

《数值分析》之

数值积分

徐岩，夏银华

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn, yhxia@ustc.edu.cn

<https://bb.ustc.edu.cn/>

数值积分结点的选择

- 数值积分公式

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

在一旦结点取定后，只要加上条件“对次数不超过 n 的多项式精确成立”，那么组合系数就唯一确定

- 在Simpson法则中，虽然积分公式是利用“次数不超过2的多项式精确成立”确定的，但最后却对三次多项式也精确成立。因此自然的问题是：能否通过选择结点，使得积分公式更好？

数值积分结点的选择

- ① 是否存在所有组合系数都相等的积分公式?

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

- ② 通过对 $n+1$ 个结点的选取, 使得积分公式对尽可能高的多项式精确成立? 目标是对“次数不超过 $2n+1$ 的多项式精确成立”

Tchebyshev积分公式

- 在数值积分公式中，如果所有的组合系数是相同的，那么可以大大减少计算的乘法次数。这称为Tchebyshev积分公式(Tchebyshev's quadrature formulas)
- 为了简单起见，通常的积分区间取为 $[-1, 1]$

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{2}{n+1} \sum_{i=0}^n f(x_i)$$

- 只有当 $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8$ 时才存在这样的积分公式
- 当 $n = 0, 1, 2, 3, 4$ 时，结点可以解析写出，其它情形只有数值解

- $n = 0, x_0 = 0$
- $n = 1, x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3} \approx -0.57735, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$
- $n = 2, x_0 = -\frac{\sqrt{2}}{2} \approx -0.707107, x_1 = 0, x_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$
- $n = 3, x_0 = -\sqrt{\frac{\sqrt{5}+2}{3\sqrt{5}}} \approx -0.794654,$
 $x_1 = -\sqrt{\frac{\sqrt{5}-2}{3\sqrt{5}}} \approx -0.187592, x_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{5}-2}{3\sqrt{5}}}, x_3 = \sqrt{\frac{\sqrt{5}+2}{3\sqrt{5}}}$
- $n = 4, x_0 = -\sqrt{\frac{5+\sqrt{11}}{12}} \approx -0.832497,$
 $x_1 = -\sqrt{\frac{5-\sqrt{11}}{12}} \approx -0.374541, x_2 = 0, x_3 = \sqrt{\frac{5-\sqrt{11}}{12}},$
 $x_4 = \sqrt{\frac{5+\sqrt{11}}{12}}$

- $n = 5$, $x_j = \pm 0.2666354015, \pm 0.4225186537, \pm 0.8662468181$
- $n = 6$,
 $x_j = 0, \pm 0.3239118105, \pm 0.5296567752, \pm 0.8838617007$
- $n = 8$, $x_j = 0, \pm 0.167906, \pm 0.528762, \pm 0.601019, \pm 0.911589$

在两点数值积分公式中，如果积分点也作为未知量，则有4个未知量，可以列出4个方程：（以 $f(x)$ 在 $[-1, 1]$ 为例）

$$\begin{aligned} 2 &= \int_{-1}^1 dx = A_0 + A_1, & 0 &= \int_{-1}^1 x dx = A_0 x_0 + A_1 x_1 \\ \frac{2}{3} &= \int_{-1}^1 x^2 dx = A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2, & 0 &= \int_{-1}^1 x^3 dx = A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 \end{aligned}$$

可解出

$$A_0 = 1, A_1 = 1, x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

数值积分公式

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

Theorem (Gauss积分定理)

设 w 是正的权函数， q 是一个 $n+1$ 次非零多项式，并且与 n 次非零多项式是关于 w 正交的，即对任意 n 次非零多项式 p 都有

$$\int_a^b q(x)p(x)w(x)dx = 0$$

若 x_0, x_1, \dots, x_n 是 q 的零点，则下述积分公式对所有 $2n+1$ 次非零多项式 f 精确成立：

$$\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad A_i = \int_a^b w(x) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx$$

$2n+1$ 次非零多项式 f , 用 q 去除 f , 得到商 p 和余式 r , p, r 为 n 次非零多项式, 则有

$$f = qp + r,$$

因此 $f(x_i) = r(x_i)$. 根据正交定义, 以及积分公式对所有 n 次非零多项式精确成立, 可得

$$\int_a^b f(x)w(x)dx = \int_a^b rwdx = \sum_{i=0}^n A_i r(x_i) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$



Gauss积分公式计算

对于给定的 n ，积分区间 $[a, b]$ 和权函数 w ，可以如下确定Gauss积分公式：

- 采用正交多项式递推公式，计算出 $n+1$ 次关于 w 正交的多项式，并且计算出它的零点
 - 对于较大的 n ，需要用数值方法求出所有的根
- 系数 A_j 可以采用待定系数法确定
- 在许多数学手册中给出了各种类型的积分公式结点以及系数的表格，使用时可以直接查手册

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
1	0	2	6	± 0.9324695142	0.1713244924
2	± 0.5773502692	1		± 0.6612093865	0.3607615730
3	± 0.7745966692	0.5555555556		± 0.2386191861	0.4679139346
	0	0.8888888889	7	± 0.9491079123	0.1294849662
4	± 0.8611363116	0.3478548451		± 0.7415311856	0.2797053915
	± 0.3399810436	0.6521451549		± 0.4058451514	0.3818300505
5	± 0.9061798459	0.2369268851	8	0	0.4179591837
	± 0.5384693101	0.4786286705		± 0.9602898565	0.1012285363
	0	0.5688888889		± 0.7966664774	0.2223810345
				± 0.5255324099	0.3137066459
				± 0.1834346425	0.3626837834

正交多项式的零点

- 在Gauss积分定理中需要 $n+1$ 次多项式 q 的根都落在区间 $[a, b]$ 内，并且都是单根。

Theorem (符号变化次数定理)

设 w 是 $C[a, b]$ 中正的权函数，并且 f 是 $C[a, b]$ 中与 Π_n 关于 w 正交的非零元，那么 f 在 $[a, b]$ 上至少变号 $n+1$ 次

证明：由于 $1 \in \Pi_n$ ，所以 $\int_a^b f(x)w(x)dx = 0$ ，从而 f 至少变号一次。假设 f 在 $[a, b]$ 上变号 r 次， $r \leq n$ ，并且变号点 t_i 满足

$$a = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_r < t_{r+1} = b$$

则多项式 $p(x) = (x - t_1) \cdots (x - t_r) \in \Pi_n$ 与 f 在每个区间 $[t_i, t_{i+1}]$ 上恒同号或恒反号，从而 $\int_a^b f(x)p(x)w(x)dx \neq 0$ ，与正交性矛盾。 □

Legendre多项式

n 次多项式

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

称为Legendre多项式, $\{L_n(x)\}$ 为 $[-1, 1]$ 上的正交多项式系, 即

$$(L_n(x), L_m(x)) = \int_{-1}^1 L_n(x) L_m(x) dx = 0, \quad m \neq n$$

性质

- $L_n(x)$ 在 $(-1, 1)$ 上有 n 个相异的实根
- $L_n(x)$ 在 $[-1, 1]$ 上正交于任何一个不高于 $n-1$ 次的多项式, 即若 $P(x)$ 为一个不高于 $n-1$ 次的多项式, 则

$$(L_n(x), P(x)) = \int_{-1}^1 L_n(x) P(x) dx = 0$$

Legendre多项式

$$p_0(x) = 1$$

$$p_1(x) = x$$

$$p_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$$

$$p_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$$

$$p_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}$$

$$p_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$

- Gauss原创性工作的情形： $w(x) = 1$, $[a, b] = [-1, 1]$

- $n = 1$:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$$

$x_i = \pm 1/\sqrt{3}$ 为二次Legendre多项式 $p_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$ 的零点

- $n = 4$:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) + A_3 f(x_3) + A_4 f(x_4)$$

其中 x_i 为五次Legendre多项式

$$p_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)$$

的零点

Gauss积分的理论分析

Lemma

在 Gauss 积分公式中, 组合系数为正数, 而且它们的和是 $\int_a^b w(x)dx$

证明: 对于给定的 n , Gauss 积分公式中的结点是 $n+1$ 次多项式 q 的零点, 其中 q 关于 w 与 n 次非零多项式正交。对于固定的 j , 令 $p = q/(x - x_j)$, 则 $\deg p^2 \leq 2n$, 所以积分公式对它精确成立, 即

$$0 < \int_a^b p^2(x)w(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i p^2(x_i) = A_j p^2(x_j)$$

因此可得 $A_j > 0$. 由于积分公式对于 $f(x) \equiv 1$ 精确成立, 所以

$$\int_a^b w(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i$$

Theorem

若 f 在 $[a, b]$ 上连续, 则当 $n \rightarrow \infty$ 时近似积分公式

$$\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_{n,i}f(x_{n,i}), \quad n \geq 0$$

收敛于积分

证明: 根据Weierstrass定理, 对于任意 $\varepsilon > 0$, 存在多项式 p 满足 $|f(x) - p(x)| < \varepsilon$, $x \in [a, b]$. 对于任一整数 n , $2n > \deg p$, 则 n 次Gauss积分公式对于 p 精确成立, 从而有(接下页)

$$\begin{aligned}
& \left| \int_a^b f(x)w(x)dx - \sum_{i=0}^n A_{n,i}f(x_{n,i}) \right| \\
& \leq \left| \int_a^b f(x)w(x)dx - \int_a^b p(x)w(x)dx \right| \\
& \quad + \left| \sum_{i=0}^n A_{n,i}p(x_{n,i}) - \sum_{i=0}^n A_{n,i}f(x_{n,i}) \right| \\
& \leq \int_a^b |f(x) - p(x)|w(x)dx + \sum_{i=0}^n A_{n,i}|p(x_{n,i}) - f(x_{n,i})| \\
& \leq \varepsilon \int_a^b w(x)dx + \varepsilon \sum_{i=0}^n A_{n,i} = 2\varepsilon \int_a^b w(x)dx
\end{aligned}$$



带误差项的Gauss积分定理

Theorem

考虑带误差项的Gauss积分公式：

$$\int_a^b f(x)w(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} A_i f(x_i) + E$$

若 $f \in C^{2n}[a, b]$, 则有

$$E = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b q^2(x)w(x)dx$$

其中 $\xi \in (a, b)$, $q(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$

证明：应用Hermite插值，存在次数不超过 $2n - 1$ 的多项式 p , 满足

$$p(x_i) = f(x_i), p'(x_i) = f'(x_i), i = 0, 1, \dots, n - 1$$

这个插值的误差公式为

$$f(x) - p(x) = \frac{1}{(2n)!} f^{(2n)}(\zeta(x)) q^2(x)$$

因此

$$\begin{aligned} & \int_a^b f(x) w(x) dx - \int_a^b p(x) w(x) dx \\ &= \frac{1}{(2n)!} \int_a^b f^{(2n)}(\zeta(x)) q^2(x) w(x) dx \\ &= \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b q^2(x) w(x) dx \end{aligned}$$

再根据 p 的次数不超过 $2n-1$ 即可得所需要的有误差项的积分公式



Gauss积分的应用：无界积分区间情形的积分

- 假设考虑的区间为 $[0, +\infty)$
- 为了计算积分

$$\int_0^{\infty} f(x) dx$$

引入权因子 e^{-x} , 把积分变形为

$$\int_0^{\infty} \varphi(x) e^{-x} dx$$

- 从而我们考虑在 $[0, +\infty)$ 上的关于权 e^{-x} 正交的多项式, 以它们的零点应用Gauss积分公式

- 即在 $[0, +\infty)$ 上的关于权 e^{-x} 正交的多项式
- 其定义为

$$\mathcal{L}_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n) \quad n \geq 0$$

- 满足递推关系：

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{n+1}(x) &= (2n+1-x)\mathcal{L}_n(x) - n^2\mathcal{L}_{n-1}(x), \quad n \geq 0 \\ \mathcal{L}_{-1} &= 0, \quad \mathcal{L}_0 = 1 \end{aligned}$$

$(-\infty, +\infty)$ 上的积分与Hermite多项式

- 如果考虑 $(-\infty, +\infty)$ 上的积分，那么引入权因子 e^{-x^2}
- 在 $(-\infty, +\infty)$ 上关于 e^{-x^2} 正交的多项式称为Hermite多项式

① 定义：

$$\mathcal{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad n \geq 0$$

② 递推关系：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n+1}(x) &= 2x\mathcal{H}_n(x) - 2n\mathcal{H}_{n-1}(x), \quad n \geq 0 \\ \mathcal{H}_{-1} &= 0, \quad \mathcal{H}_0 = 1 \end{aligned}$$

Gauss型求积公式

- Gauss-Legendre求积公式

区间 $[-1, 1]$ 上权函数 $w(x) = 1$ 的Gauss型求积公式,称为Gauss-Legendre求积公式,其Gauss点为Legendre多项式的零点.

- Gauss-Laguerre求积公式

区间 $[0, +\infty)$ 上的权函数为 $w(x) = e^{-x}$ 的Gauss型求积公式,称为Gauss-Laguerre求积公式,其Gauss点为Laguerre多项式的零点.

- Gauss-Hermite求积公式

区间 $(-\infty, +\infty)$ 上的权函数为 $w(x) = e^{-x^2}$ 的Gauss型求积公式,称为Gauss-Hermite求积公式,其Gauss点为Hermite多项式的零点.

上机作业

- 利用复化梯形积分公式和复化3点Gauss积分公式计算积分的通用程序计算下列积分

$$I_1(f) = \int_0^1 e^{-x^2} dx, \quad I_2(f) = \int_0^4 \frac{1}{1+x^2} dx,$$

$$I_3(f) = \int_0^{2\pi} \frac{1}{2 + \cos(x)} dx$$

取节点 $x_i, i = 0, \dots, N$, N 为 $2^k, k = 1, \dots, 7$, 给出如下的误差表格, 其中阶为 $\frac{\ln(Error_{old}/Error_{now})}{\ln(N_{now}/N_{old})}$.

	$I_1(f)$		$I_2(f)$		$I_3(f)$	
N	误差	阶	误差	阶	误差	阶
2						
4						
8						
16						

- 简单分析你得到的数据