

《数值分析》之

数值积分

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

<https://faculty.ustc.edu.cn/yxu>

递推梯形法则

- 用 $T_n(f)$ 表示在长度为 $h = (b - a)/n$ 的 n 个子区间上积分 $I = \int_a^b f(x)dx$ 的复化梯形法则. 对于区间 $[a, b] = [0, 1]$,

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

$$T_2(f) = \frac{1}{4}f(0) + \frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{4}f(1)$$

$$T_4(f) = \frac{1}{8}f(0) + \frac{1}{4}\left[f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{1}{2}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right)\right] + \frac{1}{8}f(1)$$

$$\begin{aligned} T_8(f) = & \frac{1}{16}f(0) + \frac{1}{8}\left[f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{1}{2}\right) + f\left(\frac{5}{8}\right) \right. \\ & \left. + f\left(\frac{3}{4}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right)\right] + \frac{1}{16}f(1) \end{aligned}$$

- 为了计算 $T(2n)$ ，可以利用 $T(n)$ 计算中已有的结果，从而只需要计算那些出现在 $T(2n)$ ，没有出现在 $T(n)$ 中的项。

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

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

$$T_8(f) = \frac{1}{2} T_4(f) + \frac{1}{8} \left[f\left(\frac{1}{8}\right) + f\left(\frac{3}{8}\right) + f\left(\frac{5}{8}\right) + f\left(\frac{7}{8}\right) \right]$$

- 令 $h = \frac{b-a}{2n}$ ，则在一般区间 $[a, b]$ 上的一般公式为

$$\begin{aligned} T_{2n}(f) &= \frac{1}{2} T_n(f) + h[f(a+h) + f(a+3h) + \cdots + f(a+(2n-1)h)] \\ &= \frac{1}{2} T_n(f) + h \sum_{i=1}^n f(a+(2i-1)h) \end{aligned}$$

- 函数变化有急有缓，为了照顾变化剧烈部分的误差，我们需要加密格点。
- 对于变化缓慢的部分，加密格点会造成计算的浪费。
- 以此我们介绍一种算法，可以自动在变化剧烈的地方加密格点计算，而变化缓慢的地方，则取稀疏的格点。

- 复化梯形公式

$$I(f) - T_n(f) = -\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi), \quad n \text{ 等分区间}$$

$$I(f) - T_{2n}(f) = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2f''(\eta), \quad 2n \text{ 等分区间}$$

- 近似有： $f''(\eta) \approx f''(\xi)$
- 从而得到

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

- 误差可以用2组复化梯形公式的差来估计

由前面的事后误差估计式

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{3}(T_{2n}(f) - T_n(f)),$$

则

$$I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3}(T_{2n}(f) - T_n(f)) = S_{2n}(f),$$

可以用低阶的公式组合后成为一个高阶的公式，截断误差由 $O(h^2)$ 提高到 $O(h^4)$ 。这种手段称为外推算法。

记 $I(h)$ 为以步长为 h 的数值积分公式，有

$$I(f) - I(h) = ch^m + O(h^{m+1}),$$

$$I(f) - I\left(\frac{h}{2}\right) = c\left(\frac{h}{2}\right)^m + O\left(\left(\frac{h}{2}\right)^{m+1}\right),$$

$$I(f) - I\left(\frac{h}{2}\right) \approx \frac{I\left(\frac{h}{2}\right) - I(h)}{2^m - 1},$$

$$I(f) \approx I\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I\left(\frac{h}{2}\right) - I(h)}{2^m - 1}.$$

基于Euler-Maclaurin公式，可以建立起新的积分外推公式。

- Euler-Maclaurin公式: 对于 $f \in C^{2m}[0, 1]$,

$$\int_0^1 f(t) dt = \frac{1}{2}[f(0) + f(1)] + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k}[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1)] \\ - A_{2m}f^{(2m)}(\xi_0)$$

其中 $\xi_0 \in (0, 1)$, $k!A_k$ 称为Bernoulli常数，由下式定义：

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} A_k x^k$$

- 进行变量代换，Euler-Maclaurin公式变为

$$\begin{aligned}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx &= \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \\ &\quad + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k} h^{2k} [f^{(2k-1)}(x_i) - f^{(2k-1)}(x_{i+1})] \\ &\quad - A_{2m} h^{2m+1} f^{(2m)}(\xi_i)\end{aligned}$$

- 令 $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \dots, 2^n$, $h = (b - a)/2^n$, 进行求和：

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x) dx &= \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{2^n-1} [f(x_i) + f(x_{i+1})] \\ &\quad + \sum_{k=1}^{m-1} A_{2k} h^{2k} [f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)] \\ &\quad - A_{2m} (b - a) h^{2m} f^{(2m)}(\xi)\end{aligned}$$

- 从而有

$$I = T(2^n) + c_2 h^2 + c_4 h^4 + \cdots + c_{2m-2} h^{2m-2} + c_{2m} h^{2m} f^{(2m)}(\xi)$$

这样我们可以应用Richardson外推技术，得到公式：

Euler-Maclaurin定理

若 $I(f) = I^{(m)}(h) + O(h^{2m})$ 为 $2m$ 阶公式，则

$$I^{(m+1)}\left(\frac{h}{2}\right) = I^{(m)}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I^{(m)}\left(\frac{h}{2}\right) - I^{(m)}(h)}{2^{2m} - 1} + O(h^{2m+2})$$

Romberg 积分就是不断地用如上定理组合低阶公式为高阶公式，进而计算积分

$$R(n, 0) = T_{2^n}(f)$$

$$R(n, m) = R(n, m-1) + \frac{1}{4^m - 1} [R(n, m-1) - R(n-1, m-1)]$$

- 对一个适当的 M , 按如下公式计算 $R(i, j)$, $i = 0, 1, \dots, M$, $j = 0, 1, \dots, M$:

$$R(0, 0) = \frac{1}{2}(b - a)[f(a) + f(b)]$$

$$R(n, 0) = \frac{1}{2}R(n-1, 0) + h_n \sum_{i=1}^{2^{n-1}} f(a + (2i-1)h_n)$$

$$R(n, m) = R(n, m-1) + \frac{1}{4^m - 1}[R(n, m-1) - R(n-1, m-1)]$$

其中 $h_0 = b - a$, $h_n = h_{n-1}/2$

- 在精致的算法中, 应当选取适度的 M , 并且加上一个自动终止程序, 当达到指定的误差标准时停止计算

Romberg阵列

$$\begin{array}{cccccc} R(0,0) & & & & & \\ R(1,0) & R(1,1) & & & & \\ R(2,0) & R(2,1) & R(2,2) & & & \\ R(3,0) & R(3,1) & R(3,2) & R(3,3) & & \\ R(4,0) & R(4,1) & R(4,2) & R(4,3) & R(4,4) & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ R(M,0) & R(M,1) & R(M,2) & R(M,3) & R(M,4) & \cdots R(M,M) \end{array}$$

收敛性定理

- 在Romberg算法中，为了应用Euler-Maclaurin公式，我们需要 $f \in C^{2m}[a, b]$ ，从而 $R(n, m)$ 收敛于 f 的积分，并且误差为 $\mathcal{O}(h^{2m})$
- 如果 f 只是连续，我们有下面的定理

Theorem

若 $f \in C[a, b]$ ，则Romberg阵列中每一列都收敛于 f 的积分，即对每个 m ，

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R(n, m) = \int_a^b f(x) dx := I$$

采用归纳法。对于第一列，它是积分 I 的梯形估计。而具有 k 个子区间的梯形法则可以写成

$$\frac{1}{2}h \sum_{i=0}^{k-1} f(a+ih) + \frac{1}{2}h \sum_{i=1}^k f(a+ih)$$

这是两个Riemann和的平均。由于 $h = (b-a)/k$ ，所以当 $k \rightarrow \infty$ 时子区间的长度趋向于零。从而根据Riemann积分理论，两个Riemann和都趋向于 I ，从而它们的平均值也趋向于 I 。这就证明了

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R(n, 0) = I$$

假设对于 $m-1$ 结论成立，则由于

$$R(n, m) = R(n, m-1) + \frac{1}{4^m - 1} [R(n, m-1) - R(n-1, m-1)]$$

所以

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R(n, m) = \frac{4^m}{4^m - 1} I - \frac{1}{4^m - 1} I = I$$