第七讲：数值积分

教师: 胡俊

北京大学数学科学学院

April 16, 2019

目录

目录

中点公式

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

$$P_1(x_c) = f(x_c), \quad P_1'(x_c) = f'(x_c), \quad \text{其中} x_c = \frac{a+b}{2}.$$

$$\int_a^b P_1(x)\,dx = f(\frac{a+b}{2})(b-a)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx - f(\frac{a+b}{2})(b-a) = \int_a^b (f(x) - P_1(x))\,dx$$

$$\int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-x_c)^2\,dx = \frac{f''(\xi_1)}{2}\int_a^b (x-x_c)^2\,dx$$

$$= \frac{f''(\xi_1)}{6}(x-x_c)^3\Big|_a^b = \frac{f''(\xi_1)}{24}(b-a)^3, \quad \xi_1 \in (a,b)$$

梯形公式

$$P_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b)$$

从而有

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_1(x)\,dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx - \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi_2),\ \xi_2 \in (a,b).$$

Simpson公式

$$x_0 = a,\, x_1 = \frac{a+b}{2},\, x_2 = b$$

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(a) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(\frac{a+b}{2}) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_0)} f(b)$$

从而有

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_2(x)\,dx = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

代数精度

一般求积公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) \tag{1}$$

Definition 1.1

设m是一个正整数, 如数值积分公式(1)的误差对

$$f(x) = 1, x, x^2, \cdots, x^m$$

都为零,但对$f(x) = x^{m+1}$不为零, 则称数值积分公式(1) 的代数精度为m阶.

Newton-Cotes求积公式

$$x_0 = a < x_1 < \cdots < x_n = b, \quad x_k = a + kh, (k = 0, \cdots, n),$$

$$h = (b-a)/n, \quad (x = a + th)$$

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

$$= \sum_{k=0}^{n} \Big(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} \frac{t-j}{k-j} \Big) f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^{(n-k)}}{k!(n-k)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} (t-j) f(x_k).$$

当$n \geq 8$时，上式中$f(x_k)$前面的系数有正有负. Newton-Cotes求积公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_n(x)\,dx = \frac{b-a}{n} \sum_{k=0}^{n} \Big(\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} \frac{t-j}{k-j}\,dt \Big) f(x_k).$$

目录

复合求积公式

当积分区间长度$b-a$不小时, 我们怎样比较准确地计算积分? 一个自然的想法是: 把区间$[a,b]$剖分成一些小区间, 例如引进等距分点.

$$x_i = a + ih,\ h = \frac{b-a}{n},\ i = 0, 1, \cdots, n.$$

并记

$$x_{i+\frac{1}{2}} = a + (i + 1/2)h$$

根据定积分的性质, 有

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx$$

复合中点公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) \triangleq M(h)$$

复合求积公式

复合梯形公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+f(x_{i+1})] \triangleq T(h)$$

复合Simpson公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{6}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+4f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1})] \triangleq S(h).$$

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - M(h)\right| \le \frac{h^2}{24}M_2(b-a)$$

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - T(h)\right| \le \frac{h^2}{12}M_2(b-a)$$

$$\left|\int_a^b f(x)\,dx - S(h)\right| \le \frac{h^4}{2880}M_4(b-a)$$

其中$M_2 = \max|f''|$, $M_4 = \max|f^{(4)}|$.

Example 2.1

用复合梯形公式和复合Simpson公式计算$\int_0^1 e^x\,dx$的近似值，要求至少有5位有效数字，问：h应取多大?

解: 显然$|f''(x)| = e^x \le e,\ x \in [0,1]$.对复合梯形求积公式，只要取

$$\frac{1}{12}eh^2 \le 0.5 \times 10^{-4},\ 即h \le \frac{1}{68};$$

对复合Simpson公式，只要取

$$\frac{h^4 e}{2880} \le 0.5 \times 10^{-4},\ h \le \frac{1}{3}$$

复合求积公式

上述截断误差估计太保守, 而且很多时候导数不好估计.

$$\int_a^b f(x)\,dx - T(h) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi_1)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx - T(\frac{h}{2}) = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\xi_2).$$

假设$f''(\xi_1) = f''(\xi_2)$, 将上面两式相减得

$$\frac{T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\xi_1),$$

这样

$$\int_a^b f(x)\,dx - T(\frac{h}{2}) = \frac{1}{3}[T(\frac{h}{2}) - T(h)]$$

这就是说, 我们可以用

$$|T(h/2) - T(h)|$$

来判断$T(\frac{h}{2})$是否达到精度要求, 计算过程如下:

(1) 设给定的精度要求为ϵ. 取初始步长$h = b - a$;
(2) 计算$T(h)$;
(3) 取$h = h/2$, 计算$T(h/2)$;
(4) 如果$|T(h/2) - T(h)| < \epsilon$, 则取$T(h/2)$为积分的近似值, 否则取$h = h/2$, 再转到(2).

复合梯形公式的数值稳定性

复合梯形公式的数值稳定性:

设函数值$f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n)$ 变成$\hat{f}(x_0), \hat{f}(x_1), \cdots, \hat{f}(x_n)$, 记$e_j = \hat{f}(x_j) - f(x_j)$, 则复合梯形公式的计算误差为

$$\hat{T}(h) - T(h) = \frac{h}{2}(e_0 + 2\sum_{j=1}^{n-1} e_j + e_n)$$

若$|e_j| \le \epsilon\ (j = 0, 1, \cdots, n)$, 则

$$|\hat{T}(h) - T(h)| \le \frac{h}{2}(\epsilon + 2(n-1)\epsilon + \epsilon) = nh\epsilon = (b-a)\epsilon.$$

Romberg求积方法

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_1(h) + \sum_{k=1}^{\infty} c_{2k}^{(1)} h^{2k},\ c_{2k}^{(1)}\text{为常数}.$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_2(h) + \sum_{k=2}^{\infty} c_{2k}^{(2)} h^{2k},\ c_{2k}^{(2)}(k=2,\cdots)\text{为常数}.$$

$$T_2(h) = \frac{T_1(h/2) - 4^{-1}T_1(h)}{1-4^{-1}}.$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_3(h) + \sum_{k=3}^{\infty} c_{2k}^{(3)} h^{2k},\ c_{2k}^{(3)}(k=3,4,\cdots)\text{为常数}.$$

$$T_3(h) = \frac{T_2(h/2) - 4^{-2}T_2(h)}{1-4^{-2}}.$$

Romberg求积方法

一般地

$$T_{k+1}(h) = \frac{T_k(h/2) - 4^{-k}T_k(h)}{1 - 4^{-k}}, k = 1, 2, \cdots$$

且有

$$\int_a^b f(x)\,dx - T_{k+1}(h) = O(h^{2(k+1)}), \ k = 1, 2, \cdots$$

计算过程：

- 取$m=0, h=b-a$, 求积分$T_1(b-a)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$. 令$1\to m$($m$记区间$[a,b]$的二分次数).
- 求复合梯形公式$T_1(\frac{b-a}{2^m})$的值, 即

$$T_1(\frac{b-a}{2^m})=T_1(\frac{b-a}{2^{m-1}})/2+\frac{b-a}{2^m}\sum_{i=0}^{2^{m-1}-1}f(x_{i+1/2}),$$

  其中$x_{i+1/2}=a+(i+1/2)\frac{b-a}{2^{m-1}}$.
- 求加速值，即用下面的公式计算

$$T_{k+1}(\frac{b-a}{2^{\ell-1}})=\frac{T_k(\frac{b-a}{2^\ell})-4^{-k}T_k(\frac{b-a}{2^{\ell-1}})}{1-4^{-k}}, k=1,2,\cdots$$

目录

考虑

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

其中$\rho(x) > 0$为已知的权函数, $A_k(k = 1, 2, \cdots, n)$为常数.

以$\rho(x) \equiv 1$为例, 可以得到一个含$2n$ 个未知量, $2n$个方程的方程组.

$$\sum_{k=1}^{n} A_k x_k^j = \frac{1}{j+1}(b^{j+1} - a^{j+1}),\ j = 0, 1, \cdots, 2n-1$$

设区间$[a, b] = [-1, 1]$, 这是因为有变量替换公式

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t)\,dt.$$

Gauss求积公式

当$n=1$时, $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = A_1 f(x_1)$中, 令$f(x)=1$和$f(x)=x$, 得

$$A_1 = 2, x_1 = 0$$

这是中点公式, 它对$f(x)=x^2$不准确成立, 故其代数精度为1阶.
$n=2$时, 在等式$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$中,
令$f(x)=1,x,x^2,x^3$,得方程组

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2 \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0 \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \frac{2}{3} \\ A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = 0 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow A_1 = A_2 = 1,\ x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

容易验证此求积公式对$f(x)=x^4$不准确成立, 故它的代数精度为3.

Gauss求积公式

$$f(x)=\sum_{j=1}^{n}f(x_j)l_j(x)+\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\prod_{j=1}^{n}(x-x_j)$$

于是

$$\int_a^b\rho(x)f(x)\,dx=\int_a^b\rho(x)\sum_{j=1}^{n}f(x_j)l_j(x)+\int_a^b\rho(x)\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\prod_{j=1}^{n}(x-x_j)\,dx$$

$$=\sum_{j=1}^{n}f(x_j)\int_a^b\rho(x)l_j(x)\,dx+\int_a^b\rho(x)\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\prod_{j=1}^{n}(x-x_j)\,dx$$

其中

$$l_j(x)=\prod_{j\neq i}\frac{x-x_i}{x_j-x_i}$$

$$A_j=\int_a^b\rho(x)l_j(x)\,dx,\quad j=1,2,\cdots,n$$

因为区间$[a,b]$上的n次带权正交多项式必有n个实零点, 取这些实零点做节点x_j, 则除了差一个常数外, $\omega_n(x)$就是带权正交多项式. 又因为$P(x) \in \mathcal{P}_{n-1}$, 所以必有

$$\int_a^b \rho(x)P(x)\omega_n(x)\,dx = 0.$$

当$f(x)$为一次数不超过$2n-1$的多项式时， 存在次数不超过$n-1$的多项式$q(x)$和$Q(x)$, 使得

$$f(x) = q(x)\omega_n(x) + Q(x).$$

于是有

$$\begin{aligned}\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx &= \int_a^b \rho(x)Q(x)\,dx \\ &= \sum_{k=1}^{n} A_k Q(x_k) = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)\end{aligned}$$

Gauss求积公式

所以, 只要取$x_j(j=1,2,\cdots,n)$为$[a,b]$上n次带权正交多项式的零点, 求积公式就对所有$2n-1$次多项式准确成立, 同时取

$$f(x)=\Big[\prod_{j=1}^{n}(x-x_j)\Big]^2\in\mathcal{P}_{2n}$$

则公式不准确成立. 这样证明求积公式的代数精度为$2n-1$阶.

目录

假设我们要用一个与步长h有关的量$Q_1(h)$去近似一个与h无关的量Q. 而且已知截断误差的渐进展开式为

$$Q - Q_1(h) = c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \cdots + c_k h^{p_k} + \cdots$$

其中c_k, p_k为常数, 且$0 < p_1 < p_2 < \cdots$, 此时Q_1逼近Q的截断误差量级为$O(h^{p_1})$.

将步长缩小一倍, 即取$h = h/2$, 则有

$$\begin{aligned} Q - Q_1(h/2) &= c_1(h/2)^{p_1} + c_2(h/2)^{p_2} + \cdots + c_k(h/2)^{p_k} + \cdots \\ &= 2^{-p_1} c_1 h^{p_1} + 2^{-p_2} c_2 h^{p_2} + \cdots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\big(Q - Q_1(h)\big) - 2^{p_1}\big(Q - Q_1(h/2)\big) \\ &= c_2 h^{p_2} + c_3 h^{p_3} + \cdots + c_k h^{p_k} - 2^{p_1 - p_2} c_2 h^{p_2} - \cdots - 2^{p_1 - p_k} c_k h^{p_k} - \cdots \end{aligned}$$

$$(1-2^{p_1})Q+2^{p_1}Q_1(h/2)-Q_1(h) = c_2(1-2^{p_1-p_2})h^{p_2}+\cdots+c_k(1-2^{p_1-p_k})h^{p_k}+\cdots.$$

两边同除以$(1-2^{p_1})$得

$$Q+\frac{2^{p_1}Q_1(h/2)-Q_1(h)}{1-2^{p_1}} = c_2\frac{1-2^{p_1-p_2}}{1-2^{p_1}}h^{p_2}+\cdots+c_k\frac{1-2^{p_1-p_k}}{1-2^{p_1}}h^{p_k}+\cdots$$

这样

$$Q-\frac{Q_1(h/2)-2^{-p_1}Q_1(h)}{1-2^{-p_1}} = c_2^*h^{p_2}+\cdots+c_k^*h^{p_k}+\cdots$$

其中常数c_k^*为

$$c_k^* = \frac{c_k(2^{-p_k}-2^{-p_1})}{1-2^{-p_1}},\ k=2,3,\cdots$$

如果记

$$Q_2(h) = \frac{Q_1(h/2) - 2^{-p_1}Q_1(h)}{1 - 2^{-p_1}}$$

则

$$Q - Q_2(h) = c_2^* h^{p_2} + \cdots + c_k^* h^{p_k} + \cdots$$

Richardson外推加速收敛技术 $\Leftarrow$ $\begin{cases} Q_2(h)\text{逼近}Q\text{的截断误差的量级是}O(h^{p_2}), \\ \text{同理，可得}Q_k(h)\text{逼近}Q\text{的截断误差量级为}O(h^{p_k}). \end{cases}$

将Richardson外推加速收敛技术用于复合梯形求积公式, 就可以得到**Romberg**求积方法. 为此, 我们首先要有复合梯形公式截断误差的渐进展开式.

Definition 4.1

Bernoulli多项式$B_n(x)$:

$$\begin{cases} B_0(x) = 1 \\ B_n'(x) = B_{n-1}(x) \text{ 且 } \int_0^1 B_n(x)\,dx = 0, \quad n \in \mathbb{N}. \end{cases}$$

其中$b_n = n!B_n(0)\,(n = 0, 1, \cdots)$称为Bernoulli数.

$$B_1'(x) = B_0(x),\ \frac{dB_1(x)}{dx} = 1,\ B_1(x) = x + c$$

由$\int_0^1 B_1(x)\,dx = 0$ 得$B_1(x) = x - \frac{1}{2}$,

$$\frac{dB_2(x)}{dx} = x - \frac{1}{2},\ B_2(x) = \frac{x^2}{2} - \frac{1}{2}x + \frac{1}{12}$$

$$B_n(0) = B_n(1),\ n = 2, 3, \cdots ,$$

Theorem 4.2

Bernoulli多项式有如下对称性:

$$B_n(x) = (-1)^n B_n(1-x),\ x \in \mathbb{R},\ n = 0, 1, 2, \cdots .$$

Proof.

用归纳法. 当$n = 0$时, 显然成立. 假设对n依然成立, 两边积分, 得

$$B_{n+1}(x) = (-1)^{n+1} B_{n+1}(1-x) + \beta_{n+1}$$

这里β_{n+1}为某固定常数. 由$\int_0^1 B_{n+1}(x)\,dx = 0$, 得$\beta_{n+1} = 0$. 故结论成立. □

由上述定理, 得

$$B_{2m+1}(0) = -B_{2m+1}(1), \text{ 即有}$$
$$B_{2m+1}(0) = B_{2m+1}(1) = 0 \quad m \geq 1\text{时}$$

Definition 4.3

$\tilde{B}_n(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$为$\mathbb{R}$上的周期延拓:

$$\tilde{B}_n(x) = B_n(x), \text{ 当} x \in [0,1], \text{ 且} \tilde{B}_n(x+1) = \tilde{B}_n(x), \; x \in \mathbb{R}$$

Theorem 4.4

*(Euler-Maclaurin公式)*设$f \in C^m[a,b]\,(m = 3, 4, \cdots)$,

$$T_h(f) = \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k) + f(x_{k+1})],$$

则

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_h(f) - \sum_{j=1}^{\left[\frac{m}{2}\right]} \frac{b_{2j}h^{2j}}{(2j)!}[f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)] + (-1)^m h^m \int_a^b \tilde{B}_m\left(\frac{x-a}{h}\right) f^{(m)}(x)\,dx.$$

这里$\left[\frac{m}{2}\right]$指小于或等于$\frac{m}{2}$的最大整数, $b_{2j} = (2j)!B_{2j}(0)$为*Bernoulli*数.

Proof:

对$\forall g(x) \in C^m[0,1]$, 由分部积分及$B_n(0) = B_n(1)\,(n = 2, 3, \cdots)$得

$$\int_0^1 B_1(z)g'(z)\,dz = \sum_{j=2}^{m} (-1)^j B_j(0)[g^{(j-1)}(1) - g^{(j-1)}(0)] - (-1)^m \int_0^1 B_m(z)g^{(m)}(z)\,dz.$$

$$B_1(z) = B_2'(z) = B_3''(z) = \cdots = B_m^{(m-1)}(z).$$

这样

$$\int_0^1 B_1(z)g'(z)dz = g'(z)B_2(z)\Big|_0^1 - \int_0^1 B_2(z)g''(z)\,dz$$

$$= B_2(0)(g'(1) - g'(0)) - B_3(z)g''(z)\Big|_0^1 + \int_0^1 B_3(z)g^{(3)}(z)\,dz$$

$$= \sum_{j=2}^{m} (-1)^j B_j(0)[g^{(j-1)}(1) - g^{(j-1)}(0)] - (-1)^m \int_0^1 B_m(z)g^{(m)}(z)\,dz.$$

Euler-Maclaurin公式

同时由$B_1(x) = x - \frac{1}{2}$, 有

$$\int_0^1 B_1(z)g'(z)\,dx = \frac{1}{2}[g(1) + g(0)] - \int_0^1 g(z)\,dz$$

利用$B_{2m+1}(0) = 0\,(m = 1, 2, \cdots)$得

$$\int_0^1 g(z)\,dz = \frac{1}{2}[g(0) + g(1)] - \int_0^1 B_1(z)g'(z)\,dz$$

$$= \frac{1}{2}[g(0) + g(1)] - \sum_{j=1}^{\left[\frac{m}{2}\right]} \frac{b_{2j}}{(2j)!}[g^{(2j-1)}(1) - g^{(2j-1)}(0)]$$

$$+ (-1)^m \int_0^1 B_m(z)g^{(m)}(z)\,dz$$

下面令$x = x_k + hz, g(z) = f(x_k + hz)$得

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx = \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})] - \sum_{j=1}^{\left[\frac{m}{2}\right]} \frac{b_{2j}h^{2j}}{(2j)!}[f^{(2j-1)}(x_{k+1}) - f^{(2j-1)}(x_k)]$$
$$+ (-1)^m h^m \int_{x_k}^{x_{k+1}} B_m(\frac{x - x_k}{h}) f^{(m)}(x)\,dx.$$

两端对$k = 0, 1, \cdots, n-1$求和, 利用$\tilde{B}_m(x)$的定义即可得Euler-Maclaurin公式. 证明结束。

目录

作业

1. 证明

$$\int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$
$$= -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi_3), \quad \xi_3 \in (a,b).$$

2. Newton-Cotes求积公式至少具有n阶代数精度, 如果n为偶数, 则具有$n+1$阶代数精度.

3. 已知积分

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

使用如下的数值积分来计算π的近似值. 复合梯形公式, 复合Simpson公式, Romberg积分, 复合Gauss公式(n=2情形). 可以选择不同的h, 对每种求积公式, 将误差刻画成h的函数, 比较各方法的精度.

4. 已知

$$\int_a^b \rho(x)\phi_i(x)\phi_j(x)\,dx = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

证明j次带权正交多项式$\phi_j(x)$有j个不同的零点.

5. 证明Gauss-Legendre积分公式中的权大于零, 即

$$A_i = \int_{-1}^{1} l_i(x)\,dx > 0$$

其中

$$l_i(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

$x_1, x_2, \cdots, x_n$是Legendre多项式$L_n(x)$的零点.

6. 验证Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}|f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)|$$

具有三阶精度。

谢谢！