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

$$\left| I(f) - T_n(f) \right| < \varepsilon, \qquad \left| I(f) - S_n(f) \right| < \varepsilon$$

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

$$\left|I(f) - T_n(f)\right| < \varepsilon, \qquad \left|I(f) - S_n(f)\right| < \varepsilon$$

解：复化梯形积分误差为

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

$\Longrightarrow \quad n \ge 68.$

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

$$\left|I(f) - T_n(f)\right| < \varepsilon, \qquad \left|I(f) - S_n(f)\right| < \varepsilon$$

解：复化梯形积分误差为

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

$\Longrightarrow \quad n \ge 68.$

复化Simpson积分误差为$(n = 2m)$

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

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

$$\left|I(f) - T_n(f)\right| < \varepsilon, \qquad \left|I(f) - S_n(f)\right| < \varepsilon$$

解：复化梯形积分误差为

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

$\Longrightarrow \quad n \ge 68.$

复化Simpson积分误差为$(n = 2m)$

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

$\Longrightarrow \quad m \ge \lceil \frac{3}{2} \rceil + 1 = 3 \quad or \quad n = 2m \ge 6.$

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

$$I(f) - T_n(f) \approx 4\Big(I(f) - T_{2n}(f)\Big) \Longrightarrow T_{2n}(f) - T_n(f) \approx 3(I(f) - T_{2n}(f))$$

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

故对给定的$\varepsilon > 0$，只需$\left|T_{2n}(f) - T_n(f)\right| < 3\varepsilon$，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$\left|T_{4n}(f) - T_{2n}(f)\right| < 3\varepsilon$是否成立$\cdots$.

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 $f^{(4)}(\xi) = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_i)$, $\quad f^{(4)}(\eta) = \frac{1}{2n}\sum_{i=0}^{2n-1} f^{(4)}(\eta_i)$ 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

$$I(f) - S_n(f) \approx 16\Big(I(f) - S_{2n}(f)\Big)$$

$$\Longrightarrow I(f) - S_{2n}(f) \approx \frac{1}{15}\Big(S_{2n}(f) - S_n(f)\Big).$$

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$\cdots$.

Romberg积分（算法）

在复化梯形积分的自动控制误差算法中有

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

考虑将误差加到$T_{2n}(f)$上作为新的近似值，即：

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

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

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \tfrac{1}{3}\Big(T_{2n}(f) - T_n(f)\Big)$$

考虑将误差加到$T_{2n}(f)$上作为新的近似值，即：

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

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

$$I(f) - S_{2n}(f) \approx \tfrac{1}{15}\Big(S_{2n}(f) - S_n(f)\Big)$$

同理考虑将误差加到$S_{2n}(f)$上作为新的近似值，即：

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

Romberg积分（算法）

在复化梯形积分的自动控制误差算法中有

$$I(f) - T_{2n}(f) \approx \tfrac{1}{3}\Big(T_{2n}(f) - T_n(f)\Big)$$

考虑将误差加到$T_{2n}(f)$上作为新的近似值，即：

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

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

$$I(f) - S_{2n}(f) \approx \tfrac{1}{15}\Big(S_{2n}(f) - S_n(f)\Big)$$

同理考虑将误差加到$S_{2n}(f)$上作为新的近似值，即：

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

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$O(h^8)$，代数精度为7.
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 $\begin{cases} I - I(h) = c \cdot h^m + o(h^m) \\ I - I(\frac{h}{2}) = \frac{c}{2^m} \cdot h^m + o(h^m) \end{cases}$ ， $c \neq 0$与 h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。

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

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

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

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 $O(h^8)$	$\cdots$	
$R_{11} = T_n$					

Romberg算法

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

Romberg算法

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

Romberg算法

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

Romberg算法

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

Romberg算法

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

Romberg算法

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

Romberg算法

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

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

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

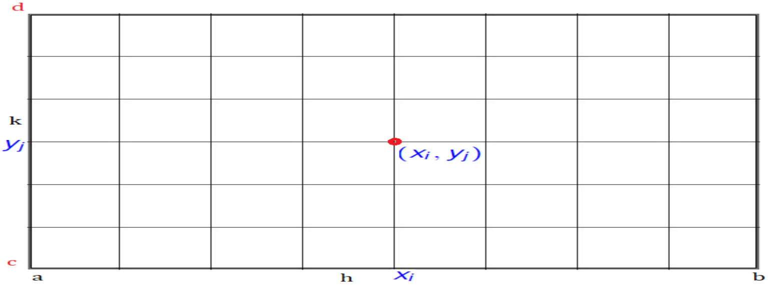
$$\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy = \int_a^b \left(\int_c^d f(x, y) dy \right) dx = \int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy$$

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

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



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.

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

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

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：

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

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

$$\{u_0,u_1,\cdots,u_m\}=\left\{\frac{1}{3},\frac{4}{3},\frac{2}{3},\frac{4}{3},\cdots,\frac{2}{3},\frac{4}{3},\frac{1}{3}\right\}$$

$$\{v_0,v_1,\cdots,v_n\}=\left\{\frac{1}{3},\frac{4}{3},\frac{2}{3},\frac{4}{3},\cdots,\frac{2}{3},\frac{4}{3},\frac{1}{3}\right\}$$

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

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$x_1, x_2, \cdots, x_n$.

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$x_1, x_2, \cdots, x_n$.

- 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$x_1, x_2, \cdots, x_n$.

- 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$x_1, x_2, \cdots, x_n$.

- 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？

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$x_1, x_2, \cdots, x_n$.

- 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$x_1, x_2, \cdots, x_n$.

- 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：

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

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

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

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 $I_n(f) = \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i f(x_i)$, $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx$ 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 $\{1, x, \cdots, x^n\}$ (即$\mathbb{P}_n = \text{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$), 求得其正交基

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

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

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：

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

利用**Gram-Schmidt**正交化过程

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

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

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

则有 $p_n \perp \mathbb{P}_{n-1}$ ($\mathbb{P}_{n-1} = \mathrm{span}\{1, x, \cdots, x^{n-1}\}$);
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 $x_1, \cdots, x_n$ 为积分节点，以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx \ \ (i = 1, \ldots, n)$ 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 $x_1, \cdots, x_n$ 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 $x_1,\cdots,x_n$ 为积分节点，以 $\alpha_i=\int_a^b W(x)l_i(x)dx\ \ (i=1,\ldots,n)$ 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 $x_1,\cdots,x_n$ 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

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

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

Gauss型积分

定义：以多项式 p_n 的 n 个零点 $x_1, \cdots, x_n$ 为积分节点，以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx \;\; (i = 1, \ldots, n)$ 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 $x_1, \cdots, x_n$ 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

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

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

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

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

Gauss型积分

定义：以多项式 p_n 的 n 个零点 $x_1, \cdots, x_n$ 为积分节点，以 $\alpha_i = \int_a^b W(x) l_i(x) dx \ \ (i = 1, \ldots, n)$ 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 $x_1, \cdots, x_n$ 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

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

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

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

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

Gauss积分的性质与误差

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

   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$\lim\limits_{n\to\infty}G_n(f)=I(f)$. 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$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=\int_a^b W(x)dx$.

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$\lim_{n\to\infty}G_n(f)=I(f)$. 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$\{x_1,\cdots,x_n\}$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$\{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ 即为Gauss积分节点.

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

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

P51

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:

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

$p_2(x)$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

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

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

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

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

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

n	x_i	A_i
1	0	2
2	±0.5773502692	1
3	±0.7745966692	0.5555555556
	0	0.8888888889
4	±0.8611363116	0.3478548451
	±0.3399810436	0.6521451549
5	±0.9061798459	0.2369268851
	±0.5384693101	0.4786286705
	0	0.5688888889

n	x_i	A_i
6	±0.9324695142	0.1713244924
	±0.6612093865	0.3607615730
	±0.2386191861	0.4679139346
7	±0.9491079123	0.1294849662
	±0.7415311856	0.2797053915
	±0.4058451514	0.3818300505
	0	0.4179591837
8	±0.9602898565	0.1012285363
	±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

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

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 ≈ 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, +∞)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
2	0.5858864376	0.8535533905
	3.4142135623	0.1464466094
3	0.4157745567	0.7110930099
	2.2942803602	0.2785177335
	602899450829	0.0103892565
4	0.3225476896	0.6031541043
	1.7457611011	0.3574186924
	4.5366202969	0.0388879085
	9.3950709123	0.0005392947

n	x_i	A_i
5	0.2635603197	0.5217556105
	1.4134030591	0.3986668110
	3.5964257710	0.0759424497
	7.0858100058	0.0036117587
	12.6408008442	0.0000233700
6	0.2228466041	0.4589646793
	1.1889321016	0.4170008307
	2.9927363260	0.1133733820
	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
2	± 0.7071067811	0.8862269254
3	± 1.2247448713	0.2954089751
	0	1.8163590006
4	± 0.5246476232	0.8049140900
	± 1.6506801238	0.0813128354
5	± 0.9585724646	0.3936193231
	± 2.0201828704	0.0199532421
	0	0.9453087204

n	x_i	A_i
6	± 0.4360774119	0.7246295952
	± 1.3358490704	0.1570673203
	± 2.3506049736	0.0045300099
7	± 0.8162878828	0.4256072526
	± 1.6735516287	0.0545155828
	± 2.6519613563	0.0009717812
	0	0.8102646175