第五章：数值积分

(1)：Newton-Cotes 公式

目录

背景

大量科学问题其实可以写成积分的形式:

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x$$

我们这章主要关注 1 维的积分问题。

方法 1:

$$\text{Newton-Leibniz 公式}: \int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(b) - F(a) \qquad F' = f$$

该方法的难点: 函数 F 不一定好求

方法 2:

$$\text{中值定理}: \quad \int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = f(\xi)(b-a)$$

该方法的难点: ξ 很难找

一些直观的选择

$$f(\xi) \approx \frac{f(a)+f(b)}{2} \qquad \Longrightarrow \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big) \qquad \text{梯形公式}$$

$$f(\xi) \approx f(\frac{a+b}{2}) \qquad \Longrightarrow \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2}) \qquad \text{矩形公式}$$

更一般的情况：

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

其中 x_k 为求积节点、A_k 为求积系数

问题：请把上述的近似公式对照成此处的一般情形

梯形： $\frac{b-a}{2}(f(b)+f(a)) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} n=1 \\ x_0=a \quad A_0=\frac{b-a}{2} \\ x_1=b \quad A_1=\frac{b-a}{2} \end{cases}$

矩形： $(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} n=0 \\ x_0=\frac{a+b}{2} \quad A_0=(b-a) \end{cases}$

目录

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

为了设计参数 A_k, x_k，我们需要对问题提一些要求

类似前面的插值部分等，我们会需要让参数的数量等于要求的等式的数量，进而得到唯一的解。

希望：求个求积公式对于多项式至少精确

定义 (代数精度)

若求积公式对于次数不大于 m 的多项式均能精确地成立，但对于 $m+1$ 次多项式就不一定精确，则称该求积公式具有m **次代数精度**。

对于 $f(x)=x^0$ 精确，得到 $b-a=\sum_k A_k$
对于 $f(x)=x^1$ 精确，得到 $\frac{1}{2}(b^2-a^2)=\sum_k A_k x_k$
$\vdots$
对于 $f(x)=x^m$ 精确，得到 $\frac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1})=\sum_k A_k x_k^m$

同时我们需要验证：

对于 $f(x)=x^{m+1}$ 不精确，即验证 $\frac{1}{m+2}(b^{m+2}-a^{m+2})\neq\sum_k A_k x_k^{m+1}$

练习

例 (梯形公式)

验证梯形公式有 1 次代数精度

假设节点已经给定了 $a \leq x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leq b$

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\ \ell_j(x)$$

之前已经学过了 $f(x) \approx L_n(x)$，故而我们可以猜测 $\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\ \mathrm{d}x$，所以可以用

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\ \mathrm{d}x = \int_a^b \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\ell_j(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_a^b \ell_j(x)\ \mathrm{d}x$$

因而，通过插值公式，我们得到了一个求积分的近似公式

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \approx \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j), \qquad A_j = \int_a^b \ell_j(x)\ \mathrm{d}x$$

定理

考虑求积公式 $\sum_{j=0}^{n} f(x_j)A_j$。

该公式至少具有 n 次代数精度<u>等价于</u> $A_j = \int_a^b \ell_j(x)\,\mathrm{d}x$（即它是插值型的）。

练习： 找到系数 A, B，使得如下的求积公式的代数精度尽量高：

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx Af(-h) + Bf(h)$$

最高的代数精度是多少?

练习： 找到系数 A, B，使得如下的求积公式的代数精度尽量高：

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\ \mathrm{d}x \approx Af(-h) + Bf(h)$$

最高的代数精度是多少?

答案： $A = 2h$, $B = 2h$, 最高代数精度为 1

目录

Newton-Cotes 公式

考虑 $x_k = a + kh,\ h = \frac{b-a}{n}$

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k) \qquad \text{(Newton-Cotes 公式)}$$

其中 $C_k^{(n)}$ 被称为**Cotes 系数**。

根据插值型公式的结果，我们希望选

$$C_k^{(n)} = \frac{1}{b-a}\int_a^b \ell_k(x)\,\mathrm{d}x = \text{具体的简化表达式见课本 (4.2.2)}$$

当 $n=1$ 时，$x_0=a$, $x_1=b$，

$$C_0^{(1)}=C_1^{(1)}=\frac{1}{2}$$

这个公式就是梯形公式。

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

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

$$\begin{aligned}\text{Newton-Cotes 公式}&=(b-a)\left[\frac{1}{6}f(a)+\frac{4}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{1}{6}f(b)\right]\\&=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\rightarrow\ (\text{Simpson 公式})\end{aligned}$$

当 $n=4$ 时，Newton-Cotes 公式被称为 Cotes 公式

名字	n			$C_k^{(n)}$			
梯形	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
Simpson	2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$			
Simpson 3/8 rule	3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		
Cotes	4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$	
Boole's rule	5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$

$n=1,2,3$ 时的系数需要知道，$n=4,5,\dots$ 的情况了解即可

偶阶求积公式的代数精度

当 $n=1$，我们之前已经验证梯形公式对于二次函数不精确

当 $n=2$ 时，

$$x_0 = a, \qquad x_1 = \frac{a+b}{2}, \qquad x_2 = b$$
$$A_0 = \frac{b-a}{6}, \qquad A_1 = \frac{4}{6}(b-a), \qquad A_2 = \frac{b-a}{6}$$

我们可以验证：

$$\frac{b^4-a^4}{4} = \frac{b-a}{6}a^3 + \frac{4}{6}(b-a)\left(\frac{a+b}{2}\right)^3 + \frac{b-a}{6}b^3$$

这意味着，Simpson $(n=2)$ 至少具有________ 次代数精度

定理

当 n 为偶数时，*Newton-Cotes* 公式至少具有 $n+1$ 次代数精度。

证明.

我们仅需证明对 $f(x)=x^{n+1}$，$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x$。根据余项公式，

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)\cdots\left(x-x_n\right)\mathrm{d}x$$

当 $f(x)=x^{n+1}$，$f^{(n+1)}(\xi)=(n+1)!$，因而误差为 $\int_a^b\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right)\cdots\left(x-x_n\right)\mathrm{d}x$，当 n 为偶数时，该被积分的函数关于轴 $x=(b-a)/2$ 是一个奇函数，因而，积分值为 0。 $\square$

梯形公式的误差

梯形公式的误差为

$$
\begin{aligned}
R_T &= \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \int_a^b \frac{f''(\xi(x))}{2}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x \\
&= \boxed{-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3}
\end{aligned}
$$

积分中值定理

定理 (积分中值定理)

假设

- 函数 g 在 $[a,b]$ 上不变号（即对于任何 $x \in [a,b]$，$g(x) \geq 0$ 或者 $g(x) \leq 0$），且 $\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x \neq 0$;
- f 为连续函数;

则

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

当 $g = 1$，该结果就是微积分里学的中值定理。

Simpson 的误差

定理 (Simpson 的误差)

对于合适的函数，我们能找到 η 使得:

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

目录

我们将区间分为 N 等份 $h=\frac{b-a}{N}$，$x_k=a+kh$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{N-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x$$

然后对于每一个分段 $\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x$，我们使用求积公式来近似。

定义 (复化求积公式收敛阶的定义)

当 $h\to 0$ 时，如果一种复化求积公式 I_N 满足，

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-I_N}{h^p}=C$$

其中，C 是某个常数，则我们称该公式是 p 阶收敛的。

复化梯形

$$T_N := \sum_{k=0}^{N-1} \frac{h}{2}\left[f\left(x_k\right)+f\left(x_{k+1}\right)\right] = \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{N-1} f\left(x_k\right)+f(b)\right]$$

积分余项:

$$\begin{aligned} I - T_N &= \sum_{k=0}^{N-1} -\frac{f''\left(\eta_k\right)}{12} h^3 = \left(-\frac{h^3 N}{12}\right)\left(\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} f''\left(\eta_k\right)\right) \\ &= -\frac{h^2(b-a)}{12} f''(\eta) \quad \text{（所以是一个 2 阶算法）} \end{aligned}$$

当 $h \to 0$ 时，

$$I - T_N = \sum_{k=0}^{N-1} -\frac{f''\left(\eta_k\right)}{12} h^3 \approx -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(\eta)\,\mathrm{d}\eta = -\frac{h^2}{12}\left(f'(b)-f'(a)\right)$$

练习： 对于定义域 $[0,1]$, 考虑函数 $f(x)=x^2$，请使用复化梯形公式计算 (使用两个分段 $N=2$)；若我们希望积分的误差小于 10^{-2}，小区间宽度 h 选为多少即可保证该精度?

练习： 对于定义域 $[0,1]$, 考虑函数 $f(x)=x^2$，请使用复化梯形公式计算(使用两个分段 $N=2$)；若我们希望积分的误差小于 10^{-2}，小区间宽度 h 选为多少即可保证该精度?

答案：(1) 积分值为 $\frac{1}{4}\big(f(0)+2f(0.5)+f(1)\big)=0.375$；(2) 我们需要 $\left|\frac{h^2(b-a)}{12}f''(\eta)\right|=\left|\frac{h^2}{12}\times 2\right|\leq 10^{-2}$，解方程即可得 h 的限制条件。

复化 Simpson

复化 Simpson 公式为:

$$S_N = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{h}{6}\left[f\left(x_k\right) + 4f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + f\left(x_{k+1}\right)\right]$$

误差为:

$$I - S_N = \sum_{k=0}^{N-1} -\frac{f^{(4)}\left(\eta_k\right) h^5}{2880} = -\frac{h^4(b-a)}{2880} f^{(4)}(\eta)$$

所以是一个 4 阶算法

类似的，当 $h \to 0$ 时，

$$I - S_N \approx -\frac{h^4}{2880} \int_a^b f^{(4)}(\eta)\ \mathrm{d}\eta = -\frac{h^4}{2880}\left(f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right)$$

目录

总结

- 知道机械求积的表达式
- 代数精度的定义、能对于具体问题验证代数精度、第11页的定理
- Newton-Cotes 是插值型的（对于固定的 n，其 $\{x_k\}_{k=0}^{n}$ 节点是固定的）
  - 知道梯形公式和 Simpson 公式（包含具体系数）
  - 当 n 为偶数时，Newton-Cotes 公式至少具有 n + 1 次代数精度
  - 能通过 Lagrange 插值的误差建立积分误差的量化
- 复化 Newton-Cotes 实际上就是对于每个分段应用 Newton-Cotes；能应用复化梯形和复化 Simpson，并知道它们分别是几阶算法