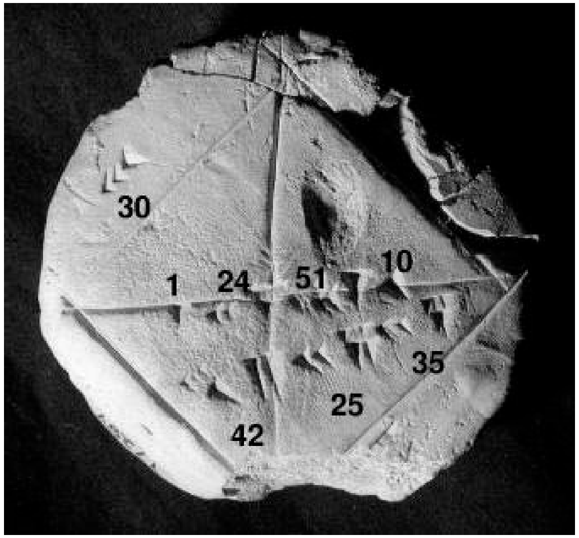
2022-2023年度第一学期 MATH2001.05

计算方法（A）



童 伟 华　管理科研楼1205室

E-mail: tongwh@ustc.edu.cn

中国科学技术大学　数学科学学院

http://math.ustc.edu.cn/

第三章　数值微分和数值积分

数值微分

- 函数 $f(x)$ 未知或非常复杂的情形下，如何求导数？
- 导数的逼近：差商

$$f'(x) = \lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$
$$= \lim_{h\to 0}\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$
$$= \lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

- 截断误差
- 步长的选取

数值微分

- **向前差商**

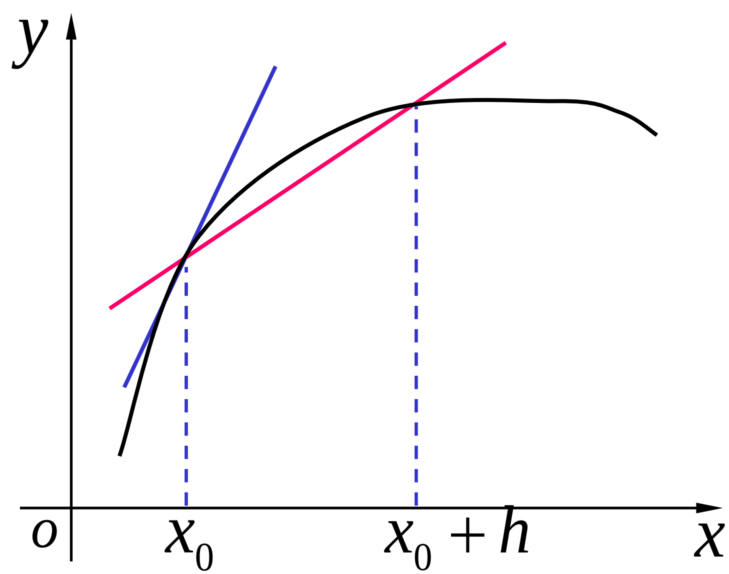
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

- **截断误差**

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

$$= -\frac{h}{2!} f''(\xi)$$

$$= O(h)$$



数值微分

- **向后差商**

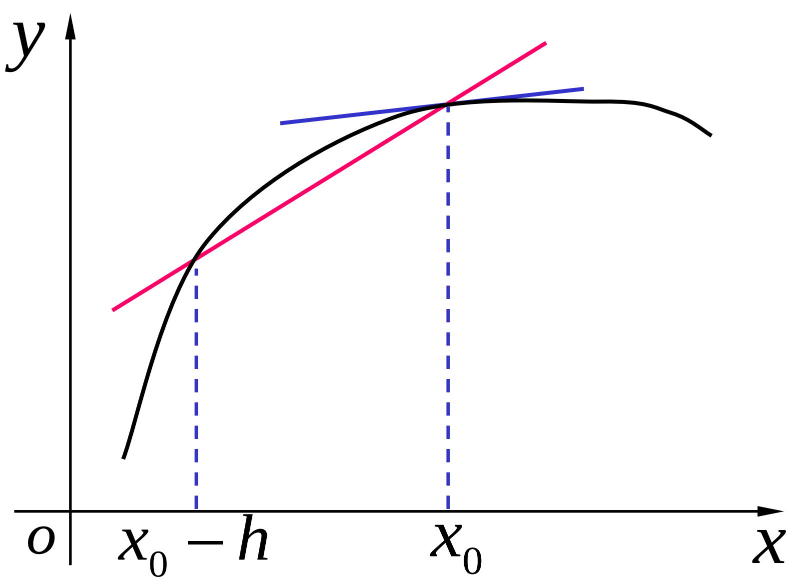
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

- **截断误差**

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

$$= \frac{h}{2!} f''(\xi)$$

$$= O(h)$$



数值微分

- **中心差商**

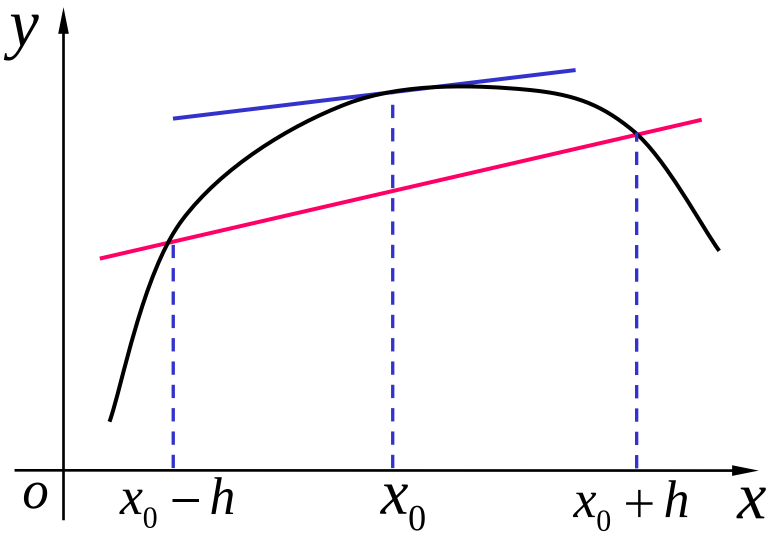
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

- **截断误差**

$$R(x) = f'(x_0) - \frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$$

$$= -\frac{h^2}{3!} f^{(3)}(\xi)$$

$$= O(h^2)$$



数值微分

- 如何设定步长？
- 理论估计
  - 截断误差：$h^2 \max|f^{(3)}(x)|/6 = h^2 M_3/6$
  - 舍入误差：e/h

$$\left.\begin{array}{l} h^2 \max|f^{(3)}(x)|/6 = h^2 M_3/6 \\ e/h \end{array}\right\} \Longrightarrow h = \sqrt[3]{\frac{3e}{M_3}}$$

- 事后估计
  - 设$D(h,x), D(h/2,x)$分别是取步长$h, h/2$的差商计算公式$f'(x)$，对于给定的误差界ε，则当

$$|D(h,x) - D(h/2,x)| < \varepsilon$$

时，步长h就是合适的步长h

数值微分

插值型数值微分

- 对于给定$f(x)$的函数表，建立插值函数$L(x)$，用插值函数$L(x)$的导数近似函数$f(x)$的导数

$$f(x) \approx L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x),$$

$$f'(x) \approx L_n'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x),$$

$$x = x_j,\ f'(x_j) \approx L_n'(x_j) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x_j).$$

- 误差估计公式

$$R(x) = \frac{d}{dx}\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right),$$

$$R(x_j) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{0 \le i \ne j \le n} (x_j - x_i).$$

数值微分

数值微分的三点公式

- 给定$\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0}^{2}$，并有$x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = h$，则

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f(x_2),$$

$$L'_2(x) = \frac{(x-x_1+x-x_2)}{2h^2} f(x_0) + \frac{(x-x_0+x-x_2)}{-h^2} f(x_1) + \frac{(x-x_0+x-x_1)}{2h^2} f(x_2),$$

$$\Downarrow$$

$$f'(x_0) \approx L'_2(x_0) = \frac{1}{2h}\big(-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\big) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi),$$

$$f'(x_1) \approx L'_2(x_1) = \frac{1}{2h}\big(-f(x_0) + f(x_2)\big) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi),$$

$$f'(x_2) \approx L'_2(x_2) = \frac{1}{2h}\big(f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\big) + \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

类似可得数值微分的五点公式

用其它插值函数方法类似，如三次样条函数插值

数值积分

- Newton-Leibniz公式，Green公式，Gauss公式，Stokes公式
- 很多积分无解析解，必须使用数值方式求解
- 从积分的定义出发

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx=\lim_{\Delta x_i\to 0}\left(\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\Delta x_i\right)$$

$$\approx\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i)=I_n(f)$$

  - 求积节点$\{x_i\}$
  - 求积系数$\{\alpha_i\}$

数值积分

- 代数精度：衡量数值积分公式优劣的重要指标之一
  - 设 $[a,b]$ 上以 $x_i,\ i=0,1,\ldots,n$ 为积分节点的数值积分公式为

$$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i f(x_i),$$

若 $I_n(f)$ 满足

$$I_n(x^i)=I(x^i),i=0,\cdots,k;$$

$$I_n(x^{k+1})\neq I(x^{k+1}),$$

则称 $I_n(f)$ 具有 k 阶代数精度

- 性质：当 $I_n(f)$ 具有 k 阶代数精度时，对任意不高于 k 次的多项式 $p(x)$，有 $I_n(p)=I(p)$

数值积分

- 插值型数值积分
  - 思想：用插值函数，譬如Lagrange插值函数，代替被积函数，进行积分

$$I(f) \approx I_n(f) = \int_a^b L_n(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i)dx = \sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b l_i(x)dx\right) f(x_i)$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$$

其中$\alpha_i = \int_a^b l_i(x)dx$

- 误差估计公式

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \int_a^b R_n(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_n(x)dx$$

- 代数精度
  - n次插值多项式形式的数值积分公式至少有n阶代数精度

数值积分

- Newton-Cotes积分：取等距节点
- 设节点步长 $h=\dfrac{b-a}{n}, x_i=a+ih, i=0,\cdots,n$，有

$$a_i=\int_a^b l_i(x)dx \overset{x=a+th}{=} \int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)}{i!(n-i)!(-1)^{n-i}}hdt$$

$$=nh\cdot\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt$$

$$=(b-a)\cdot C_i^{(n)}$$

其中 $C_i^{(n)}$ 为仅依赖于 n 的常量，可事先计算

- 性质：

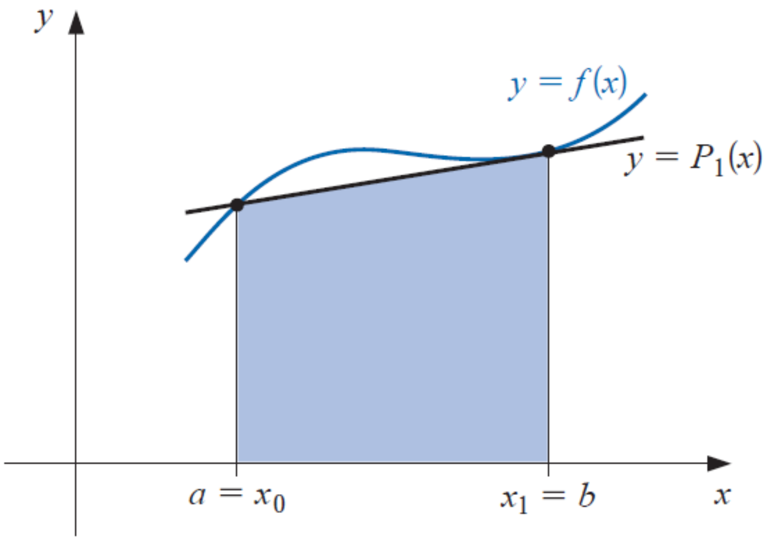
$$\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)}=1$$

数值积分

- **梯形积分：取 $n=1$**

$$C_0^{(1)} = -\int_0^1 (t-1)dt = \frac{1}{2},\quad C_1^{(1)} = \int_0^1 t\,dt = \frac{1}{2}$$

$$I_1(f) = (b-a)\left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$



- **性质：具有一阶代数精度**
- **误差估计公式**

$$E_1(f) = \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2!}(x-a)(x-b)dx = \frac{f''(\xi)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)dx$$

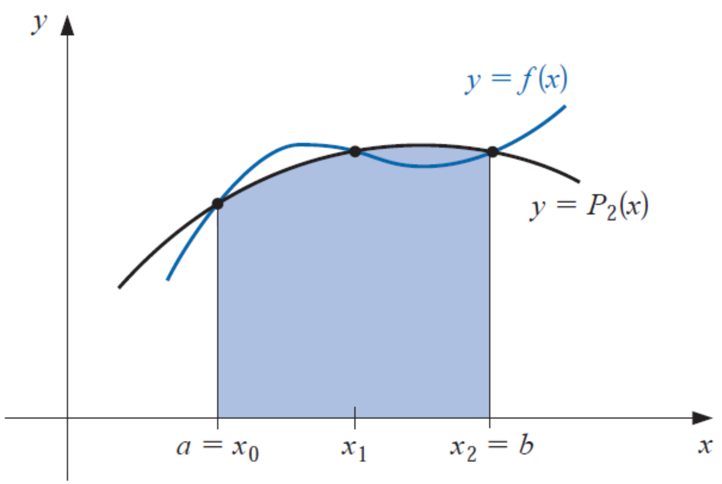
$$= \frac{-(b-a)^3}{12} f''(\xi),\quad \xi \in [a,b]$$

数值积分

- Simpson积分：取 $n=2$

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6},\ C_1^{(2)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6},\ C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}$$

$$I_2(f)=(b-a)\left[\frac{1}{6}f(a)+\frac{4}{6}f(\frac{b+a}{2})+\frac{1}{6}f(b)\right]$$



- 性质：具有三阶代数精度
- 误差估计公式

$$E_2(f)=I(f)-I_2(f)=I(f)-I(P_3)+I_2(P_3)-I_2(f)$$

$$=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi_x)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$$

$$=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$$

数值积分

- Newton-Cotes积分的误差估计公式
  - 当n为奇数时，$f \in C^{n+1}[a,b]$

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)d$$

  - 当n为偶数时，$f \in C^{n+2}[a,b]$

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b x(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)d$$

- 对于Newton-Cotes积分，奇数有n阶代数精度，偶数有$n+1$阶精度

数值积分

- Newton-Cotes积分系数表

n	$C_i^{(n)}$	ns	$E_n(f)$	Name
1	1 1	2	$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)$	Trapezoidal rule
2	1 4 1	6	$h^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$	Simpson's rule
3	1 3 3 1	8	$h^5 \frac{3}{80} f^{(4)}(\xi)$	3/8 rule
4	7 32 12 32 7	90	$h^7 \frac{8}{945} f^{(6)}(\xi)$	Milne's rule
5	19 75 50 50 75 19	288	$h^7 \frac{275}{12096} f^{(6)}(\xi)$	
6	41 216 27 272 27 216 41	840	$h^9 \frac{9}{1400} f^{(8)}(\xi)$	Weddle's rule

Table 2: Newton-Cotes formulas.

其中 $h = \dfrac{b-a}{n}$

复化数值积分

- 高阶Newton-Cotes积分：数值不稳定
- 解决方法：将积分区间分割为若干小区间，在每个小区间上进行数值积分（类似于分段插值的思想）
- 复化梯形积分：取等距节点 $h=\frac{b-a}{n}, x_i=a+ih, i=0,\cdots,n$

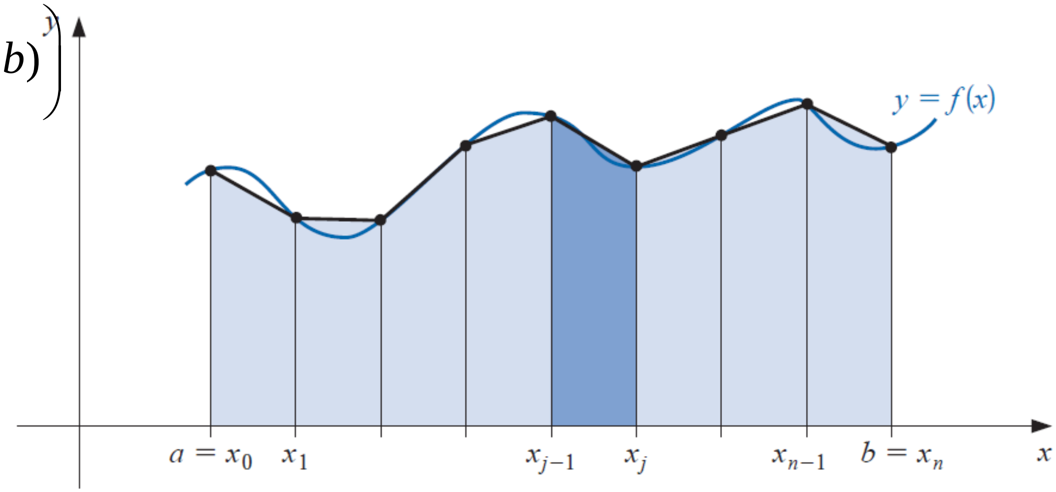
$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}(f(x_i)+f(x_{i+1}))-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)$$

$$I(f)=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{2}(f(x_i)+f(x_{i+1}))-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)\right\}=h\left(\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right)-\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)$$

$$T_n(f)=h\left(\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right)$$

$$E_n(f)=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi),\ a\le\xi\le b$$

- 收敛性：$O(h^2)$ 或 $O(\frac{1}{n^2})$



复化数值积分

- 复化Simpson积分：把积分区间分成偶数 $n=2m$ 等分，取等距节点 $h=\dfrac{b-a}{n},\ x_i=a+ih,\ i=0,\cdots,n$

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx=\frac{2h}{6}\left(f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})\right)-\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_i)$$

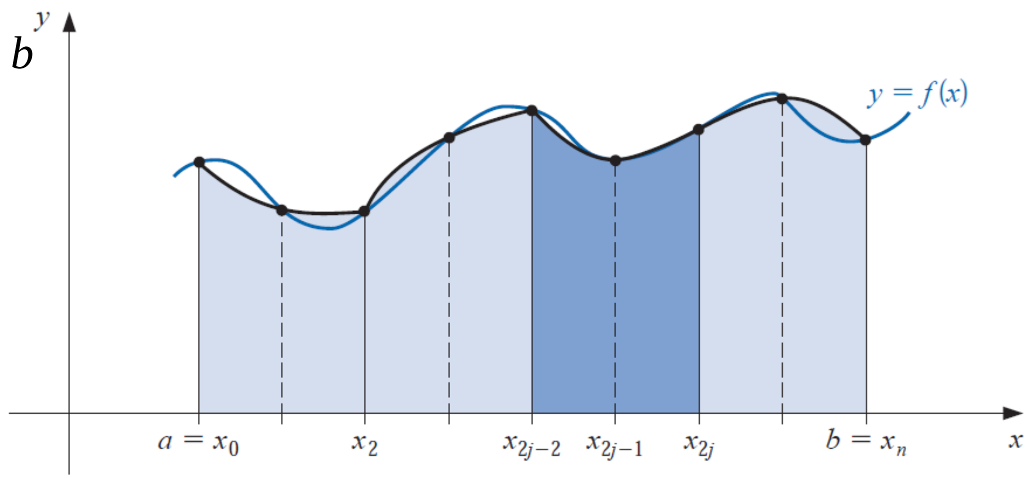
$$I(f)=\sum_{i=0}^{m-1}\left\{\frac{2h}{6}\left(f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2})\right)-\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_i)\right\}$$

$$=\frac{h}{3}\left(f(a)+4\sum_{i=0}^{m-1}f(x_{2i+1})+2\sum_{i=1}^{m-1}f(x_{2i})+f(b)\right)-\sum_{i=0}^{m-1}\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_i)$$

$$S_n(f)=\frac{h}{3}\left(f(a)+4\sum_{i=0}^{m-1}f(x_{2i+1})+2\sum_{i=1}^{m-1}f(x_{2i})+f(b)\right)$$

$$E_n(f)=-\frac{(b-a)^5}{180n^4}f^{(4)}(\xi),\ a\le\xi\le b$$

- 收敛性：$O(h^4)$ 或 $O(\dfrac{1}{n^4})$



复化数值积分

- 定义：若一个数值积分公式满足

$$\lim_{h\to 0}\frac{E(f)}{h^p}=C<\infty,\ C\neq 0,$$

则称该公式是 p 阶收敛的

- 性质：

$$T_n\sim O(h^2),\ S_n\sim O(h^4),\ C_n\sim O(h^6)$$

- 例：计算 $\pi=\int_0^1\frac{4}{1+x^2}dx$

$$T_8=\frac{1}{16}\left[f(0)+2\sum_{k=1}^{7}f(x_k)+f(1)\right]=3.138988494$$

$$S_4=\frac{1}{24}\left[f(0)+4\sum_{\text{odd}}f(x_k)+2\sum_{\text{even}}f(x_k)+f(1)\right]=3.141592502$$

运算量基本相同

复化数值积分

- 误差估计和控制
  - 先验估计：截断误差公式
  - 事后估计：递推关系
- 自动误差控制：依据事后误差估计，采取自适应的方式加密积分区间，使得在变化剧烈的地方取稠密的格点，而变化缓慢的地方取稀疏的格点

复化数值积分

- 递推关系：（复化梯形公式）
- 对区间 $[a,b]$ 进行 n 等分，$h_n=\dfrac{b-a}{n}$

$$T_n(f)=h_n\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right]$$

- 对每个区间 $[x_i,x_{i+1}]$ 进行细分，中点为 $x_{i+1/2}$，则有

$$T_{2n}(f)=\frac{h_n}{2}\left[\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right]+\frac{h_n}{2}\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+1/2})$$

$$=\frac{1}{2}[T_n(f)+H_n(f)]$$

其中 $H_n(f)=h_n\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+1/2})$

- 递推关系：（复化Simpson公式）

$$S_{2n}(f)=\frac{1}{6}[3S_n(f)+4H_{2n}(f)-H_n(f)]$$

复化数值积分

- 后验误差估计： （复化梯形公式）

$$\left.\begin{aligned} I(f)-T_n(f) &= -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\xi) \\ I(f)-T_{2n}(f) &= -\frac{(b-a)}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta) \end{aligned}\right\} \quad f''(\eta)\approx f''(\xi) \quad \Longrightarrow \quad I(f)-T_{2n}(f)\approx\frac{1}{3}\left(T_{2n}(f)-T_n(f)\right)$$

- 因此任给 $\varepsilon>0$，要使得 $|I(f)-T_{2n}(f)|<\varepsilon$，只需要

$$|T_{2n}(f)-T_n(f)|<3\varepsilon$$

- 后验误差估计： （复化Simpson公式）

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

复化数值积分

■ 自适应复化Simpson积分算法

Algorithm 4 Simpson's Adaptive Quadrature Algorithm

Input:

  $f(x)$, a, b, ε, N

$\Delta \leftarrow b-a$; $\Sigma \leftarrow 0$; $h \leftarrow \Delta/2$; $c \leftarrow (a+b)/2$; $k \leftarrow 1$;
$\overline{a} \leftarrow f(a)$; $\overline{b} \leftarrow f(b)$; $\overline{c} \leftarrow f(c)$;
$S \leftarrow (\overline{a}+4\overline{c}+\overline{b})h/3$;
$v^{(1)} \leftarrow [a, h, \overline{a}, \overline{c}, \overline{b}, S]$;
while $1 \le k \le N$ **do**
  $h \leftarrow v_2^{(k)}/2$;
  $\overline{y} \leftarrow f(v_1^{(k)}+h)$;
  $S^* \leftarrow (v_3^{(k)}+4\overline{y}+v_4^{(k)})h/3$;
  $\overline{z} \leftarrow f(v_1^{(k)}+3h)$;
  $S^{**} \leftarrow (v_4^{(k)}+4\overline{z}+v_5^{(k)})h/3$;
  if $|S^*+S^{**}-v_6^{(k)}| < 30\varepsilon h/\Delta$ **then**
    $\Sigma \leftarrow \Sigma + S^* + S^{**} + [S^*+S^{**}-v_6^{(k)}]/15$;
    $k \leftarrow k-1$;
    if $k \le 0$ **then**
      output Σ;
      return true
    end if
  else
    if $k \ge N$ **then**
      output failure;
      return false
    else
      $\overline{v} \leftarrow v_5^{(k)}$;
      $v^k \leftarrow [v_1^{(k)}, h, v_3^{(k)}, \overline{y}, v_4^{(k)}, S^*]$;
      $k \leftarrow k+1$;
      $v^k \leftarrow [v_1^{(k-1)}+2h, h, v_5^{(k-1)}, \overline{z}, \overline{v}, S^{**}]$;
    end if
  end if
end while

Output:

  Σ

复化数值积分

- 外推算法：在不显著增加计算量的前提下提高数值计算结果精度的技巧，是数值计算方法典型的技巧
- Romberg积分公式

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

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

- 效果：利用外推技巧，将梯形积分求积公式组合成Simpson求积公式，截断误差由$O(h^2)$降低到$O(h^4)$
- 类似地有

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

$$I(f)\approx C_{2n}(f)+\frac{1}{63}(C_{2n}(f)-C_n(f))=\frac{64}{63}C_{2n}(f)-\frac{1}{63}C_n(f)=R_{2n}(f)$$

复化数值积分

- （Richardson Extrapolation）若有数值逼近格式具有形式 $I(f)=I^{(m)}(h)+C_m h^{2m}+C_{m+1}h^{2m+2}+\cdots=I^{(m)}(h)+O(h^{2m})$，即为 $2m$ 阶公式，则

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

- Romberg积分计算公式

$$R_{k,j}=R_{k,j-1}+\frac{R_{k,j-1}-R_{k-1,j-1}}{4^{j-1}-1},\ j=2,\ldots,k,\ k=2,3,\ldots$$

- （收敛性）若 $f(x)\in C[a,b]$，则对任意固定的 m

$$\lim_{n\to\infty}R(n,m)=\int_a^b f(x)dx \text{ 及 } \lim_{n\to\infty}R(n,n)=\int_a^b f(x)dx$$

复化数值积分

- **Romberg积分算法**

Algorithm 5 Romberg Algorithm

Input:

$f(x)$, a, b, M

$h \leftarrow b - a$;

$R(0,0) \leftarrow \frac{1}{2}(b-a)[f(a)+f(b)]$;

for $n = 1$ to M **do**

  $h \leftarrow h/2$;

  $R(n,0) \leftarrow \frac{1}{2}R(n-1,0) + h\sum_{i=1}^{2n-1} f(a+(2i-1)h)$;

  for $m = 1$ to n **do**

    $R(n,m) \leftarrow R(n,m-1) + [R(n,m-1) - R(n-1,m-1)]/(4^m - 1)$;

  end for

end for

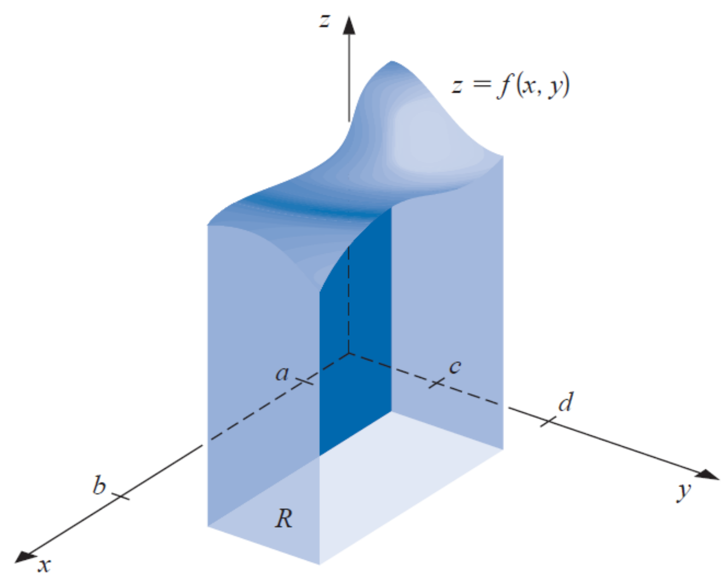
Output:

$R(n,m)\ (0 \geq n \leq M, 0 \geq m \leq n)$

重积分的计算

- 重积分：化为累次积分进行计算
- 积分区域逼近：非矩形区域可用一系列矩形区域进行逼近
- 矩形区域上的二重积分：若 $f(x)\in C([a,b]\times[c,d])$，则

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



重积分的计算

- **二重积分的复化梯形公式**
- **将区间$[a,b]$和$[c,d]$分别进行m和n等分，记**$h=\dfrac{b-a}{m},\ k=\dfrac{d-c}{n}$

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

$$=h\sum_{j=1}^{n-1}\left(\frac{1}{2}f(x_0,y_j)+\frac{1}{2}f(x_m,y_j)\right)+h\sum_{j=1}^{n-1}\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_j)$$

$$\Rightarrow \int_a^b\int_c^d f(x,y)dxdy \approx hk\{\frac{1}{4}\left(f(x_0,y_0)+f(x_0,y_n)+f(x_m,y_0)+f(x_m,y_0)\right)$$

$$+\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_0)+\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_n)+\sum_{j=1}^{n-1}f(x_0,y_j)+\sum_{j=1}^{n-1}f(x_m,y_j)\right)+\sum_{j=1}^{n-1}\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i,y_j)\}$$

$$=hk\sum_{j=0}^{n}\sum_{i=0}^{m}c_{i,j}f(x_i,y_j)$$ 角点:1/4，内部边界点1/2，内部点:1

- **误差估计公式：**

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

重积分的计算

- 二重积分的复化Simpson公式

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

其中 $\omega_{i,j} = u_i \cdot v_j$, $U = \{u_0, u_1, \cdots, u_m\} = \left\{\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \cdots, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{1}{3}\right\}^T$,

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

- 误差估计公式

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

Gauss型积分

- 对于Newton-Cotes积分，奇数有 n 阶代数精度，偶数有 $n+1$ 阶精度
- 如果放弃等距节点的要求，是否能建立更有高精度的公式?
- 例：取区间 $[-1,1]$，考虑两点数值积分格式，将积分点视为未知量，则有

$$\begin{cases} a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot 1 = \int_{-1}^{1} 1 dx = 2 \\ a_0 \cdot x_0 + a_1 \cdot x_1 = \int_{-1}^{1} x dx = 0 \\ a_0 \cdot x_0^2 + a_1 \cdot x_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2 dx = \dfrac{2}{3} \\ a_0 \cdot x_0^3 + a_1 \cdot x_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3 dx = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_0 = 1 \\ a_1 = 1 \\ x_0 = -\dfrac{1}{\sqrt{3}} \\ x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

不难验证数值积分公式 $\int_{-1}^{1} f dx = f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$ 具有三阶代数精度

Gauss型积分

- 定理：设 $I(f)=\int_a^b f(x)dx$ 关于积分节点 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的数值积分公式为 $I_n(f)=\sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$，则 $I_n(f)$ 的代数精度不超过 $2n-1$ 阶

  证明：取多项式 $p(x)=(x-x_1)^2(x-x_2)^2\cdots(x-x_n)^2=\omega_n^2(x)$

  易知 $I(p(x))>0$ 及 $I_n(p(x))=0$

  故数值积分公式 $I_n(f)$ 的代数精度不可能达到 $2n$ 阶

- 如何构造最高阶（$2n-1$）精度的公式?
- Gauss型积分：取一组特殊的积分节点（正交函数的零点）

Gauss型积分

- **定义：给定一般形式的积分和内积**

$$I(f)=\int_a^b W(x)f(x)dx,\ W(x)\geq 0,$$

$$<f,g>=\int_a^b W(x)f(x)g(x)dx$$

其中$W(x)$为权函数．若$<f,g>=0$，则称函数f与g正交

- **如何将线性函数空间的一组基变为一组正交基?**
- **利用Schmidt正交化过程：**

$$\begin{cases} g_1(x)=f_1(x) \\ \quad\vdots \\ g_n(x)=f_n(x)-\sum_{i=1}^{n-1}\dfrac{(f_n(x),g_i(x))}{(g_i(x),g_i(x))}g_i(x) \end{cases}$$

Gauss型积分

- 定理：以 n 次正交多项式的 n 个零点为积分的数值积分公式有 $2n-1$ 阶代数精度
- 证明：设 n 次正交多项式 $p_n(x)$ 的 n 个零点为 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，

  记 $G_n(f)=\int_a^b L_n(x)W(x)dx=\sum_{i=1}^{n}\left(\int_a^b l_i(x)W(x)dx\right)f(x_i)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i f(x_i)$,

  则有

$$E(f)=I(f)-G_n(f)=\int_a^b f[x_1,x_2,\cdots,x_n,x]\omega_n(x)W(x)dx$$

  对于任意的 $p(x)\in P_{2n-1}(x)$，利用多项式带余除法得

$$p(x)=s(x)p_n(x)+r(x),\ s(x),r(x)\in P_{n-1}(x),$$

  故 $\int_a^b p(x)W(x)dx=\int_a^b [s(x)p_n(x)+r(x)]W(x)dx=\int_a^b r(x)W(x)dx.$

  因此 $E(p)=I(p)-G_n(p)=I(r)-G_n(r)=E(r)=0$

- 收敛性：若 $f(x)\in C[a,b]$，则 $\lim_{n\to\infty} G_n(f)=I(f)$

仅理论上可行，因为求n次正交多项式的所有零点是非常困难的！

Gauss型积分

Gauss型求积公式的构造方法

- 求出区间$[a,b]$上权函数为$W(x)$的正交多项式$p_n(x)$；
- 求出$p_n(x)$的n个零点$x_1, x_2, \ldots, x_n$即为Gauss积分点；
- 计算积分系数α_i；

例：求积分$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx$的两点Gauss积分公式

$$p_0(x)=1$$

$$p_1(x)=x-\frac{(x, p_0(x))}{(p_0(x), p_0(x))}p_0(x)$$

$$p_2(x)=x^2-\frac{(x^2, p_0(x))}{(p_0(x), p_0(x))}p_0(x)-\frac{(x^2, p_1(x))}{(p_1(x), p_1(x))}p_1(x)$$

$$=x^2-\frac{\int_{-1}^{1}x^4dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}-\frac{\int_{-1}^{1}x^5dx}{\int_{-1}^{1}x^4dx}x=x^2-\frac{3}{5}$$

Gauss型积分

$p_2(x)$ 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积分公式为

$$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx \approx \tfrac{1}{3}[f(-\sqrt{\tfrac{3}{5}}) + f(\sqrt{\tfrac{3}{5}})]$$

Gauss型积分

■ 几种Gauss型求积公式

- Gauss-Legendre求积公式：区间 $[a,b]=[-1,1], W(x)=1$
- Gauss-Laguerre求积公式：区间 $[a,b]=[0,+\infty), W(x)=e^{-x}$
- Gauss-Hermite求积公式：区间 $[a,b]=(-\infty,+\infty), W(x)=e^{-x^2}$

■ 一般区间上的积分

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

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

■ 误差估计公式：若 $f(x)\in C^{2n}[a,b]$，则

$$E_n(f)=I(f)-G_n(f)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b \omega^2(x)W(x)dx,\ a<\xi<b$$

Gauss型积分

- Gauss-Legendre积分节点与系数表

n	x_k	A_k
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
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

Gauss型积分

- Gauss-Laguerre积分节点与系数表

n	x_k	A_k
2	0.5858864376	0.8535533905
	3.4142135623	0.1464466094
3	0.4157745567	0.7110930099
	2.2942803602	0.2785177335
	6.2899450829	0.0103892565
4	0.3225476896	0.6031541043
	1.7457611011	0.3574186924
	4.5366202969	0.0388879085
	9.3950709123	0.0005392947

n	x_k	A_k
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型积分

- Gauss-Hermite积分节点与系数表

n	x_k	A_k
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_k	A_k
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