数值分析

— 科学与工程计算基础

任课教师：黄忠亿

清华大学数学科学系

目录 I

目录 II

引言

虽然由**Newton-Leibniz**公式: 假设 $F(x)$ 为 $f(x)$ 的一个原函数, 那么有

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a).$$

但是我们知道, 即便 f 是一个简单函数, 其原函数也很难有初等函数来表达. 仅有极少数的简单函数的原函数可以写成初等函数.

另外, 实际问题中许多情形 $f(x)$ 的表达式并不清楚, 我们一般只知道函数 f 的一个列表. 因而也无法确定 F 的表达式.

综上所述, 我们有必要研究如何利用 f 的一张列表来计算上述定积分.

几个例子

例 8.1 (卫星轨道的长度)

人造地球卫星轨道可以视为一个椭圆. 我国第一颗人造地球卫星近地点距地表439公里, 远地点距地表2384公里, 地球半径为6371公里. 求该卫星的轨道长度.

卫星轨道椭圆的参数方程可以写成 $x = a\cos\theta,\ y = b\sin\theta$, $(0 \le \theta \le 2\pi)$. a, b 分别是长、短半轴. 根据弧长计算公式, 椭圆长度可以表示为如下积分

$$L = 4\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{a^2\sin^2\theta + b^2\cos^2\theta}d\theta,$$

为第二类椭圆积分, 它无法得到简单解析表达式.

我们必须使用数值积分方法来求得其值.

几个例子

例 8.2 (人口增长率)

已知20世纪部分美国人口统计数据如下, 试计算这些年份的人口增长率.

Table 1: 20世纪美国人口统计数据

年份	1900	1910	1920	1930	1940	1950	1960	1970	1980	1990
人口($\times 10^6$)	76.0	92.0	106.5	123.2	131.7	150.7	179.3	204.0	226.5	251.4

又已知某地区20世纪70年代的人口增长率如下表, 且1970年人口为 210 (百万), 试估计1980年的人口数.

Table 2: 某地区20世纪70年代人口增长率数据

年份	1970	1972	1974	1976	1978	1980
年增长率(%)	0.87	0.85	0.89	0.91	0.95	1.10

在建立一个人口模型后, 由于我们仅有一些离散数据, 我们需要用数值微分和数值积分的办法来求解.

数值积分的基本概念—求积公式

更一般地，我们通常需要计算 $\int_a^b \rho(x) f(x) dx$, 这里 $\rho(x)$ 为一权函数. 通常我们仅知道 f 的一些函数值 $\{f(x_k)\}_{k=0}^n$, 我们自然希望用公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \tag{8.1}$$

来近似计算积分值. 这里 $\{x_k\}_{k=0}^n \subset [a, b]$ 称为求积节点, A_k 称为求积系数.

$$E_n(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$ 称为求积公式(8.1) 的误差.

数值积分的基本概念—代数精度

由Weistrass引理可知，若 $f \in C[a,b]$, 我们可以用多项式任意逼近 f. 因此我们可以用使得求积公式准确成立的多项式阶数来定义求积公式的精度:

定义 8.1 (代数精度)

若 $E_n(x^m) = 0$, 对 $m = 0, 1, \cdots, M$ 都成立, 则称求积公式(8.1)至少具有 M 次代数精度. 如果 $E_n(x^{M+1}) \neq 0$, 则称公式 (8.1) 的代数精度就是 M.

利用代数精度的概念, 可以确定求积公式中的系数和节点.

对前m次多项式没有截断误差

数值积分的基本概念—代数精度

例 8.3 (确定公式 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 2f(0)$ 的代数精度)

解: 因为 $\int_{-1}^{1} 1dx = 2 = 2 \cdot 1$, $\int_{-1}^{1} xdx = 0 = 2 \cdot x|_{x=0}$,

$\int_{-1}^{1} x^2dx = \dfrac{2}{3} \neq 2 \cdot x^2|_{x=0} = 0$, 因此该公式代数精度为*1.* □

例 8.4 (设 $\int_{0}^{1} f(x)dx \approx c_0 f(0) + c_1 f(x_1)$)

试确定 x_1 与 c_0, c_1 以使得代数精度尽可能高.

解: 取 $f = 1$, $\int_{0}^{1} f(x)dx = 1 = c_0 + c_1$.

数值积分的基本概念—代数精度

取 $f=x$, $\int_0^1 f(x)dx=\frac{1}{2}=c_0\cdot 0+c_1\cdot x_1=c_1x_1$.

取 $f=x^2$, $\int_0^1 f(x)dx=\frac{1}{3}=c_0\cdot 0+c_1\cdot x_1^2=c_1x_1^2$.

求解上述三个方程的非线性方程组，可得

$$x_1=\frac{2}{3},\quad c_0=\frac{1}{4},\quad c_1=\frac{3}{4}.$$

即求积公式为 $\int_0^1 f(x)\approx\frac{1}{4}f(0)+\frac{3}{4}f\left(\frac{2}{3}\right)$.

再取 $f=x^3$, $\int_0^1 f(x)dx=\frac{1}{4}\neq c_0\cdot 0+c_1\cdot x_1^3=\frac{3}{4}\left(\frac{2}{3}\right)^2=\frac{2}{9}$.

即该公式代数精度就是2. $\square$

数值积分的基本概念—插值型求积公式

一种常用的求积公式就是利用 $f(x)$ 在节点 $\{x_k\}_{k=0}^n$ 上的插值函数来构造. 设

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x), \quad l_k(x) = \prod_{k\neq j=0}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}.$$

记插值误差为 $R_n(x) = f(x) - L_n(x)$, 我们有

$$\begin{aligned} \int_a^b \rho(x) f(x) dx &= \int_a^b \rho(x) L_n(x) dx + \int_a^b \rho(x) R_n(x) dx \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx + \int_a^b \rho(x) R_n(x) dx. \end{aligned}$$

令 $A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx$ $(0 \le k \le n)$, $E_n(f) = \int_a^b \rho(x) R_n(x) dx$, 有

数值积分的基本概念—插值型求积公式

(8.2) $$\int_a^b \rho(x)f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + E_n(f)$$

此类型求积公式称为插值型求积公式. 假设 $f \in C^{(n+1)}[a,b]$, 我们有 $R_n(x) = f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$, 其中 $\omega_{n+1}(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$. 代入上面可得

$$\begin{aligned} E_n(f) &= \int_a^b \rho(x)f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x)dx \\ &= \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b \rho(x)f^{(n+1)}(\xi_x)\omega_{n+1}(x)dx. \end{aligned}$$

数值积分的基本概念—插值型求积公式

由上式也可立即得到，插值型求积公式的代数精度至少为 n (因为若 $f \equiv p_n(x) \Longrightarrow f^{(n+1)} \equiv 0 \Longrightarrow E_n(f) = 0$)

反过来, 若想求积公式 (8.1) 的代数精度至少为 n, 那么它也必然是插值型的:

$\triangleleft$ 因为 $l_k(x)$ 均为 n 次多项式, $k = 0, \cdots, n$.

如果 (8.1) 的代数精度至少为 n, 那么应该 $E_n(l_k) = 0$, 即

$$\int_a^b \rho(x) l_k(x) dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_k(x_j) = A_k, \quad k = 0, \cdots, n$$

这说明求积系数 $A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx \Longrightarrow$ (8.1) 为插值型公式. $\triangleright$

求积公式的收敛性与稳定性

定义 8.2 (收敛性)

在求积公式 (8.1) 中, 设 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, 如果令 $h = \max\limits_{1\le k\le n}(x_k - x_{k-1})$, 如果有

$$\lim_{h\to 0}\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b \rho(x) f(x)dx,$$

则称 (8.1) 是收敛的.

一般来说, 计算函数值 $f(x_k)$ 及其求和都有可能带来舍入误差, 因此实际计算值为 $\widetilde{f}_k = f(x_k) + \delta_k$,

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \text{ 的实际计算值为 } \widetilde{I}_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k \widetilde{f}_k.$$

我们自然希望 $|\delta_k|$ 小时, $|I_n(f) - \widetilde{I}_n(f)|$ 也是小量:

求积公式的收敛性与稳定性

定义 8.3 (稳定性)

若 $\forall\varepsilon>0, \exists\delta>0$, s.t. $|f(x_k)-\widetilde{f}_k|=|\delta_k|\le\delta$ $(k=0,\cdots,n)$ 时, 有 $|I_n(f)-\widetilde{I}_n(f)|\le\varepsilon$, 则称求积公式 (8.1) 是稳定的.

函数值变化较小的时候积分变化也较小

定义 8.4 (相容性)

若公式(8.1)对于 $f\equiv1$ 是准确成立的, 则称 (8.1) 是相容的, 即

$$\int_a^b\rho(x)dx=\sum_{k=0}^{n}A_k.$$

至少0阶代数精度

我们有以下前关于两个定义的关系的定理:

定理 8.1

如果求积公式 (8.1) 是相容的, 且 $A_k>0$, 则它是稳定的.

求积公式的收敛性与稳定性

$\lhd$ $\forall \varepsilon > 0$, 令 $\delta = \varepsilon / C$, 其中 $C = \int_a^b \rho(x)dx \overset{\text{相容性}}{=} \sum_{k=0}^{n} A_k$.

当 $|f(x_k) - \tilde{f}_k| = |\delta_k| \le \delta$ ($k = 0, \cdots, n$) 时,

$$\begin{aligned} |I_n(f) - \tilde{I}_n(f)| &= \left| \sum_{k=0}^{n} A_k (f_k - \tilde{f}_k) \right| \overset{A_k>0}{\le} \sum_{k=0}^{n} A_k |f_k - \tilde{f}_k| \\ &\le \sum_{k=0}^{n} A_k \delta = \delta C = \varepsilon. \end{aligned}$$

即证明了稳定性成立. $\rhd$

例如例2中的两点积分公式是稳定的插值型公式, 其代数精度为 $2 \ge n = 1$, 求积系数 $A_k > 0$.

目录 I

目录 II

Newton-Cotes公式

最简单的插值型公式即为等距节点得到的公式 — 称之为 **Newton-Cotes 型公式.**

将区间 $[a,b]$ n 等分: $h=\frac{b-a}{n}$, $x_j=a+jh$, $j=0,\cdots,n$.

得到插值函数

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)l_k(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\prod_{j\neq k}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}.$$

取 $\rho(x)\equiv 1$, 对 $x\in[a,b]$ 做坐标变换 $x=a+th$, 有 $t\in[0,n]$,

$$L_n(x)\equiv L_n(t)=\sum_{k=0}^{n} f_k\prod_{j\neq k}\frac{t-j}{k-j}.$$

这样积分 $I(f)=\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b L_n(x)dx$.

Newton-Cotes公式

$$\int_a^b L_n(x)dx = \sum_{k=0}^{n} f_k \int_a^b l_k(x)dx \overset{x=a+th}{=} \sum_{k=0}^{n} \int_0^n f_k \left(\prod_{j\neq k} \frac{t-j}{k-j} \right) hdt$$

(注意$h=(b-a)/n$) $$\equiv (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f_k.$$

其中求积系数

$$c_k^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{j\neq k} \frac{t-j}{k-j} dt = \frac{1}{n}\frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j\neq k}(t-j)dt.$$

称 与函数、区间都没有关系了

(8.3) $$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f(x_k)$$

为 n 阶 **Newton-Cotes** 求积公式， $c_k^{(n)}$ **(**$k=0,\cdots,n$**)** 称为 n 阶 **Cotes** 系数.

Newton-Cotes公式

从上面的定义可以看出, $c_k^{(n)}$ 与 f, a, b 无关, 只与 n, k 有关, 且 $\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} = 1$. (这由 $1 = \sum_{k=0}^{n} l_k(x)$ 及 $c_k^{(n)} = \frac{1}{b-a}\int_a^b l_k(x)dx$ 得到.)

常用公式:

1. $n = 1$, 称为梯形公式:
$$I(f) \approx I_1(f) = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)].$$
2. $n = 2$, 称为 Simpson 公式:
$$I(f) \approx I_2(f) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

Newton-Cotes公式的误差分析

利用插值余项公式 $f(x) = L_n(x) + R_n(x)$**, 其中**

$$R_n(x) = f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) \equiv f[x, x_0, \cdots, x_n]\prod_{k=0}^{n}(x - x_k),$$ **得**

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)dx = I_n(f) + E_n(f) \\ &\equiv (b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} f_k + \int_a^b f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x)dx. \end{aligned}$$

即求积公式误差为 $E_n(f) = \int_a^b f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x)dx$**.**

Newton-Cotes公式的误差分析

特别, $n=1$ **时**, $E_1(f) = \int_a^b f[x,a,b](x-a)(x-b)dx \overset{\text{积分中值定理}}{=}$

$f[\eta,a,b]\int_a^b (x-a)(x-b)dx = \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!}(-\frac{(b-a)^3}{6}) = -\frac{(b-a)^3}{12}f^{(2)}(\xi)$.

$n=2$ **时**, $E_2(f) = \int_a^b f[x,x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)dx$.

令 $q(x) = \int_a^x \omega_3(x)dx = \frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}$, **即** $q'(x) = \omega_3(x)$.

这样 $E_2(f) = \int_a^b f[x,x_0,x_1,x_2]q'(x)dx \overset{\text{分部积分}}{=} f[x,x_0,x_1,x_2]q(x)\Big|_a^b$

$-\int_a^b q(x)f[x,x,x_0,x_1,x_2]dx = -\int_a^b q(x)f[x,x,x_0,x_1,x_2]dx$

$\overset{\text{积分中值定理}}{=} f[\eta,\eta,x_0,x_1,x_2]\int_a^b q(x)dx = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$.

Newton-Cotes公式的误差分析

从上面的误差分析可以看出, $n=1$ 时的 **Newton-Cotes** 公式(即梯形公式)的代数精度为 **1.** $n=2$ 时的 **Newton-Cotes** 公式(即 **Simpson** 公式)的代数精度为 **3.**

事实上我们有以下定理:

定理 8.2

n 阶 *Newton-Cotes* 型求积公式 (由于其为插值型公式) 代数精度至少为 n. 当 $n=2m$ 为偶数时, 其代数精度为 $n+1=2m+1$.

$\triangleleft$ 这里仅需对偶数情形证明即可. 与上面 **Simpson** 公式情形类似，通过坐标变换及节点对称性可以证明 $E_{2m}(p_{2m+1})=0$:

设 $p_{2m+1}(x)=\displaystyle\sum_{k=0}^{2m+1} a_k x^k$, 代入误差 $E_{2m}(f)$ 的表达式中得

Newton-Cotes公式的误差分析

$$E_{2m}(p_{2m+1}) = \int_a^b p_{2m+1}[x, x_0, \cdots, x_{2m}]\omega_{2m+1}(x)dx$$

$$= \int_a^b \frac{p_{2m+1}^{(2m+1)}(\xi_x)}{(2m+1)!}\omega_{2m+1}(x)dx = a_{2m+1}\int_a^b \omega_{2m+1}(x)dx$$

令 $c = \frac{a+b}{2}$, $h = \frac{b-a}{2m}$, $x_k = a + kh$, 有 $x_{m+1} = c$, 且

$$\omega_{2m+1}(x) = (x-c)\prod_{j=1}^{m}[(x-c-jh)(x-c+jh)] = (x-c)\prod_{j=1}^{m}[(x-c)^2 - j^2h^2]$$

令 $\mu = x - c$, $\delta = \frac{b-a}{2}$, 有

$$E_{2m}(p_{2m+1}) = a_{2m+1}\int_{-\delta}^{\delta}\mu\prod_{j=1}^{m}[\mu^2 - j^2h^2]d\mu = 0. \triangleright$$

这说明一般用偶数阶的 **Newton-Cotes** 公式会更好.

Newton-Cotes公式的误差分析

利用上面定理的思路还可以证明以下定理

定理 8.3 (Newton-Cotes 求积公式的误差估计)

对于 n 阶 Newton-Cotes 求积公式 (8.3), 我们有以下误差估计

1. 对于 n 为偶数时, 假设 $f \in C^{(n+2)}[a,b]$, 那么有

$$E_n(f) = \frac{C_n f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}, \quad \xi \in (a,b), \; C_n = \int_a^b x\omega_{n+1}(x)dx \tag{8.4}$$

2. 对于 n 为奇数时, 假设 $f \in C^{(n+1)}[a,b]$, 那么有

$$E_n(f) = \frac{D_n f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}, \quad \eta \in (a,b), \; D_n = \int_a^b \omega_{n+1}(x)dx \tag{8.5}$$

Newton-Cotes公式的误差分析

进一步考虑剖分情况: 设 $h = \frac{b-a}{n}$, **并令**

$$\pi_0(t) = t, \quad \pi_n(t) = t(t-1)\cdots(t-n),$$ **有以下推论**

推论 8.1 (等距网格下的误差估计)

1. 对于 n 为偶数时, 假设 $f \in C^{(n+2)}[a,b]$, 那么有

(8.6)
$$E_n(f) = \frac{M_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}, \quad \xi \in (a,b), \quad M_n = \int_0^n t\pi_n(t)dt$$

2. 对于 n 为奇数时, 假设 $f \in C^{(n+1)}[a,b]$, 那么有

(8.7)
$$E_n(f) = \frac{M_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}, \quad \eta \in (a,b), \quad M_n = \int_0^n \pi_n(t)dt$$

Newton-Cotes公式的误差分析

例 8.5

用*Newton-Cotes*型公式计算 $I(f) = \int_{1.1}^{1.5} e^x dx = 1.477523046\cdots$

解: $n=1$ **梯形公式:** $I_1(f) = \frac{0.4}{2}[e^{1.1} + e^{1.5}] \doteq 1.497171\cdots$

误差为 $|E_1(f)| \leq \frac{(0.4)^3}{12} e^{1.5} = 2.39 \times 10^{-2}$ **(实际为** 1.9648×10^{-2}**)**

$n=2$ **Simpson 公式:** $I_2(f) = \frac{0.4}{6}[e^{1.1} + 4e^{1.3} + e^{1.5}] \doteq 1.477536\cdots$

误差为 $|E_2(f)| \leq \frac{(0.4)^5}{2880} e^{1.5} = 1.59 \times 10^{-5}$ **(实际为** 1.31×10^{-5}**)**

$n=3$**:** $I_3(f) = \frac{0.4}{8}[e^{1.1} + 3e^{3.7/3} + 3e^{4.1/3} + e^{1.5}] \doteq 1.477528859\cdots$

(实际误差为 5.8×10^{-6}**)**

由此看出, $n=2$ 比 $n=1$ 的误差少了三个量级, 但 $n=3$ 比 $n=2$ 的误差仅少了一半. □

Newton-Cotes公式的稳定性分析

从前面已知的 “等距节点高次插值的不稳定性(即 **Runge** 现象)” 可知, n 很大的 **Newton-Cotes** 型求积公式也会不稳定!

事实上, $n \geq 8$ 时, 求积系数 $c_k^{(n)}$ 就会出现负值, 不满足稳定性条件, 因此一般不采用.

因为利用 $\sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} = 1$ 知, 虽然每个函数值 $f(x_k)$ 的误差较小, 但是由于系数有正有负, 所以其和可能把误差放大!

$n \leq 7$ 时都有 $c_k^{(n)} > 0$, 利用前面的稳定性定理可知, 此时 **Newton-Cotes** 公式是稳定的.

目录 I

目录 II

复化(合)求积公式

考虑一个定积分

$$\int_{0.5}^{5} \sin\frac{1}{x}dx \approx 2.00388436\cdots$$

如果用梯形公式计算

$$I_1(f) = \frac{4.5}{2}(\sin 2 + \sin 0.2) = 2.4929\cdots$$

如果用**Simpson**公式计算

$$I_2(f) = \frac{4.5}{6}(\sin 2 + 4\sin\frac{1}{2.75} + \sin 0.2) = 1.8980\cdots$$

误差显然还比较大！要想求得更精确的近似值, 需要用高阶的格式. 但我们知道很高阶的 **Newton-Cotes** 公式是不稳定的。

复化梯形公式

为了克服这个缺点, 很自然的想法就是采用分段低次插值来近似计算积分, 这样就得到所谓的复化求积公式.

首先将区间 $[a,b]$ 分成 n 个小区间: $x_j = a + jh$, $j = 0, \cdots, n$, $h = \frac{b-a}{n}$. 然后在每个小区间上使用梯形公式, 即:

$$I(f) = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} \frac{h}{2}[f(x_{j-1}) + f(x_j)]$$

$$= \frac{h}{2}[f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j)] \equiv T_n.$$

此即复化梯形公式.

复化梯形公式

从公式直接看出其稳定性自然满足！ 下面看其精度:

由前面的估计式, $\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_{j-1}) + f(x_j)] - \frac{h^3}{12}f''(\xi_j)$,

其中 $\xi_j \in (x_{j-1}, x_j) \Longrightarrow I(f) = T_n - \frac{h^3}{12}\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j)$.

再利用 $b-a=nh$, 以及假设 $f \in C^{(2)}[a,b]$, 得

$$E_n(f) = I(f) - T_n = -\frac{(b-a)h^2}{12}\left[\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} f''(\xi_j)\right] = -\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta)$$

其中 $\eta \in (a,b)$.

这说明复化梯形公式二阶收敛, 且 $h \to 0 \Longrightarrow T_n \rightrightarrows I(f)$.

复化梯形公式

事实上，只要 $f \in C[a,b]$, 由复化梯形公式定义

$$T_n = \frac{1}{2}\frac{b-a}{n}\left[\sum_{j=1}^{n} f(x_j) + \sum_{j=0}^{n-1} f(x_j)\right] \xrightarrow[n\to\infty]{\text{积分定义}} I(f) = \int_a^b f(x)dx$$

这和“分段线性插值函数在 $f \in C[a,b]$ 时一致收敛”是一致的.

如果 T_n 精度不够时，我们可以缩小步长 $h \to \frac{h}{2}$, $T_n \to T_{2n}$:

$$T_{2n} = \frac{h}{4}\sum_{i=1}^{n}[f(x_{i-1}) + 2f(x_{i-\frac{1}{2}}) + f(x_i)] \equiv \frac{1}{2}(T_n + H_n),$$

其中 $H_n = h\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-\frac{1}{2}})$, $x_{i-\frac{1}{2}} = a + (i - \frac{1}{2})h$.

加密网格比较方便

复化 Simpson 公式

若在每个小区间上使用 **Simpson** 公式就得到复化 **Simpson**:

$$I(f)=\sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx=\frac{h}{6}\sum_{i=1}^{n}[f_{i-1}+4f_{i-\frac{1}{2}}+f_i]+E_n(f)\equiv S_n+E_n(f)$$

这里

$$S_n=\frac{h}{6}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{j=1}^{n-1}f(x_j)+4\sum_{j=1}^{n}f(x_{j-\frac{1}{2}})\right]\equiv\frac{1}{3}T_n+\frac{2}{3}H_n.$$

计算量其实**是相当的**

同样利用前面的误差分析, 假设 $f\in C^{(4)}[a,b]$, 就有

$$E_n(f)=I(f)-S_n=-\frac{(b-a)h^4}{2880}f^{(4)}(\eta),\quad \eta\in(a,b)$$

即复化**Simpson**公式是四阶收敛的, 且 $h\to 0\Longrightarrow S_n\rightrightarrows I(f)$.

同样只要 $f\in C[a,b]\Longrightarrow S_n\to I(f)$.

复化 Simpson 公式

例 8.6

分别用复化梯形公式和复化 $Simpson$ 公式计算积分(希望误差 $\leq \frac{1}{2}\times 10^{-4}$): $I(f)=\int_0^1 e^{-x}dx = 0.6321206\cdots$

解: 利用 T_n 的误差公式 $E_n(f) = -\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta) = \frac{-f''(\eta)}{12n^2}$. 欲让 $|E_n| \leq \frac{1}{2}\times 10^{-4} \Longrightarrow$ 当 $n^2 \geq \frac{1}{6}\times 10^4$ 即可满足要求, 即 $n \geq 41$.

而对于复化Simpson公式, 欲让 $|E_n| = \frac{(b-a)h^4}{2880}|f''(\eta)| \leq \frac{1}{2}\times 10^{-4} \Longrightarrow n \geq 2$ 即可.

事实上 $S_2(f) \approx 0.632134\cdots$ 实际误差为 1.36×10^{-5}.

同样工作量下 $T_4 \approx 0.635409\cdots$ 实际误差为 3.28×10^{-3}. $\square$

带导数值的求积公式

前面的 **Newton-Cotes** 公式就是利用等距节点的 **Lagrange** 插值多项式来得到的. 有时候如果知道被积函数 f 的导数信息, 那么我们也可以利用其 **Hermite** 插值多项式来推导求积公式.

利用前面的插值公式, 我们有 f 在 $[a,b]$ 上的三次**Hermite**插值为

$$H_3(x) = f(a)\alpha_1(x) + f(b)\alpha_2(x) + f'(a)\beta_1(x) + f'(b)\beta_2(x),$$

其中

$$\alpha_1(x) = \left(1 + 2\frac{x-a}{b-a}\right)\left(\frac{b-x}{b-a}\right)^2, \qquad \beta_1(x) = (x-a)\left(\frac{b-x}{b-a}\right)^2,$$

$$\alpha_2(x) = \left(1 + 2\frac{x-b}{a-b}\right)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2, \qquad \beta_2(x) = (x-b)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2.$$

复化 Hermite 公式

若用 **Hermite** 插值 $H_3(x)$ 代替 f 求积分, 记 $\Delta = b-a$, 有

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b H_3(x)dx + E(f) = \frac{\Delta}{2}[f(a)+f(b)] + \frac{\Delta^2}{12}[f'(a)-f'(b)] + E(f)$$

这里 $E(f) = \int_a^b f[a,a,b,b,x](x-a)^2(x-b)^2dx = \frac{(b-a)^5}{720}f^{(4)}(\eta)$. 若使用复合公式, 可看到内部节点的导数值项抵消了, 即

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \sum_{k=1}^{n}\int_{x_{k-1}}^{x_k} H_3(x)dx + E_n(f)\\ &= \frac{h}{2}[f(a)+f(b)+\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)] + \frac{h^2}{12}[f'(a)-f'(b)] + E_n(f)\end{aligned}$$

只比 T_n 多了端点处导数项, 但误差为 $E_n(f) = \frac{b-a}{720}h^4 f^{(4)}(\xi)$, 与 **Simpson** 公式差不多. 比如对上面例子,

$H_n = T_n + \frac{h^2}{12}[f'(a)-f'(b)] \overset{n=2}{=} 0.632066$, 误差为 5.46×10^{-5}.

目录 I

目录 II

Romberg 求积算法

将 **Richardson** 外推思想(类似于前面介绍过的**Aitken**加速思想)用于等距网格的复化求积公式即得到 **Romberg** 求积算法.

Richardson 外推:

设 $\varphi(h)$ (如前面计算的 T_n, S_n 都可看成步长 h 的函数) 充分光滑, 在零点做 **Taylor** 展开得

$$\varphi(h) = \varphi(0) + h\varphi'(0) + \frac{h^2}{2}\varphi''(0) + \cdots$$

$$\varphi\left(\frac{h}{2}\right) = \varphi(0) + \frac{h}{2}\varphi'(0) + \frac{h^2}{8}\varphi''(0) + \cdots$$

将上面两式组合一下: $2\varphi(\frac{h}{2}) - \varphi(h) = \varphi(0) - \frac{h^2}{4}\varphi''(0) + \mathcal{O}(h^3)$.

即 $2\varphi(\frac{h}{2}) - \varphi(h) = \varphi(0) + \mathcal{O}(h^2)$ 比 $\varphi(h)$, $\varphi(\frac{h}{2})$ 逼近 $\varphi(0)$ 更好.

Richardson 外推

从上面看出慢收敛序列加工后可以收敛得更快！ 更一般地,

定理 8.4 (Richardson 外推)

设 $\varphi(h)$ 在 $h \to 0$ 时收敛到 $\varphi(0) \equiv \varphi^*$, 余项可以写成

(8.8) $$\varphi^* - \varphi(h) = \sum_{k=1}^{+\infty} a_k h^{p_k}, \quad \text{其中 } 0 < p_1 < p_2 < \cdots$$

p_k, a_k 与 h 无关, 并设 $a_k \neq 0, \forall k$. 取 $q \in (0,1)$, 定义新序列

$$\varphi_1(h) = \varphi(h), \quad \varphi_{m+1}(h) = \frac{\varphi_m(qh) - q^{p_m}\varphi_m(h)}{1 - q^{p_m}}, \quad m = 1, 2, \cdots$$

则 $\{\varphi_m(h)\}$ 以更快速度收敛到 φ^*:

这里分母是为了归一化

(8.9) $$\varphi^* - \varphi_{m+1}(h) = \sum_{k=1}^{+\infty} a_{m+k}^{(m+1)} h^{p_{m+k}}, \quad \text{其中 } a_{m+k}^{(m+1)} \text{ 与 } h \text{ 无关.}$$

收敛阶从p1到pm+1

Richardson 外推

◁ **可以用归纳法来证明:**

$m=0$ 时, 显然 (8.9) 就是 (8.8).

$m=1$ 时, $\varphi^* - \varphi_2(h) = \varphi^* - \dfrac{\varphi_1(qh) - q^{p_1}\varphi_1(h)}{1-q^{p_1}}$

$$= \frac{\varphi^* - \varphi_1(qh) - q^{p_1}\left(\varphi^* - \varphi_1(h)\right)}{1-q^{p_1}} \overset{\text{由(8.8)}}{=} \sum_{k=1}^{+\infty} a_k \frac{(qh)^{p_k} - q^{p_1}h^{p_k}}{1-q^{p_1}}$$

$$= \sum_{k=2}^{+\infty} a_k \frac{q^{p_k} - q^{p_1}}{1-q^{p_1}} h^{p_k} \equiv \sum_{k=1}^{+\infty} a_{k+1}^{(2)} h^{p_{k+1}}, \text{ 这里 } a_k^{(2)} = a_k \frac{q^{p_k} - q^{p_1}}{1-q^{p_1}}$$

下面归纳假设 $m=l-1$ 时(8.9)成立, 即有

$$\varphi^* - \varphi_l(h) = \sum_{k=1}^{+\infty} a_{l-1+k}^{(l)} h^{p_{l-1+k}}, \text{ 自然 } \varphi^* - \varphi_l(qh) = \sum_{k=1}^{+\infty} a_{l-1+k}^{(l)} (qh)^{p_{l-1+k}}.$$

Richardson 外推

$$\Longrightarrow \quad \varphi^* - \varphi_{l+1}(h) = \varphi^* - \frac{\varphi_l(qh) - q^{p_l}\varphi_l(h)}{1 - q^{p_l}}$$

$$= \quad \frac{\varphi^* - \varphi_l(qh) - q^{p_l}\left(\varphi^* - \varphi_l(h)\right)}{1 - q^{p_l}}$$

$$\text{由归纳假设} \underline{\underline{\quad}} \sum_{k=1}^{+\infty} a_{l-1+k}^{(l)} \frac{(qh)^{p_{l-1+k}} - q^{p_l} h^{p_{l-1+k}}}{1 - q^{p_l}} \quad \text{(注意第一项抵消了)}$$

$$= \quad \sum_{k=2}^{+\infty} a_{l-1+k}^{(l)} \frac{q^{p_{l-1+k}} - q^{p_l}}{1 - q^{p_l}} h^{p_{l-1+k}} \equiv \sum_{k=1}^{+\infty} a_{l+k}^{(l+1)} h^{p_{l+k}}.$$

由假设 $p_k < p_{k+1}$, $k = 1, 2, \cdots$ 知, 新的序列确实收敛更快了. $\triangleright$

Romberg 求积算法

将上述**Richardson**外推思想与等距网格减半加密技术结合起来就得到所谓的**Romberg**求积算法:

我们前面已分析过, $T_n, T_{2n}, \cdots$ 收敛到 $I(f)$ 的速度为 $\mathcal{O}(h^2)$, 较慢. 事实上有

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x)dx \\ &= T_n + \sum_{l=1}^{m} \frac{h^{2l}B_{2l}}{(2l)!}[f^{(2l-1)}(a) - f^{(2l-1)}(b)] + \frac{h^{2m+2}B_{2m+2}}{(2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi)(b-a) \end{aligned}$$

这里 B_k 为 **Bernoulli** 数, 当然与 h 无关. 这相当于前面的定理中 $p_k = 2k$ 情形. 如果我们取 $q = \frac{1}{2}$ 就可以得到以下算法:

Romberg 求积算法

算法 8.1 (Romberg求积算法)

1. 重复利用梯形公式: 记 $h_j = 2^{-j}(b-a)$, 即减半加密网格,

$$\begin{aligned} T_1^{(0)} &= T_{2^0} = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)], \\ T_1^{(1)} &= T_{2^1} = \frac{1}{2}\left[T_1^{(0)} + h_0 f(\frac{a+b}{2})\right], \\ &\cdots \\ T_1^{(k)} &= T_{2^k} = \frac{1}{2}\left[T_1^{(k-1)} + h_{k-1}H_{k-1}\right]. \end{aligned}$$

这里 $H_j = \sum_{l=1}^{2^j} f\left(a + (l-\frac{1}{2})h_j\right)$.

上标表示加密
下标表示加速

2. 利用Richardson思想加速:

$$T_{j+1}^{k-1} = \frac{4^j T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}}{4^j - 1}, \qquad j = 1, 2\cdots \quad k = 1, 2, \cdots$$

Romberg 求积算法

由于加速较多次的时候需要之前插值的节点更密了，由于runge现象以及函数光滑性限制由此不宜加速过多次

一般来说，当上面迭代到 $|T_j^{(0)} - T_{j+1}^{(0)}| < \varepsilon$ 时便终止加密迭代，输出 $T_{j+1}^{(0)}$ 来近似 $I(f)$.

例 8.7

求 $\displaystyle\int_0^1 e^x dx = e - 1 \approx 1.718\,281\,828\,459\cdots.$

$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$
1.859140			
$1.753931 \overset{1)}{\hookrightarrow}$	$\underline{1.71}8861$		
$1.727221 \overset{2)}{\hookrightarrow}$	$\underline{1.718}318 \overset{3)}{\hookrightarrow}$	$\underline{1.71828}269$	
$\underline{1.72}0518 \overset{4)}{\hookrightarrow}$	$\underline{1.71828}4 \overset{5)}{\hookrightarrow}$	$\underline{1.718281}84 \overset{6)}{\hookrightarrow}$	$\underline{1.718281828}79$

目录 I

目录 II

Gauss 型求积公式

我们前面在求积公式

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

中取等距节点, 得到了 **Newton-Cotes** 型求积公式(及相应复化公式).

显然, 我们可以更灵活地选取节点位置, 或许可以得到性质更好(代数精度更高、稳定性更好)的格式!

例 8.8

考虑求积公式 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$, 如何选择使得代数精度尽可能高?

Gauss 型求积公式

解: 共有四个参数, 因此我们分别取 $f = 1, x, x^2, x^3$ 代入公式使其为等式, 即

$$\begin{cases} 2 = A_0 + A_1, \\ 0 = A_0 x_0 + A_1 x_1, \\ \frac{2}{3} = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2, \\ 0 = A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3, \end{cases} \Longrightarrow \begin{array}{l} \text{利用第二式} \Longrightarrow A_0 x_0 = -A_1 x_1 \\ \text{代入第四式} \Longrightarrow x_0^2 = x_1^2 \\ \text{代入第三式} \Longrightarrow x_{0,1} = \pm\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \text{代回第二式} \Longrightarrow A_0 = A_1 = 1 \end{array}$$

取 $f = x^4$ 代入可知 左边$= \frac{2}{5} \neq$右边$= x_0^4 + x_1^4 = \frac{2}{9}$. 即这个求积公式代数精度就是 3. 显然远高于同样两点的梯形公式. $\square$

此例中两个节点可以达到 3 阶代数精度, 那么 $n+1$ 个节点是否可以达到 $2n+1$ 阶代数精度?

Gauss 型求积公式的一般理论

对一般的带权积分: $I(f)=\int_a^b \rho(x)f(x)dx$, 我们寻求如下求积公式

$$I(f)\approx I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \tag{8.10}$$

希望其代数精度尽可能高. 从前面插值型求积公式理论可知, 要让其代数精度$\geq n$, 那么该公式就是插值型公式, 即

$$A_k=\int_a^b \rho(x)l_k(x)dx, \quad l_k(x)=\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}, \quad \omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j).$$

插值函数的基函数

另外由插值余项可以得到

$$E_n(f)=I(f)-I_n(f)=\int_a^b \rho(x)f[x,x_0,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x)dx. \tag{8.11}$$

Gauss 型求积公式的一般理论

我们已经知道插值型公式代数精度至少为 n. 理论上看, 上面求积公式(8.11)中共有 $2n+2$ 个参数, 我们应该期望达到 $2n+1$ 阶代数精度 (多项式阶从 0 一直取到 $2n+1$). 即希望

$$\forall f = p_{2n+1} \in P_{2n+1}, \quad E_n(p_{2n+1}) = (f[x, x_0, \cdots, x_n], \omega_{n+1}) = 0.$$

如何才能实现呢? 当 $f \equiv p_{2n+1}$ 为多项式时, 由均差的性质可知, f 的 $n+1$ 阶均差 $f[x, x_0, \cdots, x_n] \equiv q_n(x) \in P_n$ 为 n 次多项式.

要想 $E_n(p_{2n+1}) = (f[x, x_0, \cdots, x_n], \omega_{n+1}) = 0$, 即 $(q_n, \omega_{n+1}) = 0$.

根据正交多项式的性质, 如果 $\omega_{n+1}(x)$ 是 $n+1$ 次正交多项式, 那么它与任意 n 次多项式 p_n 都正交, 即 $(p_n, \omega_{n+1}) = 0$.

从而就有 $\forall p_{2n+1} \in P_{2n+1}$, $E_n(p_{2n+1}) = 0$.

Gauss 型求积公式的一般理论

这样其实我们证明了以下定理

定理 8.5

插值型求积公式 (8.10): $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 具有 $2n+1$ 次代数精度的充分必要条件是: 求积节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是 $[a,b]$ 上权函数为 ρ 的 $n+1$ 次正交多项式的零点.

我们有以下定义:

定义 8.5 (Gauss 求积公式)

如果求积公式 (8.10): $I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的代数精度达到 $2n+1$, 则称 (8.10) 为高斯型求积公式.

Gauss 型求积公式的一般理论

对于上面公式, 当 f 取 $2n+2$ 阶多项式 $\omega_{n+1}^2(x)$ 时, 显然有

$I(f)=\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx>0$, 而 $I_n(f)=\sum_{k=0}^n A_k\omega_{n+1}^2(x_k)=0$.

此时等式不再成立, 即 **Gauss** 型求积公式代数精度就是 $2n+1$.

上面已经说明**Gauss**型求积公式需让 $\omega_{n+1}(x)$ 为 $n+1$ 次正交多项式 $\varphi_{n+1}(x)$, 因此有节点 x_k 为 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点, 求积系数

$$A_k=\int_a^b \rho(x)l_k(x)dx=\int_a^b \rho(x)\frac{\varphi_{n+1}(x)}{(x-x_k)\varphi'_{n+1}(x_k)}dx.$$

利用此求积公式对 $p_{2n}(x)=l_k^2(x)$ 能准确成立, 也可以由

$$\int_a^b \rho(x)l_k^2(x)dx=\sum_{j=0}^n A_j l_k^2(x_j)=A_k$$

$$\Longrightarrow \quad A_k=\frac{1}{[\omega'_{n+1}(x_k)]^2}\int_a^b \rho(x)\frac{[\omega_{n+1}(x)]^2}{(x-x_k)^2}dx.$$

Gauss 型求积公式的一般理论

利用 **Christoffel-Darboux** 恒等式, 可以将上式进一步简化: 假设 $(\varphi_j, \varphi_k) = \delta_{jk}$, $\alpha_k = a_{k+1}/a_k$, 我们有

$$(x-y)\sum_{k=0}^{n+1} \varphi_k(x)\varphi_k(y) = \frac{1}{\alpha_{n+1}}[\varphi_{n+2}(x)\varphi_{n+1}(y) - \varphi_{n+2}(y)\varphi_{n+1}(x)]$$

然后令 y 为 φ_{n+1} 的零点 x_j, 即有

$$(x-x_j)\sum_{k=0}^{n+1} \varphi_k(x)\varphi_k(x_j) = -\frac{1}{\alpha_{n+1}}[\varphi_{n+2}(x_j)\varphi_{n+1}(x)]$$

两边都乘以 $\rho(x)\varphi_0/(x-x_j)$, 在 $[a,b]$ 上积分得到(利用正交性):

(8.12) $$A_j = -\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}} \frac{\sigma_{n+1}}{\varphi_{n+2}(x_j)\varphi'_{n+1}(x_j)}, \quad j = 0, \cdots, n,$$

这里 $\sigma_k = (\varphi_k, \varphi_k)$.

Gauss 型求积公式的一般理论

例 8.9

构造 *Gauss* 型求积公式 $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$.

解: 这里权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$, 我们先构造在此权函数下的二次正交多项式.

简单起见, 可以用待定系数法: 设 $P_2(x) = x^2 + ax + b$, 希望它与 $1,\ x$ 正交, 即有

$$0 = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} P_2(x)dx = \frac{2}{5} + \frac{2}{3}a + 2b,$$

$$0 = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} xP_2(x)dx = \frac{2}{7} + \frac{2}{5}a + \frac{2}{3}b.$$

Gauss 型求积公式的一般理论

解之有 $a = -\frac{6}{7}, b = \frac{3}{35}$. 因此可求出 $x_{0,1} = \dfrac{15 \mp 2\sqrt{30}}{35}$.

继而可以用代数精度的概念可得

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx &= A_0 + A_1, \\
\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} x dx &= A_0 x_0 + A_1 x_1.
\end{aligned}
$$

从而解得 $A_{0,1} = 1 \pm \frac{\sqrt{30}}{18}$.

假如 $f(x) = \cos\frac{\pi x}{2}$, 准确积分值 $I(f) = 1.5597865\cdots$

如果用三个节点的 **Simpson** 公式 $S(f) = \frac{4}{3} = 1.333333\cdots$

而如果用以上的两点**Gauss**求积公式, $I_2(f) = 1.557589\cdots$

Gauss 求积公式的稳定性及收敛性分析

下面来看Gauss型求积公式的稳定性:

引理 8.1

Gauss 求积公式的求积系数 A_k 总是大于零.

◁ **Gauss 求积公式代数精度为 $2n+1$, 即 $E_n(p_{2n+1}) = 0$. 取 $2n$ 次多项式 $p_{2n}(x) = l_j^2(x)$, $l_j(x)$ 为插值基函数, $j = 0, 1, \cdots, n$. 那么应该有**

$$E_n(p_{2n}) = 0 \Longrightarrow 0 < I(p_{2n}) = \int_a^b \rho(x) l_j^2(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k l_j^2(x_k) = A_j. \ \triangleright$$

推论 8.2

Gauss 求积公式总是稳定的.

Gauss 求积公式的稳定性及收敛性分析

下面看**Gauss**求积公式的误差分析. 借助**Hermite**插值余项来给出**Gauss**型求积公式的余项: 如果用节点 $x_0, \cdots, x_n$ 做**Hermite**插值, 有

$$f(x) = H_{2n+1}(x) + R_{2n+1}(x) = H_{2n+1}(x) + f[x, x_0, x_0, \cdots, x_n, x_n]\omega_{n+1}^2(x).$$

而 $E_n(f) = I(f) - I_n(f) = \int_a^b \rho(x) f(x) dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$.

因为 $E_n(p_{2n+1}) = 0, \forall p_{2n+1} \in P_{2n+1}$, 因此 $E_n(H_{2n+1}) = 0$.

$$\Longrightarrow \int_a^b \rho(x) H_{2n+1}(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k H_{2n+1}(x_k) = I_n(f).$$

又 $I(f) = \int_a^b \rho(x)[H_{2n+1}(x) + R_{2n+1}(x)]dx = I_n(f) + \int_a^b \rho(x) R_{2n+1}(x) dx$

$$\Longrightarrow E_n(f) = \int_a^b \rho(x) f[x, x_0, x_0, \cdots, x_n, x_n]\omega_{n+1}^2(x) dx = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x) dx$$

这里由于是ω的平方非负所以才可以将f的差商提出来

Gauss 求积公式的稳定性及收敛性分析

我们最终可以得到如下收敛性定理:

定理 8.6

$\forall f \in C[a,b]$, 对于*Gauss*型求积公式 (8.10), 有 $\lim\limits_{n\to+\infty} I_n(f) \to I(f)$.

$\triangleleft$ 由 **Weistrass** 引理, $\forall f \in C[a,b]$, $\forall \varepsilon > 0$, 存在多项式 p_m *s.t.*

$$\|f - p_m\|_\infty < \frac{\varepsilon}{C},$$

其中 $C = 2\int_a^b \rho(x)dx > 0$. 这样

$|I(f) - I_n(f)| \leq$

$$\left| I(f) - \int_a^b \rho(x)p_m(x)dx \right| + \left| \int_a^b \rho(x)p_m(x)dx - I_n(p_m) \right| + |I_n(p_m) - I_n(f)|$$

Gauss 求积公式的稳定性及收敛性分析

第一项 $\left|I(f)-\int_a^b \rho(x)p_m(x)dx\right| \le \frac{\varepsilon}{C}\int_a^b \rho(x)dx = \frac{\varepsilon}{2}$;

第二项 $\left|\int_a^b \rho(x)p_m(x)dx - I_n(p_m)\right| = E_n(p_m) = 0$, 只要 $2n+1 \ge m$;

第三项 $|I_n(p_m)-I_n(f)| \le \sum_{k=0}^{n} A_k\frac{\varepsilon}{C} = \frac{\varepsilon}{2}$,

(这里利用相容性 $\sum_{k=0}^{n} A_k = \int_a^b \rho(x)dx = \frac{C}{2}$). 0阶代数精度

故只要 $2n+1 \ge m$, 就有三项之和 $<\varepsilon$, 即 $|E_n(f)| < \varepsilon$. ▷

下面看一些例子.

Gauss-Legendre 求积公式

即 $[a,b]=[-1,1]$, $\rho\equiv 1$, $P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]$,

$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$, $\sigma_n=(P_n,P_n)=\frac{2}{2n+1}$. 设 $\{x_k\}_{k=0}^n$ 为 P_{n+1} 的零点,

由(8.12)有 $A_k=-\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}}\frac{\sigma_{n+1}}{P_{n+2}(x_k)P'_{n+1}(x_k)}$.

$$\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}}=\frac{(2n+4)!}{2^{n+2}((n+2)!)^2}\left[\frac{(2n+2)!}{2^{n+1}((n+1)!)^2}\right]^{-1}=\frac{2n+3}{n+2}.$$

再利用递推公式

$$(n+2)P_{n+2}(x)=(2n+3)xP_{n+1}(x)-(n+1)P_n(x)$$

$$\Longrightarrow P_{n+2}(x_k)=-\tfrac{n+1}{n+2}P_n(x_k)$$

$$\Longrightarrow A_k=\frac{2}{n+1}\frac{1}{P_n(x_k)P'_{n+1}(x_k)}.$$

Gauss-Legendre 求积公式

求积公式的误差为 (利用求积节点为 P_{n+1} 的零点)

$$
\begin{aligned}
E_n(f) &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{-1}^{1} \omega_{n+1}^2(x)dx \\
&= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \frac{1}{(a_{n+1})^2} \int_{-1}^{1} P_{n+1}^2(x)dx \\
&= \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3} f^{(2n+2)}(\xi)
\end{aligned}
$$

如果是一般区间 $[a,b]$, 可以做变换

$$
t = \frac{2}{b-a}\left(x - \frac{a+b}{2}\right) \in [-1,1] \Longleftrightarrow x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t \in [a,b]
$$

Gauss-Tchebychev 求积公式

即 $[a,b]=[-1,1]$, $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, $T_n(x)=\cos(n\arccos x)$, $a_n=2^{n-1}$, $\sigma_0=(T_0,T_0)=\pi$, $\sigma_{n+1}=\frac{\pi}{2}$, $n\geq 0$. 设 $T_{n+1}(x)$ 的零点为 $\{x_k=\cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\}_{k=0}^{n}$, 那么有 $A_k=-\frac{a_{n+2}}{a_{n+1}}\frac{\sigma_{n+1}}{T_{n+2}(x_k)T'_{n+1}(x_k)}$.

再利用递推公式 $T_{n+2}(x)=2xT_{n+1}(x)-T_n(x)$

$\Longrightarrow T_{n+2}(x_k)=-T_n(x_k)\Longrightarrow A_k=\frac{\pi}{T_n(x_k)T'_{n+1}(x_k)}$.

记 $x_k=\cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\equiv\cos\theta_k$, 有

$T_n(x_k)=\cos n\theta_k=\cos\big((n+1)\theta_k-\theta_k\big)=(-1)^k\sin\theta_k$,

$T'_{n+1}(x_k)=-(n+1)\sin(n+1)\theta_k\frac{1}{\sin\theta_k}=(-1)^k(n+1)\frac{1}{\sin\theta_k}$,

即有 $A_k=\frac{\pi}{n+1}$, $0\leq k\leq n$.

Gauss-Tchebychev 求积公式

Gauss-Tchebychev 求积公式的余项为

$$
\begin{aligned}
E_n(f) &= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_{-1}^{1}\frac{\omega_{n+1}^2(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \\
&= \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\frac{1}{a_{n+1}^2}\int_{-1}^{1}\frac{T_{n+1}^2(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \\
&= \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\xi).
\end{aligned}
$$

如果是一般区间 $[a,b]$, 可以做变换

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

Gauss-Tchebychev 求积公式

看一个例子对比一下两种 **Gauss** 积分公式:

例 8.10

求 $\int_{-1}^{1} \frac{x^6+x^4}{\sqrt{1-x^2}}dx \quad \left(= \frac{11}{16}\pi = 2.159844949342983\right).$

如果用 **Gauss-Legendre** 公式,

三点公式($n=2$) $I_2(f) = 1.01193\cdots$,

六点公式($n=5$) $I_5(f) = 1.60813\cdots$

如果用 **Gauss-Tchebychev** 公式,

三点公式($n=2$) $\widetilde{I}_2(f) = 2.06167\cdots$, **将有奇性的部分拿出来**

四点公式($n=3$) $\widetilde{I}_3(f) = 2.159844949342983$ 得到准确解!

固定节点的 Gauss 求积公式

有时候我们需要在固定某些节点前提下尽可能提高代数精度, 这样便得到固定节点情形的 **Gauss** 求积公式.

通常我们可以很容易得到区间端点的信息, 因此我们可以充分利用端点的值. 例如用如下公式

$$\int_{-1}^{1}\rho(x)f(x)dx \approx A_0 f(-1) + \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k). \tag{8.13}$$

如果希望上式代数精度达到 M, 利用前面的推导过程, 即希望

$$0 = E_n(p_M) = \int_{-1}^{1}\rho(x)p_M[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x)dx. \tag{8.14}$$

而$p_M[x, x_0, \cdots, x_n]$为$M-n-1$次多项式, $\omega_{n+1} = (x+1)\prod_{k=1}^{n}(x-x_k)$.

固定节点的 Gauss 求积公式

这样选取权函数时，上一步必须用左节点（非负）

利用 n 次的正交多项式可以与任意 $n-1$ 次的多项式正交可知, 如果我们取 $\{x_k\}_{k=1}^n$ 为 $[-1,1]$ 上以 $(x+1)\rho(x)$ 为权的 n 次正交多项式的零点, 那么 $M-n-1 \leq n-1$ 时上面 (8.14) 式确实为零. 即 M 最大可以取到 $2n$.

也就是说如果我们固定一个节点的情况下, 上面 $n+1$ 个节点的求积公式代数精度最高可以达到 $2n$.

类似的我们也可以得到固定多个节点的**Gauss**型积分公式.

目录 I

目录 II

数值微分

有时候我们需要计算导数、偏导数的近似值, 简单地可以有

$$f'(x_0) \coloneqq \lim_{h\to 0} \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} = f'(x_0)+\mathcal{O}(h)$$

因此, 理论上$|h|$越小, 上面近似公式计算出来的值越逼近 $f'(x_0)$. 但是考虑到舍入误差的影响, 显然不是 $|h|$ 越小越好.

设 $f(x_0)$ 和 $f(x_0+h)$ 有舍入误差 $\varepsilon > 0$, 那么 $G(h) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ 可能有 $\frac{2\varepsilon}{h}$ 的舍入误差. 因为 $G(h) = f'(x_0) + \frac{h}{2} f''(\xi)$, 因而实际误差为

$$E(h) \le \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\varepsilon}{h}, \qquad \text{其中 } M_2 = \max_{\xi} |f''(\xi)|.$$

因此在 $h \sim 2\sqrt{\varepsilon/M_2}$ 时总体误差达到最小, 为 $\sim 2\sqrt{M_2\varepsilon}$.

数值微分

例 8.11 (举例来看:)

设 $f(x) = \cos x$. 欲求 $f'(\frac{\pi}{6})$?

解: 分别取 $h = 0.1,\ 0.01,\ 0.001$, 计算 $\dfrac{\cos(\frac{\pi}{6}+h)-\cos(\frac{\pi}{6})}{h}$ 可得:

$$-0.5424323, \quad -0.5043218, \quad -0.5004329$$

我们知道 $\cos'(\frac{\pi}{6}) = -\frac{1}{2}$, 似乎确实 h 越小误差越小. 但是如果我们只有 7 位有效数字的计算器, 取 $h = 1.0 \times 10^{-7}$, 那么有

$\cos(\frac{\pi}{6}+h)=0.8660253,\ \cos\frac{\pi}{6}=0.8660254 \Longrightarrow \frac{\cos(\frac{\pi}{6}+h)-\cos(\frac{\pi}{6})}{h} = -1$.

显然误差太大了!

从上面的分析可知取 $h = 0.0001 \sim 0.001$ 计算误差比较小.

插值型数值微分公式

类似于插值型数值积分公式的推导，我们显然可以考虑用插值函数的微分来近似 f 的微分:

设 $f(x)$ 在 $\{x_j\}_{j=0}^n$ 上的 **Lagrange** 插值多项式为

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x), \text{其中 } l_k(x) = \prod_{j\neq k} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}.$$

我们可以将 $f'(x)$ 近似为 $f'(x) \approx L_n'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k'(x)$.

其误差为 $f'(x) - L_n'(x) = (R_n(x))' = (f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x))'$

$= f[x, x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}(x) + f[x, x_0, \cdots, x_n]\omega_{n+1}'(x)$.

假设 $f \in C^{(n+2)}[a, b]$，那么有 $\xi_x, \eta_x \in (a, b)$ s.t.

$$f'(x) = L_n'(x) + \frac{f^{(n+2)}(\xi_x)}{(n+2)!}\omega_{n+1}(x) + \frac{f^{(n+1)}(\eta_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x).$$

插值型数值微分公式

另外我们已经知道等距节点高次插值的不稳定性, 我们显然应该使用分段低次插值来提高精度. 常用的公式有

1. 两点公式 (误差为 $\mathcal{O}(h)$): $f'(x_0) \approx \dfrac{f_1 - f_0}{h}$, $f'(x_1) \approx \dfrac{f_1 - f_0}{h}$.
2. 三点公式 (误差为 $\mathcal{O}(h^2)$): $f'(x_0) \approx \dfrac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h}$, $f'(x_1) \approx \dfrac{f_2 - f_0}{2h}$, $f'(x_2) \approx \dfrac{3f_2 - 4f_1 + f_0}{2h}$.

例 8.12 (欲求 $f(x) = x^2e^{-x}$ 的导数值 $f'(0.5) = 0.45489799478\cdots$)

假设有 $f(0.4) = 0.1072512$, $f(0.5) = 0.1516327$, $f(0.6) = 0.1975722$,

用两点格式 $f'(0.5) \approx \frac{f(0.5)-f(0.4)}{h} = 0.4438146$,

若用三点格式 $f'(0.5) \approx \frac{f(0.6)-f(0.4)}{2h} = 0.4516049$, 比一阶格式好.

由数值积分公式导出数值微分公式

设 $\varphi(x) = f'(x)$, 考虑等距步长, 记 $x_k = x_0 + kh$.

例如考虑积分等式

$$f(x_{k+1}) = f(x_{k-1}) + \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} \varphi(x)dx, \quad k = 1, \cdots, n-1.$$

如果对上述积分采用数值积分公式(例如**Simpson**公式), 得

$$f_{k+1} = f_{k-1} + \frac{h}{3}[\varphi_{k-1} + 4\varphi_k + \varphi_{k+1}]$$

$$\Longrightarrow \quad \varphi_{k-1} + 4\varphi_k + \varphi_{k+1} = 6f[x_{k-1}, x_{k+1}], \quad k = 1, \cdots, n-1$$

如果知道了 f_0' 和 f_n' (例如用上面单边三点积分公式得到), 联立求解此 $n-1$ 阶三对角方程组便得到 f_k', $k = 1, \cdots, n-1$.

由数值积分公式导出数值微分公式

利用三次样条的误差估计式

$$\left\| f^{(k)} - s^{(k)} \right\|_\infty \le C_k \left\| f^{(4)} \right\|_\infty \cdot h^{4-k}$$

可以得到 $(h_k = x_{k+1} - x_k)$

$$\begin{aligned} f'(x_k) &\approx s'(x_k) = m_k, \\ f''(x_k) &\approx s''(x_k) = -\frac{4}{h_k}m_k - \frac{2}{h_k}m_{k+1} + \frac{6}{h}f[x_k, x_{k+1}], \end{aligned}$$

或者

$$\begin{aligned} f'(x_k) &\approx s'(x_k) = -\frac{h_k}{3}M_k - \frac{h_k}{6}M_{k+1} + f[x_k, x_{k+1}], \\ f''(x_k) &\approx s''(x_k) = M_k \end{aligned}$$

Richardson 外推

可以**把Richardson外推法**用于中点公式进行加速:

$$G(h)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}=f'(x)+\alpha_1h^2+\alpha_2h^4+\cdots$$

故可令 $q=\frac{1}{2}$, $p_k=2k$, 取 $G_0(h)=G(h)$, 对 $m=1,2,\cdots$, 有

$$G_m(h)=\frac{4^mG_{m-1}(h/2)-G_{m-1}(h)}{4^m-1}=f'(x)+\mathcal{O}(h^{2(m+1)}).$$

例 8.13 (欲求 $f(x)=x^2e^{-x}$ 的导数值 $f'(0.5)=0.45489799478\cdots$)

取 $h=0.1$ 计算 $G(h)$, 然后外推:

$$G_0(h)=0.4516\cdots$$

$$G_0(\tfrac{h}{2})=0.4540\cdots\overset{1)}{\hookrightarrow}G_1(h)=\underline{0.45489}99\cdots$$

$$G_0(\tfrac{h}{4})=\underline{0.454}6\cdots\overset{2)}{\hookrightarrow}G_1(\tfrac{h}{2})=\underline{0.454898}1\cdots\overset{3)}{\hookrightarrow}G_2(h)=\underline{0.4548979947}2$$

目录 I

目录 II

奇异积分与振荡积分

前面讲的算法都是针对 f 足够光滑设计的, 但许多实际问题中的被积函数并没有那么光滑, 常常只是分片光滑的, 有的地方都不连续, 甚至是无界的（即有奇点）. 计算这些不连续函数、具有奇性的函数积分时需要特别考虑.

例如求积分 $\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}}dx = 2$, 由于其有奇点 $x = 0$, 所以无法用 **Newton-Cotes** 型积分公式计算. 如果使用 **Gauss-Legendre** 三点积分公式:

$$I(f) \approx I_2(f) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1+y}} dy = 1.7509 \cdots$$

依然差很多. 那么我们该怎么处理呢?

反常积分—区间截断

(I) 区间截断: 设 f **在** $x=0$ **处无界, 欲计算** $\int_0^1 f(x)dx$**(假设可积):**

当 $\left|\int_0^\delta f(x)dx\right| < \varepsilon$ **时, 可用** $\int_\delta^1 f(x)dx$ **来代替** $I(f)$ **(正常数值积分).**

例 8.14 先估计在较小区间上的情况

设 $g \in C[0,1]$, $|g(x)| \le 1$, 如何计算 $\int_0^1 f(x)dx \equiv \int_0^1 \frac{g(x)dx}{\sqrt{x}+\sqrt[3]{x}}$?

解: 先估计 $\int_0^\delta \frac{g(x)}{\sqrt{x}+\sqrt[3]{x}}$**: 因在** $[0,1]$ **区间上** $\sqrt{x} \le \sqrt[3]{x}$ **所以**

$$\left|\frac{g(x)}{\sqrt{x}+\sqrt[3]{x}}\right| \le \frac{1}{2\sqrt{x}}, \quad \text{即} \quad \left|\int_0^\delta \frac{g(x)}{\sqrt{x}+\sqrt[3]{x}}dx\right| \le \int_0^\delta \frac{dx}{2\sqrt{x}} = \sqrt{\delta}$$

故要想精度达到 10^{-3}**, 取** $\delta \le 10^{-6}$ **来计算** $\int_\delta^1 f(x)dx$ **即可.** □

反常积分—区间截断

更进一步地, 可取 $1 > r_1 > r_2 > \cdots > r_n > r_{n+1} > \cdots > 0$, (例如可取 $r_n = 2^{-n}$) 有

$$\int_0^1 f(x)dx = \lim_{r\to 0}\int_r^1 f(x)dx = \int_{r_1}^1 f dx + \int_{r_2}^{r_1} f dx + \cdots + \int_{r_{n+1}}^{r_n} f dx + \cdots$$

当 $\left|\int_{r_{n+1}}^{r_n} f dx\right| < \varepsilon$ 时停止计算.

对于上例, 取 $r_n = 2^{-n}$, $g(x) \equiv 1$, 有

n	**4**	**8**	**16**	**32**	精确值$I(f)$
$I_n(f)$	0.683	0.813	0.8403	0.84111698	0.841116917

反常积分—变量替换

(II) 变量替换: 有时通过变量替换可以消除奇点.

例 8.15

如 $f \in C[0,1]$, 对 $\int_0^1 x^{-\frac{1}{n}} f(x)dx\ (n \geq 2)$ 可令 $x = t^n$ 来消除奇性:

$$I(f) = \int_0^1 t^{-1} f(t^n) n t^{n-1} dt = n \int_0^1 t^{n-2} f(t^n) dt. \text{ 没奇性了!}$$

常用变量替换(当然有时也会把积分区间变成无穷区间!):

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \overset{x=\cos t}{=} \int_0^\pi f(\cos t) dt \quad \textbf{(或用Gauss-Tchebychev)}$$

$$\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x(1-x)}} dx \overset{x=\sin^2 t}{=} 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(\sin^2 t) dt$$

反常积分—奇点分离

(III) 奇点分离 (Kontorovitch 奇点分离技巧): 通过对被积函数做等价奇性替换来分离奇性. 例如:

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}dx = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} + \int_0^1 \frac{\cos x - 1}{\sqrt{x}}dx = 2 + \int_0^1 \frac{\cos x - 1}{\sqrt{x}}dx$$

注意到在 $x=0$ 附近, $\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^4)$, 因而上述最后积分其实已经没有奇性了, 可用正常数值积分公式计算.

一般要计算 $\int_a^b f(x)dx$, 假设$f(x)$在$[a,b]$上有奇点x_0. 若能找到另一函数g与f在x_0有相同奇性, 且 $\int_a^b g(x)dx$ 容易计算. 这样$f-g$在$[a,b]$上光滑, 就可用正常数值积分公式计算 $\int_a^b (f-g)(x)dx$.

Kontorovitch 奇点分离法

例如 $g(x)$ 可以如下构造:

设 $f(x)=(x-x_0)^\alpha\varphi(x)$, $x_0\in[a,b]$, 其中 $-1<\alpha<0$.

假设 $\varphi(x)$ 在 $[a,b]$ 上充分光滑, 将 $\varphi(x)$ 在 x_0 处做 Taylor 展开:

$$\varphi(x)=\sum_{j=0}^{k}\varphi^{(j)}(x_0)\frac{(x-x_0)^j}{j!}+\varphi^{(k+1)}(\xi)\frac{(x-x_0)^{k+1}}{(k+1)!}$$

将 $f(x)$ 写成 $\big(f(x)-g(x)\big)+g(x)$, 其中

$$g(x)=(x-x_0)^\alpha\left[\sum_{j=0}^{k}\varphi^{(j)}(x_0)\frac{(x-x_0)^j}{j!}\right]$$ (幂函数易于计算积分),

$$f-g=(x-x_0)^\alpha\left[\varphi(x)-\sum_{j=0}^{k}\varphi^{(j)}(x_0)\frac{(x-x_0)^j}{j!}\right]=\varphi^{(k+1)}(\xi)\frac{(x-x_0)^{k+1+\alpha}}{(k+1)!},$$

因为 $k+1+\alpha>0$ 就可以用正常积分公式计算.

Kontorovitch 奇点分离法

例 8.16 (举例来看: 求 $\int_0^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{x(1-x)}}dx$)

解: $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x(1-x)}}$ 在 $x=0$ 处无界, 即 $f(x) = x^{-\frac{1}{2}}(1-x)^{-\frac{1}{2}}$,

即有 $x_0 = 0$, $\alpha = -\frac{1}{2}$, $\varphi(x) = (1-x)^{-\frac{1}{2}}$.

将 $\varphi(x)$ 在 $x_0 = 0$ 处 *Taylor* 展开有: $\varphi(x) = 1 + \frac{x}{2} + \frac{3x^2}{8} + R_2(x)$,

这样 $f(x) = x^{-\frac{1}{2}}(1 + \frac{x}{2} + \frac{3x^2}{8}) + \psi(x)$, 这里

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}\left[\frac{1}{\sqrt{1-x}} - 1 - \frac{x}{2} - \frac{3x^2}{8}\right],\ \text{显然有}\ \psi(0) = 0.$$

这样 $I(f) = \int_0^{\frac{1}{2}} x^{-\frac{1}{2}}\left(1 + \frac{x}{2} + \frac{3x^2}{8}\right)dx + \int_0^{\frac{1}{2}} \psi(x)dx$

Kontorovitch 奇点分离法

$$
\begin{aligned}
I(f) &= 2\sqrt{x}\Big|_0^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{3}x^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{\frac{1}{2}} + \frac{3}{20}x^{\frac{5}{2}}\Big|_0^{\frac{1}{2}} + \int_0^{\frac{1}{2}} \psi(x)dx \\
&= \sqrt{2} + \frac{1}{3}2^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{20}2^{-\frac{5}{2}} + \int_0^{\frac{1}{2}} \psi(x)dx.
\end{aligned}
$$

例如用 $n=4$ 的复合**Simpson**公式计算 $\int_0^{\frac{1}{2}} \psi(x)dx$, 就有

$I(f) \approx \underline{1.5707976}0$, 而实际上有 $I(f) = \frac{\pi}{2} = 1.5707976327$.

即上述方法得到的近似值已经相当好了.

反常积分—用Gauss型求积公式

(IV)用Gauss型求积公式

如对 $\int_{-1}^{1}\frac{f(x)dx}{\sqrt{1-x^2}}$ 可用 **Gauss-Tchebychev** 求积公式

例如计算 $\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-x^4}}=\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1+x^2}}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx$

对 $f(x)=\frac{1}{\sqrt{1+x^2}}$ 使用 **Gauss-Tchebychev** 求积公式**:**

$$I_n(f)=\frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n}f\left(\cos\frac{2k-1}{2n}\pi\right).$$

其他一些有奇性的积分也可以用某些已知的**Gauss**型积分公式得到**.**

反常积分—用Gauss型求积公式

如 $[0,1]$ 上的权为 $\frac{1}{\sqrt{x}}$ 的正交多项式 $\{q_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 有以下性质

$$q_n(x) = P_{2n}(\sqrt{x}), \quad \text{其中 } P_{2n} \text{为 } 2n \text{ 阶 Legendre 多项式}$$

$$\int_0^1 \frac{q_n(x)q_m(x)}{\sqrt{x}}dx \overset{y=\sqrt{x}}{=} \int_0^1 \frac{1}{y}P_{2n}(y)P_{2m}(y)2ydy$$

$$= 2\int_0^1 P_{2n}(y)P_{2m}(y)dy \overset{\text{偶函数}}{=} \int_{-1}^1 P_{2n}(y)P_{2m}(y)dy = \begin{cases} 0, & n\neq m \\ \frac{2}{2n+1}, & n=m \end{cases}$$

这样, $I(f) = \displaystyle\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}}dx \approx I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$. 有 $x_k = \widetilde{x}_k^2$,

$A_k = 2\widetilde{A}_k$, 其中 $\widetilde{x}_k, \widetilde{A}_k$ 为 **Gauss-Legendre** 求积节点和系数. 余项为

$$R_n[f] = \frac{2^{4n+5}[(2n+2)!]^3}{(4n+5)[(4n+4)!]^2} f^{(2n+2)}(\eta).$$

反常积分—用Gauss型求积公式

例 8.17 (举例来看)

计算 $\int_0^1 \frac{1+x}{\sqrt{x}}dx$, 其准确值为 $\frac{8}{3} = 2.66666666\cdots$

我们使用 $\frac{1}{\sqrt{x}}$ 为权的正交多项式, 即 $q_n(x) = P_{2n}(\sqrt{x})$.

利用上面结论, 如果使用两点公式, 有

$$\begin{aligned} x_0 &= (0.339981044)^2, \quad & x_1 &= (0.861136312)^2 \\ A_0 &= 2 \times 0.652145155, \quad & A_1 &= 2 \times 0.347854845 \end{aligned}$$

得到 $I_1(f) = A_0(1+x_0) + A_1(1+x_1) = 2.6666667$, 即得到准确解!

原因是两点格式的代数精度为 3, 而 $1 + x \overset{y=\sqrt{x}}{=\!=} 1 + y^2$.

反常积分—用Gauss型求积公式

又如积分 $I(f)=\int_0^1\sqrt{\frac{x}{1-x}}f(x)dx$, 在 $x=1$ 处有奇性.

若以 $\rho(x)=\sqrt{\frac{x}{1-x}}$ 为权, 其正交多项式为

$$q_n(x)=\frac{1}{\sqrt{x}}T_{2n+1}(\sqrt{x}),\quad n=0,1,\cdots T_k \text{ 为 Tchebychev 多项式}$$

$$\int_0^1\sqrt{\frac{x}{1-x}}q_n(x)q_m(x)dx\overset{y=\sqrt{x}}{=}\int_0^1\sqrt{\frac{y^2}{1-y^2}}\frac{T_{2n+1}(y)T_{2m+1}(y)}{y^2}2ydy$$

$$=2\int_0^1\frac{T_{2n+1}(y)T_{2m+1}(y)}{\sqrt{1-y^2}}dy\overset{\text{偶函数}}{=}\int_{-1}^1\frac{T_{2n+1}(y)T_{2m+1}(y)}{\sqrt{1-y^2}}dy$$

这样, $I(f)\approx I_n(f)=\sum_{k=0}^n A_kf(x_k)$. 有 $x_k=[\cos\frac{(2k+1)\pi}{2(2n+3)}]^2$, $A_k=\frac{2\pi}{2n+3}x_k$.

余项为 $R_n[f]=\frac{\pi}{2^{4n+5}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta)$.

反常积分—用Gauss型求积公式

对于无现成公式的积分，可构造新的 Gauss 型求积公式.

如 $I(f)=\int_0^1 f(x)\ln\frac{1}{x}dx$, 在 $x=0$ 点有奇性.

取 $\rho(x)=\ln\frac{1}{x}$, 构造正交多项式:

$$\varphi_0(x)=1,\quad \varphi_1(x)=x-(x,\varphi_0)\frac{\varphi_0}{(\varphi_0,\varphi_0)}=x-\frac{1}{4},$$

$$\varphi_2(x)=x^2-(x^2,\varphi_1)\frac{\varphi_1}{\|\varphi_1\|}-(x^2,\varphi_0)\frac{\varphi_0}{\|\varphi_0\|}=x^2-\frac{5}{7}x+\frac{17}{252}.$$

比如想用两点格式, 即 $n=1$, 先求出 φ_2 的零点 $x_{0,1}=\frac{5}{14}\mp\frac{\sqrt{106}}{42}$. 用待定系数法可以求出 $A_{0,1}=\frac{1}{2}\pm\frac{9\sqrt{106}}{424}$.

这样，例如 $f(x)=\cos x$, $I(f)=0.946083331\cdots$. 如果用 **G-L** 求积公式, 哪怕用六个点的公式 $I_5(f)=0.931\cdots$, 差很多. 如果用上面公式, 有 $I_1(f)=\underline{0.9459}737\cdots$, 已经有三位有效数字了!

无穷区间上的积分—区间截断

许多问题会涉及到无界区域上的积分计算.

(I) 区间截断法: 与前面类似, 可以取截断+求极限过程来逼近:

如计算 $I(f)=\int_a^{+\infty} f(x)dx$, 可以取 $a<r_1<r_2<\cdots$, 让 $r_n\to+\infty$

$$\int_a^{+\infty} f(x)dx=\int_a^{r_1} f(x)dx+\int_{r_1}^{r_2} f(x)dx+\cdots+\int_{r_n}^{r_{n+1}} f(x)dx+\cdots$$

当 $\left|\int_{r_n}^{r_{n+1}} f(x)dx\right|\le\varepsilon$ 时停止. 例如可取 $r_n=a+2^n$.

例 8.18 (求积分 $\displaystyle\int_0^{+\infty}\frac{e^{-x}dx}{1+x^4}=0.63047783\cdots$)

取 $r_n=2^n$, 令 $I_n=\int_0^{r_n} f(x)dx$, 有 $I_0=0.57203$, $I_1=0.62746$, $I_2=0.63044$, $I_3=\underline{0.630477}61$, 已经有六位有效数字.

无穷区间上的积分—变量替换

我们也可以试图通过变量替换的办法为有界区域上的积分.

例如, 令 $t = \dfrac{x}{1+x}$ 或 $t = e^{-x}$, 可以将 $[0, +\infty) \to [0, 1]$.

$$令\ t = \frac{e^x - 1}{e^x + 1},\ 可以将\ (-\infty, +\infty) \to (-1, 1).$$

但是注意, 有时候变换以后的被积函数出现了奇点, 即虽然区间变成了有解区间, 但是积分成了反常积分! 所以说变量替换不能保证解决问题.

例如, 计算 $\displaystyle\int_0^{+\infty} \frac{f(x)}{1+x^2} dx$, 无论用上述那个变换映到 $[0, 1]$, 都可能会出现奇点.

无穷区间上的积分—Gauss型求积公式

我们也可以采用无穷区间上的Gauss积分来计算.

1) Gauss-Laguerre 求积公式:

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) + R_n[f].$$

这里 $\{x_k\}_{k=1}^n$ 为 n 次 Laguerre 多项式 $L_n(x)$ 的根 ($[0,+\infty)$ 上以 e^{-x} 为权函数正交)

$$A_k = \frac{(n!)^2 x_k}{[L_{n+1}(x_k)]^2}, \quad R_n[f] = \frac{(n!)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi).$$

无穷区间上的积分—Gauss型求积公式

2) Gauss-Hermite 求积公式:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) + R_n[f].$$

这里 $\{x_k\}_{k=1}^{n}$ 为 n 次 **Hermite** 多项式 $H_n(x)$ 的根 **(**$\mathbb{R}$ 上以 e^{-x^2} 为权函数正交**)**

$$A_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{[H_{n+1}(x_k)]^2}, \quad R_n[f] = \frac{n!\sqrt{\pi}}{(2n)!2^n} f^{(2n)}(\eta).$$

振荡函数的积分

单独考虑是因为直接计算的时候可能会遇到很多正负抵消

下面考虑含有**振荡函数的积分**: $I(f) = \int_a^b f(x)K(x,t)dx$.

这里 $K(x,t)$ 为一振荡积分核(即为 x 的振荡函数), $f(x)$ 是光滑函数, 如计算 Fourier 积分

$$\int_a^b f(x)\sin nx dx, \quad \int_a^b f(x)\cos nx dx, \quad \text{等}.$$

如果使用一般的数值积分公式 (如复合 Simpson 公式), 误差估计式中会含有 $(nh)^m$ 因子, 当 $n \gg 1$ 时需要 $h \ll 1$ 才能得到足够精度的近似.

振荡函数的积分—在零点间积分

(I)在零点间积分: 假设 $K(x,t)$ **的零点为** $\{x_k\}_{k=1}^m$**:**

$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_m < b = x_{m+1}$, **那么** **按照**0点进行分划

$$\int_a^b f(x)K(x,t)dx = \sum_{k=1}^{m+1} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)K(x,t)dx,$$

然后使用 **Gauss-Lobatto** 求积公式计算 **(**即固定两个端点为求积节点**):**

$$\int_c^d f(x)dx \approx A_0 f(c) + A_{n+1} f(d) + \sum_{j=1}^{n} A_j f(\xi_j).$$

由前面推导 **Gauss** 型积分公式的过程, 我们知道节点 $\{\xi_j\}_{j=1}^n$ 应该是区间 $[c,d]$ 上以 $(x-c)(d-x)$ 为权函数的 n 次正交多项式的零点.

振荡函数的积分—Filon 方法

(II)Filon 方法: 我们也可以先对 $f(x)$ 做逼近, 然后再计算. 即

$$f(x)=\sum_{k=1}^{n}a_k\varphi_k(x)+\varepsilon(x),\quad \varepsilon(x)\text{ 为小量}.$$

$$\begin{aligned}\Longrightarrow I(t)&=\int_a^b f(x)K(x,t)dx\\ &=\sum_{k=1}^{n}a_k\int_a^b f(x)\varphi_k(x)dx+\int_a^b\varepsilon(x)K(x,t)dx\\ &\approx\sum_{k=1}^{n}a_k\int_a^b f(x)\varphi_k(x)dx\end{aligned}$$

所谓 Filon 方法, 即对 $f(x)$ 采用分段二次函数来逼近.

如计算 Fourier 积分: $I(n)=\int_a^b f(x)\sin nx dx$.

振荡函数的积分—Filon 方法

将 $[a,b]$ 分成 $2N$ 个子区间, $h=\frac{b-a}{2N}$, $x_j=a+jh$, $0\le j\le 2N$.
在每两个子区间 $[x_{2j},x_{2j+2}]$ 上用二次函数逼近 f. 分部积分可得

$$\begin{aligned}
&\int_c^d (Ax^2+Bx+C)\sin nx\,dx\\
=&-(Ax^2+Bx+C)\frac{\cos nx}{n}\Big|_c^d+\int_c^d(2Ax+B)\frac{\cos nx}{n}dx\\
=&-(Ax^2+Bx+C)\frac{\cos nx}{n}\Big|_c^d+(2Ax+B)\frac{\sin nx}{n^2}\Big|_c^d-\frac{2A}{n^2}\int_c^d\sin nx\,dx\\
=&-(Ax^2+Bx+C)\frac{\cos nx}{n}\Big|_c^d+(2Ax+B)\frac{\sin nx}{n^2}\Big|_c^d+\frac{2A}{n^3}\cos nx\Big|_c^d
\end{aligned}$$

振荡函数的积分—Filon 方法

最终我们可以得到

$$\int_a^b f(x)\sin nx dx \approx h\{-\alpha[f(b)\cos nb - f(a)\cos na] + \beta S_{2N} + \gamma S_{2N-1}\}$$

这里 $\alpha = (\theta^2 + \theta\sin\theta\cos\theta - 2\sin^2\theta)/\theta^3$, 其中 $\theta = nh$,

$$\beta = 2[\theta(1+\cos^2\theta) - 2\sin\theta\cos\theta]/\theta^3, \qquad \gamma = 4(\sin\theta - \theta\cos\theta)/\theta^3$$

$$S_{2N} = \frac{f(a)\sin na + f(b)\sin nb}{2} + f(a+2h)\sin n(a+2h) + \cdots + f(b-2h)\sin n(b-2h)$$

$$S_{2N-1} = f(a+h)\sin n(a+h) + f(a+3h)\sin n(a+3h) + \cdots + f(b-h)\sin n(b-h)$$

类似地可以计算

$$\int_a^b f(x)\cos nx dx \approx h\{\alpha[f(b)\sin nb - f(a)\sin na] + \beta C_{2N} + \gamma C_{2N-1}\}$$

其中 C_{2N}，C_{2N-1} 是上面的 S_{2N}，S_{2N-1} 式中的 $\sin \to \cos$.

振荡函数的积分—样条逼近

(III)样条逼近: 也可考虑对 $f(x)$ 用三次样条 $S(x)$ 逼近后计算.

简单一点, 考虑等距剖分. 计算 Fourier 积分

$$\int_0^{2\pi} f(x)\cos nx dx \approx \int_0^{2\pi} S(x)\cos nx dx = \int_0^{2\pi} S(x)\frac{d\sin nx}{n}$$

$$= \int_0^{2\pi} S'(x)\frac{d\cos nx}{n^2} = \frac{S'(2\pi)-S'(0)}{n^2} + \frac{1}{n^3}\int_0^{2\pi} S'''(x)\sin nx dx$$

$$= \frac{S'(2\pi)-S'(0)}{n^2} + \frac{1}{n^3}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{M_{j+1}-M_j}{h}\int_{x_j}^{x_{j+1}} \sin nx dx$$

$$= \frac{S'(2\pi)-S'(0)}{n^2} + \frac{2\sin\frac{nh}{2}}{n^4 h}\sum_{j=0}^{N-1}(M_{j+1}-M_j)\sin\frac{2j+1}{2}nh$$

振荡函数的积分—样条逼近

完全类似地，计算 **Fourier** 积分

$$\int_0^{2\pi} f(x)\sin nx dx \approx \int_0^{2\pi} S(x)\sin nx dx = -\int_0^{2\pi} S(x)\frac{d\cos nx}{n}$$

$$= \frac{S(0)-S(2\pi)}{n} + \int_0^{2\pi} S'(x)\frac{d\sin nx}{n^2}$$

$$= \frac{S(0)-S(2\pi)}{n} + \int_0^{2\pi} S''(x)\frac{d\cos nx}{n^3}$$

$$= \frac{S(0)-S(2\pi)}{n} + \frac{S''(2\pi)-S''(0)}{n^3} + \int_0^{2\pi} S'''(x)\cos nx dx$$

$$= \frac{S(0)-S(2\pi)}{n} + \frac{S''(2\pi)-S''(0)}{n^3} + \frac{2\sin\frac{nh}{2}}{n^4 h}\sum_{j=0}^{N-1}(M_{j+1}-M_j)\cos\frac{2j+1}{2}nh$$

振荡函数的积分

例 8.19

看一个例子, 计算积分 $\displaystyle\int_0^{2\pi} x\cos x\ \sin(30x)dx = -0.209672479\cdots$

解：如果用 **Filon** 方法, 当 $h = \frac{2\pi}{210}$ 时, 即 $2N = 210$ 时,

有 $I(30) \approx -0.\underline{20967248}$, 有 **8** 位有效数字.

若用样条逼近, 将区间 $[0, 2\pi]$ N 等分,

当 $N = 48$ 时, $I(30) \approx -0.\underline{209672}31$

当 $N = 96$ 时, $I(30) \approx -0.\underline{2096724}7$

与 **Filon** 方法差不多.