

第六章 数值积分与数值微分

6.2-6.4 复化积分的误差自动控制, Romberg积分, 重积分, Gauss积分

中国科学技术大学 数学学院

chenxjin@ustc.edu.cn

复化积分的自动控制误差计算

例： $\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$ ，分别用复化梯形和复化Simpson积分公式计算 $I(f) = \int_0^1 e^x dx$. 求 n 使得

$$|I(f) - T_n(f)| < \varepsilon, \quad |I(f) - S_n(f)| < \varepsilon$$

复化积分的自动控制误差计算

例: $\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 分别用复化梯形和复化Simpson积分公式计算 $I(f) = \int_0^1 e^x dx$. 求 n 使得

$$|I(f) - T_n(f)| < \varepsilon, \quad |I(f) - S_n(f)| < \varepsilon$$

解: 复化梯形积分误差为

$$|E_n^{(1)}(f)| = \left| -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_1) \right| \leq \frac{e}{12n^2} < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow n \geq 68.$$

复化积分的自动控制误差计算

例: $\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 分别用复化梯形和复化Simpson积分公式计算 $I(f) = \int_0^1 e^x dx$. 求 n 使得

$$|I(f) - T_n(f)| < \varepsilon, \quad |I(f) - S_n(f)| < \varepsilon$$

解: 复化梯形积分误差为

$$|E_n^{(1)}(f)| = \left| -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_1) \right| \leq \frac{e}{12n^2} < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow n \geq 68.$$

复化Simpson积分误差为($n = 2m$)

$$|E_n^{(2)}(f)| = \left| -\frac{(b-a)^5}{2880m^4} f^{(4)}(\xi_2) \right| \leq \frac{e}{2880m^4} < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

复化积分的自动控制误差计算

例: $\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$, 分别用复化梯形和复化Simpson积分公式计算 $I(f) = \int_0^1 e^x dx$. 求 n 使得

$$|I(f) - T_n(f)| < \varepsilon, \quad |I(f) - S_n(f)| < \varepsilon$$

解: 复化梯形积分误差为

$$|E_n^{(1)}(f)| = \left| -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi_1) \right| \leq \frac{e}{12n^2} < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow n \geq 68.$$

复化Simpson积分误差为($n = 2m$)

$$|E_n^{(2)}(f)| = \left| -\frac{(b-a)^5}{2880m^4} f^{(4)}(\xi_2) \right| \leq \frac{e}{2880m^4} < \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

$$\Rightarrow m \geq \left\lceil \frac{3}{2} \right\rceil + 1 = 3 \quad \text{or} \quad n = 2m \geq 6.$$

随着 n 增大，复化的梯形或Simpson积分公式都能收敛到 $I(f) = \int_a^b f(x)dx$.

由误差公式，只需知道 f'' 或 $f^{(4)}$ 的上界，就可取适当的 n ，使得数值积分满足任意给定的精度要求.

若上界较大或不易估计，

随着 n 增大, 复化的梯形或Simpson积分公式都能收敛到 $I(f) = \int_a^b f(x)dx$.

由误差公式, 只需知道 f'' 或 $f^{(4)}$ 的上界, 就可取适当的 n , 使得数值积分满足任意给定的精度要求.

若上界较大或不易估计, 常采用自动控制误差算法.

复化梯形积分的自动控制误差计算

复化梯形积分公式误差

$$\begin{cases} I(f) - T_n(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi) \\ I(f) - T_{2n}(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\eta) \cdot \frac{1}{4} \end{cases}$$

其中 $f''(\xi) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i)$, $f''(\eta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{2n-1} f''(\eta_i)$ 都近似为 $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上的“平均值”，故 $f''(\xi) \approx f''(\eta)$.

复化梯形积分的自动控制误差计算

复化梯形积分公式误差

$$\begin{cases} I(f) - T_n(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\xi) \\ I(f) - T_{2n}(f) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\eta) \cdot \frac{1}{4} \end{cases}$$

其中 $f''(\xi) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f''(\xi_i)$, $f''(\eta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{2n-1} f''(\eta_i)$ 都近似为 $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上的“平均值”，故 $f''(\xi) \approx f''(\eta)$. 故有

$$\begin{aligned} I(f) - T_n(f) &\approx 4 \left(I(f) - T_{2n}(f) \right) \implies T_{2n}(f) - T_n(f) \approx 3(I(f) - T_{2n}(f)) \\ &\implies I(f) - T_{2n}(f) \approx \frac{1}{3} \left(T_{2n}(f) - T_n(f) \right) \end{aligned}$$

故对给定的 $\varepsilon > 0$ ，只需 $|T_{2n}(f) - T_n(f)| < 3\varepsilon$ ，则 $|I(f) - T_{2n}(f)| < \varepsilon$ ， $T_{2n}(f)$ 为满足要求的结果；否则若 $\geq 3\varepsilon$ ，则加密一倍，看 $|T_{4n}(f) - T_{2n}(f)| < 3\varepsilon$ 是否成立...

复化Simpson积分的自动控制误差

复化Simpson积分公式误差为

$$\begin{cases} I(f) - S_n(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\xi) \\ I(f) - S_{2n}(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\eta) \cdot \frac{1}{16} \end{cases}$$

其中 $f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i)$, $f^{(4)}(\eta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{2n-1} f^{(4)}(\eta_i)$ 都近似为 $f^{(4)}(x)$

在 $[a, b]$ 上的“平均值”，可视为 $f^{(4)}(\xi) \approx f^{(4)}(\eta)$.

复化Simpson积分的自动控制误差

复化Simpson积分公式误差为

$$\begin{cases} I(f) - S_n(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\xi) \\ I(f) - S_{2n}(f) = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\eta) \cdot \frac{1}{16} \end{cases}$$

其中 $f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i)$, $f^{(4)}(\eta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=0}^{2n-1} f^{(4)}(\eta_i)$ 都近似为 $f^{(4)}(x)$

在 $[a, b]$ 上的“平均值”，可视为 $f^{(4)}(\xi) \approx f^{(4)}(\eta)$. 故有

$$\begin{aligned} I(f) - S_n(f) &\approx 16 \left(I(f) - S_{2n}(f) \right) \\ \Rightarrow I(f) - S_{2n}(f) &\approx \frac{1}{15} \left(S_{2n}(f) - S_n(f) \right). \end{aligned}$$

对给定的 $\varepsilon > 0$ ，只需 $|S_{2n}(f) - S_n(f)| < 15\varepsilon$ ，则 $|I(f) - S_{2n}(f)| < \varepsilon$ ， $S_{2n}(f)$ 为满足要求的结果；若 $\geq 15\varepsilon$ ，则加密一倍，看 $|S_{4n}(f) - S_{2n}(f)| < 15\varepsilon$ 是否成立……

Romberg积分 (算法)

在复化梯形积分的自动控制误差算法中有

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

考虑将误差加到 $T_{2n}(f)$ 上作为新的近似值, 即:

$$I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3} \left(T_{2n}(f) - T_n(f) \right) = \frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f) = S_n(f)$$

Romberg积分 (算法)

在复化梯形积分的自动控制误差算法中有

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

考虑将误差加到 $T_{2n}(f)$ 上作为新的近似值, 即:

$$I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3} \left(T_{2n}(f) - T_n(f) \right) = \frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f) = S_n(f)$$

得到复化Simpson积分公式 $S_n(f)$, 其截断误差为 $O(h^4)$ 或 $O(\frac{1}{n^4})$.

Romberg积分 (算法)

在复化梯形积分的自动控制误差算法中有

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

考虑将误差加到 $T_{2n}(f)$ 上作为新的近似值, 即:

$$I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3} \left(T_{2n}(f) - T_n(f) \right) = \frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f) = S_n(f)$$

得到复化Simpson积分公式 $S_n(f)$, 其截断误差为 $O(h^4)$ 或 $O(\frac{1}{n^4})$.

在复化Simpson积分的自动控制误差算法中有

$$I(f) - S_{2n}(f) \approx \frac{1}{15} \left(S_{2n}(f) - S_n(f) \right)$$

同理考虑将误差加到 $S_{2n}(f)$ 上作为新的近似值, 即:

$$I(f) \approx S_{2n}(f) + \frac{1}{15} \left(S_{2n}(f) - S_n(f) \right) = \frac{16}{15} S_{2n}(f) - \frac{1}{15} S_n(f) = C_n(f)$$

Romberg积分 (算法)

在复化梯形积分的自动控制误差算法中有

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

考虑将误差加到 $T_{2n}(f)$ 上作为新的近似值, 即:

$$I(f) \approx T_{2n}(f) + \frac{1}{3} \left(T_{2n}(f) - T_n(f) \right) = \frac{4}{3} T_{2n}(f) - \frac{1}{3} T_n(f) = S_n(f)$$

得到复化Simpson积分公式 $S_n(f)$, 其截断误差为 $O(h^4)$ 或 $O(\frac{1}{n^4})$.

在复化Simpson积分的自动控制误差算法中有

$$I(f) - S_{2n}(f) \approx \frac{1}{15} \left(S_{2n}(f) - S_n(f) \right)$$

同理考虑将误差加到 $S_{2n}(f)$ 上作为新的近似值, 即:

$$I(f) \approx S_{2n}(f) + \frac{1}{15} \left(S_{2n}(f) - S_n(f) \right) = \frac{16}{15} S_{2n}(f) - \frac{1}{15} S_n(f) = C_n(f)$$

得到复化Cote's积分公式 $C_n(f)$, 其截断误差为 $O(h^6)$ 或 $O(\frac{1}{n^6})$.

Romberg公式

同理，对Cote's积分公式进行类似线性组合，可得 Romberg公式

$$R_n(f) = \frac{64}{63} C_{2n}(f) - \frac{1}{63} C_n(f)$$

其截断误差为

Romberg公式

同理，对Cote's积分公式进行类似线性组合，可得 Romberg公式

$$R_n(f) = \frac{64}{63} C_{2n}(f) - \frac{1}{63} C_n(f)$$

其截断误差为 $O(h^8)$.

类似地，还可对 $R_n(f)$ 继续做下去。

外推法

- 外推法：用低阶方法（或公式）去（线性）组合成高阶方法（或公式）的方法。外推法是计算方法中的一种常用算法。

外推法

- 外推法：用低阶方法（或公式）去（线性）组合成高阶方法（或公式）的方法。外推法是计算方法中的一种常用算法。

设
$$\begin{cases} I - I(h) = c \cdot h^m + o(h^m) \\ I - I(\frac{h}{2}) = \frac{c}{2^m} \cdot h^m + o(h^m) \end{cases}, \quad c \neq 0 \text{ 与 } h \text{ 无关.}$$

外推法

- 外推法：用低阶方法（或公式）去（线性）组合成高阶方法（或公式）的方法。外推法是计算方法中的一种常用算法。

$$\text{设 } \begin{cases} I - I(h) = c \cdot h^m + o(h^m) \\ I - I(\frac{h}{2}) = \frac{c}{2^m} \cdot h^m + o(h^m) \end{cases}, \quad c \neq 0 \text{ 与 } h \text{ 无关.}$$

$$\implies I - I(\frac{h}{2}) = \frac{c}{2^m} \cdot h^m + o(h^m) = \frac{I(\frac{h}{2}) - I(h)}{2^m - 1} + o(h^m)$$

$$I^{(1)} \triangleq I(\frac{h}{2}) + \frac{I(\frac{h}{2}) - I(h)}{2^m - 1}$$

则 $I - I^{(1)} = o(h^m)$ ，显然，新公式 $I^{(1)}$ 具有更高的误差(收敛)阶。

Romberg算法

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$					

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$					

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$	$R_{22} = S_n$				

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$ $R_{31} = T_{4n}$	$R_{22} = S_n$				

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$ $R_{31} = T_{4n}$	$R_{22} = S_n$ $R_{32} = S_{2n}$				

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$ $R_{31} = T_{4n}$	$R_{22} = S_n$ $R_{32} = S_{2n}$	$R_{33} = C_n$			

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$ $R_{31} = T_{4n}$ $R_{41} = T_{8n}$	$R_{22} = S_n$ $R_{32} = S_{2n}$ $R_{42} = S_{4n}$	$R_{33} = C_n$ $R_{43} = C_{2n}$	$R_{44} = R_n$		

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$ $R_{31} = T_{4n}$ $R_{41} = T_{8n}$ $R_{51} = T_{16n}$ \vdots $R_{m1} = T_{2^{m-1}n}$	$R_{22} = S_n$ $R_{32} = S_{2n}$ $R_{42} = S_{4n}$ $R_{52} = S_{8n}$ \vdots $R_{m2} = S_{2^{m-2}n}$	$R_{33} = C_n$ $R_{43} = C_{2n}$ $R_{53} = C_{4n}$ \vdots $R_{m3} = C_{2^{m-3}n}$	$R_{44} = R_n$ $R_{54} = R_{2n}$ \vdots $R_{m4} = R_{2^{m-4}n}$	\dots \ddots \dots	\vdots R_{mm}

Romberg算法

复化梯形 $O(h^2)$	复化Simpson $O(h^4)$	复化Cote's $O(h^6)$	Romberg $O(h^8)$...	
$R_{11} = T_n$ $R_{21} = T_{2n}$ $R_{31} = T_{4n}$ $R_{41} = T_{8n}$ $R_{51} = T_{16n}$ \vdots $R_{m1} = T_{2^{m-1}n}$	$R_{22} = S_n$ $R_{32} = S_{2n}$ $R_{42} = S_{4n}$ $R_{52} = S_{8n}$ \vdots $R_{m2} = S_{2^{m-2}n}$	$R_{33} = C_n$ $R_{43} = C_{2n}$ $R_{53} = C_{4n}$ \vdots $R_{m3} = C_{2^{m-3}n}$	$R_{44} = R_n$ $R_{54} = R_{2n}$ \vdots $R_{m4} = R_{2^{m-4}n}$	\dots \ddots \dots	\vdots R_{mm}

Romberg计算公式: $R_{k,j} = R_{k,j-1} + \frac{R_{k,j-1} - R_{k-1,j-1}}{4^{j-1} - 1}, k = 2, 3, \dots$

重积分

简化起见, 仅讨论矩形区域 D 上的二重积分. 对非矩形区域的积分, 可以(近似)变化为矩形区域上的积分.

设 a, b, c, d 为常数, f 在 $D = [a, b] \times [c, d]$ 上连续, 变为累次积分

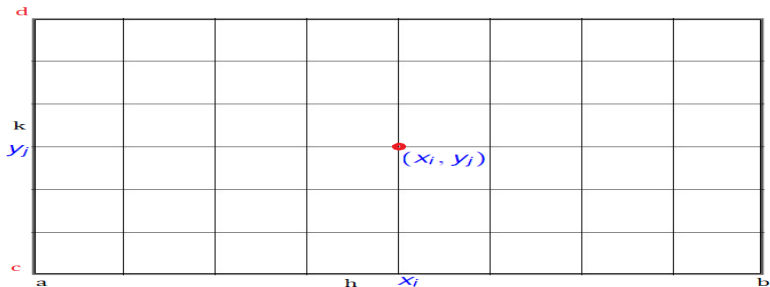
$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \int_a^b \left(\int_c^d f(x, y) dy \right) dx = \int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy$$

重积分

简化起见, 仅讨论矩形区域 D 上的二重积分. 对非矩形区域的积分, 可以(近似)变化为矩形区域上的积分.

设 a, b, c, d 为常数, f 在 $D = [a, b] \times [c, d]$ 上连续, 变为累次积分

$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \int_a^b \left(\int_c^d f(x, y) dy \right) dx = \int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy$$



重积分的复化梯形积分公式

将 $[a, b]$ 和 $[c, d]$ 等距分割: $h = \frac{b-a}{m}, k = \frac{d-c}{n}$, 先计算 $\int_c^d f(x, y)dy$. 将 x 看成常数, 由复化梯形积分公式有:

$$\int_c^d f(x, y)dy \approx \frac{k}{2} \left(f(x, y_0) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x, y_j) + f(x, y_n) \right)$$

y_j 为常数, 在 x 方向, 计算上式的每一项的积分.

$$\int_a^b f(x, y_j)dx \approx \frac{h}{2} \left(f(x_0, y_j) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_i, y_j) + f(x_m, y_j) \right)$$

$$\Rightarrow \int_a^b \int_c^d f(x, y)dx dy \approx hk \sum_{j=0}^n \sum_{i=0}^m c_{ij} f(x_i, y_j), \quad c_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{角点;} \\ \frac{1}{2}, & \text{边点;} \\ 1, & \text{内点.} \end{cases}$$

$$\text{误差为: } E(f) = -\frac{(d-c)(b-a)}{12} \left(h^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(\eta, \mu) + k^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(\bar{\eta}, \bar{\mu}) \right)$$

重积分的复化Simpson积分公式

同理，在累次积分中可采用复化Simpson积分。

将 $[a, b]$ 和 $[c, d]$ 等距分割： $h = \frac{b-a}{m}$, $k = \frac{d-c}{n}$ (m, n 为偶数)，类似可得：

$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dy dx \approx hk \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \omega_{i,j} f(x_i, y_j)$$

其中 $\omega_{i,j} = u_i \cdot v_j$, u_i, v_j 如下：

$$\begin{aligned} \{u_0, u_1, \dots, u_m\} &= \left\{ \frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \dots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3} \right\} \\ \{v_0, v_1, \dots, v_n\} &= \left\{ \frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \dots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3} \right\} \end{aligned}$$

误差为： $E(f) = -\frac{(d-c)(b-a)}{180} \left(h^4 \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\eta, \mu) + k^4 \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(\bar{\eta}, \bar{\mu}) \right)$

Gauss型积分

Gauss型积分

为方便起见，本节的积分节点个数用 n 而不是 $n+1$ ，分别记为 x_1, x_2, \dots, x_n .

Gauss型积分

为方便起见，本节的积分节点个数用 n 而不是 $n+1$ ，分别记为 x_1, x_2, \dots, x_n .

- 我们知道，对 m 个积分节点的插值型数值积分公式，一般至少可达到 $m-1$ 阶代数精度，

Gauss型积分

为方便起见，本节的积分节点个数用 n 而不是 $n + 1$ ，分别记为 x_1, x_2, \dots, x_n .

- 我们知道，对 m 个积分节点的插值型数值积分公式，一般至少可达到 $m - 1$ 阶代数精度，

例如：Newton-Cote's积分公式中的区间个数 m 为奇数时，其 $m + 1$ 个节点的数值积分公式有 m 阶代数精度；当区间个数 m 为偶数时，其 $m + 1$ 个节点的数值积分公式有 $m + 1$ 阶代数精度。

Gauss型积分

为方便起见，本节的积分节点个数用 n 而不是 $n + 1$ ，分别记为 x_1, x_2, \dots, x_n .

- 我们知道，对 $m + 1$ 个积分节点的插值型数值积分公式，一般至少可达到 m 阶代数精度，
例如：Newton-Cote's积分公式中的区间个数 m 为奇数时，其 $m + 1$ 个节点的数值积分公式有 m 阶代数精度；当区间个数 m 为偶数时，其 $m + 1$ 个节点的数值积分公式有 $m + 1$ 阶代数精度。
- 对固定的积分节点个数（比如，2个或3个），是否有更高阶代数精度的数值积分公式呢？

Gauss型积分

为方便起见，本节的积分节点个数用 n 而不是 $n+1$ ，分别记为 x_1, x_2, \dots, x_n .

- 我们知道，对 m 个积分节点的插值型数值积分公式，一般至少可达到 $m-1$ 阶代数精度，
例如：Newton-Cote's积分公式中的区间个数 m 为奇数时，其 $m+1$ 个节点的数值积分公式有 m 阶代数精度；当区间个数 m 为偶数时，其 $m+1$ 个节点的数值积分公式有 $m+1$ 阶代数精度。
- 对固定的积分节点个数（比如，2个或3个），是否有更高阶代数精度的数值积分公式呢？换言之， n 个积分节点的数值积分公式，最高可达到多少阶代数精度？

Gauss型积分

为方便起见，本节的积分节点个数用 n 而不是 $n+1$ ，分别记为 x_1, x_2, \dots, x_n .

- 我们知道，对 m 个积分节点的插值型数值积分公式，一般至少可达到 $m-1$ 阶代数精度，
例如：Newton-Cote's积分公式中的区间个数 m 为奇数时，其 $m+1$ 个节点的数值积分公式有 m 阶代数精度；当区间个数 m 为偶数时，其 $m+1$ 个节点的数值积分公式有 $m+1$ 阶代数精度。
- 对固定的积分节点个数（比如，2个或3个），是否有更高阶代数精度的数值积分公式呢？换言之， n 个积分节点的数值积分公式，最高可达到多少阶代数精度？
答案： $2n-1$ 阶，Gauss积分公式是（在相同的积分节点个数下）代数精度最高的数值积分公式。

例：设 $[a, b] = [-1, 1]$ ，考虑两点数值积分公式

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx G_2(f) = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1)$$

例：设 $[a, b] = [-1, 1]$ ，考虑两点数值积分公式

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx G_2(f) = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1)$$

把积分节点与系数作为未知量，可以列出4个方程：

$$\begin{cases} \alpha_0 \cdot 1 + \alpha_1 \cdot 1 = \int_{-1}^1 1 dx = 2 \\ \alpha_0 \cdot x_0 + \alpha_1 \cdot x_1 = \int_{-1}^1 x dx = 0 \\ \alpha_0 \cdot x_0^2 + \alpha_1 \cdot x_1^2 = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3} \\ \alpha_0 \cdot x_0^3 + \alpha_1 \cdot x_1^3 = \int_{-1}^1 x^3 dx = 0 \end{cases}$$

例：设 $[a, b] = [-1, 1]$ ，考虑两点数值积分公式

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx G_2(f) = \alpha_0 f(x_0) + \alpha_1 f(x_1)$$

把积分节点与系数作为未知量，可以列出4个方程：

$$\begin{cases} \alpha_0 \cdot 1 + \alpha_1 \cdot 1 = \int_{-1}^1 1 dx = 2 \\ \alpha_0 \cdot x_0 + \alpha_1 \cdot x_1 = \int_{-1}^1 x dx = 0 \\ \alpha_0 \cdot x_0^2 + \alpha_1 \cdot x_1^2 = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3} \\ \alpha_0 \cdot x_0^3 + \alpha_1 \cdot x_1^3 = \int_{-1}^1 x^3 dx = 0 \end{cases}$$

可解出：

$$\alpha_0 = 1, \alpha_1 = 1, x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

故数值积分公式 $G_2(f) = f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}}) \approx \int_{-1}^1 f(x)dx$ 可以达到三阶代数精度。

带权函数的积分

定义积分

$$I(f) = \int_a^b W(x)f(x)dx,$$

$$W(x) \not\equiv 0$$

其中, 权函数 $W(x) \in C[a, b]$, $W(x) \geq 0$ ($\forall x \in [a, b]$).

定理 1: $[a, b]$ 上权为 $W(x)$, 具有 n 个积分节点的数值积分公式, 代数精度不会超过 $2n - 1$ 阶.

带权函数的积分

定义积分

$$I(f) = \int_a^b W(x)f(x)dx,$$

其中, 权函数 $W(x) \in C[a, b]$, $W(x) \geq 0$ ($\forall x \in [a, b]$).

定理 1: $[a, b]$ 上权为 $W(x)$, 具有 n 个积分节点的数值积分公式, 代数精度不会超过 $2n - 1$ 阶.

Pf: (反证法) 设数值积分公式 $I_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$, $\alpha_i = \int_a^b W(x)l_i(x)dx$ 有 $2n$ 阶代数精度, 则对 $f \in \mathbb{P}_{2n}$ 有

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i) = \int_a^b W(x)f(x)dx$$

取 $f(x) = (x - x_1)^2(x - x_2)^2 \cdots (x - x_n)^2 = \omega_n^2(x) \in \mathbb{P}_{2n}$ 代入上式, 左边 = 0, 右边 > 0, 矛盾.

内积

在多项式函数构成的线性空间上可定义关于权函数 $W(x)$ 的内积为：

$$(f, g) \triangleq \int_a^b W(x) f(x) g(x) dx \quad (\text{注: } f(x) \perp g(x) \Leftrightarrow (f, g) = 0)$$

内积

在多项式函数构成的线性空间上可定义关于权函数 $W(x)$ 的内积为：

$$(f, g) \triangleq \int_a^b W(x)f(x)g(x)dx \quad (\text{注: } f(x) \perp g(x) \Leftrightarrow (f, g) = 0)$$

利用Gram-Schmidt正交化过程

$$\begin{cases} p_0(x) = f_0(x) \\ \vdots \\ p_n(x) = f_n(x) - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(f_n(x), p_i(x))}{(p_i(x), p_i(x))} p_i(x) \end{cases}$$

可由 \mathbb{P}_n 的一组基 $\{1, x, \dots, x^n\}$ (即 $\mathbb{P}_n = \text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$), 求得其正交基

$$\{p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x)\}, \quad (i.e., p_i(x) \perp p_j(x) \Leftrightarrow (p_i, p_j) = 0, \forall i \neq j)$$

则有 $p_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$ ($\mathbb{P}_{n-1} = \text{span}\{1, x, \dots, x^{n-1}\}$);

内积

在多项式函数构成的线性空间上可定义关于**权函数** $W(x)$ 的内积为:

$$(f, g) \triangleq \int_a^b W(x)f(x)g(x)dx \quad (\text{注: } f(x) \perp g(x) \Leftrightarrow (f, g) = 0)$$

利用**Gram-Schmidt**正交化过程

$$\begin{cases} p_0(x) = f_0(x) \\ \vdots \\ p_n(x) = f_n(x) - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(f_n(x), p_i(x))}{(p_i(x), p_i(x))} p_i(x) \end{cases}$$

可由 \mathbb{P}_n 的一组基 $\{1, x, \dots, x^n\}$ (即 $\mathbb{P}_n = \text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$), 求得其正交基

$$\{p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x)\}, \quad (i.e., p_i(x) \perp p_j(x) \Leftrightarrow (p_i, p_j) = 0, \forall i \neq j)$$

则有 $p_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$ ($\mathbb{P}_{n-1} = \text{span}\{1, x, \dots, x^{n-1}\}$);

例如: 当 $W(x) \equiv 1$ 时, $p_n(x)$ 其实就是 n 次Legendre(勒让德)多项式.

Gauss型积分

定义：以多项式 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为积分节点，

以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx$ ($i = 1, \dots, n$) 为积分系数的数值积分公式

$G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$ 称为Gauss积分公式. 这里, $l_i(x)$ 是以 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为节点的Lagrange插值基函数。

定理 2: Gauss积分 $G_n(f)$ 具有 $2n - 1$ 阶代数精度.

Gauss型积分

定义：以多项式 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为积分节点，

以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx$ ($i = 1, \dots, n$) 为积分系数的数值积分公式

$G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$ 称为Gauss积分公式. 这里, $l_i(x)$ 是以 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为节点的Lagrange插值基函数。

定理 2: Gauss积分 $G_n(f)$ 具有 $2n - 1$ 阶代数精度.

Pf: 以 p_n 的 n 个零点为节点构造一个 $n - 1$ 次Lagrange插值多项式, 记为 $L_{n-1}(x)$, 则Gauss数值积分公式的误差为

$$\begin{aligned} E(f) &= I(f) - G_n(f) = I(f) - I(L_{n-1}(x)) + G_n(L_{n-1}(x)) - G_n(f) \\ &= I(f) - I(L_{n-1}(x)) = \int_a^b W(x) f[x_1, \dots, x_n, x] (x - x_1) \cdots (x - x_n) dx \end{aligned}$$

对任意 $f \in \mathbb{P}_{2n-1}$, 由 $f[x_1, \dots, x_n, x] \prod_{i=1}^n (x - x_i) \in \mathbb{P}_{2n-1}$,

Gauss型积分

定义：以多项式 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为积分节点，

以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx$ ($i = 1, \dots, n$) 为积分系数的数值积分公式

$G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$ 称为Gauss积分公式. 这里, $l_i(x)$ 是以 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为节点的Lagrange插值基函数。

定理 2: Gauss积分 $G_n(f)$ 具有 $2n - 1$ 阶代数精度.

Pf: 以 p_n 的 n 个零点为节点构造一个 $n - 1$ 次Lagrange插值多项式, 记为 $L_{n-1}(x)$, 则Gauss数值积分公式的误差为

$$\begin{aligned} E(f) &= I(f) - G_n(f) = I(f) - I(L_{n-1}(x)) + G_n(L_{n-1}(x)) - G_n(f) \\ &= I(f) - I(L_{n-1}(x)) = \int_a^b W(x) f[x_1, \dots, x_n, x] (x - x_1) \cdots (x - x_n) dx \end{aligned}$$

对任意 $f \in \mathbb{P}_{2n-1}$, 由 $f[x_1, \dots, x_n, x] \prod_{i=1}^n (x - x_i) \in \mathbb{P}_{2n-1}$,
知 $f[x_1, \dots, x_n, x] \in \mathbb{P}_{n-1}$.

而多项式 $\prod_{i=1}^n (x - x_i)$ 仅与 p_n 相差一常数倍且 $p_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$, 故有

$$\prod_{i=1}^n (x - x_i) \perp \mathbb{P}_{n-1} \implies E(f) = 0$$

Gauss型积分

定义：以多项式 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为积分节点，

以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx$ ($i = 1, \dots, n$) 为积分系数的数值积分公式

$G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$ 称为Gauss积分公式. 这里, $l_i(x)$ 是以 p_n 的 n 个零点 x_1, \dots, x_n 为节点的Lagrange插值基函数。

定理 2: Gauss积分 $G_n(f)$ 具有 $2n - 1$ 阶代数精度.

Pf: 以 p_n 的 n 个零点为节点构造一个 $n - 1$ 次Lagrange插值多项式, 记为 $L_{n-1}(x)$, 则Gauss数值积分公式的误差为

$$\begin{aligned} E(f) &= I(f) - G_n(f) = I(f) - I(L_{n-1}(x)) + G_n(L_{n-1}(x)) - G_n(f) \\ &= I(f) - I(L_{n-1}(x)) = \int_a^b W(x) f[x_1, \dots, x_n, x] (x - x_1) \cdots (x - x_n) dx \end{aligned}$$

对任意 $f \in \mathbb{P}_{2n-1}$, 由 $f[x_1, \dots, x_n, x] \prod_{i=1}^n (x - x_i) \in \mathbb{P}_{2n-1}$,
知 $f[x_1, \dots, x_n, x] \in \mathbb{P}_{n-1}$.

而多项式 $\prod_{i=1}^n (x - x_i)$ 仅与 p_n 相差一常数倍且 $p_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$, 故有

$$\prod_{i=1}^n (x - x_i) \perp \mathbb{P}_{n-1} \implies E(f) = 0 \implies G_n(f) \text{ 有 } 2n-1 \text{ 阶代数精度.}$$

Gauss积分的性质与误差

1. Gauss公式 $G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$ 中积分系数 $\alpha_i > 0$ 且 $\sum_{i=1}^n \alpha_i = \int_a^b W(x) dx$.

$$\text{Pf: } \alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx = G_n(l_i) = G_n(l_i^2) = I(l_i^2) = \int_a^b W(x) l_i^2(x) dx > 0$$

2. $f \in C[a, b]$, 则 $\lim_{n \rightarrow \infty} G_n(f) = I(f)$. 这是其他插值型数值积分所不具备的.

3. $f \in C^{2n}[a, b]$, 则 $[a, b]$ 上权为 $W(x)$ 的 Gauss 积分误差为:

$$\begin{aligned} E_n(f) &= I(f) - G_n(f) \\ &= \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b W(x) \omega_n^2(x) dx, \quad \xi \in [a, b] \end{aligned}$$

其中 $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

Gauss积分的性质与误差

1. Gauss公式 $G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$ 中积分系数 $\alpha_i > 0$ 且 $\sum_{i=1}^n \alpha_i = \int_a^b W(x) dx$.

$$\text{Pf: } \alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx = G_n(l_i) = G_n(l_i^2) = I(l_i^2) = \int_a^b W(x) l_i^2(x) dx > 0$$

2. $f \in C[a, b]$, 则 $\lim_{n \rightarrow \infty} G_n(f) = I(f)$. 这是其他插值型数值积分所不具备的.

3. $f \in C^{2n}[a, b]$, 则 $[a, b]$ 上权为 $W(x)$ 的 Gauss 积分误差为:

$$\begin{aligned} E_n(f) &= I(f) - G_n(f) \\ &= \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b W(x) \omega_n^2(x) dx, \quad \xi \in [a, b] \end{aligned}$$

其中 $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

Pf: 考虑 f 关于 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 的二重密切 Hermite 插值 H_{2n-1} , 其积分等于 $I(H_{2n-1}) = G_n(H_{2n-1}) = G_n(f)$.

Gauss积分构造方法

(1) 求出区间 $[a, b]$ 上权函数为 $W(x)$ 的正交多项式 $p_n(x) \perp \mathbb{P}_{n-1}$.

(2) 求出 $p_n(x)$ 的 n 个零点 $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 即为 Gauss 积分节点.

(3) 计算积分系数 $\alpha_j = \int_a^b W(x) l_j(x) dx$. Gauss 积分公式即为

$$G_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i)$$

Gauss积分构造方法

例：求积分 $\int_{-1}^1 x^2 f(x) dx$ 的2点Gauss公式. 其中, x^2 为权函数

Gauss积分构造方法

例：求积分 $\int_{-1}^1 x^2 f(x) dx$ 的2点Gauss公式。 其中， x^2 为权函数

解：利用Gram-Schmidt正交化，依次求出正交多项式序列：

$$\begin{cases} p_0(x) = 1, & p_1(x) = x - \frac{(x, p_0(x))}{(p_0(x), p_0(x))} p_0(x) = x \\ p_2(x) = x^2 - \frac{(x^2, p_0(x))}{(p_0(x), p_0(x))} p_0(x) - \frac{(x^2, p_1(x))}{(p_1(x), p_1(x))} p_1(x) = x^2 - \frac{3}{5} \end{cases}$$

$p_2(x)$ 的两个零点为 $x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$ 积分系数为

$$A_1 = \int_{-1}^1 x^2 l_1(x) dx = \int_{-1}^1 x^2 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} dx = \frac{1}{3}$$

$$A_2 = \int_{-1}^1 x^2 l_2(x) dx = \int_{-1}^1 x^2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} dx = \frac{1}{3}$$

故两点Gauss公式为 $\int_{-1}^1 x^2 f(x) dx \approx G_2(f) = \frac{1}{3} \left(f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + f(\sqrt{\frac{3}{5}}) \right)$

Gauss-Legendre积分

区间 $[-1, 1]$ 上权 $W(x) = 1$ 的Gauss型积分称为Gauss-Legendre积分，其积分节点为Legendre(勒让德)多项式 $L_n(x)$ 的零点；其中

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$$

Gauss-Legendre积分

区间 $[-1, 1]$ 上权 $W(x) = 1$ 的Gauss型积分称为Gauss-Legendre积分，其积分节点为Legendre(勒让德)多项式 $L_n(x)$ 的零点；其中

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$$

对于 $[a, b] \neq [-1, 1]$ ，可以通过变元代换 $x = \frac{(a+b)+(b-a)t}{2}$ 将积分区间变成 $[-1, 1]$.

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) dt$$

通常，积分零点与系数会存于表中，以便直接使用。

Gauss积分系数（点）表

因此, $[a,b]$ 区间上、权函数 $W(x)=1$ 时的 **Gauss** 型积分公式为

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n A_i f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} x_i\right)$$

n	x_i	A_i	n	x_i	A_i
1	0	2	6	± 0.9324695142	0.1713244924
2	± 0.5773502692	1		± 0.6612093865	0.3607615730
3	± 0.7745966692	0.5555555556		± 0.2386191861	0.4679139346
	0	0.8888888889	7	± 0.9491079123	0.1294849662
4	± 0.8611363116	0.3478548451		± 0.7415311856	0.2797053915
	± 0.3399810436	0.6521451549		± 0.4058451514	0.3818300505
5	± 0.9061798459	0.2369268851	8	0	0.4179591837
	± 0.5384693101	0.4786286705		± 0.9602898565	0.1012285363
	0	0.5688888889		± 0.7966664774	0.2223810345
				± 0.5255324099	0.3137066459
				± 0.1834346425	0.3626837834

例 用**Gauss-Legendre**求积公式(**n=2,3**)计算积分 $I = \int_0^1 x^2 e^x dx$

例 用**Gauss-Legendre**求积公式(**n=2,3**)计算积分 $I = \int_0^1 x^2 e^x dx$

解 由于区间为**[0,1]**, 所以先作变量替换 **$x=(1+t)/2$** ,得

$$I = \int_0^1 x^2 e^x dx = \frac{1}{8} \int_{-1}^1 (t+1)^2 e^{(1+t)/2} dt$$

令 $f(t) = (1+t)^2 e^{(1+t)/2}$ 对于**n=2**,由两点**Gauss-Legendre**公式有

$$I \approx \frac{1}{8} \left[f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \right] \approx 0.71194774$$

对于**n=3**,由三点**Gauss-Legendre**公式有

$$I \approx \frac{1}{8} \left[\frac{5}{9} f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right) \right] = 0.718251799$$

容易求出定积分的精确值为 **$I = e - 2 \approx 0.718281828$** , 由此可见, **n=2**时的实际误差为**0.0063340054**, **n=3**时的实际误差为**0.000030049**。

其他常见Gauss型积分

- 区间 $[0, +\infty)$ 上权函数 $W(x) = e^{-x}$ 的Gauss型积分, 称为Gauss-Laguerre积分. 其积分节点为 Laguerre多项式

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n)$$

的零点.

其他常见Gauss型积分

- 区间 $[0, +\infty)$ 上权函数 $W(x) = e^{-x}$ 的Gauss型积分, 称为Gauss-Laguerre积分. 其积分节点为Laguerre多项式

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n)$$

的零点.

- 区间 $(-\infty, +\infty)$ 上权函数 $W(x) = e^{-x^2}$ 的Gauss积分, 称为Gauss-Hermite积分. 其积分节点为Hermite多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$$

的零点.

Gauss-Laguerre积分系数（点）表

类似地, 对 $[0, +\infty)$ 上权函数 $W(x)=1$ 的积分, 可构造**Gauss-Laguerre**求积公式:

$$\int_0^{\infty} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n A_i e^{x_i} f(x_i)$$

n	x_i	A_i	n	x_i	A_i
2	0.5858864376	0.8535533905	5	0.2635603197	0.5217556105
	3.4142135623	0.1464466094		1.4134030591	0.3986668110
3	0.4157745567	0.7110930099		3.5964257710	0.0759424497
	2.2942803602	0.2785177335		7.0858100058	0.0036117587
	6.02899450829	0.0103892565		12.6408008442	0.0000233700
4	0.3225476896	0.6031541043	6	0.2228466041	0.4589646793
	1.7457611011	0.3574186924		1.1889321016	0.4170008307
	4.5366202969	0.0388879085		2.9927363260	0.1133733820
	9.3950709123	0.0005392947		5.7751435691	0.0103991975
				9.8374674183	0.0002610172
				15.9828739806	0.0000008985

Gauss-Hermite积分系数（点）表

- ***Gauss-Hermite***求积公式

区间 $(-\infty, +\infty)$ 上权函数 $W(x) = e^{-x^2}$ 的***Gauss***型求积公式, 称为***Gauss-Hermite***求积公式, 其***Gauss***点为***Hermite***多项式的零点.
公式中的Gauss积分点和求积系数可在下表中查到 .

Gauss-Hermite积分系数（点）表

- Gauss-Hermite**求积公式

区间 $(-\infty, +\infty)$ 上权函数 $W(x)=e^{-x^2}$ 的**Gauss**型求积公式, 称为**Gauss-Hermite**求积公式, 其**Gauss**点为**Hermite**多项式的零点.

公式中的Gauss积分点和求积系数可在下表中查到 .

n	x_i	A_i	n	x_i	A_i
2	± 0.7071067811	0.8862269254	6	± 0.4360774119	0.7246295952
3	± 1.2247448713 0	0.2954089751 1.8163590006		± 1.3358490704	0.1570673203
4	± 0.5246476232 ± 1.6506801238	0.8049140900 0.0813128354		± 2.3506049736	0.0045300099
5	± 0.9585724646 ± 2.0201828704 0	0.3936193231 0.0199532421 0.9453087204	7	± 0.8162878828	0.4256072526
				± 1.6735516287	0.0545155828
				± 2.6519613563 0	0.0009717812 0.8102646175