第四章　数值积分与数值微分

复合求积公式与 Romberg 算法

朱升峰

华东师范大学 数学科学学院

2021 年 4 月

目录

- 复合梯形公式
- 复合 Simpson 求积公式
- Romberg 求积公式

复合梯形公式

把区间 $[a,b]$ 等分，分点 $x_k = a + kh(k = 0, 1, \cdots, n-1)$，$h = \frac{b-a}{n}$，在每个子区间上采用梯形公式则得

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{b=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k) + f(x_{k+1})] + R_n(f).$$

记

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

称为复合梯形公式

定理 1

设 $f(x) \in C^2[a,b]$，则复合梯形公式余项

$$R_n(f) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta),\ \ \eta \in (a,b).$$

证明： 由梯形公式余项得

$$R_n(f) = I - T_n = \sum_{t=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right], \quad \eta_k \in (x_k, x_{k+1})$$

由于 $f(x) \in C^2[a, b]$, 且

$$\min_{0\leqslant k\leqslant n-1} f''(\eta_k) \leqslant \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \leqslant \max_{0\leqslant k\leqslant n-1} f''(\eta_k)$$

由介值定理，$\exists \eta \in (a, b)$ 使

$$f''(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)$$

复合梯形公式余项

$$R_n(f) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta) \quad \square$$

复合梯形公式是收敛的：

$$\lim_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x.$$

复合 Simpson 公式

把区间 $[a,b]$ 等分，分点 $x_k = a + kh(k = 0, 1, \cdots, n-1)$，$h = \frac{b-a}{n}$，在每个子区间上采用 Simpson 公式得

$$
\begin{aligned}
I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x &= \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x \\
&= \frac{h}{6} \sum_{k=0}^{m-1} \left[f(x_k) + 4f\left(x_{k+1/2}\right) + f(x_{k+}) \right] + R_n(f),
\end{aligned}
$$

称为复合 Simpson 公式。记

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

复合 Simpson 公式的余项

由每段区间上 Simpson 公式的余项得

$$R_n(f) = I - S_n = -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\eta_k), \quad \eta_k \in (x_k, x_{k+1}).$$

从而与复合梯形公式类似，可证

$$R_n(f) = I - S_n = \frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a, b)$$

复合 Simpson 公式的收敛性

$$\lim_{n\to\infty} S_n = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

例: 对于函数 $f(x)=\frac{\sin x}{x}$, 给出 $n=8$ 时的复合梯形公式和复合 Simpson 公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x$$

并估计误差。

解:

x_i	0	1/8	2/8	3/8	4/8	5/8	6/8	7/8	1.0
$f(x_i)$	1	0.997	0.990	0.977	0.954	0.936	0.909	0.877	0.841

复合梯形公式得

$$T_8=0.9456909$$

复合 Simpson 公式得

$$S_4=0.9460832$$

估计余项误差

$$f(x) = \frac{\sin x}{x} = \int_0^1 \cos(xt)\mathrm{d}t$$

$$f^{(k)}(x) = \int_0^1 \frac{d^k}{dx^k}\cos(xt)\,dt = \int_0^1 t^k \cos\left(xt + \frac{k\pi}{2}\right)\,dt$$

$$\max_{0\le x\le 1}\left|f^{(k)}(x)\right| \le \max_{0\le x\le 1}\int_0^1 \left|t^k \cos\left(xt + \frac{k\pi}{2}\right)\right|\,dt \le \int_0^1 t^k\,dt = \frac{1}{k+1}$$

复合梯形公式的误差

$$|R_8(f)| = |I - T_8| \leqslant \frac{h^2}{12}\max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f''(x)| \leqslant \frac{1}{12}\left(\frac{1}{8}\right)^2\frac{1}{3} = 0.434\times 10^{-3}$$

复合 Simpson 公式的误差

$$|R_4(f)| = |I - S_4| \leqslant \frac{1}{2880}\left(\frac{1}{4}\right)^4\frac{1}{5} = 0.271\times 10^{-6}$$

例：计算积分 $\int_0^1 \mathrm{e}^x \mathrm{d}x$，若用复合梯形公式，区间 $[0,1]$ 应分多少等份才能使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$? 若改用 Simpson 公式，要达到同样精度，区间应分多少等份?

解：$f(x)=\mathrm{e}^x$, $f'(x)=\mathrm{e}^x$, $f^{(4)}(x)=\mathrm{e}^x$, $b-a=1$，对复合梯形公式的余项有

$$|R_n(f)|=\left|-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)\right|\leqslant \frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 \mathrm{e}\leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-5}.$$

由此有 $n^2\geqslant \frac{\mathrm{e}}{6}\times 10^5, n\geqslant 212.85$, 可取 $n=213$, 即将区间 $[0,1]$ 分为 213 等份，则可使误差不超过 $\frac{1}{2}\times 10^{-5}$。

若改用复合 Simpson 公式，有

$$|R_n(f)|=\frac{b-a}{2880}h^4\left|f^{(4)}(\xi)\right|\leqslant \frac{1}{2880}\left(\frac{1}{n}\right)^4 \mathrm{e}\leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-5},$$

由此得

$$n\geqslant 3.707.$$

可取 $n=4$，此时实际上区间应分为 8 等份。

- 梯形公式的递推化
- Richardson 外推
- Romberg 算法

逐次分半法可提高求积精度

设将区间 $[a,b]$ 分为 n 等份，如果将区间再二分一次，分点增至 $2n+1$ 个。每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 经二分增加了一个分点 $x_{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_k + x_{k+1})$，用复合梯形公式得该子区间上的积分值为

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

$h = \frac{b-a}{n}$ 为二分前的步长，每个子区间上的积分值相加得

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

梯形法的递推化

递推公式

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

例：用梯形法的递推公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\, \mathrm{d}x$$

解：记 $T^{(k)} \equiv T_{2^k}\ (k=0,1,2,\cdots,)$ $T^{(0)} = T_1 = \frac{1}{2}(f(0)+f(1)) = 0.920735492$。不断对分，计算结果如表

k	$T^{(k)}$	k	$T^{(k)}$
1	0.939793285	6	0.946076943
2	0.944513522	7	0.946081539
3	0.945690864	8	0.946082687
4	0.945985030	9	0.946082975
5	0.946058561	10	0.946083046

外推技巧

- 复合梯形法递推公式：算法简单，编程方便
- 但收敛速度较慢 (上例要达到 7 为有效数字精度，需要二分区间 10 次，即要分点 1025 个，计算量大)
- 梯形法的加速-Romberg（龙贝格）算法

记 $I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$，$T(h) = T_n$，$T_{2n} = T(\frac{h}{2})$，有

$$T(h) = I + \frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \quad \lim_{i\to 0} T(h) = T(0) = 1$$

定理 2

设 $f(x) \in C^\infty[a, b]$, 记 $T_n = T(h)$, 则有

$$T(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_l h^{2l} + \cdots ,$$

其中系数 α_l 与 h 无关。

证明：略，可参考蒋尔雄等著《数值逼近》。

Richardson 外推算法

$$T(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_i h^{2i} + \cdots = I + O\left(h^2\right)$$

$$T\left(\frac{h}{2}\right) = I + \alpha_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \alpha_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \cdots + \alpha_i \left(\frac{h}{2}\right)^{2i} + \cdots$$

对以上两式相减得

$$4T(h/2) - T(h) = 3I + (-3/4)\alpha_2 h^4 + (-15/16)\alpha_3 h^6 + \cdots$$

$$\Longrightarrow S(h) \equiv \frac{1}{3}\left(4T\left(\frac{h}{2}\right) - T(h)\right) = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots = I + O\left(h^4\right)$$

$$\Longrightarrow C(h) \equiv \frac{1}{15}\left(16S\left(\frac{h}{2}\right) - S(h)\right) = I + \gamma_1 h^6 + \gamma_2 h^8 + \cdots = I + O\left(h^6\right)$$

$$\Longrightarrow R(h) \equiv \frac{1}{63}\left(64C\left(\frac{h}{2}\right) - C(h)\right) = I + O\left(h^8\right)$$

$$\vdots$$

Romberg 算法

记 $T_0(h)=T(h)$，$T_1(h)=S(h)$，$T_2(h)=C(h)$，$T_3(h)=R(h)$，以上过程统一写成

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

经 $m(m=1,2,\cdots,)$ 次加速后

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

此为Richardson 外推加速方法

令 $T_0^{(k)}$ 表示二分次后求得的梯形公式值，$T_m^{(k)}$ 表示序列 $\{T_0^{(k)}\}$ 的 m 次加速值

$$T_m^{(k)}=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)}-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)},\quad k=1,2,\cdots$$

此为Romberg 求积算法

Step 1: 取 $k=0, h=b-a, T_0^{(0)}=\frac{h}{2}(f(a)+f(b))$.
令 $k \leftarrow 1$ (k 为区间 $[a,b]$ 的二分次数)

Step 2: $T_0\left(\frac{b-a}{2^k}\right)$，按递推公式计算 $T_0^{(k)}$

Step 3: 求加速值，按公式逐个算出 T 表的第 k 行其余元素 $T_j^{(k-j)} (j=1,2,\cdots,k)$

Step 4: 若 $|T_k^{(0)}-T_{k-1}^{(0)}|<\epsilon$，则终止计算，取 $T_k^{(0)} \approx I$；否则令 $k \leftarrow k+1$

T 表

k	h	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	$\cdots$
0	$b-a$	$T_0^{(0)}$					
1	$\frac{b-a}{2}$	$T_0^{(1)}$	$T_1^{(0)}$				
2	$\frac{b-a}{4}$	$T_0^{(2)}$	$T_1^{(1)}$	$T_2^{(0)}$			
3	$\frac{b-a}{8}$	$T_0^{(3)}$	$T_1^{(2)}$	$T_2^{(1)}$	$T_3^{(0)}$		
4	$\frac{b-a}{16}$	$T_0^{(4)}$	$T_1^{(3)}$	$T_2^{(2)}$	$T_3^{(1)}$	$T_4^{(0)}$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$

例

例：用 Romberg 算法计算定积分

$$\int_0^1 x^{3/2}\, \mathrm{d}x$$

解：exp**.m

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	$T_5^{(k)}$
0	0.5000000					
1	0.4267767	0.4023689				
2	0.4070181	0.4004319	0.4003027			
3	0.4018124	0.4000772	0.4000536	0.4000496		
4	0.4004634	0.4000137	0.4000094	0.4000087	0.4000086	
5	0.4001176	0.4000024	0.4000016	0.4000015	0.4000015	0.4000015

算到 $k=5$ 的精度已相当高 (准确值为 0.4).