Scientific Computation

Xiao Yunxuan

November 2017

1 正交多项式

1.1 勒让德多项式

1.1.1 形式

勒让德多项式是带权$\rho(x) = 1$的正交函数族, 是$\{1, x, x^2, \cdots, x^n, \cdots\}$通过正交化得到的,自然的次数从$1 - n$

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_n(x) = \dfrac{1}{2^n n!}\dfrac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \end{cases}$$

归一化后形式:

$$\widetilde{P_n}(x) = \frac{n!}{(2n)!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n = \frac{2^n(n!)^2}{(2n)!}P_n(x)$$

1.1.2 性质

性质1: 正交性

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0, & m \neq n; \\ \dfrac{2}{2n+1}, & m = n; \end{cases}$$

1.1.3 应用

1.勒让德多项式P_n零点作为n-rank Gauss-Legendre 求积公式插值点

2 数值积分

2.1 代数精度

若某种求积公式对次数$\leq m$的多项式准确成立

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

则其具有m次代数精度

直白表述：即能找到确定的插分点$\{x_k\}$及其对应的系数$\{A_k\}$,使得其线性组合能精确表示一组基$\{1, x, x^2, \cdots, x^m\}$，则其必对$P_m$精确成立。

化归为解线性方程组:

$$\begin{cases} \sum A_k = b - a \\ \sum A_k x_k = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ \qquad \vdots \\ \sum A_k x_k^m = \dfrac{1}{m+1}(b^{m+1} - a^{m+1}) \end{cases}$$

要刻画一个n次多项式，至少需要$n+1$个点，加上$n+1$个系数组成的$2n+2$个未知量的方程组

1.一般会告诉插分点,带进去解系数A_k

2.继续向下验证是否对x^{m+1}也成立，直到推到最大代数精度

PS:n阶求积公式——n+1插值点——最少n代数精度——对P_n精确成立

2.2 插值型求积公式

通过插值点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 得到插值函数$L_n(x)$，以插值函数的积分近似代替I。
(梯形公式与中矩形公式均是特殊的插值求积公式)

$$\begin{aligned}\int L_n(x)dx &= \int \sum f(x_k)l_k(x)dx \\ &= \sum f(x_k)\int l_k(x)dx \\ &= \sum f(x_k)A_k\end{aligned}$$

故系数即插值基函数的积分：

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx$$

求积公式的余相：

$$R[f] = \int [f(x) - L_n(x)] = \int R_n(x) = \int \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

1.对于 $\forall f(x) \in P_n(x):$ $R[f] = 0$精确成立

2.对于 $\forall f(x) \notin P_n(x):$ 有泛化公式：

$$R[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \boldsymbol{K} f^{(n+1)}(\xi)$$

据此可求出$n+1$**阶函数求积余项公式**(WARNING：此时$f(x) = x^{n+1}$)

$$\boldsymbol{K} = \frac{1}{(n+1)!}[\int_a^b x^{n+1}dx - \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{n+1}]$$

2.3 Newton-Cotes Formula

等距型插值求积公式

2.3.1 Trapezoidal Formula

$$n = 1, h = b - a$$

$$I \approx \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)]$$

$$R[f] = -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi) \qquad Accuracy = 1$$

2.3.2 Simpson Formula

$$n = 2, h = \frac{b-a}{2}$$

$$I \approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

$$R[f] = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \qquad Accuracy = 3$$

2.3.3 Newton Formula

$$n = 3, h = \frac{b-a}{3}$$

$$I \approx \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

$$R[f] = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi) \qquad Accuracy = 3$$

2.3.4 Cotes Formula

$$n = 4, h = \frac{b-a}{4}$$

$$I \approx \frac{2h}{45}[7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

$$R[f] = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi) \qquad Accuracy = 5$$

规律：偶次阶求积公式具有n+1阶精度。

定理

证明偶次阶求积公式具有n+1阶精度:

我们只需证明n $=$ Even Number时，Newton-Cotes 公式对$f = x^{n+1}$余项为0

引入变换$x = a + th$

$$
\begin{aligned}
R[f] &= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \\
&= \int_a^b \omega_{n+1}(x) \\
&= h^{n+1}\int_0^n \prod_{j=0}^{n}(t-j)dht \quad (Alter : t = u + \frac{n}{2}) \\
&= h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} \prod_{j=0}^{n}(u + \frac{n}{2} - j)du \quad (Moving\_towards\_left) \\
&= 0 \quad (Odd\_function)
\end{aligned}
$$

2.4 梯形算法外推化

将区间[a,b]n等分，再将n个区间二等分，得到$\{x_k, x_{k+\frac{1}{2}}\}$

使用复合梯形公式得到:

$$I = \frac{h}{4}[f(x_k) + f(x_k + \frac{1}{2}]$$