《地球物理计算方法》

第2章　数值积分

1、机械求积

2、Newton-cotes积分公式

3、复化求积方法

4、Romberg加速算法

5、Gauss积分公式

6、数值微分

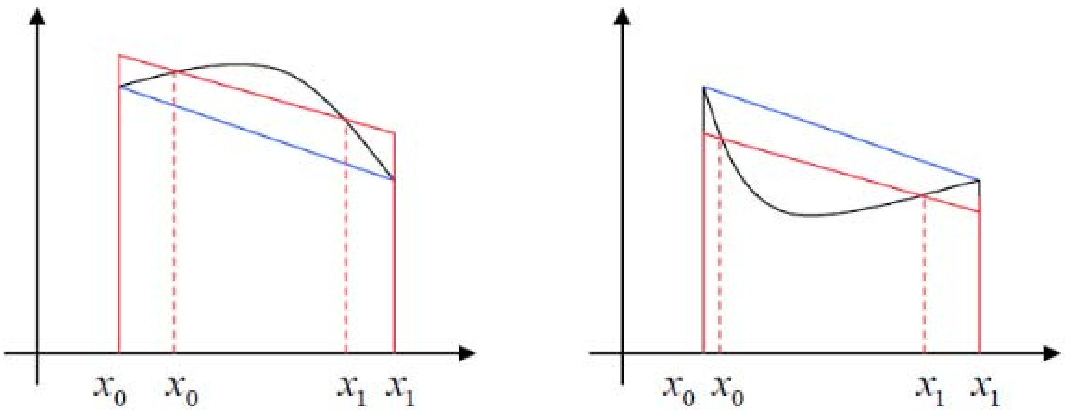
问题的提出

- 构造牛顿-柯特斯公式时，我们限定用等分点作为求积节点，简化了处理过程（已知节点x_k，求系数A_k，），但同时限制了求积公式的精度。

代数精度：n阶或n+1阶精度（**注：n为区间个数**，求积节点个数为n+1）

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

问题的提出



高斯积分与插值积分对比

由蓝色线$x=x_0$，$x=x_1$，$y=0$三条线围成的区域是基于梯形求积公式计算的结果，发现蓝线和黑线之间的区域并没有被计算到积分值内，存在较大误差。若将x_0，x_1分别向内移动一点距离，得到外框红线表示的梯形求积公式，这对于黑色曲线积分的拟合就更理想，面积更近似。这就是高斯求积的基本思想：不严格按照给定的x点求积，x点是动态可移动的，同时积分系数A也是不确定的。

- 适当地选取求积节点（求系数A_k，待求节点x_k），使求积公式具有2n-1次代数精度（**注：** 这里n又为求积节点个数，节点x_k不等间距）。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

注：积分区间[-1,1]

若具有2n-1阶精度，称该求积公式为高斯公式，待求节点x_k为高斯点。

方法：

根据代数精度定义：求积具有$2n$-1 次代数精度，令 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^{2n-1}$ 代入求积公式等式准确成立，即建立等式。

如两点高斯公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

则：n=2（2个求积节点），可以得到3次代数精度的公式，

即对$f(x) = 1, x, x^2, x^3$用上式积分恒等。

得到一个非线性方程组，

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2 \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0 \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = 0 \end{cases}$$

四个方程，四个未知数：

两个系数：A_1，A_2，

两个求积节点：x_1，x_2

$$A_1 = A_2 = 1$$

$$x_2 = -x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

➢2点高斯公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

➢3点高斯公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9} f(-\sqrt{\frac{3}{5}})+\frac{8}{9} f(0)+\frac{5}{9} f(\sqrt{\frac{3}{5}})$$

对任意区间[a,b]的积分高斯积分公式：

将x进行变量替换（平移和拉伸），使新变量的积分区间为[-1,1]。

将新变量的高斯点代入函数中，应用高斯公式求积分系数。

令 $$x=\frac{b-a}{2}t+\frac{a+b}{2},t\in[-1,1].$$

将区间进行拉伸和平移，可得到任意区间的积分公式：

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{2}\left[f\left(-\frac{b-a}{2\sqrt{3}}+\frac{a+b}{2}\right)+f\left(\frac{b-a}{2\sqrt{3}}+\frac{a+b}{2}\right)\right]$$ （两点高斯式）

2. 高斯点的基本特性

◆根据代数精度方法，高斯点的确定及系数的求取虽然原则上可以化为代数问题（方程组是非线性的），**非线性的方程组求解**存在困难（系数A_k线性，节点x_k非线性）。

办法：从研究过高斯点多项式的基本特性（如正交性）着手来解决高斯公式的构造问题。

设$x_k(k=1,2,\ldots,n)$是求积公式的高斯点，作多项式 $\omega(x)$

$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$$

对于任意次数≤n-1次的多项式 $p_{n-1}(x)$，

(1) 以高斯点为根的n次多项式 $\omega(x)$与一切次数≤n-1次的多项式 $p_{n-1}(x)$正交；

(2) 如果n次多项式 $\omega(x)$与任意n-1次的多项式$p_{n-1}(x)$正交，则其零点必须为高斯点。

定理： 节点x_k(k=1,2,..n)是高斯点的充分必要条件是，多项式$\omega(x)$与一切次数≤n-1的多项式$p_{n-1}(x)$正交。

◆对任意的多项式$p_{n-1}(x)$成立；

◆最简单的多项式为1, x, x^2,…, x^{n-1}，所以根据下列积分等式，可以求出各高斯点x_k

$$\int_{-1}^{1} x^k \omega(x)dx = 0, \quad k = 0,1,\cdots,n-1$$（利用正交性求高斯点）

□当高斯点x_k已知，代入线性方程组中，求出积分系数A_k；

3. 勒让德多项式

设x_k $(k=1,2,..n)$是求积公式的高斯点，以该点为零点的n次多项式

$$p_n(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$$

称为勒让德多项式。

(1)求勒让德多项式 $p_n(x)$的零点值即找到了高斯点；

(2)利用勒让德多项式，取它的零点作为求积节点即可构造出高斯公式。

构造出勒让德多项式

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

逐步构造出勒让德多项式

$$p_1(x) = x$$

$$p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

$$p_4(x) = x^4 - \frac{30}{35}x^2 + \frac{3}{35}$$

高斯点

令勒让德多项式为零，

即为方程求根；

根据定义：

这些根为高斯点；

n	x_k
1	0.000000
2	$\pm$ 0.5773503
3	$\pm$ 0.7745967 0.000000
4	$\pm$ 0.8611363 $\pm$ 0.3398810
5	$\pm$ 0.9061798 $\pm$ 0.5384693 0.000000

高斯积分公式的特点：

（1）收敛性，当n-> 无穷大收敛到积分值

（2）数值稳定性好，

（3）高斯求积公式具有内在的对称性（系数和节点）。

（4）困难：为了同时处理求积系数与求积节点，用代数精度方法归结出的代数方程组是非线性。

1、机械求积

2、Newton-cotes积分公式

3、复化求积方法

4、Romberg加速算法

5、Gauss积分公式

6、数值微分

1、差商公式

由导数定义,差商近似导数,得到数值微分公式

h->0的极限， $f'(a)=\lim\limits_{h\to 0}\dfrac{f(a+h)-f(a)}{h}$

$$f(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a)}{h},$$

$$f'(a)\approx\frac{f(a)-f(a-h)}{h},$$

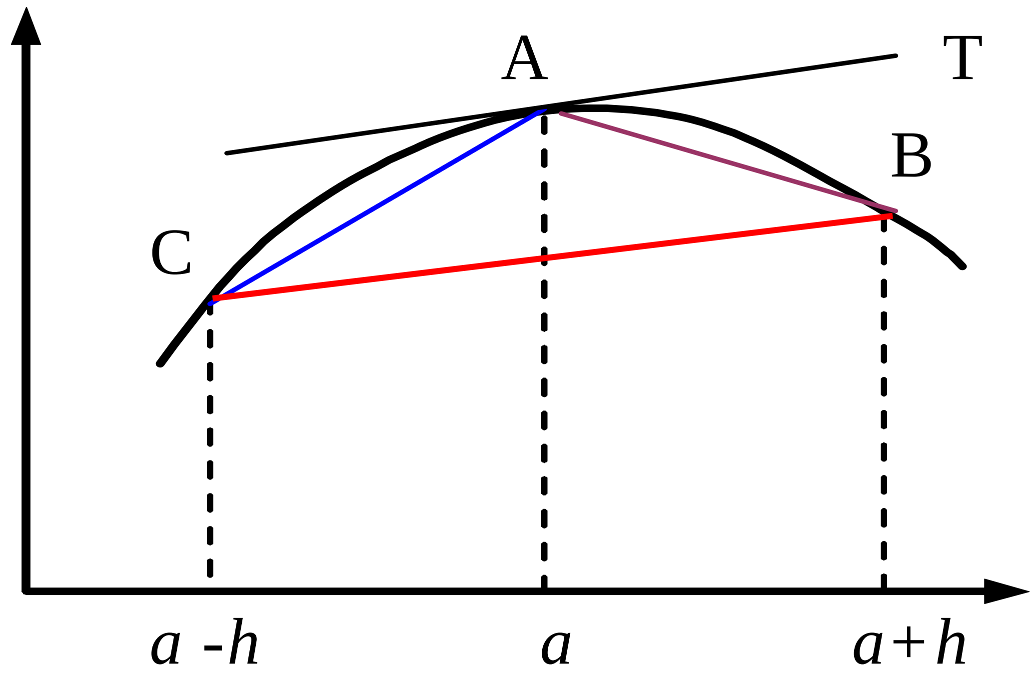
$$f'(a)\approx\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}.\qquad \text{（中点公式）}$$

数值微分： 用函数值的线性组合近似函数在某点的导数值。

差商比较示意图（看线的颜色）

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$$

$$f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h}$$



$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$$ ————————中点方法

中点格式表达成为,

$$G(h)\overset{\Delta}{=}\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}=f'(a)+\underbrace{\frac{h^2}{3!}f'''(a)+\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots}_{\text{误差R}}.$$

注：泰勒展开 $\begin{cases} f(a+h)=f(a)+f'(a)h+\dfrac{f''(a)}{2!}h^2+\dfrac{f^{(3)}(a)}{3!}h^3+\dfrac{f^{(4)}(a)}{4!}h^4+\dfrac{f^{(5)}(a)}{5!}h^5+\dots \\ f(a-h)=f(a)-f'(a)h+\dfrac{f''(a)}{2!}h^2-\dfrac{f^{(3)}(a)}{3!}h^3+\dfrac{f^{(4)}(a)}{4!}h^4-\dfrac{f^{(5)}(a)}{5!}h^5+\dots \end{cases}$

误差R与h^2成正比。

从截断误差角度看，h越小越好；

从舍入误差角度看，h不能太小（f(a+h)与f(a-h)太接近）；

所以在实际计算时 h需选择一个合适值。

2、中点方法的加速

中点格式表达成为

$$G(h) \triangleq f'(a) + \underbrace{\frac{h^2}{3!} f'''(a) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots}_{\text{误差R}}$$

当步长减半，为h/2时

$$G\left(\frac{h}{2}\right) \triangleq f'(a) + \frac{1}{2^2}\frac{h^2}{3!} f'''(a) + \frac{1}{2^4}\frac{h^4}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots$$

步长为h时，误差R

$$G(h)-f'(a)=\frac{h^2}{3!}f'''(a)+\frac{h^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots \quad (1)$$

步长为h/2时，误差R

$$G(h/2)-f'(a)=\frac{(h/2)^2}{3!}f'''(a)+\frac{(h/2)^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots \quad (2)$$

（1）式-(2)式得，

$$G(h)-G(h/2)=3\frac{(h/2)^2}{3!}f'''(a)+15\frac{(h/2)^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots \quad (3)$$

由（3）式得，$\dfrac{(h/2)^2}{3!}f'''(a)\approx\dfrac{1}{3}[G(h)-G(h/2)]$

将其代入（2）式中，

$$G(h/2)-f'(a)=\frac{(h/2)^2}{3!}f'''(a)+\frac{(h/2)^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots\quad(2)$$

可得，$G(h/2)-f'(a)=\dfrac{1}{3}\big(G(h)-G(h/2)\big)+\dfrac{(h/2)^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$

移项整理得，

$$\frac{4}{3}G(h/2)-\frac{1}{3}G(h)=f'(a)+\frac{(h/2)^4}{5!}f^{(5)}(a)+\cdots$$

令 $G_1(h)=\frac{4}{3}G(h/2)-\frac{1}{3}G(h)$，则有，

$$G_1(h)=f'(a)+\beta_1 h^4+\beta_2 h^6+\dots,$$

称$G_1(h)$为$f'(a)$的加速公式，$f'(a)\approx G_1(h)$，则该中点加速公式的截断误差主项为$O(h^4)$。

若令$G_2(h)=\frac{16}{15}G_1(h/2)-\frac{1}{15}G_1(h)$, 则有，

$$G_2(h)=f'(a)+\gamma_1 h^6+\dots,$$

所以, 中点加速公式 $f'(a)\approx G_2(h)$的截断误差主项为$O(h^6)$。

例：求函数$f(x)=e^x$在$x=1$处的导数值(近似值要求三位有效数字)。

解：中点公式，

$$f'(1)\approx G(h)=\frac{f(1+h)-f(1-h)}{2h}=\frac{e^{1+h}-e^{1-h}}{2h}$$

h	G(h)	$G_1(h)$	$G_2(h)$	$G_3(h)$
0.8	3.01765	2.715917	2.718285	2.71828
0.4	2.79135	2.718137	2.718276	
0.2	2.73644	2.719267		
0.1	2.72281			

3、数值求导公式的设计方法

已知一组节点：$x_i = x_0 + ih, i = 0,1,\cdots,n$ 及对应的函数值 $f(x_i)$，

求 $f'(x_k)$，即构造：

$$f'(x_k) \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

构造方法：

- 精度分析方法
- 插值方法

1、代数精度构造法

$$x_i = x_0 + ih\,, i = 0,1,\cdots,n \;,\quad f'(x_k) \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

例如，已知：

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{h}(A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)) \quad \text{(2阶精度)}$$

求 A_0，A_1和A_2使该微分格式具有2阶精度。

令它对于 $f(x)=1, x, x^2$ 成立等式，得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 0 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 + A_2 x_2 = h \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = 2 x_0 h \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 0 \\ A_1 + 2 A_2 = 1 \\ A_1 + 4 A_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = -\dfrac{3}{2} \\ A_1 = 2 \\ A_2 = -\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}(-3 f(x_0) + 4 f(x_1) - f(x_2))$$

2、插值多项式构造方法

已知函数$y = f(x)$的节点上的函数值$y_i = f(x_i)\ (i = 0,1,\cdots,n)$，构造插值多项式$p_n(x)$.

取 $f'(x) = p_n'(x)$ ，则称为插值型求导公式。

插值多项式余项

依据插值多项式余项定理

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

求导得到：

$$R'_n(x) = f'(x) - p'_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'_{n+1}(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)$$

➢对于任意的x，

难以确定： $\frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi)$

$$\frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi)$$

➢但对于节点x_k上：$\omega_{n+1}(x_k) = 0$

$$\frac{\omega_{n+1}(x_k)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi) = 0$$

该节点x_k的余项：

$$R'_n(x_k) = f'(x_k) - p'_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k)$$

(1) 两点公式

设已给出两个节点上 x_0, x_1 的函数值 $f(x_0), f(x_1)$，作线性插值，

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

对上式两端求导，记 $h = x_1 - x_0$ ，则有

$$p'_1(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

$$f'(x_0) \approx p_1'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)]$$

$$f'(x_1) \approx p_1'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)]$$

(2)三点公式

设已给出三个节点上 $x = x_0 + th(x_0, x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h)$ 的函数值，作二次插值，得

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

$$p_2(x_0+th)=\frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0)+t(t-2)f(x_1)+\frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$

对t求导，得

$$p'_2(x_0+th)=\frac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0)-4(t-1)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)\right]$$

t=0, 1, 2代入上式，得到三个节点处的求导公式，

$$f'(x_0) \approx p_2'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)]$$

$$f'(x_1) \approx p_2'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)]$$

$$f'(x_2) \approx p_2'(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)]$$

3、高阶导数公式

可以根据插值多项式构造：

$$f^{(k)}(x) \approx p_n^{(k)}(x), k = 1, 2, \ldots.$$

如：

$$p_2''(x_0 + th) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)],$$ 令t=1得，

$$f''(x_1) \approx \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)]$$