第四章　数值积分与数值微分

——Gauss求积公式、重积分与数值微分

刘可伋

上海财经大学 数学学院

一、知识回顾

对机械求积公式

思考：代数精度能再提高吗？

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

一般取等距节点，然后确定系数 A_i，然后得到代数精度至少为 n 的求积公式.

若 A_i，x_i 未知，则有 $2n+2$ 个未知参数，将

$$f = 1, x, x^2, \cdots, x^{2n+1}$$

代入使其精确成立，则可构造代数精度至少为 $2n+1$ 的求积公式！

例1 确定 x_0, x_1, A_0, A_1，使下式具有尽可能高的代数精度.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

解： 令求积公式对 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 精确成立，则

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases}，求得\ x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}, A_0 = A_1 = 1$$

对 $f(x) = x^4$ 不成立，故代数精度为 3

二、Gauss 型求积公式

考虑机械带权求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

定义：若有 $x_i \in [a,b]$与A_i，使上述公式代数精度为 $2n+1$，则称 x_i 为**高斯点**，A_i 为**高斯系数**，求积公式为**高斯(Gauss)型求积公式.**

> **注记**：1. 上述求积公式最少具有 $2n+1$ 次代数精度
>
> 2. **Gauss型求积公式**在机械求积公式中**代数精度最高**

如何计算 x_i 和 A_i ？

方法一：解非线性方程组

方法二：

（1）找 Gauss 点 x_i （如何找？）

（2）解线性方程组确定 Gauss 系数 A_i （较容易）

2.1　Gauss 点

定理：插值型求积公式中的节点 $x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是Gauss点的**充要条件**为：

$\omega_{n+1}=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ 与任意次数不超过 n 的多项式 $P(x)$ 都

关于权函数 $\rho(x)$ 正交，即

$$\int_a^b \rho(x)P(x)\omega_{n+1}(x)\,dx=0$$

推论：设 $P_0(x),P_1(x),\cdots,P_n(x),\cdots$ 是 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交的多项式族，

则 Gauss 点即为 $\boldsymbol{P_{n+1}(x)}$ **的零点**.

2.2 Gauss 型求积公式的计算

（1）求出 $\omega_{n+1}(x)$ 的表达式（利用与 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 带权正交）

（2）计算其零点

（3）计算 Gauss 系数

Gauss 点的两种特殊情形：

（1）$[a, b] = [-1,1]$，$\rho(x) = 1$

Gauss 点为 **Legendre 多项式的零点**

（2）$[a, b] = [-1,1]$，$\rho(x) = 1/\sqrt{1 - x^2}$

Gauss 点为 **Chebyshev 多项式的零点**

Gauss 系数计算方法：

法1：将 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 代入并解方程

法2：$A_i = \int_a^b \rho(x) l_i(x)\, dx$

例1 确定 x_0, x_1, A_0, A_1，使下式具有尽可能高的代数精度

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

解：设 $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) = x^2 + ax + b$，由正交性可得

$$\int_0^1 \sqrt{x}\,\omega(x)dx = 0,\quad \int_0^1 \sqrt{x}\,x\omega(x)dx = 0$$

可得 $\omega(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21}$，零点为 $x_0 = 0.289949$，$x_1 = 0.821162$

$$\frac{2}{3} = \int_0^1 \sqrt{x} \cdot 1\,dx = A_0 + A_1,\quad \frac{2}{5} = \int_0^1 \sqrt{x} \cdot x dx = A_0 x_0 + A_1 x_1$$

解得：$A_0 \approx 0.277556$，$A_1 \approx 0.389111.$

2.3 余项公式

设 $H_{2n+1}(x)$ 是 $f(x)$ 在 $x_i(i=0,1,\cdots,n)$上的 $2n+1$ 次**Hermite插值多项式**

$$H_{2n+1}(x_i)=f(x_i),\quad H'_{2n+1}(x_i)=f'(x_i)$$

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

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx=\int_a^b \rho(x)H_{2n+1}(x)\,dx+R_n[f]=\sum_{i=0}^{n}A_iH_{2n+1}(x_i)+R_n[f]$$

$$R_n[f]=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx,\quad \eta\in(a,b)$$

2.4　收敛性与稳定性

收敛性：当 a, b 为有限数，且 $f(x) \in C[a,b]$，

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b \rho(x) f(x)\,dx$$

稳定性：令 $f(x) = l_i^2(x) = \left(\prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \right)^2$

$$\int_a^b \rho(x) l_i^2(x)\,dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_i^2(x_j) = A_i > 0$$

2.5 Gauss-Legendre 求积公式

Gauss-Legendre (G-L) 求积公式

积分区间：$[-1,1]$，权函数： $\rho(x)=1$

Gauss 点：Legendre多项式 $P_{n+1}(x)$ 的零点

G − L公式：$\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

（1）$n=0$，$P_1(x)=x$，则 Gauss 点：0，将 $f(x)=1$ 代入，得 $A_0=2$

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx 2f(0)}$$

（2）$n=1$，$P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$，则 Gauss 点：$\pm\frac{\sqrt{3}}{3}$

将 $f(x)=1, x$ 代入，得 $A_0=A_1=1$

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

（3）$n=2$，$P_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$，则 Gauss 点：$0$， $\pm\frac{\sqrt{15}}{5}$

将 $f(x)=1,x,x^2$ 代入，得 $A_0=\frac{5}{9}$，$A_1=\frac{8}{9}$，$A_2=\frac{5}{9}$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right)+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right)$$

思考：$n\geq 3$ 如何求？

G-L公式余项：

$$R[f]=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_{-1}^{1}\tilde{P}_{n+1}^{2}(x)\,dx=\frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}f^{(2n+2)}(\eta)，\ \eta\in(-1,1)$$

一般区间 $[a,b]$ 上的G-L公式：

变量替换 $x=\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}$，令 $g(t)=f\left(\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}\right)$

$$\int_a^b f(x)\,dx=\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1}g(t)\,dt\approx\frac{b-a}{2}\sum_{i=0}^{n}A_i g(t_i)$$

例2 用三点G-L公式计算定积分

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x \, dx$$

解： 设 $x = \frac{\pi}{4}t + \frac{\pi}{4}$， 令 $g(t) = \frac{\pi^2}{16}(t+1)^2 \cos\frac{\pi}{4}(t+1)$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x \, dx = \frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1} \frac{\pi^2}{16}(t+1)^2 \cos\frac{\pi}{4}(t+1) \, dt$$

$$\approx \frac{\pi}{4}\left[\frac{5}{9}g\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right) + \frac{8}{9}g(0) + \frac{5}{9}g\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right)\right] \approx 0.4672$$

2.6 Gauss-Chebyshev 求积公式

积分区间：$[-1,1]$，权函数：$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

Gauss 点： Chebyshev多项式 $T_{n+1}(x)$ 的零点 $x_i=\cos\dfrac{2i+1}{2n+2}\pi\ (i=0,1,\cdots,n)$

G − C公式：$\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)\,dx\approx\frac{\pi}{n+1}\sum_{i=0}^{n}f(x_i)$

G-C公式余项：

$$R[f]=\frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta),\quad \eta\in(-1,1)$$

$$n=0,\quad \int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)\,dx\approx \pi f(0)$$

$$n=1,\quad \int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)\,dx\approx \frac{\pi}{2}\left[f\left(-\frac{\sqrt{2}}{2}\right)+f\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)\right]$$

$$n=2,\quad \int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}f(x)\,dx\approx \frac{\pi}{3}\left[f\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right)+f(0)+f\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\right]$$

例3 用五点G-C公式计算反常积分并估计误差

$$\int_{-1}^{1} \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

解： $\int_{-1}^{1} \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{5} \sum_{i=0}^{4} e^{\left(\cos \frac{2i-1}{2n+2}\pi\right)} \approx 3.9775$

误差为：$|R[f]| \leq \frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!} \left\| f^{(2n+2)}(\eta) \right\|_{\infty} = \frac{2\pi}{2^{10} \times 10!} e \leq 4.6 \times 10^{-9}$

思考： 如何编程？ CH4_5ex3.m

2.7 无穷区间的 Gauss 公式

（1）Gauss-Laguerre 求积公式

积分区间：$[0, +\infty]$，权函数： $\rho(x) = e^{-x}$

（2） Gauss-Hermite 求积公式

积分区间：$[-\infty, +\infty]$，权函数： $\rho(x) = e^{-x^2}$

2.8 Gauss 型求积公式的注记

优点：

（1）精度高 （2）可计算反常积分

缺点：

增加节点时，需重新计算Gauss点与Gauss系数

建议：

实际中可使用**复化的Gauss型求积公式**来提高精度

三、二重积分

考虑二重积分如何数值求解

$$\iint\limits_{\Omega} f(x,y)\,ds，\quad \Omega \subseteq \mathbb{R}^2$$

求解思路：先累次积分，再数值积分（为提高精度，可用复化求积公式）

$$\iint\limits_{\Omega} f(x,y)\,ds = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\,dy\,dx$$

$$\iint\limits_{\Omega} f(x,y)\,ds = \int_a^b \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x,y)\,dy\,dx$$

$$\iint\limits_{\Omega} f(x,y)\,ds = \int_a^b \int_{x_1(y)}^{x_2(y)} f(x,y)\,dx\,dy$$

例4 用两点G-L求积公式计算二重积分

$$\iint_{\Omega} (x^2 + 2y^2)\, ds，\ \Omega = [-1,1]\times[-1,1]$$

解： $\iint_{\Omega} x^2 + 2y^2\, ds = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}(x^2+2y^2)\, dy\, dx$

令 $f(x,y) = x^2 + 2y^2$，则

$$\int_{-1}^{1}\left[\int_{-1}^{1}(x^2+2y^2)\, dy\right]dx \approx \int_{-1}^{1}\left[f\left(x,-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)+f\left(x,\frac{\sqrt{3}}{3}\right)\right]dx = \int_{-1}^{1}\left(2x^2+\frac{4}{3}\right)dx = 4$$

四、数值微分

已知 $f(x)$ 在 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 的函数值，对 $[a,b]$ 内任意一点，如何计算该点的导数值?

基本思想：函数值的线性组合近似导数值

（1）**插值多项式近似**

构造插值多项式 $P_n(x)$ 近似 $f(x)$，然后 $f'(x) \approx P_n{}'(x)$

（2）**差商近似**

插值多项式近似的余项

$$f'(x) - P_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left[\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\right]' + \frac{1}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\,\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi_x)$$

节点 x_i 处的余项

$$f'(x_i) - P_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0,j\neq i}^{n}(x_i - x_j)$$

4.1　两点公式

节点 x_0, x_1，步长 $h = x_1 - x_0$

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) = \frac{-(x - x_1)f(x_0) + (x - x_0)f(x_1)}{h}$$

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \frac{h}{2} f''(\xi_0)}$$

$$\boxed{f'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \frac{h}{2} f''(\xi_1)}$$

4.2 三点等距公式

思考： 如何近似高阶导数？

步长 h，节点$x_i = x_0 + ih$，$i = 0,1,2$

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_2-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

4.3 差商近似导数

$$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{1}{2!}h^2f''(x)+\frac{1}{3!}h^3f^{(3)}(x)+\cdots$$

向前差商： $f'(x)=\dfrac{f(x+h)-f(x)}{h}+\mathcal{O}(h)$

思考： 如何提高精度？

$$f(x-h)=f(x)-hf'(x)+\frac{1}{2!}h^2f''(x)-\frac{1}{3!}h^3f^{(3)}(x)+\cdots$$

向后差商： $f'(x)=\dfrac{f(x)-f(x-h)}{h}+\mathcal{O}(h)$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x) + \frac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x) - \frac{1}{3!}h^3 f^{(3)}(x) + \cdots$$

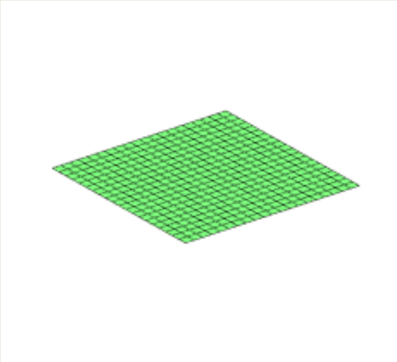
中心差分： $f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$

外推技巧：

$$G_0(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

$$G_1(h) := \frac{4G_0\left(\frac{h}{2}\right) - G_0(h)}{3} = f'(x) + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots$$

$$G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}\left(\frac{h}{2}\right) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}, \quad f'(x) - G_m(h) = \mathcal{O}\left(h^{2(m+1)}\right)$$



求解微分方程：**波动方程、热传导方程**等

小结

余项、收敛性、稳定性

数值积分

数值微分

Gauss求积公式

重积分公式

插值型求导公式

差商求导公式

G-L公式，G-C公式

习题与编程题见课程网页：

1、参考书目

[1]《第三种科学方法：计算机时代的科学计算》，石忠慈著，清华大学出版社，2000

[2]《数值分析》，张平文等著，北京大学出版社，2007

[3]《数值分析》，冯烟利等译，高等教育出版社，2005

2、网络学习资源

(1) https://www.icourse163.org/course/NEU-1002089009?from=searchPage《数值分析》精品课程

(2) https://uk.mathworks.com/help/pdf_doc/matlab/getstart.pdf（MATLAB入门）

(3) https://www.icourse163.org/course/CSU-1002475002?from=searchPage《科学计算与MATLAB语言》精品课程

3、拓展性参考文献

[1] D. Liu et. al, The existence and numerical method for a free boundary problem modeling the ductal carcinoma in situ, Applied Mathematics Letters 121(107378), 2021.