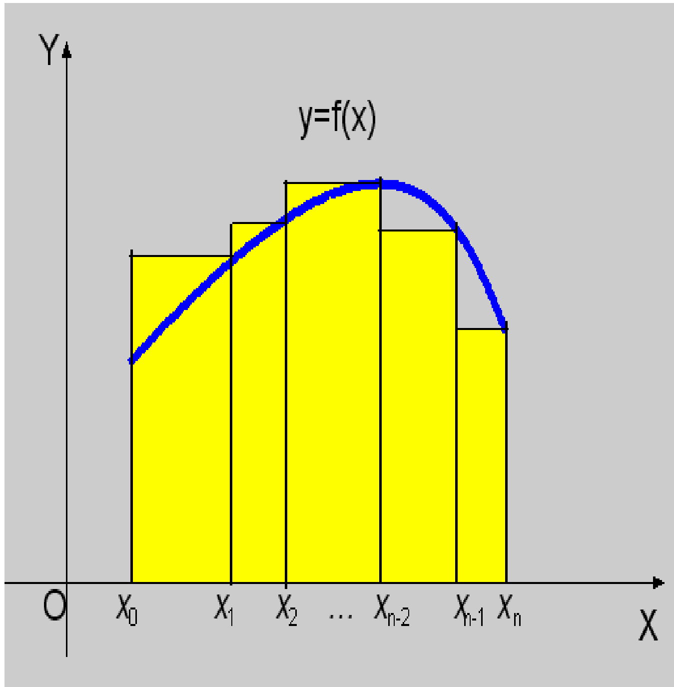
$$
R(C) = R(I_4) = \int_a^b R_4(x)dx = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)
$$

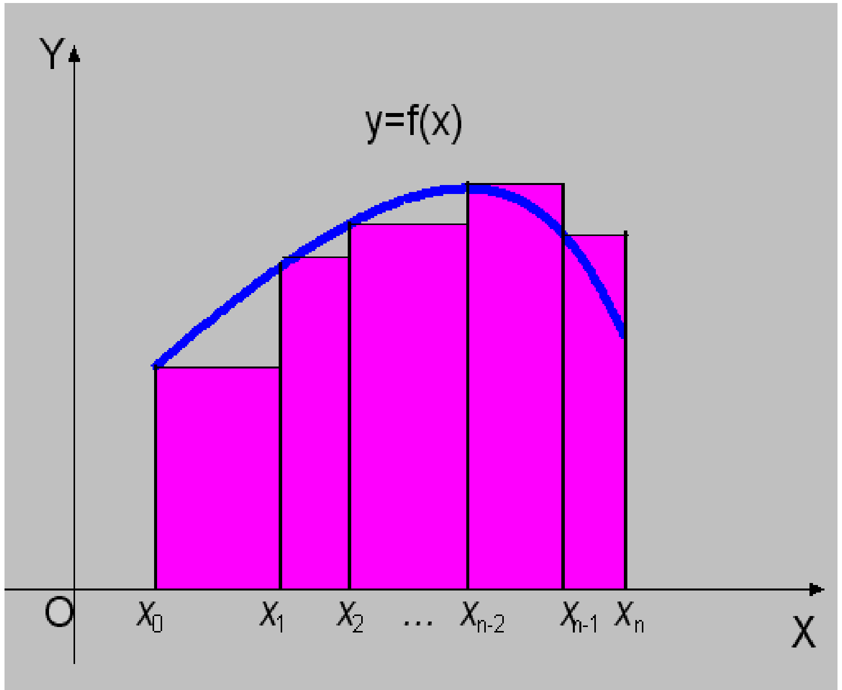
Cotes公式具有**5**次代数精度。

第3节　　复化求积公式

高次插值有**Runge 现象**，故采用分段低次插值

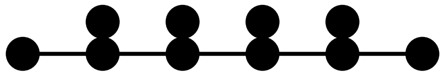
⇒ 分段低次合成的 ***Newton-Cotes*** 复化求积公式。





- 复化梯形公式： $h=\dfrac{b-a}{n},\ x_k=a+kh\quad (k=0,\dots,n)$

在每个 $[x_{k-1},x_k]$ 上用梯形公式：



$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \approx \frac{x_k-x_{k-1}}{2}[f(x_{k-1})+f(x_k)],\quad k=1,\dots,n$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n}\frac{h}{2}[f(x_{k-1})+f(x_k)]=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]=T_n$$

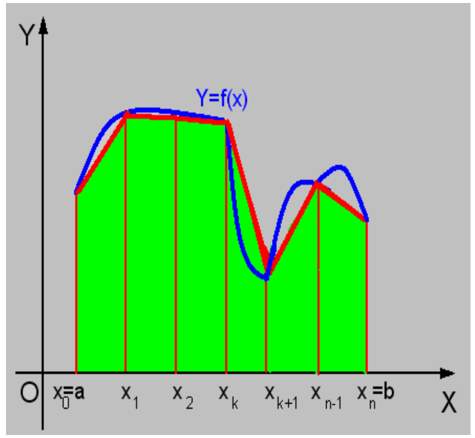
余项：

$$R[f]=\sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)\right]=-\frac{h^2}{12}(b-a)\frac{\sum_{k=1}^{n}f''(\xi_k)}{n}$$

而 $\min\limits_{a\le x\le b} f''(x)\le \sum\limits_{k=0}^{n-1}\dfrac{f''(\xi_k)}{n}\le \max\limits_{a\le x\le b} f''(x)$

由介值定理知：$\exists \xi\in(a,b)$ 使 $f''(\xi)=\sum\limits_{k=0}^{n-1}\dfrac{f''(\xi_k)}{n}$

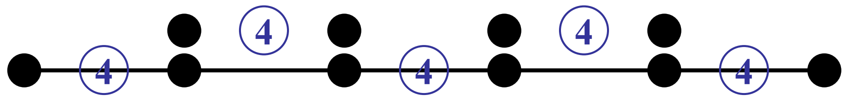
即有： $R[f]=-\dfrac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)$



- 复化 Simpson 公式： $h=\dfrac{b-a}{n},\ x_k=a+k\,h\quad (k=0,\ldots,n)$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \approx \frac{h}{6}[f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})]$$

$x_k \qquad x_{k+\frac{1}{2}} \qquad x_{k+1}$



$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1})+f(b)] = S_n$$

$$R[f]=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left(f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right)$$

注：为方便编程，可采用另一记法：令 $n'=2n$ 为偶数，

这时 $h'=\dfrac{b-a}{n'}=\dfrac{h}{2},\ x_k=a+k\,h'$，有

$$S_n=\frac{h'}{3}[f(a)+4\sum_{odd\ \ k} f(x_k)+2\sum_{even\ \ k} f(x_k)+f(b)]$$

例1：分别利用复化梯形公式和复化Simpson公式计算积分:

$$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

积分的相对精确值为 $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx 0.94608309$

解：设 $x_i = ih \quad i = 0,1,\cdots,8$ 步长 $h=1/8$

运算量基本相同

$$T_8 = \frac{h}{2}\left[f(0)+2f(x_1)+\cdots+2f(x_7)+f(1)\right]$$

$=0.94569086$

$$S_4 = \frac{h}{3}\{f(0)+4[f(x_1)+f(x_3)+f(x_5)+f(x_7)]$$

$$+2[f(x_2)+f(x_4)+f(x_6)]+f(1)\} \quad =0.94608331$$

➢复化求积法的余项和收敛阶:

复化梯形（ *Trapezoid* ）公式的余项:

$$I - T_n = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{h^3}{12} f''(\xi_k)\right] = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi) \quad \xi \in (a,b)$$

复化辛甫生（*Simpson*）公式的余项:

$$I - S_n = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi_k)\right] = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) \quad \xi \in (a,b)$$

复化柯特斯（*Cotes*）公式的余项:

$$I - C_n = \sum_{k=1}^{n}\left[-\frac{2h}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi_k)\right]$$

$$= -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi) \quad \xi \in (a,b)$$

先看复化梯形公式余项:

$$I - T_n = \sum_{k=1}^{n}[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)] = -\frac{h^2}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

$$\Rightarrow \frac{I - T_n}{h^2} = -\frac{1}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h]$$

当n充分大, $h \to 0$ 时,

$$-\frac{1}{12}\sum_{k=1}^{n}[f''(\xi_k)\cdot h] \to -\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)dx = -\frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]$$

即对复化的梯形公式有: $\dfrac{I - T_n}{h^2} \to -\dfrac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]$

类似地,对于复化的辛甫生公式和柯特斯公式分别有:

$$\frac{I - S_n}{h^4} \to -\frac{1}{180\times 2^4}\left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right]$$

$$\frac{I - C_n}{h^6} \to -\frac{2}{945\times 4^6}\left[f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)\right]$$

定义 若一个积分公式的误差满足 $\lim\limits_{h\to 0}\dfrac{I-I_n}{h^p}=C<\infty$ 且 $C\neq 0$，则称该公式是 p 阶收敛的。

$$T_n \sim O(h^2),\ S_n \sim O(h^4),\ C_n \sim O(h^6)$$

而且，当 h 很小时，复化的梯形法、辛甫生法和柯特斯法分别有下列的误差估计式:

$$I-T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b)-f'(a)]$$

$$I-S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right]$$

$$I-C_n \approx -\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right]$$

当步长 h 折半时，$R(T)$, $R(S)$,$R(C)$ 分别减至原有误差的 1/4,1/16,1/64

例2：计算$\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

解：$T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{7} f(x_k) + f(1)\right]$ 其中 $x_k = \frac{k}{8}$

$= 3.138988494$

$S_4 = \frac{1}{24}\left[f(0) + 4\sum_{\text{odd}} f(x_k) + 2\sum_{\text{even}} f(x_k) + f(1)\right]$ 其中 $x_k = \frac{k}{8}$

$= 3.141592502$

上例中若要求 $|I - T_n| < 10^{-6}$，则 $|R_n[f]| \approx \frac{h^2}{12}|f'(1) - f'(0)| = \frac{h^2}{6} < 10^{-6}$

$\Rightarrow h < 0.00244949$ 即：取 $n = 409$

通常采取将区间不断对分的方法，即取 $n = 2^k$

上例中$2^k \geq 409 \Rightarrow k = 9$ 时，$T_{512} = 3.141592018$

§ 5.3　变步长求积公式及其加速收敛技巧

Q: 给定精度 ε，如何取 n？

实际计算中常采用变步长的计算方案，即在步长逐次分半（即步长二分）的过程中，反复利用复化求积公式计算，直至所求积分值满足精度要求为止。

➢复化梯形公式的递推化：

将求积区间 $[a, b]$ 分成 n 等分，一共有 $n+1$ 个分点，

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

将求积区间再二分一次，则分点增至 $2n+1$ 个，

每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 二分后用复化梯形公式求的积分值为：

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

$h=(b-a)/n$ 代表二分前的步长。

将每个子区间上的积分值相加得:

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

比较T_n和T_{2n}得下列梯形递推公式:

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

注意到区间再次对分时 $R_{2n}[f]\approx-\frac{1}{12}[f'(b)-f'(a)]\left(\frac{h}{2}\right)^2\approx\frac{1}{4}R_n[f]$

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

直接用计算结果来估计误差的方法称为事后误差估计法

递推梯形公式加上一个控制精度,即可成为自动选取步长的复化梯形公式。

➢龙贝格积分（外推加速公式） /* Romberg Integration */

由 $I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$可知：$T_{2n}$ 的误差大致等于 $\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)$

用这个误差值作为的 T_{2n}一种补偿，可以期望所得到的

$$\overline{T} = T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$$ 可能是更好的结果。

例：计算 $\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$

已知对于$\varepsilon = 10^{-6}$ 须将区间对分 9 次，得到 $T_{512} = 3.141592018$

而 $T_4 = 3.131176471$ $T_8 = 3.138988494$

的精度都很差（与准确值3.14159265比较）

由 $I \approx \frac{4T_{2n} - T_n}{4-1} = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$ 来计算 I 效果是否好些？

$$\frac{4}{3}T_8 - \frac{1}{3}T_4 = 3.141592502 = S_4$$

再考察辛甫生法，由误差公式：$I-S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right]$

其截断误差大致与h^4成正比，因此：

$$\frac{I-S_{2n}}{I-S_n} \approx \frac{1}{16} \Rightarrow I-S_{2n} \approx \frac{1}{16-1}(S_{2n}-S_n) \Rightarrow I \approx \frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n$$

不难直接验证：$\frac{16}{15}S_{2n}-\frac{1}{15}S_n = C_n$

一般有：$\boxed{\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}=S_n}$ $\boxed{\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}=C_n}$ $\boxed{\frac{4^3C_{2n}-C_n}{4^3-1}=R_n}$

- **Romberg 算法：**

$$\begin{array}{llll}
① \ T_1 = T_0^{(0)} \quad \boxed{<\varepsilon?} & & & \\
② \ T_2 = T_0^{(1)} & ③ \ S_1 = T_1^{(0)} \quad \boxed{<\varepsilon?} & & \\
④ \ T_4 = T_0^{(2)} & ⑤ \ S_2 = T_1^{(1)} & ⑥ \ C_1 = T_2^{(0)} \quad \boxed{<\varepsilon?} & \\
⑦ \ T_8 = T_0^{(3)} & ⑧ \ S_4 = T_1^{(2)} & ⑨ \ C_2 = T_2^{(1)} & ⑩ \ R_1 = T_3^{(0)}
\end{array}$$

$\cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots$

上述加速过程还可继续下去，其理论依据是下面要介绍的 理查德森外推加速方法。

算例：用*Romberg*积分法求解定积分： $\pi=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

误差容限：**1.0e-6**　准确值：π^*=3.14159265358979

T_1	3.000000000	0	0	0	0
T_2	3.100000000	3.133333333	0	0	0
T_4	3.131176471	3.141568628	3.142117647	0	0
T_8	3.138988495	3.141592503	3.141594094	3.141585784	0
T_{16}	3.140941612	3.141592651	3.141592661	3.141592638	3.14159266

➢ 理查德森外推法

利用低阶公式产生高精度的结果。

设对于某一 $h \neq 0$，有公式 $T_0(h)$ 近似计算某一未知值 I。由 Taylor展开得到： $T_0(h) - I = \alpha_1 h + \alpha_2 h^2 + \alpha_3 h^3 + \ldots$

现将 h 对分，得： $T_0(\frac{h}{2}) - I = \alpha_1 \left(\frac{h}{2}\right) + \alpha_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \alpha_3 \left(\frac{h}{2}\right)^3 + \ldots$

Q: 如何将公式精度由 $O(h)$ 提高到 $O(h^2)$？

$$\frac{2T_0(\frac{h}{2}) - T_0(h)}{2-1} - I = -\frac{1}{2}\alpha_2 h^2 - \frac{3}{4}\alpha_3 h^3 - \ldots$$

即： $$T_1(h) = \frac{2T_0(\frac{h}{2}) - T_0(h)}{2-1} = I + \beta_1 h^2 + \beta_2 h^3 + \ldots$$

$$T_2(h) = \frac{2^2 T_1(\frac{h}{2}) - T_1(h)}{2^2-1} = I + \gamma_1 h^3 + \gamma_2 h^4 + \ldots$$

$$\Rightarrow T_m(h) = \frac{2^m T_{m-1}(\frac{h}{2}) - T_{m-1}(h)}{2^m - 1} = I + \delta_1 h^{m+1} + \delta_2 h^{m+2} + \ldots$$

§ 5.4 高斯型积分

牛顿—柯特斯型求积公式是封闭型的（区间[*a*, *b*]的两端点*a*, *b*均是求积节点）而且要求求积节点是等距的, 受此限制，牛顿—柯特斯型求积公式的代数精确度只能是n（n为奇数）或 $n+1$（n为偶数）。

而如果对求积节点也适当的选取, 即在求积公式中不仅A_k而且x_k也加以选取,这就可以增加自由度，从而可提高求积公式的代数精确度。

构造具有$2n+1$次代数精度的求积公式

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

将节点 $x_0 \ldots x_n$ 以及系数 $A_0 \ldots A_n$ 都作为待定系数。令 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^{2n+1}$ 代入可求解，得到的公式具有$2n+1$ 次代数精度。这样的节点称为Gauss 点，公式称为Gauss 型求积公式。

例: $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$

其中， x_0, x_1 固定在-1，1，A_0, A_1可以适当选取,只有两个自由度,得到的是梯形公式,其代数精确度只有1。如果对求积节点也进行适当选取,将有四个自由度,得到如下公式:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

这个积分公式的代数精确度为3, 这就是高斯型求积公式,上面的求积节点$\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$ 称为高斯点。

定义 如果$n+1$个求积节点的求积公式的代数精确度为$2n+1$,则这$n+1$个求积节点称为高斯点。

定理 $x_0 \ldots x_n$ 为 Gauss 点 $\Leftrightarrow$ $w(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$ 与任意次数不大于n 的多项式 $P(x)$ 正 。

证明："$\Rightarrow$" $x_0 \ldots x_n$ uss 点, 则公式 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

求 Gauss 点 $\Leftrightarrow$ 求$w(x)$

对任意次数不大于n 的多项式 $P_n(x)$， $P_n(x)\,w(x)$的次数不大于$2n+1$，则代入公式应精确成立：

$$\int_a^b P_n(x)w(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k P_n(x_k)\overset{0}{\cancel{w(x_k)}} = 0$$

"$\Leftarrow$" 要证明 $x_0 \ldots x_n$ 为 Gauss 点，即要证公式对任意次数不大于$2n+1$ 的多项式 $P_m(x)$ 精确成立，即证明：

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

设 $P_m(x) = w(x)q(x) + r(x)$

$$\int_a^b P_m(x)dx = \overset{0}{\cancel{\int_a^b w(x)q(x)dx}} + \int_a^b r(x)dx \quad = \sum_{k=0}^{n} A_k r(x_k)$$

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

对于关系 $\int_a^b q(x)\omega_{n+1}(x)dx=0$,我们称之为正交性,即 $\omega_{n+1}(x)$ 与任意次多项式正交, 而这样的多项式类称为正交多项式。

建立Gauss型公式，就是给定[a, b]，利用对应的正交多项式零点计算A_i，最常用的就是[-1,1]上的情形。对于积分区间为[a, b]的一般情形则可作变换：$t=\frac{2}{b-a}(x-\frac{b+a}{2})$ 使积分区间变为[-1,1]。

➢高斯—勒让德求积公式

1. *Legendre*多项式

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n\cdot 2!}\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right]\quad ,n=0,1,2\cdots$$

称为勒让德(Legendre)多项式。其具有前面提到的正交性质,

即对于任意次数不超过n的多项式 $q(x)$,成立:

$$\int_{-1}^{1}q(x)P_{n+1}(x)dx=0$$

因此，多项式$P_{n+1}(x)$的零点就是相应的高斯—勒让德求积公式的高斯点。

勒让德多项式的前几项如下：

$$P_0(x)=1,\qquad P_1(x)=\frac{1}{2}\frac{d}{dx}(x^2-1)=x$$

$$P_2(x)=\frac{1}{2^2\cdot 2!}\frac{d^2}{dx^2}\left[(x^2-1)^2\right]=\frac{1}{2}(3x^2-1)$$

$$P_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x),\qquad P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$

$$P_5(x)=\frac{1}{8}(65x^5-70x^3+15x)$$

勒让德多项式的首项系数为

$$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$$

2.高斯—勒让德求积公式

当n=0时,$P_1(x)=x$, 其零点为$x_0=0$,易得$A_0=2$,

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 2f(0)$$

当n=1时,$P_2(x)=1/2(3x^2-1)$, 其零点为 $x_0=-\frac{1}{\sqrt{3}},\ x_1=\frac{1}{\sqrt{3}}$,易得$A_0=1$， $A_1=1$。

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

代数精度为3

当n=2时,$P_3(x)=1/2(5x^3-3x)$, 其零点为 $\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$ 和0。

设高斯—勒让德求积公式是:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+A_1 f(0)+A_2 f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

依次代$f(x)=1, x, x^2$ 入上式，得如下关于系数A_0, A_1, A_2的方程组:

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 2 \\ -A_0 + A_2 = 0 \\ A_0 + A_2 = \dfrac{10}{9} \end{cases} \Rightarrow A_0 = A_2 = 5/9,\ A_1 = 8/9$$

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

代数精度为5

例：用n=2的高斯—勒让德公式计算 $\int_0^1 4arctgxdx$

精确值：$= \left[4xarctgx - 2ln(1+x^2)\right]_{x=0}^{1} = 1.7552983$

解：此处，a=0，b=1，作变换 $x = \frac{1}{2}(t+1)$

则：
$$\int_0^1 4arctgx\, dx = \int_{-1}^{1} 2arctg\left(\frac{1}{2}t + \frac{1}{2}\right) dt \qquad f(t) = 2arctg\left(\frac{1}{2}t + \frac{1}{2}\right)$$

故 $f(0)$=0.9272652， $f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = 0.2244562$ $\quad f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = 1.4515062$

所以原式 $\approx \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = 1.7553526$