数值微分和积分

田付阳

应用物理研究所
数理学院物理系

April 3, 2018

概括

1. 数值微分
    - 中心差商
    - 辛普森法
    - 理查森外推法
2. 数值积分

泰勒展开

设h是小量，函数$f(x+h)$和$f(x-h)$在点x的泰勒展开为

$$f(x \pm h) = f(x) \pm h f'(x) \pm \frac{h^2}{2!} f''(x) \pm \cdots \pm \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x) \pm \cdots \quad (1)$$

函数$f(x)$的一阶数值微商可以为：

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (2)$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad (3)$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (4)$$

分别称为向前(Euler方法)、向后、中心(对称)差商近似微商。

误差分析

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + \cdots$$

误差阶为$O(h)$, 注意h不能太小，以便避免舍入误差。相对误差被估算为：

$$\frac{|\widetilde{\frac{\Delta f}{\Delta x}} - \frac{df}{dx}|}{\frac{df}{dx}} \leq 3\varepsilon_M + |\frac{f(x)}{\frac{df}{dx}}|2\frac{\varepsilon_M}{h}$$

由于太小的步长会导致数值衰减产生大的误差，适当的h值能够给出与舍入误差和截断误差,从下式

$$\frac{h}{2}|f''(x)| = |f(x)|\frac{2\varepsilon_M}{h}$$

中，假定函数的大小到导数可比拟，则误差为：

$$\frac{h}{2}|f''(x)| = |f(x)|\frac{2\varepsilon_M}{h} \rightarrow h_0 = \sqrt{\varepsilon_M} \approx 10^{-8}$$

中心差商

中心差商有较高的精度,

$$
\begin{aligned}
\frac{df}{dx} &\approx \frac{f(x+\frac{h}{2})-f(x-\frac{h}{2})}{h} \\
&= \frac{1}{h}(f(x)+\frac{h}{2}f'(x)+\frac{h^2}{8}f''(x)+\cdots-(f(x)-\frac{h}{2}f'(x)+\frac{h^2}{8}f''(x)+\cdots)) \\
&= f'(x)+\frac{h^2}{24}f'''(x)+\cdots.
\end{aligned}
$$

误差阶为$O(h^2)$，适当的步长估算为

$$\frac{h^2}{24}|f'''(x)| = |f(x)|\frac{2\varepsilon_M}{h},$$

再假定函数与导数有相比拟的数值大小,

$$h_0 = \sqrt[3]{48\varepsilon_M} \approx 10^{-5}.$$

则预期的相对误差阶为 $\frac{h_0^2}{24} \approx 10^{-11}$.

例子

采用中心差商求余弦函数的数值微分,code

```
% dfdx_center
clc; clear all; format long;
N = 64; dx=2*pi/N;
x=0:dx:2*pi;
f = cos(x);
dfdx(2:N)=(f(3:N+1)-f(1:N-1))/(2*dx);
% dfdx(1)=dfdx(3)-2*dfdx(2); dfdx(N+1)=dfdx(N-1)-1*dfdx(N);
dfdx(1)=0; %2*dfdx(2)-dfdx(3);
dfdx(N+1)=0; %2*dfdx(N)-dfdx(N-1);
figure(1);
set(gca,'FontSize',16);
plot(x,dfdx,'r-',x,-sin(x),'bo')
grid on;
title('图-示例：余弦函数的数值微分');
xlabel('x'); ylabel('y');
```

泰勒展开

对于 $2h$, 泰勒展开的形式为,

$$f(x+2h)=f(x)+2hf'(x)+2h^2f''(x)+\cdots+\frac{(2h)^n}{n!}f^{(n)}(x)+\cdots \quad (5)$$

联合 Eq.1 和 5, 可推得:

$$f'(x)=\frac{-f(x+2h)+4f(x+h)-3f(x)}{2h}.$$

被称之为多点一阶近似微商。

联合 Eq. 1 和 2, 可推得二阶微商的中心差商公式:

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

辛普森数值微分法

对于某函数$f(x)$在等距节点$(x_0, x_1, \cdots, x_n)$的函数值$f(x_k)$，$k = 0, 1, \cdots, n$,且有边界条件$f'(x_0)$和$f'(x_n)$, 联合公式2,3和4,同时设$m_k = f'(x_k)(k = 1, 2, \cdots, n-1)$,得

$$
\begin{aligned}
m_k &= \frac{1}{2h}(f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})) \\
m_{k-1} &= \frac{1}{h}(f(x_k) - f(x_{k-1})) \\
m_{k+1} &= \frac{1}{h}(f(x_{k+1}) - f(x_k))
\end{aligned}
$$

可得代数递推方程：

$$
m_{k-1} + 4m_k + m_{k+1} = \frac{3}{h}(f(x_{x+1}) - f(x_{k-1})) \tag{6}
$$

$k = 1, 2, \cdots, n-1$. 为三对角方程组，有$n-1$个方程，$n-1$个未知变量，被称为辛普森数值微分法。

function df = multipoint(func,x0,h,type)
y0 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0);
y1 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0+h);
y2 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0+2*h);
y_1 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0-h);
y_2 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0-2*h);
switch type
case 1,
df = (y1-y0)/h;
case 2,
df = (y0-y_1)/h;
case 3,
df = (y1-y_1)/(2*h);
case 4,
df = (-3*y0+4*y1-y2)/(2*h);
case 5,
df = (3*y0-4*y_1+y_2)/(2*h);
end

采用拉格朗日插值方法和三次样条插值对某列表函数求得近似插值函数，然后进行微分。

如给定$(x_i,\ f(x_i))$, $i=0,1,2$,设$x_2-x_1=x_1-x_0=h$,用拉格朗日插值计算$f'(x_0)$, $f'(x_2)$,$f'(x_2)$。

方式:

$$
\begin{aligned}
L_2(x) \quad = \quad & \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) \\
& +\frac{(x-x_1)(x-x_0)}{(x_2-x_1)(x_2-x_1)}f(x_2)
\end{aligned}
$$

$$f'(x)\approx L_2'(x)$$

$$=\frac{1}{2h}(\frac{(2x-x_1-x_2)}{h}f(x_0)-2\frac{(2x-x_0-x_2)}{h}f(x_1)+\frac{2x-x_0-x_1}{h}f(x_2$$

Continued

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \frac{1}{2h}(-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)) \\
f'(x_1) &= \frac{1}{2h}(-f(x_0)+f(x_2)) \\
f'(x_2) &= \frac{1}{2h}(f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2))
\end{aligned}
$$

左右边界点的一阶导数与内点的一阶导数不同，注意此关系在数值差分计算时如何使用已知导数的边界条件是非常有用的。

普适公式

利用误差修正求得高精度的数值微分公式，

$$\phi_1(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \Rightarrow \phi_1(h) = f'(x) - \sum_{n=1} a_{2n} h^{2n},$$

$$a_{2n} = \frac{f^{2n+1}(\xi)}{(2n+1)!}$$

将步长减半，$h \to h/2$，得到

$$\phi_1(\frac{h}{2}) = f'(x) - \sum_{n=1} a_{2n} \frac{h^{2n}}{2^{2n}}$$

$$2^2 \phi_1(\frac{h}{2}) - \phi_1(h) = (2^2 - 1) f'(x) - \sum_{n=1} a_{2n} \frac{h^{2n}}{2^{2n}}$$

令

$$\phi_2(h) = \frac{2^2 \phi_1(\frac{h}{2}) - \phi_1(h)}{2^2 - 1} \quad or \quad \phi_2(h) = \frac{4}{3} \phi_1(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3} \phi_1(h)$$

即进行了一个超松弛迭代，超松弛因子$w=4/3$,得

$$\phi_2(h)=f'(x)-\sum_{n=2}(\frac{1}{2^{2n-2}}-1)\frac{a_{2n}}{2^2-1}h^{2n}$$

精度是$O(h^4)$,继续逐次将步长差减半，会得到递推关系

$$\phi_m(h)=\frac{2^{2(m-1)}\phi_{m-1}(\frac{h}{2})-\phi_{m-1}(h)}{2^{2(m-1)}-1}$$

或另外两种变形, 得超松弛迭代形式和误差补偿形式，当误差达到精度要求时，停止迭代，

$$\begin{aligned}\phi_m(h) &= \frac{2^{2(m-1)\phi_{m-1}}(\frac{h}{2})}{2^{2(m-1)}-1}-\frac{1}{2^{2(m-1)}-1}\phi_{m-1}(h)\\ \phi_m(h) &= \phi_{m-1}(\frac{h}{2})+\frac{1}{2^{2(m-1)}-1}(\phi_{m-1}(\frac{h}{2})-\phi_{m-1}(h))\end{aligned}$$

$$f'(x)=\phi_m(h)-\sum_{n=m}\prod_{k=1}^{m-1}(\frac{2^{2k-2n}-1}{2^{2k-1}})a_{2n}h^{2n} \tag{7}$$

```
function df = Richason(func,x0,n,h)
for (i=1:n)
y1 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0+h/2^i);
y2 = subs(sym(func), findsym(sym(func)),x0-h/2^i);
G(i)=2^(i-1)*(y1-y2)/h;
end
G1=G;
for (i=1:n-1)
for (j=(i+1):n)
G1(j)=(G1(j)-(0.5)^(2*i)*G(j-1))/(1-(0.5)^(2*i))
end
df=G(n);
```

For example, 求$y = 2^x$在$x = 1$处的导数。

数值积分

- 很难得到被积函数$f(x)$的原函数；
- 虽然被积函数的原函数存在，但不能用初等函数表示成有限形式；
- 被积函数没有具体的表达式，其函数关系可能是数据列表或图形等.

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\Delta x}\sum_{i=0}^{n-1} f(\varepsilon_i)\Delta x_i \approx \sum_{x_i} w_i f(x_i)$$

式中的节点x_i满足$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$,$f(x_i)$是求积节点上的函数值，$\varepsilon_i$是求积节点上与$f(x)$无关的权重因子，不同的权重因子取法，给出不同的数值积分方法.

1. Equidistant Sample Points 牛顿-科茨求积公式
2. Optimized Sample Points 高斯积分公式

等间距样本点

等间距样本点, $x_i = a + ih, i = 0 \cdots n \quad h = \frac{b-a}{n}$, 通过拉格朗日方法, 获得$n$次插值多项式 $p(x_i) = f(x_i)$:

$$p(x) = \sum_i^n f_i \prod_{k=0,k\neq i}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$$

多项式的积分为

$$\int_a^b p(x)dx = \sum_i^n f_i \int_a^b \prod_{k=0,k\neq i}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k} dx$$

定义新的变量

$$\begin{aligned} x &= x + hs, \\ x - x_k &= h(s-k), \\ x_i - x_k &= (i-k)h. \end{aligned}$$

得到

$$\int_a^b \prod_{k=0,k\neq i}^{n} \frac{s-k}{i-k} h ds = h\alpha_i,$$

so

$$\int_a^b p(x)dx = (b-a)\sum_{i=0}^{n} f_i\alpha_i.$$

α_i 为权重因子:

1. Newton-Cortes Rules
2. Newton-Cortes Rules for an open interval
3. Composite Newton-Cotes Formulas
4. Extrapolation Method (Romberg Integration)

Newton-Cotes公式

$$\int_a^b p(x)dx \approx$$

1. $h\frac{f_0+f_1}{2}$, the trapezoidal rule;
2. $2h\frac{f_0+4f_1+f_2}{6}$, Simpson's rule;
3. $3h\frac{f_0+3f_1+3f_2+f_3}{8}$,$3/8$ rule;
4. $4h\frac{7f_0+32f_1+12f_2+32f_3+7f_4}{90}$, Milne rule;
5. $6h\frac{41f_0+216f_1+27f_2+272f_3+27f_4+216f_5+41f_6}{840}$, Weddle rule.

注意: n 太大，容易导致数据不稳定。

梯形公式

$n = 1$ 时，多项式为

$$p(x) = f_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

i.e.

$$l_0(x) = \frac{b - x}{b - a} \qquad l_1(x) = \frac{x - a}{b - a}$$

积分为

$$\begin{aligned}
\int_a^b p(x)dx &= f_0 \int_0^1 \frac{s - 1}{0 - 1} h ds + f_1 \int_0^1 \frac{s - 0}{1 - 0} h ds \\
&= -f_0 h(\frac{(1-1)^2}{2} - \frac{(0-1)^2}{2}) + f_1 h(\frac{1^2}{2} - \frac{0^2}{2}) \\
&= h \frac{f_0 + f_1}{2}.
\end{aligned}$$

梯形公式的误差

定义$f(x)$的余项$R_1(x)$,得

$$
\begin{aligned}
R_1(x) &= f(x) - L_1(x) \\
\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b L_1(x)dx + \int_a^b R_1(x)dx,
\end{aligned}
$$

则梯形公式的误差为 $\int_a^b R_1(x)dx$，在积分区间$[a,b]$, $x_0 \in (a,b)$, 再定义

$$K = \frac{R_1(x_0)}{(x_0-a)(x_0-b)}$$

我们可以构建新的函数

$$\varphi(x) = f(x) - L_1(x) - K(x-a)(x-b),$$

因为$L_1(x)$ 为一次函数，则 $L''(x)=0$. 如果$f(x)$在区间$[a,b]$有二阶导，则，可得

$$\varphi(x)=f''(x)-2K.$$

由下列条件

1. $L_1(a)=f(a), L_1(b)=f(b) \Rightarrow \varphi(a)=0, \varphi(b)=0.$
2. $\varphi(x_0)=f(x_0)-L_1(x)-K(x_0-a)(x_0-b)=R_1(x_0)-R_1(x_0)=0$

可得在积分区间$[a,b]$上有三个零点，和在$[a,x_0]$ 及 $[x_0,b]$ 上 $\varphi'(x)=0$. 同时，存在两点$\varphi''(x)=0$. 定义$x=\xi$, $\xi\in[a,b]$, 得

$$K=\frac{1}{2}f''(\xi),\quad \xi\in[a,b]$$

则

$$R_1(x)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x-a)(x-b),$$

梯形公式积分如下：

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) + \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx.$$

由平均值理论，在区间 (a,b)，$\bar{\xi}$ 满足

$$\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\bar{\xi}),$$

则

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) - \frac{(b-a)^3}{12}f''(\bar{\xi}), \bar{\xi} \in (a,b).$$

定义 $|f(\bar{\xi})| \le M$，得

$$|\int_a^b R_1(x)dx| \le \frac{M}{12}(b-a)^3 = \tilde{M}(b-a)^2,$$

则梯形公式误差为 $(b-a)^3 = O(h^3)$。证明其余项为$R = -\frac{h^3}{12}f''(\varepsilon)$

取 $n=2$, 在区间 $[a,b]$上，有三个不同点$x_0=a$, $x_1=\frac{a+b}{2}$, and $x_2=b$，且 $h=\frac{b-a}{2}$. 根据二次Larange 公式，即抛物线方程, 得

$$\begin{aligned} f(x) &\approx y_0 l_0(x)+y_1 l_1(x)+y2 l_2(x) \\ &= y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\ & \quad y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \end{aligned}$$

积分为 $\int_a^b l_0(x)dx=\frac{1}{3}h$, $\int_a^b l_1(x)dx=\frac{4}{3}h$, $\int_a^b l_2(x)dx=\frac{1}{3}h$,则积分公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx 2h\frac{f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)}{6}, R=-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\bar{\xi})$$

取$n=4$,$h=(b-a)/4$, 为科茨公式

$$\int_a^b = \frac{2h}{45}[7f(a)+32f(a+h)+12f(a+2h)+32f(a+3h)+7f(b)]$$

当步长为$h=(b-a)/n$,节点为$x_i=a+ih, i=0,1,\cdots,n$,设$x=a+th, dx=hdt, x-x_j=(a+th)-(a+jh)=h(t-j), x_i-x_j=h(i-j)$

$$\begin{aligned} w_i &= \int_a^b (\prod_{j=0,j\neq i}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j})dx = \int_0^n (\prod_{j=0,j\neq i}^{n} \frac{x-x_j}{i-j})hdt \\ &= \frac{h\int_0^n \prod_{j=0,j\neq i}^{n}(t-j)dt}{i(i-1)(i-2)\cdots(2)(1)(-1)(-2)\cdots(i-n)} \\ &= \frac{h(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\int_0^n \frac{\prod_{j=0}^{n}(t-j)}{t-i}dt \end{aligned}$$

上式为牛顿-科茨公式。

复化求积公式

积分区间大时，为提高数据积分精度，将区间$[a,b]$分成n个子区间，子区间长度为$h=(b-a)/n$,在每个子区间上使用低阶求积公式，再对所有子区间上的计算结果求和，得到区间$[a,b]$上积分的近似值，称为复化求积。对于最为简单的矩形区间，积分公式如下：

1. left trapezoidal formula

$$I_l = h\sum_{i=0}^{n-1} f(a+ih)$$

2. right trapezoidal formula

$$I_r = h\sum_{i=1}^{n} f(a+ih)$$

3. midpoint trapezoidal formula

$$I_m = h\sum_{i=0}^{n-1} f(a+(i+1/2)h)$$

An example

采用梯形公式，计算函数$\sin x$在区间$[0, \pi]$

```
. clc; clear all; format long;
n = 8;
for k = 1:n;
dx = pi/k;
x = 0:dx:pi;
xm = dx/2:dx:pi-dx/2;
f = sin(x); fm = sin(xm);
Il(k) = sum(f(1:k))*dx;
Ir(k) = sum(f(2:k+1))*dx;
Im(k) = sum(fm)*dx;
end
figure(1); set(gca,'FontSize',16);
plot(1:n,Il,'r-',1:n,Ir,'ko',1:n,Im,'b-','linewidth',2); xlabel('网格数');ylabel('积分值'); legend('左距形','右矩形','中点公式'); title('图4.2-3 例题4.2.4三种求积公式结果比较'); grid on;
```

复化梯形公式

对区间[a,b]进行n等分，子区间的长度$h=(b-a)/n$,取等距节点 $x_k=a+kh,\quad k=0,1,\cdots,2n,$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_k)+f(x_{k+1}))$$

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

The matlab 程序:

```
function T=TrapInt1(f,a, b, nsub)
n=nsub+1; % nsun-区间数，n-总节点数
h=(b-a)/nsub; % h-区间步长
x=a:h:b; % x-节点坐标
y=f(x); % y-节点函数值
T=h*(0.5*y(1)+sum(y(2:n-1)+0.5*y(n))
end
```

复化辛普森公式

对区间进行2n等分，子区间的长度$h=(b-a)/2n$,取等距节点 $x_k=a+kh,\quad k=0,1,\cdots,2n,$

$$\int_{x_{2m}}^{x_{2m+2}} \approx \frac{h}{3}(f(x_{2m})+4f(x_{2m+1})+f(x_{2m+2}))$$

$$\int_a^b = \frac{h}{3}(f(a)+4\sum_{m=1}^{n} f(x_{2m-1})+2\sum_{m=1}^{n-1} f(x_{2m})+f(b))$$

The matlab 程序:

```
function S=SimpInt1(f,a, b, ndouble-sub)
n=2*ndouble-sub+1; % n-总节点数
h=(b-a)/(n-1); % h-区间步长
x=a:h:b; % x-节点坐标
y=f(x); % y-节点函数值
S=(h/3)*(y(1)+4*sum(y(2:2:n-1))+2*sum(y(3:2:n-2))+y(n));
end
```

例题

求定积分

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

变步长的梯形公式

在给定精度条件下，难以确定积分范围的区间，实际应用中，经常采用变步长的求积公式，在步长逐次减半过程中，反复应用复化求积公式进行计算，直到相邻两次计算结果之差小于给定精度ε时终止计算。

$$T_n = \frac{h}{2}(f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)), \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}(f(x_k) + f(x_{k+1}))$$

然后将步长h折半，则在区间$[x_k, x_{k+1}]$上

$$\begin{aligned} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx &= \frac{1}{2}\frac{h}{2}(f(x_k) + f(x_{k+1/2})) + \frac{1}{2}\frac{h}{2}(f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1})) \\ &= \frac{1}{4}h(f_k) + 2f(x_{k+1/2}) + f(x_{k+1}) \end{aligned}$$

得

$$\begin{aligned} T_{2n} &= \frac{4}{h}\sum_{k=0}^{n-1}(f(x_k) + f(x_{k+1})) + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) \\ &= \frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k + \frac{h}{2}) \end{aligned}$$

计算每次二等分步长后的积分值，直到满足$|T_{2n} - T_n| < \varepsilon$为止。计算二分步长全的积分值，需要计算新增加的分点值$f(x_k + 1/2)$，原来节点的函数值不必重新计算。其算法为

1. 输入a, b, ε
2. $b - a \Rightarrow h$, $(h/2) * (f(a) + f(b)) \Rightarrow T \Rightarrow_1$
3. $0 \Rightarrow s, a + h/2 \Rightarrow x$
4. $s + f(x) \Rightarrow s, x + h \Rightarrow x$
5. 如果$x < b \to (4)$
6. $T_1/2 + (h/2) \cdot s \Rightarrow T_2$
7. 如果$|T_2 - T_1| \geq \varepsilon$, 则$h/2 \Rightarrow h$, $T_2 \Rightarrow T_1 \to (3)$, 否则，输出$T_2$，结束。

The accuracy of the integration can be improved by optimizing the sample point positions. We try to fully optimize the position of the n points x_i to obtain the maximum possible accuracy. We approximate the integral by a sum

$$\int_a^b f(x)dx \approx I = \sum_{I=1}^{N} f(x_i)w_i$$

we construct an orthogonal system of polynomials, If $W_n(x)$ is the orthogonal polynomial at interval $[-1,1]$, for anyone of polynomial with the order $< n$, $g_n(x)$ satisfies

$$\int_{-1}^{1} g_n(x)W_n(x)dx = 0$$

we define the polynomial, its order is smaller than $2n+1$, we can get

$$P(x) = Q(x)W_n(x) + R(x),$$

So the order of $Q(x)$ and $R(x)$ can not be larger than n,

$$\int_{-1}^{1} P(x)dx = \int_{-1}^{1} Q(x)W_n(x)dx + \int_{-1}^{1} R(x)dx.$$

Using the orthogonality $\int_{-1}^{1} Q(x)W_n(x)dx = 0$, we can the integration formula

$$\int_{-1}^{1} R(x)dx = \sum_{i=0}^{n} H_i R(x_i)$$

Considering $H_i = \int_{-1}^{1} l_i(x)dx$ and x_i is the root of $W_n(x)$, we can obtain

$$P(x_i) = R(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \cdots, n,$$

combining the above equation, we can obtain

$$\int_{-1}^{1} P(x)dx = \sum_{i=0}^{n} H_i P(x_i),$$

where $P(x)$ is a polynomial with $(2n+1)$ order. The accuracy is obviously high. x_i is the zero point of the n+1 order polynomial, named Gaussian point, and H_i is the Gaussian coefficient.

总结

- 数值微分;

总结

- 数值微分;
- 数值积分.

作业

1. 采用泰勒(Taylor)展开方法确定下列数值微分公式的系数 a, b, and c:
   $\phi(x_0, h) = af(x_0) + bf(x_0 + h) + cf(x_0 + 2h)$
   (提示：取$\phi(x_0, h) = f'(x_0), \phi(x_0, h) = f'(x_0)$).
2. 根据数值微分定义，编写数值微分计算
   $f(x) = \sin(x), 0 \le x \le 2\pi$
3. 按下列数据:

x	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
$f(x)$	5.7	4.6	3.5	3.7	4.9	5.2	5.5

分别用复化梯形和复化辛普森(Simpson)公式计算$\int_{0.6}^{0.8} f(x)dx$