Numerical Analysis
陈曦，HOME
Summer, 2024

数值分析

数值积分和数值微分

参考书目：

- Numerical Analysis（David Kincaid, Ward Cheney）
- Numerical Analysis（Timothy Sauer，2014）
- Approximation Theory and Approximation Practice（Trefethen，2013）

1 数值微分

最常见的数值微分是直接差分法。如果记 D_+ 为前向差分算子，后向差分算子为 D_-，中心差分算子为 D_0，即

$$D_+u(t) = \frac{u(t+h)-u(t)}{h}, \quad D_-u(t) = \frac{u(t)-u(t-h)}{h}, \quad D_0u(t) = \frac{u(t+h)-u(t-h)}{2h},$$

则它们都可以用来近似 $u'(t)$，使用带余项的 Taylor 展开可以看到

$$D_+u(t) = u'(t) + \frac{h}{2}u''(\xi_+), \quad D_-u(t) = u'(t) + \frac{h}{2}u''(\xi_-), \quad D_0u(t) = u'(t) + \frac{h^2}{6}u'''(\xi_0),$$

所以前两种单侧差分是一阶的，中心差分是二阶的。为了近似更高阶的导数，我们可以使用更高阶的差分算子，例如

$$D_+D_-u(t) = \frac{u(t+h)-2u(t)+u(t-h)}{h^2} = u''(t) + \frac{h^2}{12}u^{(4)}(\xi)$$

是二阶中心差分，具有二阶精度；类似地，使用待定系数法，考虑

$$\sum_{k=-l}^{r} a_k u(t+kh) = u^{(n)}(t) + O(h^n),$$

将左侧使用 Taylor 展开，令两侧各阶系数相等可以求出 a_k 的值。另外，给出两个常用的单侧差分算子：

$$\frac{3u(t)-4u(t+h)+u(t+2h)}{-2h} = u'(t) + O(h^2), \quad \frac{u(t-2h)-4u(t-h)+3u(t)}{2h} = u'(t) + O(h^2).$$

1.1 插值型微分

借助多项式插值，我们可以得到一大类数值微分方法，这类方法称为插值型微分，其基本思想是先使用多项式对原函数进行插值，之后使用该插值多项式的导数来近似原函数的导数。当使用 Lagrange 插值时，回忆其满足

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i), \tag{1.1}$$

其中 $\ell_i(x)$ 是 Lagrange 插值基函数 $\prod_{j\neq i}(x-x_j)/(x_i-x_j)$。对上式的两侧求导可得

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i'(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i) + \frac{1}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi_x). \tag{1.2}$$

考虑该近似在某插值节点 x_k 上的值，则

$$f'(x_k) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_{x_k})}{(n+1)!}\frac{d}{dx}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)|_{x=x_k}, \tag{1.3}$$

因为

$$\frac{d}{dx}\prod_{i=0}^{n}(x_k-x_i)=\sum_{i=0}^{n}\prod_{j\neq i}(x_k-x_j)=\prod_{j\neq k}(x_k-x_j),$$

所以插值型微分的误差为

$$f'(x_k)-\sum_{i=0}^{n}f(x_i)\ell_i'(x_k)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_{x_k})}{(n+1)!}\prod_{j\neq k}(x_k-x_j). \tag{1.4}$$

1.2 Richardson 外推法

注意到数值微分的误差往往形如

$$Ch^n+O(h^{n+1}),$$

其中 C 是与 h 无关的常数，因此我们可以使用外推法来提高精度，具体来说，我们可以使用两个不同的步长 h_1 和 h_2，得到两个近似值 u_1 和 u_2，将他们进行线性组合以消去误差中的主要部分从而提高数值精度。一般地，对于一个相容的数值微分方法我们有

$$Lu=\varphi(h)+a_1h+a_2h^2+a_3h^3+a_4h^4+\cdots, \tag{1.5}$$

其中 L 是差分算子，$\varphi(h)$ 是使用 u 在某些节点处的值组合得到的数值微分，h 是步长，剩余的部分是误差项。为了消除一阶误差项，分别使用 h 和 $h/2$ 的步长得到两个近似值 u_1 和 u_2，则

$$\begin{aligned}Lu&=\varphi(h)+a_1h+a_2h^2+a_3h^3+a_4h^4+\cdots,\\&=\varphi(h/2)+a_1h/2+a_2h^2/4+a_3h^3/8+a_4h^4/16+\cdots,\end{aligned}$$

将第二行乘二并减去第一行，可以得到

$$Lu=2\varphi(h/2)-\varphi(h)-\frac{a_2}{2}h^2-\frac{3a_3}{4}h^3+\cdots,$$

因此 $2\varphi(h/2)-\varphi(h)$ 是一个具有二阶截断误差的更高精度的数值微分。

以上方法称为 Richardson 外推法，重复使用它可以提高数值微分的精度。M 步的 Richardson 外推法在每步分为两个阶段：

1. 选取合适的步长 h 并计算前 $M+1$ 个数值近似值，并记为

$$D(n,0)=\varphi(h/2^n),\quad n=0,1,\cdots,M. \tag{1.6}$$

2. 逐项消去高阶误差项，使用以下递推公式计算 $D(n,k)$：

$$D(n,k)=\frac{2^k}{2^k-1}D(n,k-1)-\frac{1}{2^k-1}D(n-1,k-1), \tag{1.7}$$

   其中 $n=k,\cdots,M$，$k=1,2,\cdots,n$。

使用数学归纳法可知按照以上方法得到的 $D(n,k)$ 具有 $k+1$ 阶截断误差。

当使用中心差分时，误差中不含有奇数次的项，因此我们可以将第二个阶段中的递推关系改为

$$D(n,k)=\frac{4^k}{4^k-1}D(n,k-1)-\frac{1}{4^k-1}D(n-1,k-1), \tag{1.8}$$

此时 $D(n,k)$ 的截断误差阶数为 $2(k+1)$。

通常 Richardson 外推法的计算借助于以下的表格：

$D(0,0)$				
$D(1,0)$	$D(1,1)$			
$D(2,0)$	$D(2,1)$	$D(2,2)$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$D(M,0)$	$D(M,1)$	$D(M,2)$	$\cdots$	$D(M,M)$

每次计算 $D(n,k)$ 时需要使用 $D(n,k-1)$ 和 $D(n-1,k-1)$，因此可以从左上角开始逐列计算。

2 数值积分

数值积分可以视作数值微分的逆运算，其目的是计算定积分

$$I = \int_a^b f(x)dx.$$

最简单的积分方法包括矩形法、梯形法和 Simpson 法则，这些方法都是插值型积分方法的特例。所谓插值型积分方法是指先对被积函数进行多项式插值，之后对插值多项式进行积分。当使用 Lagrange 插值时，我们有

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i),$$

两侧同时积分可得

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b \ell_i(x)dx + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\int_a^b \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)dx,$$

记其中与 f 无关的

$$\int_a^b \ell_i(x)dx := A_i, \tag{2.1}$$

则 f 的插值型数值积分可以表示为

$$\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \tag{2.2}$$

相应的数值误差为

$$\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)dx, \tag{2.3}$$

使用绝对值不等式可得

$$\left|\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)dx\right| \leqslant \frac{M}{(n+1)!}\int_a^b \prod_{i=0}^{n}|x - x_i|dx, \tag{2.4}$$

其中 $M = \max_{x\in[a,b]} f^{(n+1)}(x)$。

与连续空间上的最佳逼近类似，我们希望最小化上述误差，为此需要寻找合适的插值节点 x_i，这一问题可以转化为如下最优化问题：

$$\min_{x_0,\cdots,x_n}\int_a^b \prod_{i=0}^{n}|x - x_i|dx, \tag{2.5}$$

可以证明在 $[a,b] = [-1,1]$ 时，当且仅当 $x_0,\cdots,x_n$ 是第二类 Chebyshev 点，即第二类 Chebyshev 多项式 $U_{n+1}(x) = \sin[(n+2)\arccos x]/\sin(\arccos x)$ 的零点时上式取到最小值 2^{-n}，即

$$\int_{-1}^1 \prod_{i=0}^{n}|x - x_i|dx = 2^{-n}, \tag{2.6}$$

相应的插值点，即第二类 Chebyshev 点为

$$x_i = \cos\left(\frac{i+1}{n+2}\pi\right), \quad i = 0, 1, \cdots, n. \tag{2.7}$$

于是我们有如下误差估计：

$$\left|\int_{-1}^1 f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\right| \leqslant \frac{M}{2^n(n+1)!}. \tag{2.8}$$

当区间为一般的 $[a,b]$ 时，使用坐标变换

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$$

可以将区间变换到 $[-1,1]$ 上，此时插值型积分的误差为

$$\left|\int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)\right| \leqslant \frac{M}{(n+1)!}\int_{-1}^1 \prod_{i=0}^{n}\frac{b-a}{2}|t - t_i| \cdot \frac{b-a}{2}dt \leqslant \frac{M}{2^n(n+1)!}\cdot(\frac{b-a}{2})^{n+2}. \tag{2.9}$$

2.1 Newton-Cotes 公式

如果不追求特别高的精度,等距节点的插值点是最简单的选择,相应的插值型积分方法称为 Newton-Cotes 插值。最简单的 Newton-Cotes 公式是矩形法、梯形法和 Simpson 法则，它们分别对应于 $n=0,1,2$ 的情形。对于 $n=0$ 的情形，我们有

$$\int_a^b f(x)dx \approx f(a)(b-a) \text{ or } f(b)(b-a), \tag{2.10}$$

也可以使用中点法，即

$$\int_a^b f(x)dx \approx f(\frac{a+b}{2})(b-a). \tag{2.11}$$

这种情况下我们只使用一个插值点 $x_0=a,b$ 或者 $(a+b)/2$。根据插值型积分的误差估计可知 $x_0=a,b$ 时方法的误差为

$$f'(\xi)\int_a^b (x-x_0)dx = \pm\frac{f'(\xi)}{2}(b-a)^2,$$

不过当使用中点法时，由于正负误差恰好相互抵消，误差阶数上升为 $O((b-a)^3)$。

对于 $n=1$ 的情形，我们有

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)+O((b-a)^3), \tag{2.12}$$

注意到当 $x_0=a, x_1=b$ 时，Lagrange 插值基函数为

$$\ell_0(x)=\frac{x-b}{a-b},\quad \ell_1(x)=\frac{x-a}{b-a},$$

计算 A_0, A_1 可得

$$A_0=\int_a^b \ell_0(x)dx=\frac{b-a}{2},\quad A_1=\int_a^b \ell_1(x)dx=\frac{b-a}{2},$$

所以我们有

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)=\frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a),$$

由此可见梯形法则是 $n=1$ 的 Newton-Cotes 公式。根据之前的分析可知

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

其中使用到了积分中值定理，于是该方法的误差为

$$\int_a^b f(x)dx-\frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)=-\frac{1}{12}f''(\xi)(b-a)^3.$$

对于 $n=2$ 的情形，Lagrange 基函数变为

$$\ell_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},\quad \ell_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\quad \ell_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)},$$

计算 A_0, A_1, A_2 可得

$$A_0=\int_a^b \ell_0(x)dx=\frac{b-a}{6},\quad A_1=\int_a^b \ell_1(x)dx=\frac{2(b-a)}{3},\quad A_2=\int_a^b \ell_2(x)dx=\frac{b-a}{6},$$

由此可知 $n=2$ 的 Newton-Cotes 公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right], \tag{2.13}$$

此即 Simpson 法则。与之前类似地借助积分中值定理可知该方法的误差为

$$\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=-\frac{1}{90}f^{(4)}(\xi)(\frac{b-a}{2})^5.$$

通常为了提高精度，我们可以将区间 $[a,b]$ 等分为 n 个子区间，然后在每个子区间上使用 Newton-Cotes 公式，这种方法称为复合 Newton-Cotes 公式。当使用等距划分 $a=x_0<x_1<\cdots<x_{n-1}<x_n=b$ 时，复合梯形法则为

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=1}^n\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(x_n)\right], \tag{2.14}$$

其中 $h=(b-a)/n$，数值误差为

$$-\frac{1}{12}(b-a)h^2 f''(\xi).$$

复合 Simpson 法则为

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=1}^n\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx\approx\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4\sum_{i=1}^{n/2}f(x_{2i-1})+2\sum_{i=2}^{n/2}f(x_{2i-2})+f(x_n)\right], \tag{2.15}$$

数值误差为

$$-\frac{1}{180}(b-a)h^4 f^{(4)}(\xi).$$

一般的 Newton-Cotes 公式可以借助待定系数法来构造，由于插值节点已经确定，我们只需要计算 A_i 的值。通常我们需要选取 A_i 以使得相应的 Newton-Cotes 公式具有尽可能高的精度，一般 $n+1$ 个节点的 Newton-Cotes 公式最高可以达到 n 阶代数精度，即对于任意阶数不超过 n 的多项式 $p(x)$，有

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

即数值积分是准确的。要求 $n+1$ 个节点的 Newton-Cotes 公式具有 n 阶代数精度可以确定 A_i 的值。要令 $n+1$ 个节点的 Newton-Cotes 公式具有 n 阶代数精度，只需

$$\int_a^b x^k dx=\sum_{i=0}^n A_i x_i^k,\quad k=0,1,\cdots,n, \tag{2.16}$$

写成矩阵形式即

$$\begin{pmatrix}1&1&\cdots&1\\x_0&x_1&\cdots&x_n\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\x_0^n&x_1^n&\cdots&x_n^n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_0\\A_1\\\vdots\\A_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}b-a\\\frac{b^2-a^2}{2}\\\vdots\\\frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1}\end{pmatrix},$$

注意到系数矩阵是 Vandermonde 矩阵且使用的是等距节点，因此该线性方程组是非奇异的，方程有界，解该线性方程组即可得到 A_i 的值。然而该方法的缺点是当 n 较大时，Vandermonde 矩阵的条件数会变得很大，因此数值稳定性会变得很差。另一种方法是不再考虑 x^k，而是换用 $(x-x_0)\cdots(x-x_k)$，这种情况下有

$$\int_a^b\prod_{j=0}^k(x-x_j)dx=\sum_{i=k+1}^n A_i\prod_{j=0}^k(x_i-x_j), \tag{2.17}$$

于是矩阵形式变为

$$\begin{pmatrix}1&1&1&\cdots&1\\&(x_1-x_0)&(x_2-x_0)&\cdots&(x_n-x_0)\\&&(x_2-x_0)(x_2-x_1)&\cdots&(x_n-x_0)(x_n-x_1)\\&&&\ddots&\vdots\\&&&&\prod_{j=0}^n(x_n-x_j)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_0\\A_1\\\vdots\\A_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}b-a\\\int_a^b(x-x_0)dx\\\vdots\\\int_a^b\prod_{j=0}^n(x-x_j)dx\end{pmatrix},$$

这样系数矩阵变为上三角矩阵，因此可以使用回代法求解。

更一般地，我们有广义 Newton-Cotes 公式，这类方法使用等距节点插值计算加权积分

$$\int_a^b f(x)w(x)dx\approx\sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \tag{2.18}$$

其中 $w(x)>0$ 是权函数，A_i 是待定系数。

2.2 Gauss 积分公式

通过仔细选取插值节点，我们可以将插值型积分的精度提高到 $2n+1$ 阶，相应的积分方法称为 Gauss 积分。考虑一般的广义插值问题：

$$\int_a^b f(x)w(x)dx=\sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \tag{2.19}$$

Gauss 积分使用插值节点 $x_0,\cdots x_n$ 是关于 w 的 $n+1$ 阶广义正交多项式的零点。广义正交多项式的定义如下。

Definition. 如果 $n+1$ 阶多项式 Q 满足

$$\int_a^b P(x)Q(x)w(x)dx = 0, \quad \forall P \in \mathcal{P}_n, \tag{2.20}$$

则称 Q 是关于 w 的 $n+1$ 阶广义正交多项式。

注意到对任意 $f \in \mathcal{P}_{2n+1}$ 都可以使用带余除法写为

$$f(x) = Q(x)g(x) + r(x), \quad \deg r < \deg Q = n+1,$$

进而 $f(x_i) = r(x_i)$。又因为 f 至多 $2n+1$ 阶，所以 $\deg g \leqslant n$，因此使用 Q 的 w 正交性有

$$\int_a^b f(x)w(x)dx = \int_a^b Q(x)g(x)w(x)dx + \int_a^b r(x)w(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i r(x_i) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \tag{2.21}$$

因此该积分公式具有 $2n+1$ 阶代数精度。

在使用 Gauss 积分时首先需要确定相应的广义正交多项式，通常可以使用 Gram-Schmidt 正交化方法来构造，其中使用关于 w 的广义内积：

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx. \tag{2.22}$$

可以验证广义正交多项式的所有根都是 (a,b) 内实的单根。

最后我们对 Gauss 积分的误差进行估计。我们先给出 Gauss 积分的一些性质。

Lemma 1. *Gauss 积分公式中的系数 A_i 都是正的，且满足*

$$\sum_{i=0}^n A_i = \int_a^b w(x)dx. \tag{2.23}$$

Proof. 先说明 $A_i > 0$。令 Q 是关于 w 的 $n+1$ 阶广义正交多项式，设它的根为 $x_0, \cdots, x_n$，令 $P(x) = Q(x)/(x-x_i)$，其中 x_i 是 Q 的某一根，因此 P 是 n 阶多项式，因为 Gauss 积分具有 $2n+1$ 阶代数精度，所以对 P^2 使用 Gauss 积分有

$$0 = \int_a^b P^2(x)w(x)dx = \sum_{j=0}^n A_j P^2(x_j) = A_i P^2(x_i),$$

所以 $A_i > 0$。另外，对 $Q = 1$ 使用 Gauss 积分有

$$\int_a^b w(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i,$$

证毕。 □

根据 Weierstrass 定理，有界闭区间上的连续函数可以被多项式逼近，因此对于任意 $f \in C[a,b]$，给定任意 $\varepsilon > 0$，都存在 $P \in \mathcal{P}$ 使得

$$|f(x) - P(x)| < \varepsilon, \quad \forall x \in [a,b].$$

使用这一事实我们可以证明使用 Gauss 积分计算 f 的广义积分的误差随着插值节点个数 n 的增大而收敛到零。

Theorem 1. Gauss 积分的收敛性 *如果 $f \in C[a,b]$，则对于任意 $\varepsilon > 0$，存在 N 使得任意 $n > N$ 都有*

$$\left| \int_a^b f(x)w(x)dx - \sum_{i=0}^n A_{ni} f(x_{ni}) \right| < \varepsilon, \tag{2.24}$$

因此 Gauss 积分的误差随着插值节点个数 n 的增大而收敛到零，其中下标 ni 表示使用 A_{ni} 和节点 x_{ni} 与节点个数 n 有关。

Proof. 选取 $\epsilon > 0$ 使得

$$2\epsilon \int_a^b w(x)dx < \varepsilon,$$

根据 Weierstrass 定理，存在 $P \in \mathcal{P}$ 使得

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon, \quad \forall x \in [a,b].$$

使用三角不等式可知

$$\begin{aligned}
\left|\int_a^b f(x)w(x)dx-\sum_{i=0}^n A_{ni}f(x_{ni})\right| &\leqslant \left|\int_a^b f(x)w(x)dx-\int_a^b P(x)w(x)dx\right|+\left|\int_a^b P(x)w(x)dx-\sum_{i=0}^n A_{ni}f(x_{ni})\right| \\
&\leqslant \int_a^b |f(x)-P(x)|w(x)dx+\left|\sum_{i=0}^n A_{ni}P(x_{ni})-\sum_{i=0}^n A_{ni}f(x_{ni})\right| \\
&\leqslant \epsilon\int_a^b w(x)dx+\sum_{i=0}^n A_{ni}|P(x_{ni})-f(x_{ni})| \\
&\leqslant \epsilon\int_a^b w(x)dx+\sum_{i=0}^n A_{ni}\epsilon \\
&\leqslant 2\epsilon\int_a^b w(x)dx<\varepsilon,
\end{aligned}$$

其中我们令 N 为任意大于 $\deg P$ 的整数，证毕。 □

更进一步地，我们可以给出 Gauss 积分的具体误差公式。

Theorem 2. $n+1$ **节点 Gauss 积分的误差公式** *如果 $f\in C^{2n+2}[a,b]$，则存在 $\xi\in(a,b)$ 使得*

$$\int_a^b f(x)w(x)dx-\sum_{i=0}^n A_if(x_i)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b\prod_{i=0}^n(x-x_i)dx. \tag{2.25}$$

Proof. 令 P 为 f 在 Gauss 插值节点处的二重 Hermite 插值多项式，即

$$P(x_i)=f(x_i),\quad P'(x_i)=f'(x_i),\quad i=0,1,\cdots,n,$$

于是 $\deg P=2n+1$，插值误差为

$$f(x)-P(x)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\prod_{i=0}^n(x-x_i)^2,$$

将上式关于 w 积分并使用 Gauss 积分即可得到

$$\int_a^b f(x)w(x)dx-\sum_{i=0}^n A_if(x_i)=\frac{1}{(2n+2)!}\int_a^b f^{(2n+2)}(\xi_x)\prod_{i=0}^n(x-x_i)^2dx,$$

使用积分中值定理可知上式右侧等于

$$\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b\prod_{i=0}^n(x-x_i)dx,$$

因此

$$\int_a^b f(x)w(x)dx-\sum_{i=0}^n A_if(x_i)=\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b\prod_{i=0}^n(x-x_i)dx,$$

证毕。 □

2.3 Romberg 积分

当使用复合梯形法则时，类似于数值微分中的 Richardson 外推法，我们可以通过递推的方式提高数值积分的精度，在这个过程中，我们希望可以充分利用以往的计算结果以减少计算量（用内存换速度），相应的方法称为 Romberg 积分。

令计算步长为 $h=(b-a)/n$，则记复合梯形法则为

$$T(n)=\frac{h}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(x_n)\right]=\frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+\frac{b-a}{n}i)+f(b)\right], \tag{2.26}$$

注意到当步长减半时，原本的节点仍然在被使用，因此无需重复计算这一部分极点处的值，更准确地说，我们有

$$\begin{aligned}
T(2n)&=\frac{b-a}{4n}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{2n-1}f(a+\frac{b-a}{2n}i)+f(b)\right] \\
&=\frac{1}{2}T(n)+\frac{b-a}{2n}\sum_{i=1}^{n-1}f(a+\frac{b-a}{2n}(2i-1)),
\end{aligned} \tag{2.27}$$

重复使用上式可得

$$T(2^n) = \frac{1}{2}T(2^{n-1}) + \frac{b-a}{2^n}\sum_{i=1}^{2^n-1} f(a + \frac{b-a}{2^n}(2i-1)), \tag{2.28}$$

于是使用这一递推关系可以较高效地计算出 $T(2^n)$，这一方法称为 Romberg 积分。

通常 Romberg 积分可以借助 Richardson 外推法提高精度，这一过程往往使用表格来计算。令表格的第一列为 $R(n,0) = T(2^n)$。注意到梯形法则具有二阶精度且误差中不含有奇数次项，因此 Richardson 外推过程中的递推关系为

$$R(n,k) = \frac{4^k}{4^k-1}R(n,k-1) - \frac{1}{4^k-1}R(n-1,k-1), \tag{2.29}$$

其中 $n = 2^k, \cdots, M$，$k = 1, 2, \cdots, n$。计算表格为

$R(0,0)$				
$R(1,0)$	$R(1,1)$			
$R(2,0)$	$R(2,1)$	$R(2,2)$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
$R(M,0)$	$R(M,1)$	$R(M,2)$	$\cdots$	$R(M,M)$