§6 数值积分和导数

Def 6.1 称线性函数 $I_n(f)=\sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k)$ 为加权求和式，它是 $f\in C[a,b]$ 的积分 $I(f)=\int_a^b \rho(x)f(x)dx$ 的一个估计。
其中 $\rho\in C[a,b]$ 是权重函数，$\forall x\in(a,b)$，$\rho(x)>0$。x_k 称为节点，w_k 称为权重或系数。

Ex 6.2 当 a 或 $b=\infty$ 时，若 $\forall j\in\mathbb{N}$，$\mu_j=\int_a^b x^j\rho(x)dx$ 存在，则 $I_n(f)$ 仍有定义。

§6.1 准确性和收敛性

Def 6.3 称 $I_n(f)$ 的余项或误差为 $E_n(f)=I(f)-I_n(f)$，称 $I_n(f)$ 在 $C[a,b]$ 收敛 $\Leftrightarrow \forall f\in C[a,b]\ \lim_{n\to\infty}I_n(f)=I(f)$

Def 6.4 称 $\mathbb{V}\subset C[a,b]$ 在 $C[a,b]$ 上稠密，若 $\forall f\in C[a,b]$，$\forall\varepsilon>0$，$\exists f_\varepsilon\in\mathbb{V}$ s.t. $\max_{x\in[a,b]}|f(x)-f_\varepsilon(x)|<\varepsilon$。

Thm 6.5 设 $\{I_n(f):n\in\mathbb{N}^+\}$ 是一列估计 $I(f)$ 的加权求和式，$\mathbb{V}$ 是 $C[a,b]$ 上的稠密集，
则 $I_n(f)$ 在 $C[a,b]$ 上收敛，当且仅当 (1) $\forall f\in\mathbb{V}$，$\lim_{n\to\infty}I_n(f)=I(f)$；(2) $\exists B\in\mathbb{R}$ s.t. $\forall n\in\mathbb{N}^+$，$W_n=\sum_{k=1}^{n}|w_k|<B$

Pf: "$\Leftarrow$" 需证明 $\forall f\in C[a,b]$，$\lim_{n\to\infty}I_n(f)=I(f)$
$\because \mathbb{V}$ 在 $C[a,b]$ 中稠密，$\exists f_\varepsilon\in\mathbb{V}$，$\max_{x\in[a,b]}|f(x)-f_\varepsilon(x)|\le\varepsilon$，$\forall\varepsilon>0$。
记 $k=\max_{x\in[a,b]}|f(x)-f_\varepsilon(x)|$，则

$$|E_n(f)|\le|I(f)-I(f_\varepsilon)|+|I(f_\varepsilon)-I_n(f_\varepsilon)|+|I_n(f_\varepsilon)-I_n(f)|$$
$$=\left|\int_a^b(f(x)-f_\varepsilon(x))\rho(x)dx\right|+|I(f_\varepsilon)-I_n(f_\varepsilon)|+\left|\sum_{k=1}^{n}w_k(f(x_k)-f_\varepsilon(x_k))\right|$$
$$\le k\left[\int_a^b\rho(x)dx+\sum_{k=1}^{n}|w_k|\right]+|I(f_\varepsilon)-I_n(f_\varepsilon)|\to 0\ (\varepsilon\to 0)$$

"$\Rightarrow$" (1) 显然 (2) 略。

Def 6.6 称加权求积式 $I_n(f)$ 有精确阶 d_E，当且仅当 $\begin{cases}\forall f\in\mathbb{P}_{d_E},\ E_n(f)=0\\ \exists g\in\mathbb{P}_{d_E+1},\ E_n(g)\neq 0.\end{cases}$

Ex 6.7 $d_E\ge 0$，说明 $\sum_{k=1}^{n} w_k$ 有界，因为 $\forall c\in\mathbb{R}$，$I_n(c)=c\int_a^b\rho(x)dx$ 成立。（c 为常函数）

Lem 6.8 设 $x_1,\dots,x_n$ 是 $I_n(f)$ 的两两不同结点，若 $d_E\ge n-1$，则 $\forall k=1,\dots,n$，$w_k=\int_a^b\rho(x)\ell_k(x)dx$，其中 $\ell_k(x)=\prod_{i\neq k}\frac{x-x_i}{x_k-x_i}$

Pf: 设 $p_{n-1}(f;x)$ 是 f 在 $x_1,\dots,x_n$ 点的插值多项式，则

$$\sum_{k=1}^{n}w_k p_{n-1}(x_k)=\int_a^b p_{n-1}(f;x)\rho(x)dx=\int_a^b\sum_{k=1}^{n}\ell_k(x)f(x_k)\rho(x)dx=\sum_{k=1}^{n}w_k f(x_k)$$

§6.2 Newton-Cotes 公式

Def 6.9 Newton-Cotes 公式是通过用 $f(x)$ 在 $x_1,\dots,x_n\in[a,b]$ 处的插值多项式估计 $f(x)$ 得到 $n-1$ 阶加权求积式。

Def 6.10 梯形公式是通过用连接 $(a,f(a))$ 和 $(b,f(b))$ 的直线估计 $f(x)$ 得到一阶加权求积式。（即 Newton-Cotes 公式 $n=1$）
特别地，当 $\rho(x)=1$ 时，$I^T(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

Ex 6.11 将梯形公式应用到 $\rho(x)=x^{-\frac12}$，$x\in[0,1]$
$w_1=\int_0^1 x^{-\frac12}(1-x)dx=\left(2x^{\frac12}-\frac23x^{\frac32}\right)\Big|_0^1=\frac43$，$w_2=\int_0^1x^{-\frac12}x\,dx=\frac23$，$I^T(f)=\frac23[2f(0)+f(1)]$

Thm 6.12 对 $f\in C^2[a,b]$，$\rho(x)=1$，梯形公式的余项满足 $\exists\xi\in[a,b]$ s.t. $E^T(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$

Pf: $$E^T(f)\underset{\text{Thm 2.7}}{=}-\int_a^b\frac{f''(\xi(x))}{2}(x-a)(b-x)dx\underset{\text{积分中值}}{=}-\frac{f''(\xi)}{2}\int_a^b(x-a)(b-x)dx=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$

Def 6.13 中点公式是通过用常数 $f(\frac{a+b}{2})$ 估计 $f(x)$ 得到一阶加权求和式 (即 Newton-Cotes 公式 $n=0$)

特别地，当 $\rho(x)\equiv 1$ 时，$I^T(f)=(b-a)f(\frac{a+b}{2})$

Def 6.14 辛普森公式是通过用过 $(a,f(a)),(b,f(b)),(\frac{a+b}{2},f(\frac{a+b}{2}))$ 的二次函数估计 $f(x)$ 得到二阶加权求积式.

(即 Newton-Cotes 公式 $n=1$)，特别地，当 $\rho(x)\equiv 1$ 时，$I^S(f)=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$

Thm 6.15 对 $f\in C^4[a,b]$，$\rho(x)\equiv 1$，辛普森公式的余项满足 $\exists\xi\in[a,b]$，s.t. $E^S(f)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$

Ex 6.16 $\{I_{n-1}\}$ 在 $I=\int_{-4}^{4}\frac{dx}{1+x^2}=2\tan^{-1}(4)$ 上不收敛 (即使是良态)，实际上很少应用 $n>8$ 情形.

§6.3 组合公式

Def 6.17 组合梯形公式 (对于 $\rho(x)\equiv 1$)：$I_n^T(f)=\frac{h}{2}f(x_0)+h\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+\frac{h}{2}f(x_n)$，$h=\frac{b-a}{n}$，$x_k=a+kh$

Thm 6.18 对 $f\in C^2[a,b]$，组合梯形公式的余项满足 $\exists\xi\in(a,b)$ s.t. $E_n^T(f)=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)$

Pf：对子区间 $[x_{k-1},x_k]$ 分别应用 Thm 6.12，$E_n^T(f)=\sum_{k=1}^{n}-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)=-\frac{b-a}{12}h^2\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}f''(\xi_k)=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)$

Def 6.19 组合辛普森公式 (对于 $\rho(x)\equiv 1$)，$I_n^S(f)=\frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\dots+4f(x_{n-1})+f(x_n)]$

$h=\frac{b-a}{n}$，$x_k=a+kh$，n 为偶数.

Thm 6.20 对于 $f\in C^4[a,b]$，组合辛普森公式的余项满足 $\exists\xi\in(a,b)$ s.t. $E_n^S(f)=-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\xi)$

Lem 6.21 梯形公式满足 $\forall f\in\Pi_{n-1}[0,2\pi]$，$E_n^T(f)=0$，$\Pi_n[0,2\pi]=\mathrm{span}\{1,\cos x,\sin x,\dots\cos nx,\sin nx\}$.

Pf：复函数 $e_m(x)=e^{imx}=\cos mx+i\sin mx$ $m\in\mathbb{Z}$. 则 $\Pi_n[0,2\pi]=\mathrm{span}\{e^{imx},m=-n,\dots,n\}$

$$E_n^T(e_m)=\int_0^{2\pi}e_m(x)\,dx-\frac{2\pi}{n}\left[\frac{e_m(0)+e_m(2\pi)}{2}+\sum_{k=1}^{n-1}e_m\left(\frac{2k\pi}{n}\right)\right]=\int_0^{2\pi}e^{imx}dx-\frac{2\pi}{n}\sum_{k=1}^{n-1}e^{\frac{imk\cdot 2\pi}{n}}=-\frac{2\pi}{n}\sum_{k=1}^{n-1}e^{\frac{imk\cdot 2\pi}{n}}$$

$$=\begin{cases}0, & m=0\\ -2\pi & m\equiv 0\ (\mathrm{mod}\ n)\ m\neq 0\\ -\frac{2\pi}{n}\cdot\frac{1-e^{imn\cdot 2\pi/n}}{1-e^{im\cdot 2\pi/n}}=0 & m\not\equiv 0\ (\mathrm{mod}\ n)\end{cases}$$

$\therefore E_n^T(e_m)=0$，$m=-n+1,\dots,n-1$.

即 $E_n^T(f)=0$，$\forall f\in\Pi_{n-1}[0,2\pi]$

§6.4 高斯公式

Lem 6.22 设 $n,m\in\mathbb{N}^+$，$m\le n$，给定多项式 $p=\sum_{i=0}^{n+m}p_ix^i\in\mathbb{P}_{n+m}$，$s=\sum_{i=0}^{n}s_ix^i\in\mathbb{P}_n$，$p_{n+m}\neq 0$，$s_n\neq 0$

则 $\exists!\,q\in\mathbb{P}_m$，$r\in\mathbb{P}_{n-1}$ s.t. $p=qs+r$ (多项式带余除法)

Pf：设 $\sum_{i=0}^{n+m}p_ix^i=(\sum_{i=0}^{m}q_ix^i)(\sum_{i=0}^{n}s_ix^i)+\sum_{i=0}^{n-1}r_ix^i$，比较各对应系数，得.

$$\begin{cases}p_{n+m}=q_ms_n\\ p_{n+m-1}=q_ms_{n-1}+q_{m-1}s_n\\ \vdots\\ p_n=q_ms_{n-m}+\dots+q_0s_n\end{cases}$$

下三角方程组且对角元不为0，故有唯一解

故 q 可唯一解出，进而可得 $r=p-qs$

Def 6.23 称结点为 $x_1,\dots x_n$ 的加权求积式的结点多项式为 $v_n(x)=\prod_{k=1}^{n}(x-x_k)$

Thm 6.24 精确阶 $d_E \geq n-1$ 的加权求积式可仅通过提供额外的条件 $\forall p \in \mathbb{P}_{j-1}$ $\int_a^b v_n(x)p(x)\rho(x)dx=0$ 提升到 $d_E \geq n+j-1$ 的精确阶.

Pf: "$\Rightarrow$" $\int_a^b v_n(x)p(x)\rho(x)dx = \sum_{k=1}^n w_k v_n(x_k)p(x_k)=0$ $(v_n(x_k)=0)$ 其中 $v_n(x)=\prod_{k=1}^n (x-x_k)$

"$\Leftarrow$" 只需证 $E_n(p)=0$, $\forall p\in\mathbb{P}_{n+j-1}$, $\int_a^b p(x)\rho(x)dx = \int_a^b q(x)v_n(x)\rho(x)dx + \int_a^b r(x)\rho(x)dx = \int_a^b r(x)\rho(x)dx = \sum_{k=1}^n w_k r(x_k)$

$q(x)\in\mathbb{P}_{j-1}$, $r(x)\in\mathbb{P}_{n-1}$ $\quad = \sum_{k=1}^n w_k[p(x_k)-q(x_k)v_n(x_k)] = \sum_{k=1}^n w_k p(x_k) \Rightarrow E_n(p)=0$

Def 6.25 高斯公式是满足Thm 6.24中 $j=n$ 条件的求积式, 结点为给定 n 次多项式 $v_n(x)$ 的 n 个根 $x_1, x_2, \dots, x_n$.

Cor 6.26 高斯公式的精确阶为 $2n-1$.

Pf: j 不可能超过 n, 否则 $\int_a^b v_n^2(x)\rho(x)dx=0$, $v_n(x)$ 与自身正交; 因为对节点和权重的限制只有 $2n$ 个, 至多确定 $2n-1$ 次多项式.

Cor 6.27 高斯公式经修正后的权重为 $\forall k=1,\dots,n$, $w_k=\int_a^b \frac{v_n(x)}{(x-x_k)v_n'(x_k)}\rho(x)dx$

Pf: 由Lem 6.8, $w_k=\int_a^b \rho(x)\ell_k(x)dx \xlongequal{\text{Lem 2.12}} \int_a^b \frac{v_n(x)}{(x-x_k)v_n'(x_k)}\rho(x)dx$

Ex 6.28 对 $\rho(x)=x^{-\frac12}$, $x\in[0,1]$, 导出 $n=2$ 的高斯公式 $I_2^G(f)$

Sol: 设 $\pi(x)=c_0-c_1x+x^2$, 满足 $\forall p\in\mathbb{P}_1$, $\langle p(x),\pi(x)\rangle = \int_0^1 p(x)\pi(x)\rho(x)dx=0$

这只需满足 $\langle 1,\pi(x)\rangle=\langle x,\pi(x)\rangle=0$, 即 $\int_0^1(c_0-c_1x+c_2x^2)x^{-\frac12}dx = \frac25+2c_0-\frac23c_1=0$

$\Rightarrow c_1=\frac67$, $c_0=\frac{3}{35}$ 即 $\pi(x)=\frac{3}{35}-\frac67x+x^2$ $\qquad \int_0^1(c_0-c_1x+c_2x^2)x^{\frac12}dx=\frac27+\frac23c_0-\frac25c_1=0$

$\pi(x)$ 的0点为 $x_{1,2}=\frac17(3\pm2\sqrt{\frac65})$

考虑求解 w_1, w_2, 因为高斯公式对所有常数和线性函数是精确的, 所以

$I_2^G(1)=w_1+w_2=\int_0^1 x^{-\frac12}dx=2$, $I_2^G(x)=w_1x_1+w_2x_2=\int_0^1 x^{\frac12}dx=\frac23$ $\Rightarrow$ $\cancel{w_{1,2}=1\pm\frac13\sqrt{\frac65}}$ $w_1=1-\frac13\sqrt{\frac65}$

$\therefore I_2^G(f)=(1+\frac13\sqrt{\frac56})f(\frac37-\frac27\sqrt{\frac65})+(1-\frac13\sqrt{\frac56})f(\frac37+\frac27\sqrt{\frac65})$ $\qquad w_2=1+\frac13\sqrt{\frac65}$

梯形公式的精确阶为1, 而高斯公式精确阶为3.

Def 6.29 正交多项式集: $\mathcal{P}=\{p_i:\deg(p_i)=i\}$ s.t. $\forall p_i,p_j\in\mathcal{P}$, $i\neq j$, $\langle p_i,p_j\rangle=0$

Ex 6.30 本章中 $\langle p_i,p_j\rangle=\int_a^b p_i(x)p_j(x)\rho(x)dx$

Thm 6.31 $C[a,b]$ 上正交多项式的零点都是 (a,b) 上的实单根.

Pf: 对固定 $n\geq1$, 假设 $p_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上不变号, 则 $\exists C\in\mathbb{R}^+$ s.t. $\int_a^b \rho(x)p_n(x)dx = C\langle p_n(x),p_0\rangle\neq0$

这与 p_n 与 p_0 正交矛盾, 所以 $\exists x_1\in[a,b]$ s.t. $p_n(x_1)=0$

假设 x_1 是多重零点, 则 $\frac{p_n(x)}{(x-x_1)^2}$ 是 $n-2$ 次多项式 $\because$ $p_n(x)$ 与所以 $n-1$ 次及以下多项式都正交.

$\therefore 0=\langle p_n(x),\frac{p_n(x)}{(x-x_1)^2}\rangle=\langle 1,\frac{p_n^2(x)}{(x-x_1)^2}\rangle>0$, 矛盾! 因此 x_1 是单根, 同理所有零点均为单根.

假设只有 $j<n$ 个零点 $x_1,\dots,x_j$ 在 (a,b) 上. 设 $v_j(x)=\prod_{i=1}^j(x-x_i)\in\mathbb{P}_j$, 则 $p_nv_j=q_{n-j}v_j^2$, q_{n-j} 是 $n-j$ 次不变号函数.

因此 $\langle p_n,v_j\rangle=\langle q_{n-j},v_j^2\rangle>0$ 与 p_n 和 v_j 正交矛盾

$\therefore p_n$ 的所有 n 个零点都是单根.

Cor 6.32 高斯公式的所有节点,都是 (a,b) 上两两不同的实数.

Lem 6.33 高斯公式的权重是正的.

PF: $\forall k=1,\dots,n$ $\because l_k\in\mathbb{P}_{n-1}$ $\therefore l_k^2\in\mathbb{P}_{2n-2}$ $\therefore w_k=\sum_{j=1}^{n}w_j l_k^2(x_j)=\int_a^b \rho(x)l_k^2(x)\,dx>0$ $\quad l_k(x)=\prod_{i\neq k}\frac{x-x_i}{x_k-x_i}$

Lem 6.34 高斯公式满足 $\sum_{k=1}^{n}w_k=\mu_0\in(0,+\infty)$

PF: $\sum_{k=1}^{n}w_k=\int_a^b\rho(x)\,dx=\mu_0>0$

Thm 6.35 高斯公式在 $C[a,b]$ 上收敛.

PF: 设 $\mathbb{P}$ 为全体实多项式, 由 Thm 2.53, $\mathbb{P}$ 是 $C[a,b]$ 上的稠密集 $\Rightarrow$ Thm 6.5(1)

由 Lem 6.33, 6.34, $\sum_{k=1}^{n}|w_k|=\sum_{k=1}^{n}w_k<\infty$, 因此由 Thm 6.5 高斯公式在 $C[a,b]$ 上收敛.

Thm 6.36 $\forall f\in C^{2n}[a,b]$, 高斯公式的余项满足 $\exists\xi\in[a,b]$ s.t. $E_n(f)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b\rho(x)\nu_n^2(x)\,dx$

§6.5 数值导数

Def 6.37 (待定系数法,导出估计 $u^{(k)}(\bar{x})$ 的FD公式的一般方法) 设 $n>k$, $x_1,\dots,x_n$ 两两不同, 由Taylor公式得

$$u(x_j)=u(\bar{x})+(x_j-\bar{x})u'(\bar{x})+\frac{(x_j-\bar{x})^2}{2}u''(\bar{x})+\dots+\frac{(x_j-\bar{x})^k}{k!}u^{(k)}(\bar{x})+\dots$$

设 $u^{(k)}(\bar{x})=c_1u(x_1)+c_2u(x_2)+\dots+c_nu(x_n)+O(h^p)$ 则 $\forall i=0,\dots,p-1$ $\frac{1}{i!}\sum_{j=1}^{n}c_j(x_j-\bar{x})^i=\begin{cases}1 & i=k\\ 0 & \text{others}\end{cases}$

Ex 6.38 用FD公式 $D_2u(\bar{x})=au(\bar{x})+bu(\bar{x}-h)+cu(\bar{x}-2h)$ 估计 $u'(\bar{x})$. 确定 a,b,c.

Sol: $D_2u(\bar{x})=(a+b+c)u(\bar{x})-(b+2c)hu'(\bar{x})+\frac{1}{2}(b+4c)h^2u''(\bar{x})-\frac{1}{6}(b+8c)h^3u'''(\bar{x})+O(h^4)$

$$\begin{cases}a+b+c=0\\ b+2c=-\frac{1}{h}\\ b+4c=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}a=\frac{3}{2h}\\ b=-\frac{2}{h}\\ c=\frac{1}{2h}\end{cases}\qquad D_2u(\bar{x})=\frac{1}{2h}\left[3u(\bar{x})-4u(\bar{x}-h)+u(\bar{x}-2h)\right]$$

Def 6.39 称FD公式是 p 阶精确的, 如果其误差满足 $E(h)=O(h^p)$; $h=\max\{x_{i+1}-x_i\}$

Ex 6.40 例如考虑 $u'(\bar{x})$ 的三个估计.

(1) $D_+u(\bar{x})=\frac{u(\bar{x}+h)-u(\bar{x})}{h}$ (2) $D_-u(\bar{x})=\frac{u(\bar{x})-u(\bar{x}-h)}{h}$ (3) $D_0u(\bar{x})=\frac{D(\bar{x}+h)-D(\bar{x}-h)}{2h}=\frac{1}{2}(D_++D_-)u(\bar{x})$

(1) (2) 是一阶精确的. (3) 是二阶精确的. Ex 6.38 是二阶精确的.

Lem 6.43 用FD公式 $D^2u(\bar{x})=\frac{u(\bar{x}-h)-2u(\bar{x})+u(\bar{x}+h)}{h^2}$ 估计 $u''(\bar{x})$ 是二阶精确的.

进一步地, 如果输入 $u(\bar{x}-h)$, $u(\bar{x})$, $u(\bar{x}+h)$ 的值与真实值的误差 $\varepsilon\in[-E,E]$

则 $\exists\xi\in[\bar{x}-h,\bar{x}+h]$ s.t. $\left|u''(\bar{x})-D^2u(\bar{x})\right|\le\frac{h^2}{12}\left|u^{(4)}(\xi)\right|+\frac{4E}{h^2}$, $\xi\in[\bar{x}-h,\bar{x}+h]$