数值积分与数值微分

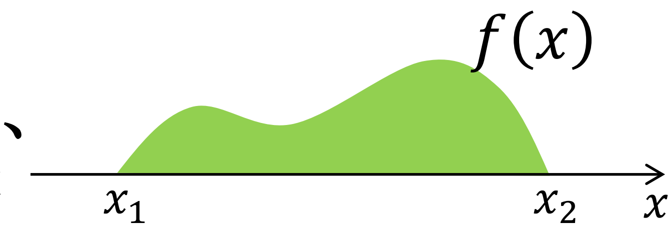
- 内容
  - 数值积分的基本概念
  - 牛顿-柯特斯公式
  - 复合求积方法
  - 理查森外推法
  - 自适应积分算法
  - 高斯求积公式
  - 数值微分

数值积分的基本概念

数值积分

重心横坐标$\bar{x} = \dfrac{\int_{x_1}^{x_2} xf(x)dx}{\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx}$

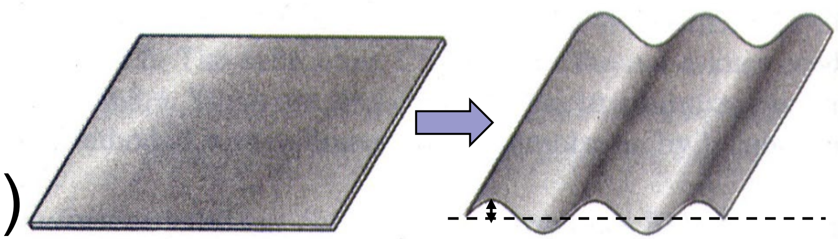
- 目的与用途
  - 经典问题: 计算几何形体的面积、体积，力学中物体的重心位置等



例: 铝制波纹瓦的长度问题

由一块平整的铝板压制而成.

若每个波纹的高度(自中心线)为1寸, 周期为 2π寸, 做4尺长波纹瓦需多长铝板?



解: $f(x) = \sin x$, 求x=0到x=40寸之间的曲线弧长L

$$L = \int_0^{40} \sqrt{1 + (f'(x))^2}\mathrm{d}x = \int_0^{40} \sqrt{1 + (\cos x)^2}\mathrm{d}x$$

第二类椭圆积分, 无法解析求出！

数值积分基本思想

- 计算$I(f) \triangleq \int_a^b f(x)dx$

  思路1: Newton-Leibniz公式$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$,
  其中$F(x)$为$f(x)$的原函数

  - 一些函数没有解析的原函数, 如$e^{x^2}, \frac{\sin x}{x}, \sin x^2$

  或者原函数的计算量很大

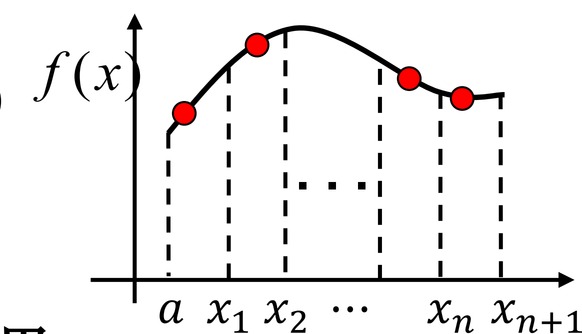
  思路2: 积分的定义 $I(f) = \lim_{n\to\infty, h\to 0} \sum_{i=0}^{n} (x_{i+1} - x_i) f(\xi_i)$

  Monte Carlo 计算量大

  - 取充分大的n, 计算函数值的加权和
  - 近似计算积分的公式(机械求积公式)

  积分系数 积分节点

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



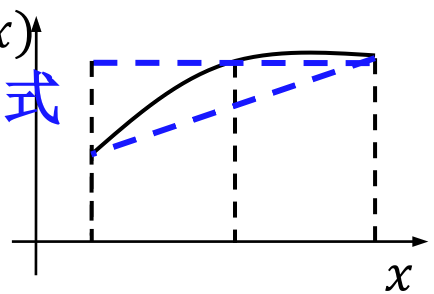
希望用较少的计算量得到较准确的结果

插值型求积公式

- 如何得到具体的求积公式? $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$
  - 用多项式函数$p(x)$来近似$f(x)$
    $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx$, 后者易于计算
  - 插值型求积公式: 区间[a, b]内插值节点为$x_0, x_1, \dots, x_n$,
    $p(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x) \Longrightarrow \boxed{I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\int_a^b l_k(x)dx}$
    其中$l_k(x)$为拉格朗日插值基函数, 积分系数$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$
  - n=0, n=1对应的情况

$I_0(f)=\int_a^b f(x_0)dx=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ 中矩形公式

$I_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$ 梯形公式

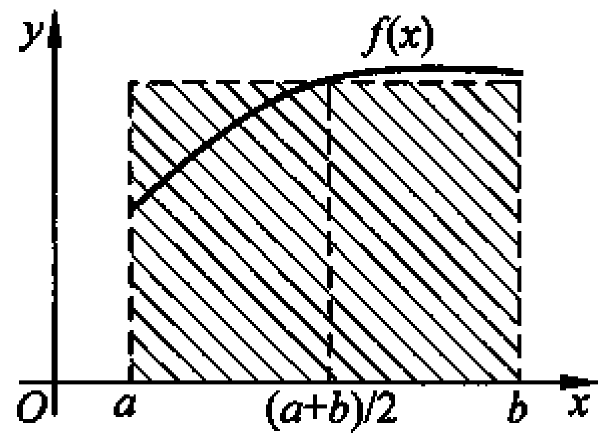


例 (中矩形公式，midpoint rule)：根据 $n=0$对应的拉格朗日插值推导相应的求积公式, 插值节点为区间 $[a,b]$ 的中点。

【解】当 $n=0$ 时，$x_0=(a+b)/2$, 由于 0 次拉格朗日插值多项式为常数, 则

$$L_0(x)=f(x_0)$$

$$I_0(f)=\int_a^b f(x_0)\mathrm{d}x=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$



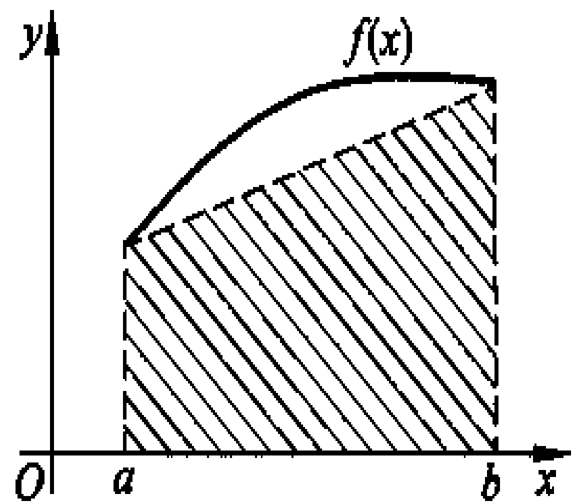
例 (梯形公式，trapezoid rule): 根据 $n=1$对应的拉格朗日插值推导相应的求积公式, 假设插值节点分别为区间 $[a,b]$ 的两个端点。

【解】 当 $n=1$ 时, $x_0=a, x_1=b$, 利用线性拉格朗日插值基函数求得

$$A_0=\int_a^b l_0(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,\mathrm{d}x=\frac{b-a}{2}$$

$$A_1=\int_a^b l_1(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \frac{x-a}{b-a}\,\mathrm{d}x=\frac{b-a}{2}$$

$$I_1(f)=\sum_{k=0}^{1} A_k f(x_k)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

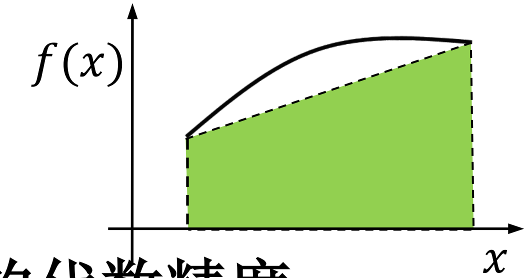


积分余项与代数精度

- 积分余项
  - 定义7.1: 计算积分$I(f)$的求积公式为$I_n(f)$, 则
    $R[f] \equiv I(f) - I_n(f)$为积分余项　　反映计算的截断误差
  - 若$I_n(f)$为插值函数$p(x)$的积分, $R[f]=\int_a^b[f(x)-p(x)]dx$
    插值余项的积分

  对插值型求积公式, $R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$
- 代数精度　衡量求积公式准确度的另一个指标
  - 定义7.2: 若$I_n(f)$对于被积函数$f(x)$为次数不超过m的多项式的情况都是准确的, 但对于m+1次多项式不准确, 则该求积公式具有m次代数精度

积分余项与代数精度



- 代数精度

例: 梯形公式$I_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$的代数精度

显然若$f(x)$为0次、1次多项式, 它准确. 为1次代数精度

中矩形公式 $I_0(f)=(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ 为1次代数精度

□ **Th7.1**: 机械求积公式$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$至少有m次代数精度⟺当$f(x)$分别为$1,x,\dots,x^m$时, $I(f)=I_n(f)$

推论: $\sum_{k=0}^{n}A_k=b-a$

□ **Th7.2**: $I_n(f)$是插值型求积公式⟺它至少有n次代数精度

证明: $\Longrightarrow$, 插值型求积公式的定义

$\Longleftarrow$, 令$f(x)=l_k(x)$,为n次多项式, 则$A_k=\int_a^b l_k(x)dx$即插值型

例: 用公式$H_2(f)=A_0f(0)+A_1f(1)+B_0f'(0)$近似计算积分$I(f)=\int_0^1 f(x)dx$. 求系数值使该公式代数精度尽量高(**待定系数法**)

解: 令$f(x)=1$，x，x^2分别代入上述公式, 要使$H_2(f)=I(f)$成立

当$f(x)=1$时，$A_0+A_1=\int_0^1 1\cdot \mathrm{d}x=1$

当$f(x)=x$时，$A_1+B_0=\int_0^1 x\mathrm{d}x=\frac{1}{2}$

当$f(x)=x^2$时，$A_1=\int_0^1 x^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3}$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_0=\frac{2}{3} \\ B_0=\frac{1}{6} \end{cases}$$

是2次代数精度吗?还需考察$f(x)=x^3$时公式是否准

此时，$H_2(f)=A_1\neq\int_0^1 x^3\mathrm{d}x$ $\quad\therefore$该公式为2次代数精度

求积公式的收敛性与稳定性

- 收敛性、敏感性、稳定性
  - 定义7.3: $I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$, $a\le x_0<x_1<\cdots<x_n\le b$,
    若 $\lim\limits_{n\to\infty,h\to 0} I_n(f)=\int_a^b f(x)dx$, 其中 $h=\max\limits_{1\le k\le n}(x_k-x_{k-1})$,
    称求积公式$I_n(f)$具有收敛性　(一系列求积公式的性质)
  - 数值积分问题的敏感性分析

$$f(x)\longrightarrow\tilde{f}(x),\ \text{扰动的大小}\ \delta=\left\|f(x)-\tilde{f}(x)\right\|_\infty=\max_{a\le x\le b}\left|f(x)-\tilde{f}(x)\right|$$

$$\text{结果误差}\left|\int_a^b f(x)dx-\int_a^b\tilde{f}(x)dx\right|\le\int_a^b\left|f(x)-\tilde{f}(x)\right|dx\le(b-a)\delta$$

$\therefore (b-a)$是绝对条件数的上限　积分问题一般不太敏感

求积公式的收敛性与稳定性

- 考察$I_n(f)$的**稳定性**: $f(x_k) \longrightarrow \tilde{f}(x_k)$

$$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|=\left|\sum_{k=0}^{n} A_k\left[f(x_k)-\tilde{f}(x_k)\right]\right| \le \sum_{k=0}^{n} |A_k|\cdot|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)|$$

$\le (\sum_{k=0}^{n}|A_k|)\varepsilon$, 其中$\varepsilon = \max\limits_{0\le k\le n}\left|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)\right| \le \delta$

$\Longrightarrow$ 若所有$A_k > 0$, 则$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right| \le (\sum_{k=0}^{n} A_k)\delta = (b-a)\delta$

这是控制数值计算误差能达到的**理想情况**

- **定义7.4**: 若对$k = 0, 1, \dots, n$, 均有$A_k > 0$, 则机械求积公式$I_n(f) = \Sigma_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$是稳定的　　尽量用稳定的公式
- 对单个求积公式, 考察积分余项、代数精度和稳定性;
- 对一系列公式(节点逐渐增多), 考察收敛性

(估计截断误差)

牛顿-柯特斯公式

Newton-Cotes公式

- 基本思想
  - 插值型求积公式, 节点x_k, $k=0,1,\ldots,n$在区间上均匀分布, 即设$h=(b-a)/n$, 则$x_k=a+kh,(k=0,\ldots,n)$

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k),\quad A_k=\int_a^b\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}dx$$

称为n阶牛顿-柯特斯公式

令$x=a+th$, $\quad A_k=\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}\left(\frac{t-j}{k-j}\right)\frac{b-a}{n}dt=(b-a)C_k^{(n)}$

$C_k^{(n)}$与积分区间无关, 称为n阶N-C公式的Cotes系数

Cotes系数表

n=1, 1/2, 1/2

n=2, 1/6, 2/3, 1/6

n=3, … …

n=4, 7/90, 16/45, 2/15, 16/45, 7/90

… … … …

- 一系列求积公式
- 便于使用

Newton-Cotes公式

- 稳定性与常用公式
  - n=8时, 有负的$C_k^{(n)}$ 相应的公式不稳定
  - 对称性: $C_k^{(n)}=C_{n-k}^{(n)}$
  - 三种常用的低阶N-C公式

Cotes系数表

n=1, 1/2, 1/2

n=2, 1/6, 2/3, 1/6

n=3, … …

n=4, 7/90, 16/45, 2/15, 16/45, 7/90

… … … …

n=8, $\frac{989}{28350}$ $\frac{5888}{28350}$ $\frac{-928}{28350}$ $\frac{10496}{28350}$ $\frac{-4540}{28350}$ $\frac{10496}{28350}$ $\frac{-928}{28350}$ $\frac{5888}{28350}$ $\frac{989}{28350}$

n=1: $T(f)=(b-a)\left[\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)\right]$ 梯形公式

n=2: $S(f)=(b-a)\left[\frac{1}{6}f(a)+\frac{4}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right)+\frac{1}{6}f(b)\right]$ **Simpson公式**

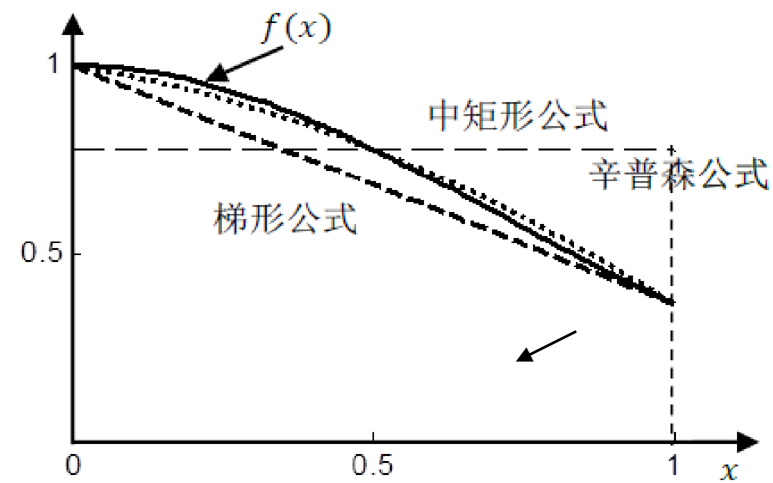
n=4: $C(f)=(b-a)\left[\frac{7}{90}f(x_0)+\frac{32}{90}f(x_1)+\frac{12}{90}f(x_2)+\frac{32}{90}f(x_3)+\frac{7}{90}f(x_4)\right]$ **Cotes公式**

中矩形公式可看成是n=0时的特例

例7.3 用中矩形公式、梯形公式和辛普森公式近似计算积分$I(f)=\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x$，(准确值为$I\approx 0.746824$)

- $M = 1\cdot e^{-0.25}\approx 0.778801$
- $T=\frac{1}{2}(1+e^{-1})\approx 0.683940$
- $S=\frac{1}{6}\left(1+4e^{-0.25}+e^{-1}\right)\approx 0.747180$ (最准确)
- 梯形法的误差约为-0.0629，中矩形法的误差约为0.032

  为什么？



Newton-Cotes公式

- 代数精度 (n阶公式至少有n次代数精度)

$\boxed{\text{n为偶数时, n阶牛顿-柯特斯公式} I_n(f) \text{至少有} \underline{\text{n+1次}} \text{代数精度}}$

证明: 只需看它对$f(x) = x^{n+1}$的积分余项是否为0

n=0时
另外讨论

利用插值型求积公式$I_n(f)$的积分余项:

$x = a + th,\ t \in [0, n]$

$$R[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx = \int_a^b \omega_{n+1}(x)dx = h^{n+2}\int_0^n \prod_{j=0}^n (t-j)dt$$

关键看积分$\int_0^n \prod_{j=0}^n (t-j)dt$, 令$\underline{t = u + n/2}$　　n为偶数

$$\int_{-n/2}^{n/2} H(u)du,\ \text{其中} H(u) = \prod_{j=0}^n \left(u + \frac{n}{2} - j\right) = \prod_{j=-n/2}^{n/2} (u-j)$$

n=2时, $H(u) = (u-1)u(u+1), \ldots$

$H(u)$是奇函数! 在对称区间上的积分$\int_{-n/2}^{n/2} H(u)du$**=0**

∴一般不用n=3对应的N-C公式

低阶N-C公式的积分余项

- 中矩形公式的余项

$$R_M=\frac{f''(\eta)}{24}(b-a)^3$$

- 梯形公式(n=1)

$$R_T=I(f)-T(f)=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

- Simpson公式(n=2)

$$R_S=I(f)-S(f)=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{2880}(b-a)^5,\ \eta\in(a,b)$$

稳定性、收敛性

- 稳定性　　n=8, $\frac{989}{28350}$ $\frac{5888}{28350}$ $\frac{-928}{28350}$ $\frac{10496}{28350}$ $\frac{-4540}{28350}$ $\frac{10496}{28350}$ $\frac{-928}{28350}$ $\frac{5888}{28350}$ $\frac{989}{28350}$
  - n=8的N-C公式不稳定
  - 当n≥10时， $C_k^{(n)}, (k=0,1,\cdots,n)$中至少有一个是负的
  - 高阶牛顿-柯特斯公式不稳定, 小扰动将带来大误差
- 收敛性
  - 牛顿-柯特斯公式基于等距节点的多项式插值
  - 由于高次多项式插值的龙格现象, 随着n的增加, 并不能保证结果收敛到准确解
- 计算量
  - n阶公式含n+1次函数求值

一般只用n<8的偶数阶N-C公式
(梯形公式例外)

复合求积公式

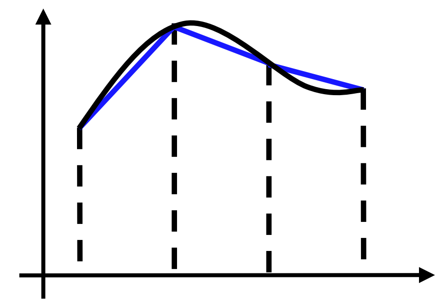
复合求积公式 (composite quadrature)

- **Motivation**
  - 高阶N-C公式不稳定, 阶数越高结果未必越准
  - 受分段低次插值启发, 将积分区间分成小区间分别计算

    例如把区间[a, b]等分为n个子区间, 对每个采用简单积分公式， $h=(b-a)/n$

- 定义7.5: 若等距节点求积公式的截断误差为$O(h^p)$, h为节点间距, 则它具有p阶准确度(order of accuracy)
  - 准确度阶数越高, 随h的减小其结果误差减小得越快

复合求积公式



- 复合梯形公式

对区间做n等分，$h=(b-a)/n$

区间$[x_k,x_{k+1}]$上，$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$

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

稳定, 具有收敛性 (分段线性插值具有收敛性)

□ **Th7.4**: $\lim_{n\to\infty} T_n = I(f)$,只要$f(x)$是可积函数就成立

例：T_n显然对于$f(x)=x^2$不准确, 只有1次代数精度

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

2阶准确度

复合求积公式

- 复合Simpson公式
  - $S_n = \frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})]$
    $\Rightarrow S_n = \frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2})+ 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]$
  - $h = x_{k+1} - x_k$, $x_{k+1/2}$为$[x_k, x_{k+1}]$的中点
  - S_n公式中的[ ]内，部分项与复合梯形公式T_n的一样
  - $2n+1$个节点，具有**稳定性、收敛性、3次代数精度**
  - 积分余项 $I(f) - S_n = -\frac{1}{2880}h^4(b-a)\cdot f^{(4)}(\eta) = O(h^4)$
  - S_n具有**4阶准确度**

复合求积公式

- 步长折半的复合求积公式计算
  - 积分余项公式含被积函数的高阶导数, 很难应用.
    常常动态地确定步长h (逐渐减小, 直到满足要求)
  - 常用的减小步长策略: 步长折半, 之前的计算可复用
    n个小区间→ 2n个小区间, 记新增节点为$x_{k+1/2}$
  - 复合梯形公式的情况
    小区间$[x_k, x_{k+1}]$, 步长折半后复合梯形公式结果为

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

递推化的复合梯形公式: $$=\frac{1}{2}\left\{\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]\right\}+\frac{h}{2}f(x_{k+1/2})$$

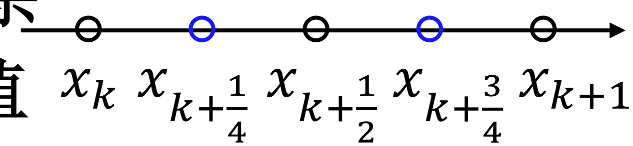
$$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})$$ 只需再计算新增节点的函数值

复合求积公式

- 步长折半的复合求积公式计算
  - 复合Simpson公式的情况

○ 计算S_n的积分节点
○ 计算S_{2n}的新增节点

S_n与S_{2n}的关系比复合梯形公式稍复杂



计算S_{2n}时仍可重用很多点的函数值

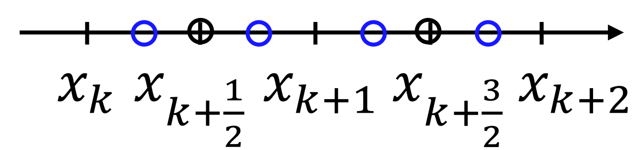
- 很少使用复合中矩形公式

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

与梯形公式有相同的代数精度/准确度, 计算量更小

但是, 在构造复合中矩形公式时, 计算量并不小,

且在步长折半时, 无法复用计算



例 7.4(复合求积公式)：计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x$,

已知n=8对应的区间等分点上的被积函数（列于表7-2)，求复合梯形公式及辛普森公式的结果。积分的准确值约为 $I=0.94608307$

将积分区间[0,1]划分为8等分，应用复合梯形法，求得$T_8=0.945\,690\,9$

将积分区间 4 等分, 应用复合辛普森法, 有 $S_4=0.9460833$

两种复合求积公式都使用 9 个点的函数值, 计算量基本相同, 然而精度却差别很大。复合辛普森公式比复合梯形公式的准确度高得多

理查森外推及Romberg算法

- 复合梯形公式的余项 $I(f)-T_n=-\frac{h^2(b-a)}{12}f''(\eta)=O(h^2)$

Th7.5 □ 设被积函数$f(x)\in C[a,b]$, 任意阶可导, $T(h)$为积分步长为h的复合梯形公式的结果, 则$T(h)=I(f)+\alpha_1 h^2+\alpha_2 h^4+\cdots+\alpha_l h^{2l}+\cdots$, 其中系数$\alpha_l,(l=1,2,\cdots)$与$h$无关

- 理查森外推法
  - □ 区间逐次二等分；再外推，得到更高阶的求积公式

$$T_0^{(n)}-I=\alpha_1 h^2+\alpha_2 h^4+\cdots$$

$$T_0^{(n+1)}-I=\frac{\alpha_1}{4}h^2+\frac{\alpha_2}{16}h^4+\cdots$$

$$\frac{4T_0^{(n+1)}-4I-T_0^{(n)}+I}{3}=\boxed{\frac{4T_0^{(n+1)}-T_0^{(n)}}{3}}-I$$

更准确的值! $=O(h^4)$

  - □ 列三角形T数表计算

h	$T_0^{(n)}$	$T_1^{(n)}$	$T_2^{(n)}$
$b-a$	$T_0^{(0)}$		
$(b-a)/2$	$T_0^{(1)}$	$T_1^{(0)}$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

- 缺点: 光滑性要求高; 节点多

Romberg 算法

- 以复合梯形求积公式的误差展开式为依据, 在形成步长逐次减半的梯形值序列的同时, 通过理查森外推法构造收敛阶更高的值序列。
- 对被积函数光滑性的要求很高，且适合于只能在等距节点上对被积函数取值的情况。

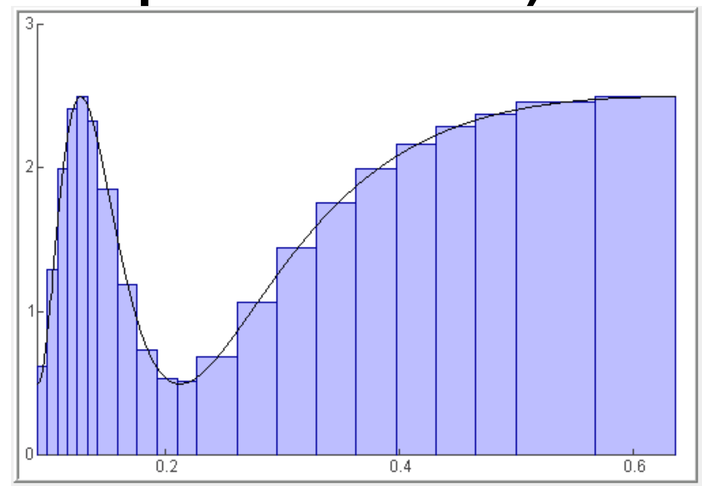
例 7.5: 用 Romberg 算法计算积分$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$, 判断收敛的阈值设为 $\varepsilon=10^{-4}$

【解】使用 Romberg 积分表 (也称为“ T 数表”),可以看出, 经过两次步长折半后计算出 $T_2^{(0)}$, 即满足收敛条件。此时的结果与准确值 $I=0.94608307$ 非常接近。复合辛普森公式的结果 S_4 需要计算 9 次函数值, 而 Romberg 算法只需计算 5 次函数值就得到了更准确的结果。

h	$T_0^{(n)}$	$T_1^{(n)}$	$T_2^{(n)}$
1	0.9207355		
$1/2$	0.9397933	0.9461459	
$1/2^2$	0.9445135	0.9460869	0.94608300

自适应积分算法

自适应积分算法 (adaptive quadrature)



- 基本思想
  - 积分节点没必要均匀分布
  - 自动地非均匀取点，使计算结果达到准确度要求

1. 评估当前区间积分结果的准确度，若不准确就将它折半，直至小区间的结果准确
2. 用两个不同的求积公式算同一个积分，它们之差可近似判断结果的准确度

$$I - S \approx 2^4(I - S_2) \quad \Longrightarrow \quad I - S_2 \approx \frac{S_2 - S}{15}$$ (递归计算过程)

S：Simpson公式，S_2:复合Simpson公式

自适应积分算法

- 一个自适应求积算法

  对每个区间, 用Simpson公式、复合Simpson公式计算

  无论区间大小, 用相同的误差阈值; 函数的递归调用

原理算法: Q=ada_quad(a, b, f(x), tol)

计算[a, b]四等分后节点上的f(x)值;

计算Simpson公式的值S;

计算复合Simpson公式的值S_2;

If $|S_2 - S|$ <tol

　由S, S_2外推得到Q; $\{\ Q = S_2 + \frac{S_2 - S}{15}\ \}$

Else

　Q_1:= ada_quad(a, (a+b)/2, f(x), tol);

　Q_2:= ada_quad((a+b)/2, b, f(x), tol);

　Q:= Q_1 + Q_2;

End

实际的算法需保证函数值不重复计算

自适应积分算法

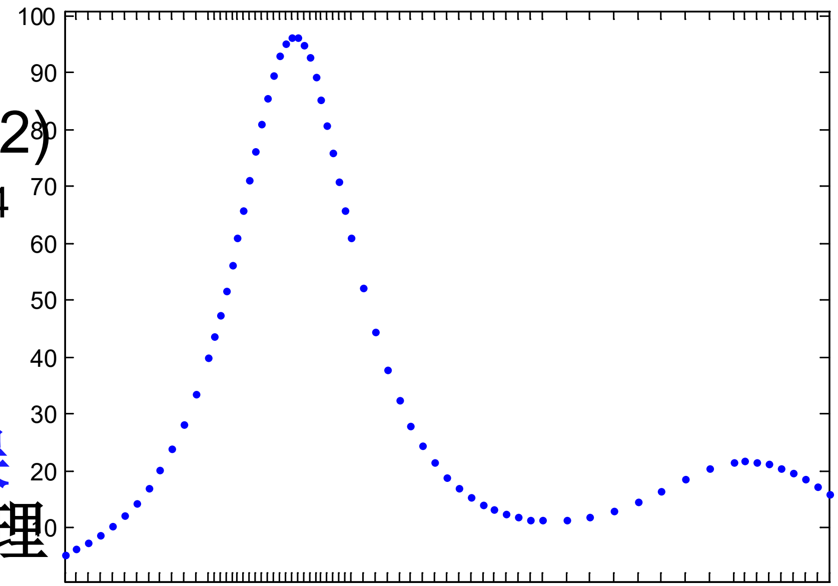
- 一个自适应求积程序quadtx $f(x)=\frac{1}{(x-0.3)^2+0.01}+\frac{1}{(x-0.9)^2+0.04}-6$

  例子: $I=\int_0^1 f(x)dx$

[Q, fcnt]= quadtx(@humps, 0, 1, 1e-2)

fcnt=41 (积分点数). 误差4.1×10^{-4}

fcnt=53,误差约8×10^{-5}



- 讨论
  - 通过阈值设置控制相对误差; 不连续函数的特殊处理
  - 还有其他估计积分误差的方法, 比如利用中矩形公式和梯形公式的差
  - Romberg算法取33个、65个点分别算出29.8467, 29.8585 (误差: 0.012, 2×10^{-4}), 不如自适应积分好

高斯求积公式

高斯求积公式(Gaussian Quadrature)

- 基本思想
  - 牛顿-柯特斯公式基于<u>等距节点</u>的多项式插值，若不要求节点等间距，可得更高代数精度的公式
  - 求积公式$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$，积分系数、积分节点一共是2n+2个待定参数
  - 定义7.6:若$I_n=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$具有2n+1次或更高次代数精度，则称$I_n$为(n阶)高斯求积公式，积分节点为高斯点

一定是插值型公式

例7.8: 推导计算$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x$的高斯求积公式$G_1(f)=A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)$

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \int_{-1}^{1} 1\mathrm{d}x = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = \int_{-1}^{1} x\mathrm{d}x = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2\mathrm{d}x = \frac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3\mathrm{d}x = 0 \end{cases}$$

解得: $G_2(f)=f(-1/\sqrt{3})+f(1/\sqrt{3})$

高斯求积公式

插值型求积公式、代数精度的概念也可扩展

- 怎么求一般的高斯求积公式?

  考虑带权积分$I=\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \Sigma_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = I_n$

  权函数为1、$1/\sqrt{1-x^2}$、e^{-x^2}等, 节点/系数反映它的影响

  若$\forall f(x)\in\mathbb{P}_{2n+1}$, $I = I_n$, I_n为$\rho(x)$对应的高斯求积公式

  - 定理7.7: $x_k, (k = 0, 1, \cdots, n)$为高斯点的充要条件是多项式$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$与$\forall P(x)\in\mathbb{P}_n$正交, 即 $\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)dx = 0$

  证明: $\Longrightarrow$ 高斯积分有2n+1次代数精度, 而$\omega_{n+1}(x_k)$=0

  要证x_k为节点的公式有2n+1次代数精度 $\Longleftarrow$ $f(x)\in\mathbb{P}_{2n+1}$, 设$f(x)=P_n(x)\omega_{n+1}(x)+Q_n(x)$, $Q_n(x)\in\mathbb{P}_n$

  $\int_a^b f(x)\rho(x)dx =\int_a^b Q_n(x)\rho(x)dx=\Sigma_{k=0}^{n} A_k Q_n(x_k)$ $=\Sigma_{k=0}^{n} A_k f(x_k)=I_n$ 插值型求积公式算A_k, 等式成立

  $\therefore$ I_n为高斯公式, x_k为高斯点

高斯求积公式

- 怎么求一般的高斯求积公式?
  - x_k为高斯点 $\Longleftrightarrow$ $\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$与$\mathbb{P}_n$正交
  - 高斯点就是n+1次正交多项式的零点 正交多项式的性质(5)
  - 正交多项式与权函数有关, 且零点均为单实根, $\in (a,b)$
  - 求出高斯点后, 再根据插值型求积公式求系数

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\rho(x)dx\,,\ \ k = 0, \dots, n,$$

- 特点
  - 稳定: $A_k = \int_a^b l_k^2(x)\rho(x)dx = \|l_k(x)\|^2 > 0$

    $= \sum_{j=0}^{n} A_j l_k^2(x_j) = A_k$
  - 收敛: $\lim_{n\to\infty} I_n = \int_a^b f(x)\rho(x)dx$
  - 积分余项: $R_n[f] = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega_{n+1}^2(x)\rho(x)dx$

高斯-勒让德公式

- 高斯求积公式的应用
  - 根据具体的权函数，求正交多项式零点，再算积分系数，得到高斯积分表
  - 勒让德多项式对应的区间为$[-1,1]$、权函数为$\rho(x)=1$
  - 计算$\int_{-1}^{1} f(x)dx$的高斯积分公式称为**高斯-勒让德公式**
  - 高斯-勒让德积分点关于原点对称，对称点的积分系数相同
  - 还有高斯-切比雪夫公式、高斯-埃尔米特公式，等等

高斯-勒让德积分表

n	x_k	A_k
0	0	2
1	± 0.5773503	1
2	± 0.7745967 0	0.5555556 0.8888889
3	± 0.8611363 ± 0.3399810	0.3478548 0.6521452
4	± 0.9061798 ± 0.5384693 0	0.2369269 0.4786287 0.5688889
5	± 0.9324695 ± 0.6612094 ± 0.2386192	0.1713245 0.3607616 0.4679139

高斯-勒让德公式

例7.9 用高斯-勒让德公式计算积分$I = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x$

解: 为了变换积分区间, 设$x = 0.5 + 0.5t$

$$I = \frac{1}{2} \boxed{\int_{-1}^{1} \frac{\sin(0.5+0.5t)}{0.5+0.5t} \mathrm{d}t} \Rightarrow I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k \frac{\sin(0.5+0.5x_k)}{0.5+0.5x_k}$$

查n阶高斯-勒让德公式的积分节点与系数x_k, A_k

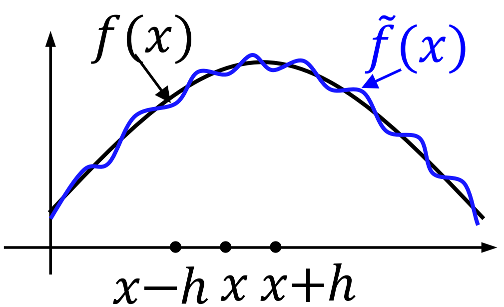
取n=4 (5个节点), 算出$\tilde{I} = I_n/2 = \mathbf{0.94608312}$

在相同的计算量情况下, 结果比Romberg算法更准

数值微分

数值微分

- 问题的描述
  - 近似计算函数的导数$f'(x)$, 其中$f(x)$的表达式未知
  - 与积分相比, 求微分的问题更敏感
  - 使用若干函数值近似计算其导数



- 基本的**有限差分**公式(finite difference)
  - $f'(x) \approx D_f(h) = \dfrac{f(x+h)-f(x)}{h}$　(向前差分)
  - $f'(x) \approx D_b(h) = \dfrac{f(x)-f(x-h)}{h}$　(向后差分)
  - $f'(x) \approx D_c(h) = \dfrac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$　(中心差分)

差商与导数的关系:

$$f[x_0,\ldots,x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

2阶准确度

利用Taylor展开推出: $D_c(h) = f'(x) + \dfrac{f^{(3)}(\xi)}{3!}h^2 = f'(x) + O(h^2)$

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\cdots$$
$$f(x-h)=f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)-\cdots$$

$$D_f(h)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}=f'(x)+O(h)$$ 1 阶准确度

$$D_b(h)=\frac{f(x)-f(x-h)}{h}=f'(x)+O(h)$$ 1 阶准确度

$$D_c(h)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}=f'(x)+O\left(h^2\right)$$ 2 阶准确度

$$G_c(h)=2f[x-h,x,x+h]=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=f''(x)+O\left(h^2\right)$$

二阶中心差分
2 阶准确度

例7.10: 用中心差分公式算$f(x)=\sqrt{x}$在x=2处一阶导数值，分析不同步长h对准确度影响

解: 中心差分公式$D_c(h)=\dfrac{f(2+h)-f(2-h)}{2h}=\dfrac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}$

取h=10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, …, 10^{-12}, 计算结果见表

准确导数值: $f'(2)=\sqrt{2}/4$,　随h缩小, 误差先减后增

包含截断误差、舍入误差的误差限

$$\varepsilon_{tot}=\frac{M\cdot h^2}{6}+\frac{\varepsilon}{h}$$, M为$|f'''(\xi)|$上界，ε为算$f(x)$的误差限

h	$D_c(h)$	准确数字位数
10^{-2}	0.3535544955	5
10^{-3}	0.3535534016	6
10^{-4}	0.3535533907	9
10^{-5}	0.3535533906	9
10^{-6}	0.3535533906	9
10^{-7}	0.3535533899	7
10^{-8}	0.3535533977	8
10^{-9}	0.3535534088	6
10^{-10}	0.3535538529	6
10^{-11}	0.3535505222	5
10^{-12}	0.3536060333	3

总误差限何时最小?

$\dfrac{M\cdot h^2}{6}=\dfrac{\varepsilon}{2h}$，即$h=\sqrt[3]{\dfrac{3\varepsilon}{M}}$时，达最小值

$|f'''(\xi)|=\frac{3}{8}\xi^{-5/2}\le\underbrace{0.0754}_{M}$, $\varepsilon\approx2\times10^{-16}$ ⇨ $h\approx2\times10^{-5}$时误差最小

与实验相符!

数值微分

- 插值型求导公式 (上述公式均为此方法的特例)
  - 根据离散点上$f(x)$值构造插值多项式$P(x)$, 用它的导数近似$f(x)$的导数 (适合于节点任意分布的情况)
  - 增加插值节点可构造出更高准确度的公式, 或得到求更高阶导数的差分公式

$$L_n(x)=\Sigma_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) \approx f(x) \Longrightarrow f^{(i)}(x) \approx \Sigma_{k=0}^{n} f(x_k) l_k^{(i)}(x)$$

带入x_j

两点插值

$$P_1(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0) + \frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1) = \frac{x-x_1}{-h}f(x_0) + \frac{x-x_0}{h}f(x_1)$$

$$P_1'(x) = -\frac{1}{h}f(x_0) + \frac{1}{h}f(x_1) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h},$$

当 x 取值为 x_0 或 x_1 时, 这就是近似 $f'(x)$ 的向前差分公式或向后差分公式。利用拉格朗日插值余项公式, 截断误差:

$$f'(x) - P_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f^{(n+1)}(\xi),$$

其中, $\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n)$ 。由于 $\omega_{n+1}(x_k) = 0$, 则

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k),\ (k = 0,1,\cdots,n)$$

$$f'(x_0) - P_1'(x_0) = -\frac{f''(\xi)}{2}h = O(h),\ f'(x_1) - P_1'(x_1) = \frac{f''(\xi)}{2}h = O(h)$$

分别是向前、向后差分公式的截断误差。

三点插值

3个等距插值节点为 $x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$, 二次拉格朗日插值多项式

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

做变量代换 $x = x_0 + th$, 有

$$P_2(x_0+th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{t(t-1)}{2} f(x_2),$$

$$P_2'(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} P_2(x_0+th) = \frac{\left(t-\frac{3}{2}\right)f(x_0) - (2t-2)f(x_1) + \left(t-\frac{1}{2}\right)f(x_2)}{h}$$

$f'(x_1) \approx P_2'(x_1) = \frac{-f(x_0)+f(x_2)}{2h}$ (中心差分公式,具有 2 阶准确度)

$f''(x_1) \approx P_2''(x) = \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2}$ (2 阶中心差分公式,具有 2 阶准确度)

数值微分

$$D_c(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

- 外推算法

$$f'(x) - D_c(h) = \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots + \alpha_k h^{2k} + \cdots$$

  - 中心差分公式的误差展开式 $\alpha_k (k = 1,2,\cdots)$与h无关
  - 将h逐次减半，用理查森外推构造更准的公式

$$f'(x) - D_c\left(\frac{h}{2}\right) = \frac{\alpha_1}{4} h^2 + \frac{\alpha_2}{16} h^4 + \cdots \Rightarrow f'(x) - \boxed{\frac{4D_c\left(\frac{h}{2}\right) - D_c(h)}{3}} = O(h^4)$$

$$\Rightarrow D_c^{(1)}(h)$$

  - 可构造逐次外推的求导算法
    (考虑舍入、计算量，外推次数不要太多)

例7.11

$f(x) = x^2 e^{-x}$

算$x = 0.5$处的导数

h	$D_c(h)$	$D_c^{(1)}(h)$	$D_c^{(2)}(h)$
0.1	0.4516049081		
0.05	0.4540761694	0.4548999231	
0.025	0.4546926288	0.4548981152	0.4548979947
准确的有效数字位数	3	5	9