第4章 数值积分与数值微分

张利军
zlj@nju.edu.cn
http://cs.nju.edu.cn/zlj

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

积分计算面临的挑战

Newton-Leibniz公式

- 对于积分$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$，其中$f(x)$的原函数为$F(x)$，则有：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = F(b) - F(a)$$

实际使用中的问题

- 大量的被积函数$f(x)$很难找到用初等函数表示的原函数，例如 $\frac{\sin x}{x}$，$\sin x^2$等
- $f(x)$是由测量或数值计算给出的一张数据表，Newton-Leibniz公式无法直接使用

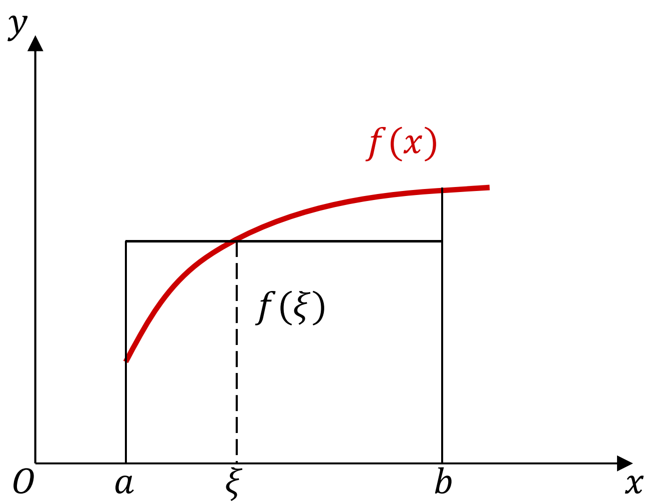
数值求积的基本思想

□ 积分中值定理

- 在积分区间(a, b)内存在一点ξ，有下式成立：

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = (b-a)f(\xi)$$

- 底为$b-a$，高为$f(\xi)$的矩形面积等于所求曲边梯形的面积I
- ξ的具体位置一般不知道，难以准确算出$f(\xi)$
- $f(\xi)$称为区间$[a, b]$上的平均高度

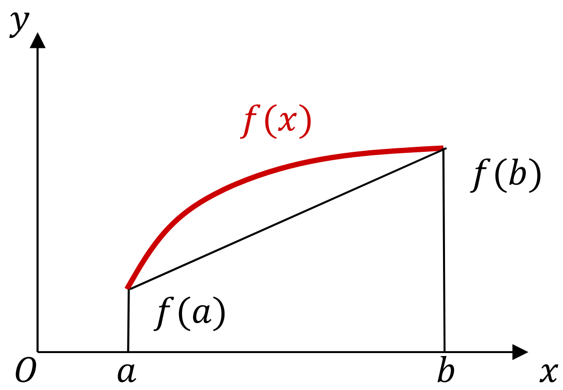


近似平均高度$f(\xi)$

- 梯形公式
  - 用两端点的高度$f(a)$与$f(b)$取算术平均近似$f(\xi)$

$$f(\xi) \approx \frac{[f(a)+f(b)]}{2}$$

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$



近似平均高度$f(\xi)$

梯形公式

- 用两端点的高度$f(a)$与$f(b)$取算术平均近似$f(\xi)$

$$f(\xi) \approx \frac{[f(a)+f(b)]}{2}$$

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

中矩形公式（矩形公式）

- 用区间中点$c=\frac{a+b}{2}$的高度$f(c)$近似$f(\xi)$

$$R=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{4.1.2}$$

近似平均高度$f(\xi)$

□ 机械求积

- 在区间(a,b)上适当选取某些节点x_k，用$f(x_k)$的加权平均来近似$f(\xi)$，得到如下形式的公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.1.3}$$

- x_k被称为求积节点
- A_k被称为求积系数，亦称伴随节点x_k的权
- 权A_k仅仅与节点x_k的选取有关，而不依赖于被积函数$f(x)$的具体形式

将积分求值问题归结为函数值的计算，避免寻找原函数

代数精度

- **定义4.1** 如果某个求积公式对于次数不大于m的多项式均能准确地成立，但对于$m+1$次多项式就不一定准确，则称该求积公式具有m次代数精度
  - 梯形公式具有1次代数精度

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

  - 矩形公式具有1次代数精度

$$R=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{4.1.2}$$

一般算法

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \quad (4.1.3)$$

- 欲使求积公式(4.1.3)具有m次代数精度，只要令它对于$f(x)=1,x,x^2,\dots,x^m$都能成立，即

$$\begin{cases} \sum A_k = b-a \\ \sum A_k x_k = \dfrac{1}{2}(b^2-a^2) \\ \qquad\vdots \\ \sum A_k x_k^m = \dfrac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1}) \end{cases} \qquad (4.1.4)$$

  - 是一个确定参数x_k和A_k的代数问题
  - $m+1$个方程，$2n+2$个变量
- 如果事先选定求积节点x_k，这时取$m=n$求解方程组(4.1.4)即可确定求积系数A_k

插值型的求积公式

- 设给定一组节点

$$a \le x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$$

且已知函数$f(x)$在这些节点上的值，作插值函数$L_n(x)$。依据

$$f(x) \approx L_n(x)$$

则积分I可以近似表示为

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x = I_n$$

- 机械求积

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.1.3}$$

插值型的求积公式（续）

- Lagrange插值多项式

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x), \qquad (2.2.11)$$

  - 其中$l_k(x)$为n次插值基函数

$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}(k=0,1,\dots,n)$$

- 化简 $I_n=\int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x=\int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)\,\mathrm{d}x$

$$=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x$$

插值型的求积公式（续）

- 设给定一组节点

$$a \le x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$$

且已知函数$f(x)$在这些节点上的值。则积分I可以近似表示为

$$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.1.5)$$

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \prod_{k \ne j} \frac{(x - x_j)}{(x_k - x_j)}\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.6)$$

- 称为插值型的求积公式

插值余项

- **定理2.2** 设$f^{(n)}(x)$在$[a,b]$上连续，$f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内存在，节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，$L_n(x)$是满足条件式(2.2.8)的插值多项式，则对于任何$x \in [a,b]$，插值余项

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (2.2.14)$$

  - 这里$\xi \in (a,b)$且依赖于x
  - $\omega_{n+1}(x)$定义为

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad (2.2.12)$$

具有n次代数精度的充分性

- 对于插值型求积公式(4.1.5)，根据定义

$$I=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b L_n(x)\,\mathrm{d}x = I_n$$

知其余项

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \big(f(x)-L_n(x)\big)\,\mathrm{d}x$$

$$=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.7)$$

- 公式 (4.1.5)至少具有n次代数精度
  - 次数不大于n的多项式$f(x)$，$R[f]$等于零

具有n次代数精度的必要性

- 反之，如果求积公式(4.1.5)至少具有n次代数精度，则必定是插值型

$$I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.1.5}$$

  - 上式对插值基函数$l_k(x)$准确成立，则

$$\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j)=A_k$$

  - 得到插值型的求积公式(4.1.6)中定义的A_k

- **定理4.1** 形如式(4.1.5)的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

Cotes（柯特斯）系数

- Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式
  - 将积分区间$[a,b]$划分为n等份，步长$h=\frac{b-a}{n}$，取等距节点$x_k=a+kh$构造的插值型求积公式

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \tag{4.2.1}$$

- $C_k^{(n)}$被称为Cotes系数
  - 根据(4.1.6)，引进变换$x=a+th$

$$A_k=\int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x=\int_a^b\prod_{k\neq j}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}\mathrm{d}x \tag{4.1.6}$$

Cotes（柯特斯）系数

□ Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式

- 将积分区间$[a,b]$划分为n等份，步长$h=\frac{b-a}{n}$，取等距节点$x_k=a+kh$构造的插值型求积公式

$$I_n=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \qquad (4.2.1)$$

□ $C_k^{(n)}$被称为Cotes系数

- 根据(4.1.6)，引进变换$x=a+th$，可得

$$C_k^{(n)}=\frac{h}{b-a}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{(t-j)}{(k-j)}\mathrm{d}t=\frac{(-1)^{n-k}}{nk!\,(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(t-j)\,\mathrm{d}t \qquad (4.2.2)$$

特例

- 当$n=1$时

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

  - 得到梯形公式

$$T = (b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{4.1.1}$$

- 当$n=2$时

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

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

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

特例（续）

- 当$n = 2$时
  - 得到Simpson（辛普森）公式

$$S = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

- 当$n = 4$时
  - 得到Cotes（柯特斯）公式

$$C = \frac{b-a}{90}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

$$x_k = a + kh, \qquad h = \frac{b-a}{4} \qquad (4.2.4)$$

- 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负，稳定性得不到保证

求积公式的代数精度

- **定理4.1** 形如式(4.1.5)的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的
  - 作为插值型的求积公式，n阶的Newton-Cotes公式至少具有n次的代数精度
- Simpson公式（$n=2$）

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

  - 用$f(x)=x^3$进行验证，发现

$$S=\frac{b-a}{6}\left[a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right]={\color{red}=}\ I=\int_a^b x^3\,\mathrm{d}x=\frac{b^4-a^4}{4}$$

求积公式的代数精度

- **定理4.1** 形如式(4.1.5)的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的
  - 作为插值型的求积公式，n阶的Newton-Cotes公式至少具有n次的代数精度
- Simpson公式（$n=2$）

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

Simpson公式实际上具有$3=2+1$次代数精度

偶阶求积公式的代数精度

- **定理4.2** 当阶n为偶数时，Newton-Cotes公式至少有$n+1$次代数精度
  - 只需证明当n为偶数时，Newton-Cotes公式对$f(x)=x^{n+1}$的余项为零
  - 积分余项为

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \tag{4.1.7}$$

  - 由于$f^{(n+1)}(x)=(n+1)!$，因此

$$R[f]=\int_a^b \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\,\mathrm{d}x$$

偶阶求积公式的代数精度（续）

- 引进变换$x = a + th$，并注意到$x_j = a + jh$

$$R[f] = h^{n+2} \int_0^n \prod_{j=0}^{n} (t - j)\, \mathrm{d}t$$

- 若n为偶数，则$\frac{n}{2}$为整数，令$t = u + \frac{n}{2}$

$$R[f] = h^{n+2} \int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \prod_{j=0}^{n} \left(u + \frac{n}{2} - j\right) \mathrm{d}u$$

- 可以得到$R[f] = 0$，由于被积函数

$$H[u] = \prod_{j=0}^{n} \left(u + \frac{n}{2} - j\right) = \prod_{j=-n/2}^{n/2} (u - j)$$

是奇函数

几种低阶求积公式的余项

□ 梯形公式（$n=1$）

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \qquad (4.1.1)$$

- 根据积分余项公式

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.7)$$

- 可得

$$R_T=I-T=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

- 注意到，$(x-a)(x-b)$在区间$[a,b]$上保号（非正），可应用**加权积分中值定理**

几种低阶求积公式的余项（续）

加权积分中值定理

- 假设$f \in C[a,b]$，并且函数$g(x)$在区间$[a,b]$不变号，那么存在一个常数$c \in [a,b]$，使得

$$\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x = f(c)\int_a^b g(x)\,\mathrm{d}x$$

梯形公式（$n=1$）

- 余项

$$\begin{aligned} R_T &= \frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x \\ &= -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \end{aligned} \tag{4.2.5}$$

其中$\eta \in [a,b]$

几种低阶求积公式的余项（续）

□ Simpson公式（$n=2$）

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad (4.2.3)$$

1. 直接应用积分余项公式

$$R[f]=I-I_n=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\,\mathrm{d}x \qquad (4.1.7)$$

2. 利用定理4.2，得到更紧的上界

- 构造次数不大于3的多项式$H(x)$，使之满足

$$H(a)=f(a), H(b)=f(b), H(c)=f(c), \qquad H'(c)=f'(c)$$

其中$c=\frac{a+b}{2}$

几种低阶求积公式的余项（续）

- 由于Simpson公式具有3次代数精度，它对于这样构造出的3次式$H(x)$是准确的：

$$\int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6}[H(a)+4H(c)+H(b)]$$

- 根据$H(x)$的插值条件

$$\int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(c)+f(b)] = S$$

- 因此积分余项

$$R_S = I - S = \int_a^b [f(x)-H(x)]\,\mathrm{d}x$$

几种低阶求积公式的余项（续）

- 对于满足下面插值条件的$H(x)$

$$H(a)=f(a),H(b)=f(b),H(c)=f(c),\qquad H'(c)=f'(c)$$

- 可以证明，插值余项满足（详见例2.5）

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

- 因此，积分余项可以写成

$$R_S=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi)}{4}(x-a)(x-c)^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

- 注意到，$(x-a)(x-c)^2(x-b)$在区间$[a,b]$上保号（非正），可应用加权积分中值定理

几种低阶求积公式的余项（续）

- Simpson公式（$n=2$）
  - 余项

$$R_S=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad (4.2.7)$$

其中$\eta\in[a,b]$

- Cotes公式（$n=4$）

$$C=\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$$

余项 $R_C=I-C=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (4.2.8)$

复化求积法

等价于首先采用“分段低次插值”，再算积分

- 在使用Newton-Cotes公式时，提高阶的途径并不总能取得满意的效果
  - 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负
- 复化求积法
  1. 设将积分区间$[a, b]$划分为n等份，步长$h = \frac{b-a}{n}$，分点为$x_k = a + kh$，$k = 0,1, \ldots, n$
  2. 先用低阶Newton-Cotes公式求得每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$的积分值I_k
  3. 然后再求和，将$\sum_{k=0}^{n-1} I_k$作为积分I的近似值

特例

复化后仍然是形如式(4.1.3)的机械求积公式

□ 梯形公式

$$T = (b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \qquad (4.1.1)$$

余项 $$R_T = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \qquad (4.2.5)$$

□ 复化梯形公式

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

- 余项 (4.2.9)

$$I - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right] = -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\eta) \quad (4.2.10)$$

特例（续）

复化后仍然是形如式(4.1.3)的机械求积公式

- **Simpson公式**

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \tag{4.2.3}$$

- **复化Simpson公式**
  - 记子区间$[x_k,x_{k+1}]$的中点为$x_{k+\frac{1}{2}}$

$$\begin{aligned}S_n&=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})\right]\\&=\frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]\end{aligned} \tag{4.2.11}$$

特例（续）

- Simpson公式
  - 余项 $$R_S = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad (4.2.7)$$
- 复化Simpson公式
  - 余项
$$I - S_n = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \qquad (4.2.13)$$
  - h的阶数更高，同样的间距下误差更小

特例（续）

复化后仍然是形如式(4.1.3)的机械求积公式

□ Cotes公式

$$C=\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$$

□ 复化Cotes公式

- 记子区间$[x_k,x_{k+1}]$的4等分点$x_{k+\frac{1}{4}}$，$x_{k+\frac{1}{2}}$，$x_{k+\frac{3}{4}}$

$$C_n=\frac{h}{90}\left[7f(a)+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{4}})+12\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}})\right.$$
$$\left.+32\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{3}{4}})+14\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+7f(b)\right] \quad (4.2.12)$$

特例（续）

- Cotes公式
  - 余项 $$R_C = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (4.2.8)$$
- 复化Cotes公式
  - 余项
  $$I - C_n = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (4.2.14)$$
  - h的阶数更高，同样的间距下误差更小

例4.1

- 对于函数$f(x)=\frac{\sin x}{x}$，试利用表4.2计算积分$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
  - 比较两种方法：它们都需要提供9个点上的函数值，计算量基本相同
  - 将积分区间[0,1]划分为8等份，应用复化梯形法求得$T_8=0.9456909$

x	$f(x)$
0	1.0000000
1/8	0.9973978
1/4	0.9896158
3/8	0.9767267
1/2	0.9588510
5/8	0.9361556
3/4	0.9088516
7/8	0.8771925
1	0.8414709

例4.1（续）

- 对于函数$f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$，试利用表4.2计算积分$I=\int_0^1 \dfrac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
  - 将积分区间[0,1]划分为4等份，应用复化Simpson法求得 $S_4=0.9460832$
  - 同准确值$I=0.9460831$比较，T_8只有两位有效数字，S_4有六位有效数字

x	$f(x)$
0	1.0000000
1/8	0.9973978
1/4	0.9896158
3/8	0.9767267
1/2	0.9588510
5/8	0.9361556
3/4	0.9088516
7/8	0.8771925
1	0.8414709

误差的渐近性

- 复化的梯形法、Simpson法和Cotes法当步长$h \to 0$时均收敛到所求的积分值I
  - 根据余项公式可得

- 复化梯形公式
  - 余项

$$I - T_n = \sum_{k=0}^{n-1} \left[-\frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \right] \tag{4.2.10}$$

  - 可得

$$\frac{I - T_n}{h^2} = -\frac{1}{12} \sum_{k=0}^{n-1} h f''(\eta_k) \to -\frac{1}{12} \int_a^b f''(x) dx$$

误差的渐近性（续）

- 复化的梯形法

$$\frac{I - T_n}{h^2} \to -\frac{1}{12}[f'(b) - f'(a)]$$

- 复化的Simpson法

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

- 复化的Cotes法

$$\frac{I - C_n}{h^6} \to -\frac{1}{945 \times 4^6}[f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)]$$

p阶收敛

- **定义4.2** 如果一种复化求积公式I_n，当$h \to 0$时成立渐进关系式

$$\frac{I - I_n}{h^p} \to C, \qquad (C \neq 0)$$

则称求积公式I_n是p阶收敛的

- 复化梯形法具有2阶收敛精度
- 复化Simpson法具有4阶收敛精度
- 复化Cotes法分别具有6阶收敛精度

误差估计（h很小时）

- 复化的梯形法

$$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \tag{4.2.15}$$

  - h减半，误差变为1/4

- 复化的Simpson法

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 [f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)] \tag{4.2.16}$$

  - h减半，误差变为1/16

- 复化的Cotes法

$$I - C_n \approx -\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 [f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)] \tag{4.2.17}$$

  - h减半，误差变为1/64

目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

研究动机

- 复化求积方法
  - 优点：对提高精度是行之有效的
  - 缺点：在使用求积公式之前必须给出合适的步长
    - ✓ 步长太大，精度难以保证
    - ✓ 步长太小，又会导致计算量的增加

- 实际计算中常常采用变步长的计算方案
  - 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进行计算
  - 直至所求得的积分值满足精度要求为止

梯形法的递推化

- 设将求积区间$[a,b]$分成n等份，则一共有$n+1$个分点，按梯形公式(4.2.9)计算积分值T_n，需要提供$n+1$个函数值 (4.2.9)

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

- 如果将求积区间再二分一次，则分点增至$2n+1$个
  - 每个子区间$[x_k,x_{k+1}]$经过二分只增加了一个分点$x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x_k+x_{k+1})$

梯形法的递推化（续）

- 子区间$[x_k, x_{k+1}]$上的积分值为

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

能够增量计算

这里$h = \frac{b-a}{n}$代表二分前的步长

- 将每个子区间上的积分值相加，得

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

- 递推公式

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \qquad (4.3.1)$$

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

例4.2

- 计算积分$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$
  - 先对整个区间 $[0,1]$ 使用梯形公式，对于函数$f(x) = \frac{\sin x}{x}$，定义$f(0) = 1$，计算$f(1) = 0.8414709$，根据梯形公式可得

$$T_1 = \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] = 0.9207355$$

  - 然后将区间二等分，再求出中点的函数值 $f\left(\frac{1}{2}\right) = 0.9588510$，利用递推公式可得

$$T_2 = \frac{1}{2}T_1 + \frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right) = 0.9397933$$

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

例4.2 （续）

- 进一步二分求积区间，计算新分点上的函数值

$$f\left(\frac{1}{4}\right) = 0.9896158 \qquad f\left(\frac{3}{4}\right) = 0.9088516$$

- 再次利用递推公式可得

$$T_4 = \frac{1}{2}T_2 + \frac{1}{4}\left[f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right)\right] = 0.9445135$$

- 这样不断二分下去，得到下面的结果

例4.2（续）

- 积分I的准确值为0.9460831，用变步长方法二分10次得到了这个结果

k	$T_{n=2^k}$	k	$T_{n=2^k}$
1	0.9397933	6	0.9460769
2	0.9445135	7	0.9460815
3	0.9456909	8	0.9460827
4	0.9459850	9	0.9460830
5	0.9460596	10	0.9460831

误差的事后估计

- 梯形法算法简单，但精度差、收敛速度缓慢
  - 递推化实现了增量计算，并不能直接提升精度
- 梯形法的误差公式

$$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \qquad (4.2.15)$$

  - T_n的截断误差大致与h^2成正比，因此当步长二分后，截断误差将减至原有误差的1/4，即有

$$\frac{I - T_{2n}}{I - T_n} \approx \frac{1}{4} \quad \Rightarrow I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \qquad (4.3.2)$$

  - **用计算结果估计误差：** 二分前后的两个积分值T_n与T_{2n}相当接近，就可以保证 T_{2n}的误差很小

Romberg（龙贝格）公式

- 积分近似值 T_{2n} 的误差大致等于$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$

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

- 用这个误差值作为T_{2n}的一种补偿

$$\bar{T}=T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n \qquad (4.3.3)$$

  - 可能是更好的结果

- 例4.2中，$T_4=0.9445135$和$T_8=0.9456909$的精度都很差（只有两三位有效数字）
  - $\bar{T}=\frac{4}{3}T_8-\frac{1}{3}T_4=0.9460833$却有6位有效数字

提升精度的分析

S_n的截断误差大致与h^4成正比

- 复化梯形公式

$$T_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \qquad (4.2.9)$$

- 复化Simpson公式

$$S_n = \frac{h}{6}\left[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \qquad (4.2.11)$$

- 可以得到关系式

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (4.3.4)$$

Romberg公式（续）

Simpson法的误差公式

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right] \quad (4.2.16)$$

- S_n的截断误差大致与h^4成正比，因此，若将步长折半，则误差将减至原有误差的1/16，即有

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

- 改进方案

$$\bar{S} = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n$$

Romberg公式（续）

C_n的截断误差大致与h^6成正比

□ Simpson法的误差公式

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \left[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right] \quad (4.2.16)$$

- S_n的截断误差大致与h^4成正比，因此，若将步长折半，则误差将减至原有误差的1/16，即有

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

- 改进方案等价于Cotes法的积分值C_n
  - ✓ 更小的误差

$$\bar{S} = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n = C_n \quad (4.3.5)$$

Romberg公式（续）

- 重复同样的推导，得到Romberg公式

$$R_n = \frac{64}{63} C_{2n} - \frac{1}{63} C_n \qquad (4.3.6)$$

- 在变步长的过程中运用式(4.3.4)、(4.3.5)和式(4.3.6)，就能将粗糙的梯形值T_n，逐步加工成精度较高的Simpson值S_n、Cotes值C_n和Romberg值R_n

$$S_n = \frac{4}{3} T_{2n} - \frac{1}{3} T_n \qquad (4.3.4)$$

$$C_n = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n \qquad (4.3.5)$$

例4.3

- 用加速公式(4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)加工例4.2得到的梯形值
  - 变步长方法二分10次得到准确值

k	$T_{n=2^k}$	k	$T_{n=2^k}$
1	0.9397933	6	0.9460769
2	0.9445135	7	0.9460815
3	0.9456909	8	0.9460827
4	0.9459850	9	0.9460830
5	0.9460596	10	0.9460831

例4.3

- 用加速公式(4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)加工例4.2得到的梯形值

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	0.9207355			
1	0.9397933			
2	0.9445135			
3	0.9456909			

例4.3

加速效果十分显著

- 用加速公式(4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)加工例4.2得到的梯形值
  - 计算结果如下所示（k表示二分次数）

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	0.9207355			
1	0.9397933	0.9461459		
2	0.9445135	0.9460869	0.9460830	
3	0.9456909	0.9460833	0.9460831	0.9460831

  - 准确值$I=0.9460831$

Richardson（理查森）外推加速法

- (4.3.4)、(4.3.5)和(4.3.6)的加速过程可以再继续下去
  - 梯形法的余项可展开成下列级数形式
- 定理4.3 设 $f(x) \in C^{\infty}[a,b]$，则成立

$$T(h) = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \cdots + a_k h^{2k} + \cdots \qquad (4.3.7)$$

其中系数$a_k (k = 1,2,\ldots)$与h无关

  - 保留更多的h高阶项
- 对比复化梯形公式的余项

$$I - T_n = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\eta) \qquad (4.2.10)$$

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (4.3.4)$$

Richardson外推加速法（续）

$$T(h) = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6 + \cdots + a_k h^{2k} + \cdots \qquad (4.3.7)$$

- 根据式(4.3.7)，可得到

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = I + \frac{a_1}{4}h^2 + \frac{a_2}{16}h^4 + \frac{a^3}{64}h^6 + \cdots \qquad (4.3.8)$$

- 将上述两式按照以下方式作线性组合

$$T_1(h) = \frac{4}{3}T\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}T(h) \qquad (4.3.9)$$

则可以从余项展开式中消去h^2项，从而得到

$$T_1(h) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots \qquad (4.3.10)$$

- $\{T_1(h)\}$其实就是Simpson值序列

$$C_n = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n \quad (4.3.5)$$

Richardson外推加速法（续）

$$T_1(h) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots \qquad (4.3.10)$$

- 根据式(4.3.10)，有

$$T_1\left(\frac{h}{2}\right) = I + \frac{\beta_1}{16} h^4 + \hat{\beta}_2 h^6 + \hat{\beta}_3 h^8 + \cdots$$

- 若令

$$T_2(h) = \frac{16}{15} T_1\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{15} T_1(h)$$

则又可进一步消去h^4 项，从而有

$$T_2(h) = I + \gamma_1 h^6 + \gamma_2 h^8 + \cdots$$

- $\{T_2(h)\}$其实就是Cotes值序列

Richardson外推加速法（续）

- 如此继续下去，每加速一次，误差量级提高2阶
  - 一般地，将$T_0(h)=T(h)$，按公式

$$T_m(h)=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}\left(\frac{h}{2}\right)-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}(h) \qquad (4.3.11)$$

经过$m(m=1,2,\ldots)$次加速后，余项便取下列形式

$$T_m(h)=I+\delta_1 h^{2(m+1)}+\delta_2 h^{2(m+2)}+\cdots \qquad (4.3.12)$$

- 以$T_0^{(k)}$表示二分k次后求得的梯形值，且以$T_m^{(k)}$表示序列$\{T_0^{(k)}\}$的m次加速值，可得

$$T_m^{(k)}=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)}-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)} \qquad (4.3.13)$$

Richardson外推加速法（续）

- 可以逐行构造出下列三角形数表——T数表

$$
\begin{array}{llll}
T_0^{(0)} & & & \\
T_0^{(1)} & T_1^{(0)} & & \\
T_0^{(2)} & T_1^{(1)} & T_2^{(0)} & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
$$

- 可以证明，如果$f(x)$充分光滑，那么T数表的每一列元素及对角线元素均收敛到所求积分值I

$$\lim_{k\to\infty} T_m^{(k)} = I \ (m\text{固定}) \qquad \lim_{m\to\infty} T_m^{(0)} = I$$

Romberg算法流程

- 在二分过程中逐步形成T数表的具体方法
  1. 准备初值：计算下式，且令$1 \longrightarrow k$(k 记录二分的次数)
  $$T_0^{(0)} = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$
  2. 求梯形值：按照式(4.3.1)计算梯形值$T_0^{(k)}$
  $$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \tag{4.3.1}$$

Romberg算法流程（续）

3. 求加速值：按照式(4.3.13)逐个求出T数表第$k+1$行其余个元素$T_j^{(k-j)}$ $(j=1,2,\dots,k)$

$$T_m^{(k)}=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)}-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)} \qquad (4.3.13)$$

4. 精度控制：对于指定精度ε，若$\left|T_k^{(0)}-T_{k-1}^{(0)}\right|<\varepsilon$，则终止计算，并取$T_k^{(0)}$作为所求的结果；否则令$k+1\longrightarrow k$（意即二分一次），转步2继续计算