数值积分

数值方法求积分的一般形式为：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} \lambda_k f(x_k)$$

- x_k为$[a,b]$区间内n个**求积节点**
- λ_k称为**求积系数**，与积分函数$f(x)$无关

可简单定义数值积分的**截断误差**，即准确值减积分值：

$$R_n = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} \lambda_k f(x_k)$$

代数精度：若上述截断误差公式中，积分公式对m次多项式都成立，使之消为0,对$m+1$次多项式不成立，产生余项，那么称其有m次代数精度。

以教材中这道题为例：

> 判断下述数值积分方法的代数精度：
>
> $$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{1}{2}[f(-1)+2f(0)+f(1)]$$
>
> $$\begin{aligned} &f(x)=1: \quad 左端=2, \quad 右端=2, \quad 左端=右端, \\ &f(x)=x: \quad 左端=0, \quad 右端=0, \quad 左端=右端, \\ &f(x)=x^2: \quad 左端=\frac{2}{3}, \quad 右端=1, \quad 左端\neq右端, \qquad m=1. \end{aligned}$$

插值型求积公式

一般的拉格朗日插值积分

若对函数$f(x)$求解拉格朗日插值，然后积分，即：

构造$p_n(x)$近似于$f(x)$:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)$$

然后求解积分：

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)dx$$

上述即为**插值型求积公式**，由于积分和求和符可互换位置，可以看出：

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} \int_a^b l_k(x)dx \cdot f(x_k)$$

$$\lambda_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

对于上述插值型求积公式，**若有$n+1$个节点，那么有n次代数精度。**

均匀的Newton-Cotes积分

若**积分节点均匀分布**，满足：

$$x_k = a + kh = a + k \cdot \frac{b-a}{n}$$

那么对应的积分公式称为Newton-Cotes积分公式。

对于Newton-Cotes积分公式，**若有n个节点，n为奇数，那么积分公式有n次代数精度，比一般的插值形公式提高一次精度**。

常见的Newton-Cotes积分有：**梯形公式，Simpson公式**

梯形公式：2个插值点($x_0 = a, x_1 = b$)，1次代数精度

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

Simpson公式：3个插值点($x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b$)，**3次代数精度**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

积分收敛性问题

记$I_n(f)$为数值方法求解积分，$I(f)$为精确积分，若：

$$\lim_{n\to\infty} I_n(f) = I(f)$$

则称积分公式为收敛的。

然而上述的收敛表达式中，$I(f)$不容易得到，因此考虑每次积分时$f(x_k) = f(x_k) + \epsilon_k$产生的数值误差：

$$\eta_n = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k \epsilon_k$$

对上述表达式进行分析，发现只要满足对于常数K：

$$\sum_{k=0}^{n} |\lambda_k| \leq K$$

积分公式即具有数值稳定性。分析发现先前的所有插值型求积公式稳定性无保障，有两种获得稳定和数值积分方法：**复化积分法**和**Gauss积分法**。

复化求积公式

复化求积公式的核心概念是将区间分为多个小区间，在每个小区间内使用上述的梯形或Simpson求积公式计算，这样得到的最终结果能够保证数值收敛。

设$[a,b]$区间内存在$n+1$个均匀分布的节点：

$$x_k = a + kh = a + k \cdot \frac{b-a}{n}; \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

梯形复化求积公式

使用梯形复化求积公式，需要满足$f(x)$在区间上满足**两阶**连续可导。

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh)]$$

梯形复化求积的值序列是**二阶收敛**的。

Simpson复化求积公式

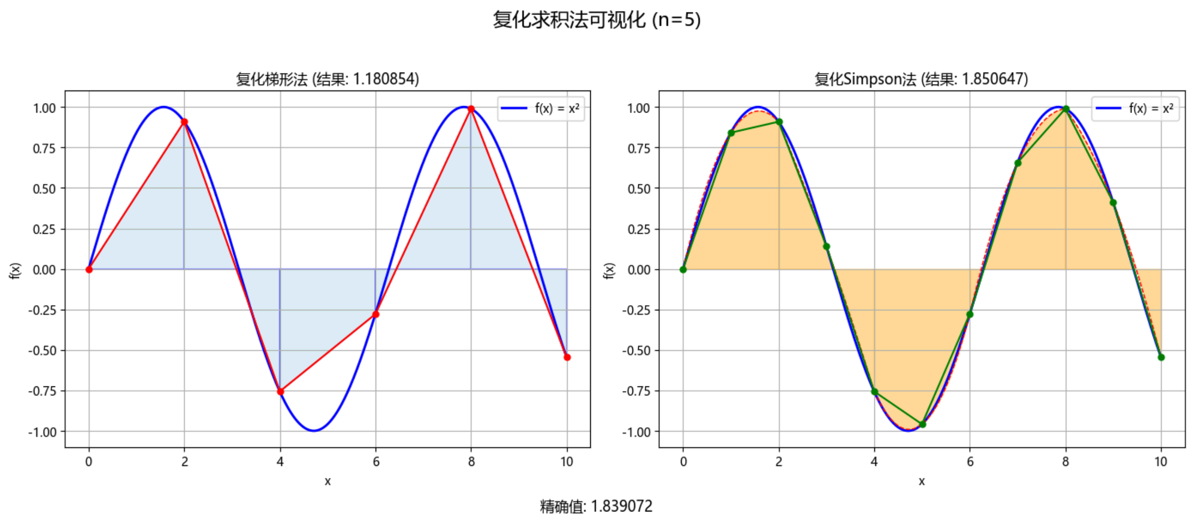
使用Simpson复化求积公式，需要满足$f(x)$在区间上满足**四阶**连续可导。

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(a) + f(b) + 4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i})]$$

注意求和的两项分别为奇数节点项和偶数节点项。Simpson的值序列是**四阶收敛**的。

为了达到相同的精度条件，使用梯形复化求积比Simpson方法需要更多的节点，更大的计算量。

下图展示了一个梯形复化求积法与Simpson积分方法的可视化对比，代码在`Integral.py`中。



Gauss型求积公式

基本概念

Gauss型求积公式构造复杂，但是是具有**最高代数精度**的。经证明，给定n个节点，最高只能构造$2n-1$代数精度的求积公式。若求积分公式有$2n-1$代数精度，称其为Gauss型求积公式。
【经LLM和课本交叉验证，PPT中给出的$2n+1$的结论是错误的】

Gauss型求积公式考虑代权的求积公式：

$$\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} \mathbf{A}_k f(x_k)$$

构成的充分必要条件为：求积节点是n次正交多项式的n个零点x_i

以PPT上的这道题为例:

> 构造Gauss积分公式
>
> $$\int_0^1 \ln\frac{1}{x}dx \approx \mathbf{A_1}f(x_1)+\mathbf{A_2}f(x_2)$$
>
> 首先由于两个节点，构造正交二次多项式$\phi_2(x)=x^2+ax+b$与1和x正交：
>
> $$\int_0^1 (x^2+bx+c)\ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=0,\quad \int_0^1 (x^2+bx+c)x\ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=0,$$
>
> 因为
>
> $$\int_0^1 \ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=1,\quad \int_0^1 x\ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=\frac{1}{4},\quad \int_0^1 x^2\ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=\frac{1}{9},\quad \int_0^1 x^3\ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=\frac{1}{16}.$$
>
> 所以有 $\frac{1}{9}+\frac{1}{4}a+b=0,\quad \underline{\frac{1}{16}+\frac{1}{9}a+\frac{1}{4}b=0.}$
>
> 解得 $a=-\frac{5}{7},\quad b=\frac{17}{252},$
>
> 即 $\varphi(x)=x^2-\frac{5}{7}x^2+\frac{17}{252}.$
>
> 求解x_1,x_2,使得：$\phi(x_1)=\phi(x_2)=0$:
>
> 得到 $x_1=\frac{5}{14}-\frac{\sqrt{106}}{42},\quad x_2=\frac{5}{14}+\frac{\sqrt{106}}{42}.$
>
> 最后求解得到最终的积分系数：
>
> $$A_1+A_2=\int_0^1 \ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=1,\qquad A_1x_1+A_2x_2=\int_0^1 x\ln\frac{1}{x}\mathrm{d}x=\frac{1}{4},$$
>
> 解得 $A_1=\frac{1}{2}+\frac{9\sqrt{106}}{424},\quad A_2=\frac{1}{2}-\frac{9\sqrt{106}}{424}.$
>
> 这样代回原式可以得到最终的解。

对于Gauss型求积公式有：

$$\sum_{k=0}^{n}|\mathbf{A}_k|=\int_a^b \rho(x)dx=\text{常数}<K$$

根据先前关于积分收敛性条件，其满足数值稳定性的要求。

虽然Gauss积分公式的构造复杂，但是收敛速度快，使用节点少，对于常用的Gauss积分公式，节点和系数已经被计算出来，只需要查表即可得到。

常见的Gauss求积公式

1. Gauss-Chebyshev求积

- 区间：[-1, 1]
- 权函数：$w(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
- 节点x_j：

$$x_j=\cos\frac{(2j+1)\pi}{2n+2}$$

- 系数A_j：

$$A_j=\frac{\pi}{n+1}$$

2. Gauss-Legendre求积

- 区间：[-1, 1]
- 权函数：$w(x)=1$
- 节点x_j：
  $n+1$次Legendre多项式 $P_{n+1}(x)$ 的零点
- 系数A_j：

$$A_j=\frac{2}{(1-x_j^2)\left[P'_{n+1}(x_j)\right]^2}$$

3. Gauss-Hermite求积

- 区间：$(-\infty,\infty)$
- 权函数：$w(x)=e^{-x^2}$
- 节点x_j：
  $n+1$次Hermite多项式$H_{n+1}(x)$的零点
- 系数A_j：

$$A_j=\frac{2^{n+2}(n+1)!\sqrt{\pi}}{\left[H'_{n+1}(x_j)\right]^2}$$

4. Gauss-Laguerre求积

- 区间：$[0,\infty)$
- 权函数：$w(x)=e^{-x}$
- 节点x_j：
  $n+1$次Laguerre多项式$L_{n+1}(x)$的零点
- 系数A_j：

$$A_j=\frac{x_j}{[(n+1)L_n(x_j)]^2}$$