Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

等距节点高次多项式插值型数值求积公式

设 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上定义，令 $x_k = a + kh,\ k = 0, 1, \cdots, n,$ $h = (b-a)/n$, 为区间 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个等距节点。

记 $x = a + th$, 做 Lagrange 插值多项式 $P_n(x) \in \mathbb{P}_n$

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \Bigg[\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \Bigg] f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} \Bigg[\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{t - j}{k - j} \Bigg] f(x_k)$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \Bigg[\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t - j) \Bigg] f(x_k).$$

注意 $dx = (b-a)dt/n$, 定义 Newton-Cotes 系数

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} (t - j)\, dt, \qquad k = 0, 1, \cdots, n.$$

Newton-Cotes 求积公式

记 $A_k = (b-a)C_k^{(n)}$, 于是得到 Newton-Cotes 求积公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k).$$

取 $f(x) \equiv 1$, 则 $P_n(x) \equiv 1$, 此时上式截断误差为零。因此有

$$\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1, \quad \forall n.$$

当 $n \leq 7$ 时，所有的 Newton-Cotes 系数都是正的。但当 $n = 8$ 或 $n > 9$ 时，系数有正有负，此时必有 $\sum_{k=0}^{n} |C_k^{(n)}| > 1$. 事实上 $\sum_{k=0}^{n} |C_k^{(n)}|$ 是发散序列, 相应的 Newton-Cotes 求积公式是数值不稳定的。应用中一般不采用 $n \geq 8$ 的 Newton-Cotes 公式.

插值型求积公式的定义

一般的数值积分公式可以表示为

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \triangleq I_n(f),$$

其中 x_k, A_k 分别称为求积节点与求积系数（权数）. 定义

$$E_n(f) \triangleq I(f) - I_n(f),$$

称其为数值积分公式的（截断）误差。

定义： 如果 $E_n(f) = 0, \forall f \in \mathbb{P}_n$, 则称数值积分公式 $I_n(f)$ 为插值型的。

插值型求积公式的特征

定理： 以下两个命题是等价的：

1. $I_n(f)$ 为插值型的数值积分公式.
2. $I_n(f)$ 可由对 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的 n 次插值多项式的积分得到.

证明： (1) $\Rightarrow$ (2): 对任给的 $f(x)$, 在 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上做 $f(x)$ 的 Lagrange 插值多项式

$$L_n(f)(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k) \in \mathbb{P}_n.$$

由 $I_n(f)$ 为插值型的积分公式有 $E_n(L_n(f)) = 0$, 即

$$\begin{aligned} I(L_n(f)) - I_n(L_n(f)) &= \sum_{k=0}^{n} \left(\int_a^b l_k(x)\, dx \right) f(x_k) - \sum_{k=0}^{n} A_k \left(L_n(f)(x_k) \right) \\ &= \sum_{k=0}^{n} \left(\int_a^b l_k(x)\, dx - A_k \right) f(x_k) = 0. \end{aligned}$$

插值型求积公式的特征(续)

由 f 的任意性，即得 $A_k = \int_a^b l_k(x)\,dx$, $k = 0, 1, \cdots, n$.

(2) $\Rightarrow$ (1): 由于 $L_n(f) = f, \forall f \in \mathbb{P}_n$, 因此, 若 $A_k = \int_a^b l_k(x)\,dx$, $k = 0, 1, \cdots, n$, 则有

$$I(f) = I(L_n(f)) = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = I_n(f), \quad \forall f \in \mathbb{P}_n,$$

即 $E_n(f) = 0$. ■

具有 $n+k$ 阶代数精度的求积公式的特征

定理： 对 $k \geq 0$, 数值积分公式 $I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 的代数精度为 $d = n+k$ 阶的充分必要条件是：

1. $I_n(f)$ 为插值型的数值积分公式;
2. $\omega_n(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$ 满足 $\int_a^b \omega_n(x)P(x)dx = 0,\ \forall P(x) \in \mathbb{P}_{k-1}$;
3. $\exists Q(x) \in \mathbb{P}_k$, $s.t.$ $\int_a^b \omega_n(x)Q(x)dx \neq 0$.

推论： 数值积分公式 $I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ 的代数精度最多为 $2n+1$ 阶, 即 $0 \leq k \leq n+1$, 因为总有 $\int_a^b \omega^2(x)dx > 0$.

$n+k$ 阶代数精度求积公式充要条件的证明

证明： 先证必要性. 由 $I_n(f)$ 的代数精度为 $d=n+k\geq n$ 知 $E_n(f)=0,\ \forall f\in\mathbb{P}_n$, 由定义知 (1) 成立. 对 $\forall P(x)\in\mathbb{P}_{k-1}$, $\omega_n(x)P(x)\in\mathbb{P}_{n+k}$, 且 $\omega_n(x_i)P(x_i)=0,\ i=0,1,\cdots,n$, 因此

$$\int_a^b \omega_n(x)P(x)dx = I(\omega_n(x)P(x)) = \sum_{i=0}^{n} A_i\omega_n(x_i)P(x_i) = 0.$$

即 (2) 成立. 又由定义知 $I(x^{n+k+1})\neq I_n(x^{n+k+1})$. 将 x^{n+k+1} 表示为 $x^{n+k+1}=\omega_n(x)Q(x)+R(x)$, 其中 $Q\in\mathbb{P}_k$, $R\in\mathbb{P}_n$, 则由 $x_i^{n+k+1}=R(x_i),\ 0\leq i\leq n$, 知 $I(R)=I_n(R)=I_n(x^{n+k+1})$, 因此

$$\int_a^b \omega_n(x)Q(x)dx = I(x^{n+k+1})-I(R(x)) = I(x^{n+k+1})-I_n(x^{n+k+1})\neq 0.$$

即 (3) 成立.

$n+k$ 阶代数精度求积公式充要条件的证明(续)

再证充分性. $\forall P(x) \in \mathbb{P}_{n+k}$, $P(x) = \omega_n(x)Q(x) + R(x)$, 其中 $Q(x) \in \mathbb{P}_{k-1}$, $R(x) \in \mathbb{P}_n$, 于是由 (2) 知 $I(P(x)) = I(R(x))$, 又由 (1) 知 $I(R(x)) = I_n(R(x))$, 而 $P(x_i) = R(x_i)$, $0 \le i \le n$, 因此

$$I(P(x)) = I_n(R(x)) = \sum_{i=0}^{n} A_i R(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i P(x_i) = I_n(P(x)).$$

即数值积分公式 $I_n(f)$ 的代数精度不低于 $n+k$ 阶.

另一方面，取 $\hat{P}(x) = \omega_n(x)\hat{Q}(x) \in \mathbb{P}_{n+k+1} \setminus \mathbb{P}_{n+k}$, 其中 $\hat{Q}(x)$ 首项系数为 1, $\hat{Q}(x) \in \mathbb{P}_k \setminus \mathbb{P}_{k-1}$ 满足条件 (3), 于是有

$$I(\hat{P}(x)) \ne 0 = \sum_{i=0}^{n} A_i \omega_n(x_i)\hat{Q}(x_i) = I_n(\hat{P}(x)).$$

因此

$$I(x^{n+k+1}) = I(\hat{P}(x)) + I(x^{n+1} - \hat{P}(x)) \ne I_n(\hat{P}(x)) + I_n(x^{n+1} - \hat{P}(x)) = I_n(x^{n+k+1}).$$

这就证明了数值积分公式 $I_n(f)$ 的代数精度是 $n+k$ 阶的. ■

Newton-Cotes 求积公式的代数精度

定理： *Newton-Cotes* 求积公式的代数精度至少是 n 阶的，而当 n 是偶数时，则至少是 $n+1$ 阶的.

证明： 由于 Newton-Cotes 公式是插值型的，因此其代数精度至少是 n 阶的. 当 $n=2k$ 是偶数时，由定理 3.3.2 知，只需证明

$$\int_a^b \omega_{2k}(x)dx = 0.$$

记 $h=(b-a)/(2k)$. 令 $x=a+th=a+(u+k)h$, 则有

$$\int_a^b \omega_{2k}(x)dx = h^{2k+2}\int_0^n \prod_{i=0}^{2k}(t-i)dt = h^{2k+2}\int_{-k}^{k} u\prod_{i=1}^{k}(u+i)(u-i)du = 0,$$

最后一个等式是由于被积函数是奇函数。 ■

利用分段插值求积提高数值积分的精度

由以上讨论知，代数精度 $\geq n$ 的数值积分公式必然是插值型的，且其代数精度最多是$2n+1$. 另一方面，当 $n=8$ 或 $n>9$ 时，插值型数值积分公式数值不稳定。

区间 $[a,b]$ 上数值积分的精度一般依赖于区间的长度。$b-a$ 越小精度越高，但当 $b-a$ 比较大时，精度则难以保证。

为了提高一般区间 $[a,b]$ 上数值积分的精度，一个自然的想法就是利用函数的分段多项式插值构造数值积分公式。这正是复合求积公式的思想。

复合中点公式、复合梯形公式和复合 Simpson 公式

在 $[a,b]$ 上引进等距节点 $x_i = a + ih,\ i = 0, 1, \cdots, n$, $h = (b-a)/n$, 并记 $x_{i+\frac{1}{2}} = a + (i+\frac{1}{2})h$, 在每个子区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上分别使用中点公式、梯形公式和 Simpson 公式即得

$$\text{复合中点公式:}\quad \int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) \triangleq M(h);$$

$$\text{复合梯形公式:}\quad \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i) + f(x_{i+1})] \triangleq T(h);$$

$$\text{复合 Simpson 公式:}\quad \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+4f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1})] \triangleq S(h).$$

注： M for Middle-point, T for Trapezoidal and S for Simpson.

复合求积公式的截断误差

当被积函数充分光滑时，由插值型积分公式的截断误差容易得到相应复合求积公式的截断误差。例如，由(3.3.3), (3.3.5), (3.3.7)易得：

$$\left|\int_a^b f(x)dx - M(h)\right| \le \frac{h^2}{24} M_2(b-a),$$

$$\left|\int_a^b f(x)dx - T(h)\right| \le \frac{h^2}{12} M_2(b-a),$$

$$\left|\int_a^b f(x)dx - S(h)\right| \le \frac{h^4}{2880} M_4(b-a),$$

其中 $M_2 = \max_{x\in(a,b)} |f''(x)|$, $M_4 = \max_{x\in(a,b)} |f^{(4)}(x)|$.

复合求积公式的截断误差

事实上，当被积函数充分光滑时，由(3.3.3), (3.3.5), (3.3.7) 可以得到：

$$\int_a^b f(x)dx - M(h) = \frac{h^2}{24}\int_a^b f''(x)dx + O(h^3),$$

$$\int_a^b f(x)dx - T(h) = -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx + O(h^3),$$

$$\int_a^b f(x)dx - S(h) = -\frac{h^4}{2880}\int_a^b f^{(4)}(x)dx + O(h^5).$$

复合求积公式的数值稳定性

对 $0 \le k \le 7$ 的插值型求积公式，所有的积分权数 $A_i > 0$, $i = 0, 1, \cdots, n$. 设函数值计算的舍入误差限为 ε, 则有

$$\left|\sum_{l=1}^{n}\sum_{i=0}^{k} A_k[f(x_{l,i}) - \hat{f}(x_{l,i})]\right| \le \sum_{l=1}^{n}\sum_{i=0}^{k} h_l C_k \varepsilon = (b-a)\,\varepsilon.$$

其中 $h_l = x_l - x_{l-1}$, $x_{l,i} = x_{l-1} + ih_l$, $0 \le l \le n$, $0 \le i \le k$.

因此，基于 $0 \le k \le 7$ 的插值型求积公式的复合积分公式都是数值稳定的。特别的，复合中点公式、复合梯形公式和复合 Simpson 公式都是数值稳定的。

在实际应用中，当允许误差远大于 $(b-a)\,\varepsilon_{mach}$ 时，可根据截断误差选取适当的分点 $\{x_l\}_{l=0}^{n}$ 和 $0 \le k \le 7$.

实际计算时如何选取 n —基于先验误差估计的做法

若允许误差为10^{-5}, 则由截断误差表达式，则复合中点公式、复合梯形公式和复合 Simpson 公式的 h 应分别满足

$$h_M \le \sqrt{\frac{2.4}{M_2(b-a)}} \times 10^{-2} \quad \text{或} \quad n_M \ge \sqrt{\frac{M_2(b-a)^3}{2.4}} \times 10^2,$$

$$h_T \le \sqrt{\frac{1.2}{M_2(b-a)}} \times 10^{-2} \quad \text{或} \quad n_T \ge \sqrt{\frac{M_2(b-a)^3}{1.2}} \times 10^2,$$

$$h_S \le \sqrt[4]{\frac{288}{M_4(b-a)}} \times 10^{-1} \quad \text{或} \quad n_S \ge \sqrt[4]{\frac{M_4(b-a)^5}{288}} \times 10.$$

注： 为达到相同的误差, 复合梯形公式要比复合中点公式多用 40% 的节点.

实际计算时如何选取 n —基于后验误差估计的做法

以复合梯形公式为例。由

$$\int_a^b f(x)dx - T(h) = -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx + O(h^3),$$

$$\int_a^b f(x)dx - T(h/2) = -\frac{(h/2)^2}{12}\int_a^b f''(x)dx + O(h^3),$$

得

$$\frac{T(h/2) - T(h)}{3} = -\frac{(h/2)^2}{12}\int_a^b f''(x)dx + O(h^3),$$

即

$$\int_a^b f(x)dx - T(h/2) = \frac{T(h/2) - T(h)}{3} + O(h^3).$$

实际计算时如何选取 n —基于后验误差估计的做法

因此，当 h 充分小时（如何判断？），$\frac{T(h/2)-T(h)}{3}$ 是误差的主部，可以用其来估计 $T(h/2)$ 的误差。具体计算过程如下：

1. 设给定精度要求为 ε, 取初始步长为 $h=b-a$;
2. 计算 $T_1 := T(h)$;
3. 计算 $T_2 := T(h/2)$;
4. 如果 $|T_2 - T_1| < \varepsilon$, 取 T_2 为积分值; 否则，令 $h := h/2$, $T_1 := T_2$, 返回 ③.

既然 $\frac{T(h/2)-T(h)}{3}$ 是误差的主部, 那么将它加到 $T(h/2)$ 应该能大幅度提高计算精度。事实上,

$$T(h/2) + \frac{T(h/2) - T(h)}{3} = S(h) = I(f) + O(h^5).$$

这正是 Richardson 外推加速的出发点。

Richardson 外推加速法

设用一个依赖于参变量 h 的算法 $Q_1(h)$ 计算某量 Q 时有

$$Q - Q_1(h) = c_1 h^{p_1} + c_2 h^{p_2} + \cdots + c_k h^{p_k} + \cdots ,$$

其中 c_i, p_i 为非零常数，且 $0 < p_1 < p_2 < \cdots$. 于是有

$$Q - Q_1(h/2) = 2^{-p_1} c_1 h^{p_1} + 2^{-p_2} c_2 h^{p_2} + \cdots + 2^{-p_k} c_k h^{p_k} + \cdots .$$

第二式减去 2^{-p_1} 倍的第一式，然后除以 $(1 - 2^{-p_1})$ 得

$$Q - \frac{Q_1(h/2) - 2^{-p_1} Q_1(h)}{1 - 2^{-p_1}} = c_2^1 h^{p_2} + c_3^1 h^{p_3} + \cdots + c_k^1 h^{p_k} + \cdots ,$$

其中 $c_k^1 = \dfrac{c_k(2^{-p_k} - 2^{-p_1})}{1 - 2^{-p_1}}$, $k = 2, 3, \cdots$.

Richardson 外推加速法

令

$$Q_2(h) = \frac{Q_1(h/2) - 2^{-p_1} Q_1(h)}{1 - 2^{-p_1}},$$

则 $Q_2(h)$ 逼近 Q 的截断误差的量级就提高至 $O(h^{p_2})$, 即

$$Q - Q_2(h) = c_2^1 h^{p_2} + c_3^1 h^{p_3} + \cdots + c_k^1 h^{p_k} + \cdots .$$

同理，令

$$Q_3(h) = \frac{Q_2(h/2) - 2^{-p_2} Q_2(h)}{1 - 2^{-p_2}},$$

则 $Q_3(h)$ 逼近 Q 的截断误差的量级就提高至 $O(h^{p_3})$, 即

$$Q - Q_3(h) = c_3^2 h^{p_3} + c_4^2 h^{p_4} + \cdots + c_k^2 h^{p_k} + \cdots .$$

其中 $c_k^2 = \dfrac{c_k^1(2^{-p_k} - 2^{-p_2})}{1 - 2^{-p_2}}$, $k = 3, 4, \cdots$.

Richardson 外推加速法

一般地，令

$$Q_{i+1}(h) = \frac{Q_i(h/2) - 2^{-p_i} Q_i(h)}{1 - 2^{-p_i}},$$

则 $Q_{i+1}(h)$ 逼近 Q 的截断误差的量级就提高至 $O(h^{p_{i+1}})$, 即

$$Q - Q_{i+1}(h) = c_{i+1}^{i} h^{p_{i+1}} + c_{i+2}^{i} h^{p_{i+2}} + \cdots + c_k^{i} h^{p_k} + \cdots,$$

其中 $c_k^i = \dfrac{c_k^{i-1}(2^{-p_k} - 2^{-p_i})}{1 - 2^{-p_i}}, \ k = i+1, i+2, \cdots.$

这种从低阶精度格式的截断误差渐近展开式出发，通过简单线性组合得到高阶精度格式的方法称为 Richardson 外推加速收敛技术。该技术在数值计算中有十分广泛的应用。下面要介绍的 Romberg 求积方法就是其中的一项。

复合梯形求积公式截断误差的渐近展开式

定理： *(Euler-Maclaurin 公式)* 设 $f \in \mathbb{C}^m[a,b]$, $m \geq 3$, 则梯形求积公式 $T_h(f)$ 的截断误差 $\int_a^b f(x)dx - T_h(f)$ 可表示为

$$-\sum_{j=1}^{[\frac{m}{2}]} \frac{b_{2j}h^{2j}}{(2j)!}[f^{(2j-1)}(b)-f^{(2j-1)}(a)]+(-1)^m h^m \int_a^b \tilde{B}_m(\frac{x-a}{h})f^{(m)}(x)dx,$$

其中 $[\frac{m}{2}]$ 指 $\leq \frac{m}{2}$ 的最大整数，$b_{2j} = (2j)!B_{2j}(0)$ 为 *Bernoulli* 数，$\tilde{B}_m(x)$ 是 *Bernoulli* 多项式的周期扩张。

注： Bernoulli 数，Bernoulli 多项式及其周期扩张的定义，以及 Euler-Maclaurin 公式的证明将在下节课介绍。

Romberg 求积方法

设 $f \in \mathbb{C}^m[a,b]$, 对梯形求积公式 $T_h(f)$ 使用 Richardson 外推加速收敛技术，若 $f'(a) \neq f'(b)$, $f'''(a) \neq f'''(b)$, 令

$$T_2(h) \triangleq \frac{T(h/2) - 2^{-2}T(h)}{1 - 2^{-2}} = \frac{T(h/2) - 4^{-1}T(h)}{1 - 4^{-1}}, \quad m > 2,$$

$$T_3(h) \triangleq \frac{T_2(h/2) - 2^{-2\times 2}T_2(h)}{1 - 2^{-2\times 2}} = \frac{T_2(h/2) - 4^{-2}T_2(h)}{1 - 4^{-2}}, \quad m > 4,$$

一般地，若 $f^{(2k-1)}(a) \neq f^{(2k-1)}(b)$, 令

$$T_{k+1}(h) \triangleq \frac{T_k(h/2) - 2^{-2\times k}T_k(h)}{1 - 2^{-2\times k}} = \frac{T_k(h/2) - 4^{-k}T_k(h)}{1 - 4^{-k}}, \quad m > 2k.$$

这种构造高精度求积公式序列的方法称为 Romberg 求积方法。

Romberg 求积方法截断误差的精度

设 $f \in \mathbb{C}^m[a,b]$, 则由 Euler-Maclaurin 公式和 Richardson 外推加速收敛技术知 Romberg 求积方法截断误差的精度为

$$\int_a^b f(x)dx - T_{k+1}(h) = O(h^{2k+1}), \quad m = 2k+1,$$

$$\int_a^b f(x)dx - T_{k+1}(h) = O(h^{2k+2}), \quad m \geq 2k+2.$$

注： 值得指出的是，由 Euler-Maclaurin 公式，若 $f \in \mathbb{C}^m[a,b]$, $m \geq 3$, 是以 $b-a$ 为周期的周期函数，则梯形公式的截断误差的精度就是 $O(h^m)$ （称具有这种性质的格式具有谱精度）. 此时，无需也无法使用 Romberg 求积方法.

自适应求积方法

- 以上的讨论是在等距节点的情况下展开的。事实上，复合求积公式不必建立在等距节点上;
- 截断误差也不必整体考虑，事实上分段考虑局部截断误差可提供误差的分布情况;
- 特别地，根据局部后验误差估计得到局部截断误差的主部，在误差密度（即单位长度区间上的误差值）较大的子区间上添加新节点以期减少局部误差密度.
- 直至所有地方的局部误差密度都不超过允许值。

以上是自适应求积方法的基本框架。具体实现时，如何选取局部的求积公式，并做相应的局部后验误差估计和外推加速收敛技术等，对自适应求积方法的效率和精度至关重要。

习题三：7，8，9；　上机习题三：4

Thank You!