第 4 章 数值积分与微分

姚遥

南京大学智能科学与技术学院

本章目录

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

Newton-Leibniz 公式

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

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

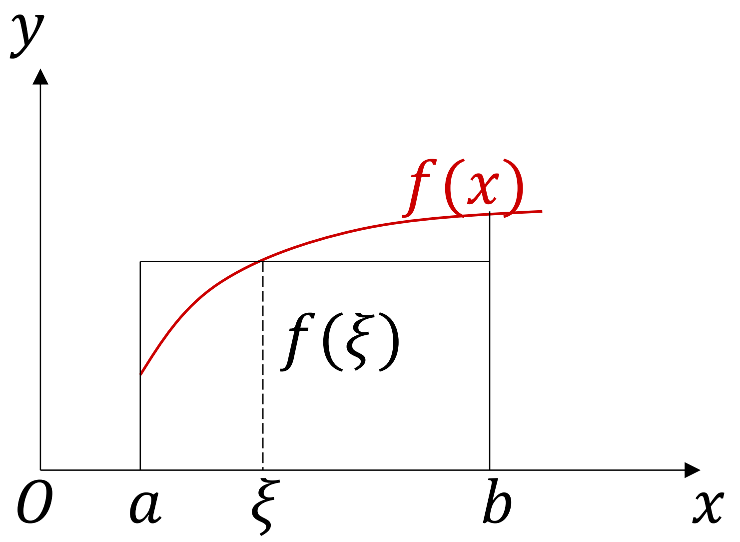
实际使用中的问题

- 大量被积函数 $f(x)$ 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数据表，Newton-Leibniz 公式无法直接使用

积分中值定理

- 在积分区间(a, b)内存在一点ξ，有下式成立：

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



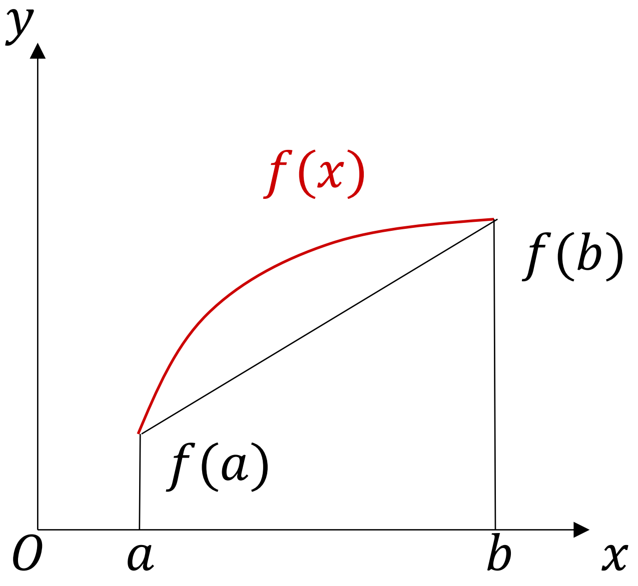
- 底为 $b-a$，高为 $f(\xi)$ 的矩形面积等于所求曲边梯形的面积 I
- ξ 的具体位置一般不知道，难以准确算出 $f(\xi)$
- $f(\xi)$ 称为区间 $[a, b]$ 上的平均高度

近似平均高度 $f(\xi)$

- **梯形公式**：用端点高度 $f(a)$ 与 $f(b)$ 取平均近似 $f(\xi)$

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

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



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

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

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

积分 -> 函数值计算

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

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

数值积分 | 代数精度

欲使求积公式 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 具有 m 次代数精度，只要令它对于 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^m$ 都能成立，即

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

- 取 $n = m$，选定 $n + 1$ 个求积节点 x_k
- 确定 A_k： $n + 1$ 个方程，$n + 1$ 个变量

数值积分 | 插值型求积公式

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 $L_n(x)$，则积分 I 可以近似表示为

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

- 若采用Lagrange插值多项式 $L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)$，则

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

其中 $l_k(x)$ 为 n 次插值基函数

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

数值积分 | 插值型求积公式

- 对照机械求积

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

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.1.5}$$

- 可得

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

称为插值型求积公式

数值积分 | 插值余项

回顾定理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

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

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

- 对于插值型求积公式(4.1.5)，其余项为

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

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

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

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

- **充分性**：次数不大于 n 的多项式 $f(x)$，$R[f]$ 等于零
- **必要性**：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
  - 求积公式(4.1.5)至少具有 n 次代数精度，故对插值基函数$l_k(x)$准确成立，则

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

  - 此即为插值型的求积公式(4.1.6)中定义的 A_k

本章目录

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

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)

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

- 引进变换 $x=a+th$

Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式

- 引进变换 $x = a + th$

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

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

- 当 $n = 1$ 时，即梯形公式

$$C_0^{(1)} = C_1^{(1)} = \frac{1}{2} \qquad T = (b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2}$$

Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式

- 当 $n = 2$ 时

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

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

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

➢ 得Simpson（辛普森）公式

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

Newton-Cotes（牛顿-柯特斯）公式

- 当 $n=4$ 时

$$C_0^{(4)}=\frac{7}{90},\ C_1^{(4)}=\frac{16}{45},\ C_2^{(4)}=\frac{2}{15},\ C_3^{(4)}=\frac{16}{45},\ C_4^{(4)}=\frac{7}{90},$$

  - 得到Cotes（柯特斯）公式

$$S=\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] \qquad (4.2.4)$$

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

- 当 $n\geq 8$ 时，Cotes系数有正有负，稳定性得不到保证

数值积分 | Newton–Cotes公式代数精度

根据定理4.1，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

验证一下

- 对Simpson公式（$n=2$）

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

- 用 $f(x)=x^3$ 进行验证，发现

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

实际上具有 $3=2+1$ 次代数精度

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

- **思路**：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

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

- 由于 $f^{(n+1)}(x)=(n+1)!$，因此

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

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

- 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

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

Newton-Cotes公式余项（对所有 n）

- 根据积分余项公式

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

- 注意到，$\omega(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上，可应用加权积分中值定理

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

- 故余项

$$R[f] = \frac{f^{n+1}(\eta)}{(n+1)!}\int_a^b \omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x \qquad \eta \in [a,b]$$

梯形公式余项（$\mathbf{n=1}$）

$$R_T = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3 \qquad \eta \in [a,b]$$

Newton-Cotes公式余项（对 n 为偶数）

- 类似定理4.2，应该可以得到更紧的上界
- **思路**：构造次数不大于 $n+1$ 次的多项式 $H(x)$
  - 对所有节点满足 $H(x_k)=L(x_k)$，
  - 存在一个 x_i（比如 $x_i=a$），$H'(x_i)=L'(x_i)$
  - Rolle 定理
- 可得

$$R[f]=\frac{f^{n+2}(\eta)}{(n+2)!}\int_a^b (x-x_i)\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x$$

x_i 为任意一个 n 次的插值节点

Newton-Cotes公式余项（对 n 为偶数）

$$R[f] = \frac{f^{n+2}(\eta)}{(n+2)!}\int_a^b (x - x_i)\omega_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x$$

x_i 为任意一个 n 次的插值节点

Simpson公式余项（$n = 2$，$x_i = c = \frac{a+b}{2}$）

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)\,\mathrm{d}x = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \tag{4.2.7}$$

Cotes公式余项（$n = 4$，$x_i = c = \frac{a+b}{2}$）

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

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

- 设将积分区间 $[a, b]$ 划分为 n 等份，步长 $h = \frac{b-a}{n}$，分点为 $x_k = a + kh$，$k = 0,1, \dots, n$
- 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
- 然后再求和，将 $\sum_{k=0}^{n-1} I_k$ 作为积分I的近似值

“分段低次插值”，各段积分，再求和

数值积分 | 复化求积法

梯形公式

$$T=(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2}\qquad R_T=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

复化梯形公式

$$T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \tag{4.2.9}$$

- 余项

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

Simpson公式

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

复化Simpson公式

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

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

Simpson公式余项

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

复化Simpson公式余项

$$I - S_n = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \tag{4.2.11}$$

- $h < (b-a)$，同样的间距下误差更小

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 $x_{k+\frac{1}{4}}$, $x_{k+\frac{1}{2}}$, $x_{k+\frac{3}{4}}$

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

数值积分 | 复化求积法

Cotes公式余项

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

复化Cotes公式余项

$$I - C_n = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \tag{4.2.14}$$

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

- **方法一**：将积分区间 [0,1] 划分为 8 等份，应用复化梯形法求得 $T_8=0.9456909$
- **方法二**：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

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

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

- 可得

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

数值积分 | 误差的渐近性

复化梯形公式

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

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

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

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

数值积分｜误差的渐近性

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

本章目录

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

数值积分 | 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

数值积分 | 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

$$T_n = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})] = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{4.2.9}$$

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 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$
- 子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的积分值为（$h = \frac{b-a}{n}$）

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

- 将每个子区间上的积分值相加，得

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

可增量计算，递推公式为

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

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

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

- 进一步将区间二等分，计算$f\left(\frac{1}{4}\right)=0.9896158$，$f\left(\frac{3}{4}\right)=0.9088516$，继续递推

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

数值积分 | 梯形法的递推化

例4.2 计算积分$I = \int_0^1 \frac{sin\ x}{x} \mathrm{d}x$

- 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

复化梯形法的误差公式

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

- 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

进一步减小复化梯形法的误差

- 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}的一种补偿可能得到更好的结果

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

例4.2中，$T_4 = 0.9445135$ 和 $T_8 = 0.9456909$精度很差（只有两三位有效数字）

- 但 $\bar{T}=\frac{4}{3}T_8-\frac{1}{3}T_4=0.9460833$ 却有 6 位有效数字

数值积分 | Romberg公式

复化梯形公式

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

复化Simpson公式

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

可以得到关系式

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

复化Simpson法的误差公式

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

- 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**：

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

复化Simpson法的误差公式

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

- 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

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

复化Cotes法的误差公式

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

- 重复同样的推导，得到**Romberg公式**

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

- 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

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

- **回顾**：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

- 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			
2	0.9445135			
3	0.9456909			

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

- 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

通过3次二分就得到了准确值 $I = 0.9460831$

数值积分 | Richardson外推加速法

- Romberg公式推广：(4.3.4)(4.3.5)(4.3.6)的加速过程可以再继续下去，因为梯形法余项可展开成下面的形式

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

- 推导见书 4.3.4节

数值积分 | Richardson外推加速法

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

- 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消去 h^2

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

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

$\{T_1(h)\}$ 其实就是Simpson值序列

数值积分 | Richardson外推加速法

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

- 根据式(4.3.10)，可得到

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

- 将上述两式按照以下方式作线性组合消去 h^4

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

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

$\{T_2(h)\}$其实就是Cotes值序列

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

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

- 经过m $(m = 1, 2, \dots)$次加速后，余项便取下列形式

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

- 用 $T_0^{(k)}$ 表示二分 k 次后的梯形值，以 $T_m^{(k)}$ 表示序列 $\{T_0^{(k)}\}$ 的 m 次加速值：

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

数值积分 | Richardson外推加速法

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

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

数值积分 | 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 $T_0^{(k)}$

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

在二分过程中逐步形成 T 数表的具体方法

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

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

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 $k+1\rightarrow k$（意即二分一次），转步 2 继续计算