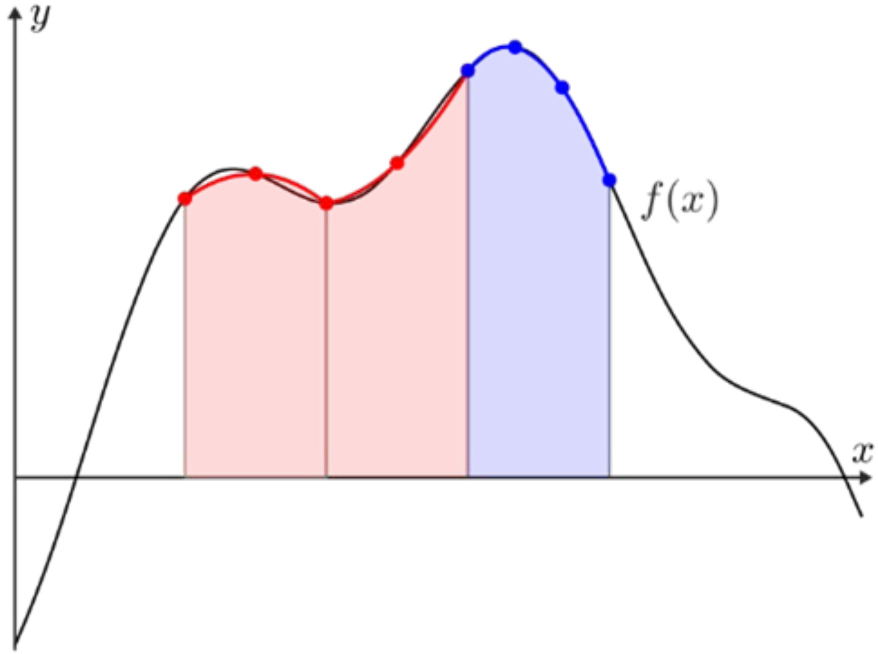
计算物理 第一部分

第5讲 数值积分



李强 北京大学物理学院西楼227

qliphy0@pku.edu.cn，15210033542

引言

本章中我们讨论利用数值方法进行函数的积分。利用数值方法计算定积分是很多物理分支中必须面对的课题。**这一章中我们将仅仅涉及普通的单自变量函数在一维的定积分。**对于多元函数在多维空间的积分，一般采用Monte Carlo方法更为合适。

- **等间距的数值积分公式：Newton-Cortes(牛顿-柯特斯）**
- **外推积分方法**
- **利用正交多项式的高斯积分法**

等间距的数值积分公式

我们首先来考察数值积分的函数计算点是等间距的情形。假定我们希望计算积分，

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

通常的做法–实际上也是积分的最初数学定义–是**将有限的区间[a,b] 等分为N份，每一份的长度为h=(b−a)/N**。我们令，

$$x_0 \equiv a, x_1 = x_0 + h, \cdots, x_N = x_0 + Nh = b \, ,$$

并且计算各个点的函数值，

$$f(x_i) = f_i \, , \quad i = 0, 1, \cdots, N \, .$$

那么我们可构造最基本的所谓梯形法则来近似函数的积分，

$$I \approx h\left[\frac{1}{2}f_0 + f_1 + \cdots + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N\right]$$

Newton-Cortes

$$I=\int_a^b f(x)dx$$

我们认定**$a=x_0<x_0+h<\cdots<x_N=b$**构成了区间[a,b]的一个分割。我们知道我们可以**利用Lagrange内插公式**，

$$P_N(x)=\sum_{i=0}^{N} f_i L_i(x) \qquad L_j(x)=\prod_{0\le m\le n m\neq j}\frac{x-x_m}{x_j-x_m},\ j=0,1,\cdots,n$$

这个多项式经过所有的N+1个点(x_i,f_i)。利用这个内插公式计算积分话，我们得到，

$$\boxed{\int_a^b P_N(x)dx=\sum_{i=0}^{N} f_i\int_a^b L_i(x)dx}$$

现在我们令

$$x=a+ht,\quad t\in[0,N]$$

同时令

$$L_i(x)\equiv\phi_i(t)=\prod_{k=0,k\neq i}^{N}\frac{t-k}{i-k}$$

于是我们就得到，

$$\boxed{\int_a^b P_N(x)dx=h\sum_{i=0}^{N} f_i\alpha_i,\quad \alpha_i=\int_0^N \phi_i(t)dt}$$

Newton-Cortes

例如我们取N=2，我们有

$$\alpha_0 = \int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\frac{t-2}{0-2}dt = \frac{1}{3}$$

类似的计算给出α_1=4/3, α_2=1/3。于是我们得到著名的**Simpson 规则(或者称为Simpson公式)**，

$$\boxed{\int_a^b P_2(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2).}$$

对于任意的N点公式，一般称为**Newton-Cortes公式**。它的形式为，

$$\boxed{\int_a^b P_N(x)dx = h\sum_{i=0}^{N} f_i\alpha_i}$$

其中权重α_i源于有理系数的多项式在[0,N]上的积分，因此它们必定都是有理数。通常将它们写为分数的形式。它们还满足一个约束条件

$$\boxed{\sum_{i=0}^{N}\alpha_i = N}$$

这可以在上面的Newton-Cortes公式中令f(x)=1(从而$P_N(x)\equiv1$并且$f_i\equiv1$)获得。

Newton-Cortes

$$\int_a^b P_N(x)dx = h\sum_{i=0}^{N} f_i\alpha_i, \quad \alpha_i = \int_0^N \phi_i(t)dt$$

我们可以将其通分，**令$\alpha_i=\sigma_i/s$，其中的σ_i和s都是正整数，s是各个 α_i共同的分母**，这样一来公式可以写成:

$$\int_a^b P_N(x)dx = \frac{b-a}{Ns}\sum_{i=0}^{N} f_i\sigma_i \qquad \sum_i(\sigma_i/Ns)=1$$

对计算积分I(f)的求积公式$I_n(f)$，**称$I(f)-I_n(f)$为该公式的积分余项，记为R[f]**。积分余项反映了求积公式的截断误差，是衡量求积公式准确度的重要依据。假设$I_n(f)$为某个插值函数p(x)的积分，则

$$R[f] = \int_a^b [f(x)-p(x)]dx$$

即积分余项等于插值余项的积分。对拉格朗日插值，我们有

$$R[f] = \int_a^b [f(x)-P_N(x)]dx = \int_a^b \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}\omega(x)dx$$

$$\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_N)。$$

Newton-Cortes

$$R[f]=\int_a^b[f(x)-P_N(x)]dx=\int_a^b\frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}\omega(x)dx$$

$$\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_N)。$$

设**x=a+th**，那么 ω(x)积分可以写成

$$\boxed{\int_a^b\omega(x)dx=h^{N+2}\int_0^N\prod_{j=0}^N(t-j)dt}$$

当N是偶数时，我们可以令t=u+N/2，那么积分可以写成

$$\boxed{h^{N+2}\int_{-N/2}^{N/2}\prod_{j=0}^N(u+\frac{N}{2}-j)du=h^{N+2}\int_{-N/2}^{N/2}\prod_{j=-N/2}^{N/2}(u-j)du}$$

可以看出来被积函数是个奇函数，所以积分等于0!

如果我们想要逼近的函数本身是N阶多项式，那么P_N对f(x)的逼近提供的是一个精确解，因为这个时候f^(N+1)(ξ)=0。
如果N是偶数，P_N(x)的表示可以严格表达一个N+1阶多项式的积分，因为这个时候f^(N+1)(ξ)=constant。尽管f^(N+1)(ξ)!=0，我们却可以把这个常数提取到积分的外面，**而对于ω(x)的积分，当N是偶数时，积分为0。因此截断误差比我们预判的还要高一阶。**

Newton-Cortes

…也就是说偶数阶的牛顿-柯特斯公式与比它高一阶的公式拥有相同阶数的截断误差。

我们来看一个表。Newton-Cortes积分表达式对N=1, 2,···,6的情形

$$P_1(x) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

$$P_2(x) = \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$$

N	σ_i	Ns	误差估计	名称
1	1 1	2	$h^3(1/12)f^{(2)}(\xi)$	梯形法则
2	1 4 1	6	$h^5(1/90)f^{(4)}(\xi)$	Simpson 规则
3	1 3 3 1	8	$h^5(3/80)f^{(4)}(\xi)$	3/8 规则
4	7 32 12 32 7	90	$h^7(8/945)f^{(6)}(\xi)$	Milne 规则，也称 Cotes 公式
5	19 75 50 50 75 19	288	$h^7(275/12096)f^{(6)}(\xi)$	
6	41 216 27 272 27 216 41	840	$h^9(9/1400)f^{(8)}(\xi)$	Weddle 规则

$$P_4(x) = \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$$

同学们也许会说，比较梯形法则和Simpson规则的时候不太公平，因为梯形法则只取了两个点做内插，而Simpson规则取了3个点。我们也可以在3个点的时候用梯形法则，这个时候h由h=(b−a)/2降到h=(b−a)/3，也就是说步长和Simpson规则一样，但是误差一个是O(h^3)，另一个是O(h^5)。

Newton-Cortes

Quadrature function

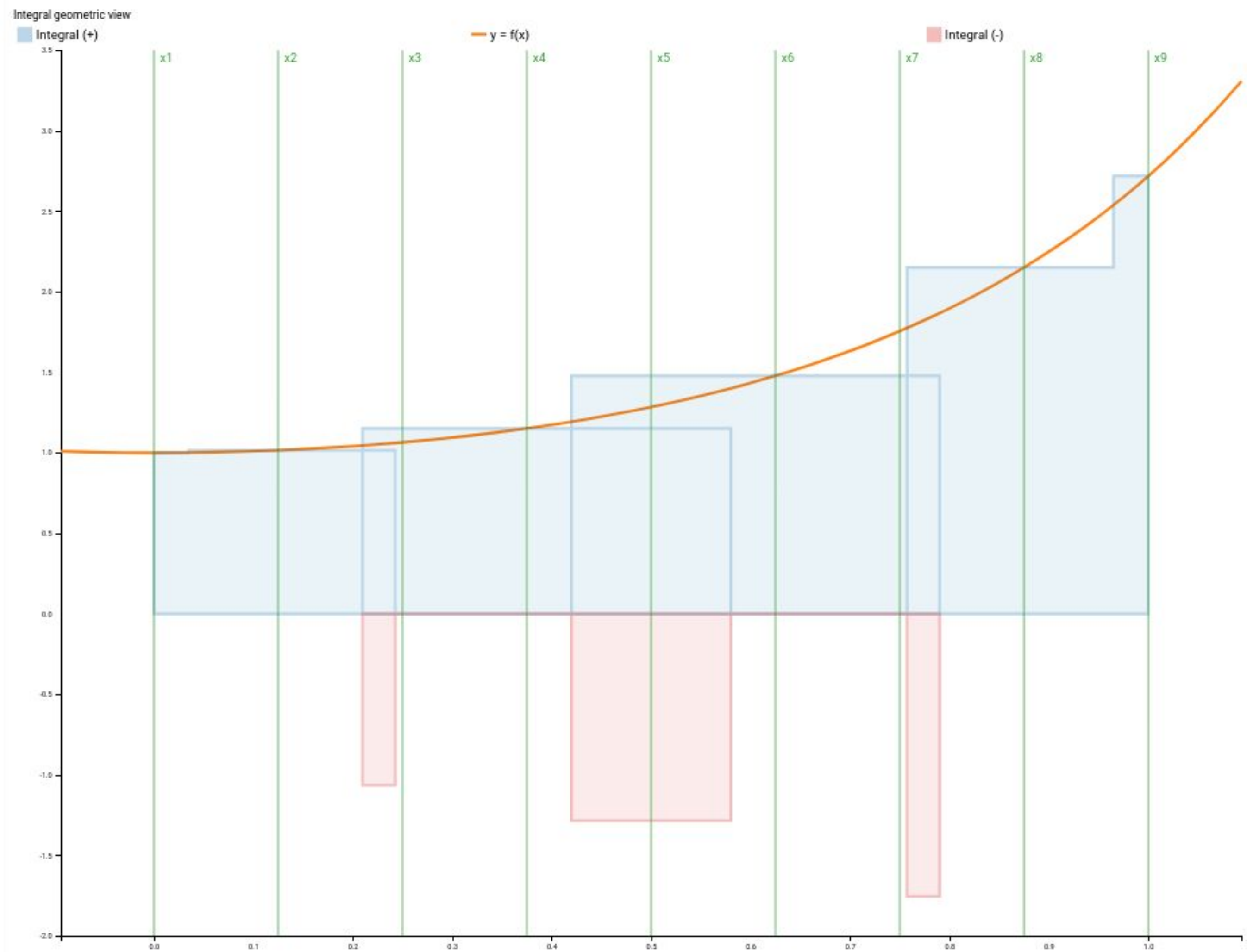
$$\int_{x_1}^{x_9} f(x)\,dx \approx \frac{4}{14175} h \left(989(f(x_1)+f(x_9)) + 5888(f(x_2)+f(x_8)) - 928(f(x_3)+f(x_7)) + 10496(f(x_4)+f(x_6)) - 4540 f(x_5)\right)$$

$$h = \frac{(x_9 - x_1)}{8}$$

Method error

$$-\frac{2368}{467775} h^{11} f^{(9)}(\xi)$$

$$x_1 \le \xi \le x_9$$



积分公式的收敛性和稳定性

收敛性的定义比较直接，对于n的值可为任意正整数的一系列求积公式

$$I_n(f)=\frac{b-a}{Ns}\sum_{i=0}^{N} f_i\sigma_i。\ a\le x_0\le x_1\le\cdots\le b,$$

若 $$\boxed{\lim_{n\to\infty,h\to 0} I_n(f)=\int_a^b f(x)dx} \quad h=\max_{1\le k\le n}(x_k-x_{k-1}),$$

则称这一系列求积分公式具有收敛性

在讨论求积分公式的稳定性之前，我们先分析**数值积分问题的敏感性和条件数**。假设f(x)为准确的被积函数，˜f(x)为实际计算时受扰动影响的被积函数，扰动的大小为

$$\delta=\|f(x)-\tilde f(x)\|_\infty=\max_{a\le x\le b}|f(x)-\tilde f(x)|。$$

那么扰动对积分计算的影响

$$\left|\int_a^b f(x)dx-\int_a^b \tilde f(x)dx\right|\le\int_a^b |f(x)-\tilde f(x)|dx\le(b-a)\delta$$

积分区间的长度(b−a)是绝对条件数的上限。一般来说，数值积分问题是不太敏感的，这点不难理解，因为积分运算本身就是一个平均过程，它不容易受被积函数的小扰动影响。

积分公式的收敛性和稳定性

求积分公式的稳定性是与我们如何选取积分公式有关的，比方说我们是选择梯形公式还是选择Simpson公式。**它反映了计算过程中的扰动是否被放大，以及放大的程度**。具体来说我们需要考虑积分节点的函数值出现误差时，它对结果产生的影响。假设节点函数值由f_i变成了$\tilde{f}_i$，则数值积分的结果由$I_n(f_i)$变成$I_n(\tilde{f}_i)$，两者之间的差满足

$$
\begin{aligned}
|I_n(f)-I_n(\tilde{f})| &= \frac{b-a}{Ns}\left|\sum_{i=0}^{n}\sigma_i\left[f_i-\tilde{f}_i\right]\right| \\
&\le \frac{b-a}{Ns}\sum_{i=0}^{n}|\sigma_i|\cdot|f_i-\tilde{f}_i| \\
&\le \frac{b-a}{Ns}\left(\sum_{i=0}^{n}|\sigma_i|\right)\epsilon
\end{aligned}
$$

$$\epsilon=\max_{0\le i\le n}|f_i-\tilde{f}_i|\le\delta,$$

这时，我们分情况分析。如果σ_i全是正数，那么

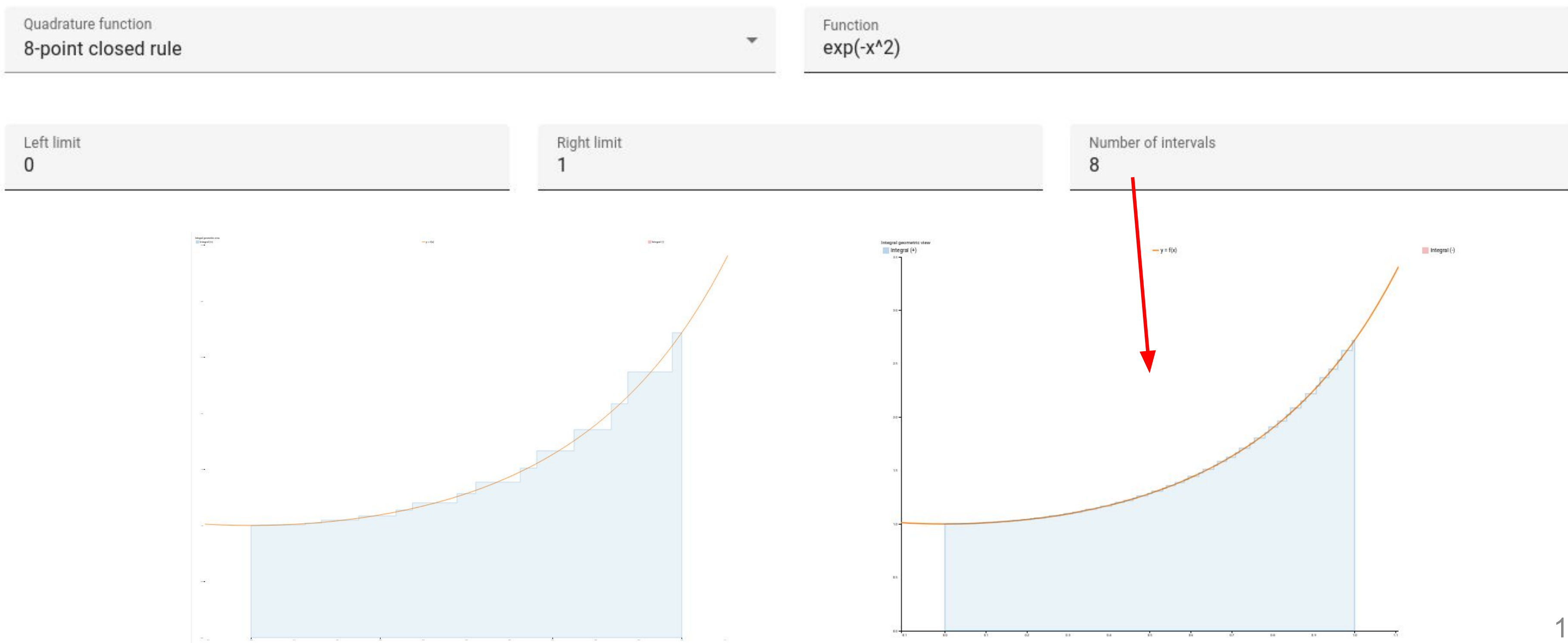
$$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|\le(b-a)\epsilon\le(b-a)\delta$$

说明求积分公式的结果受扰动的影响程度与积分问题敏感性的结果一致。**如果σ_i有正有负**，比方说像Newton-Cortes积分在$n\ge8$的情况下就会出现σ_i相消,**从而导致函数值的扰动在计算结果上被放大很多。**

Newton-Cortes

在真实计算数值积分时，我们往往并不是将上述规则直接运用到待积分的整个区间，而是**首先将积分区间分为若干个小段，然后分别在各个小段上运用这些积分公式**。

换句话说，我们经常使用的是**所谓的延展的积分规则**，例如延展的梯形规则、延展的Simpson规则等等。



判断积分余项的公式

Euler-Maclaurin公式

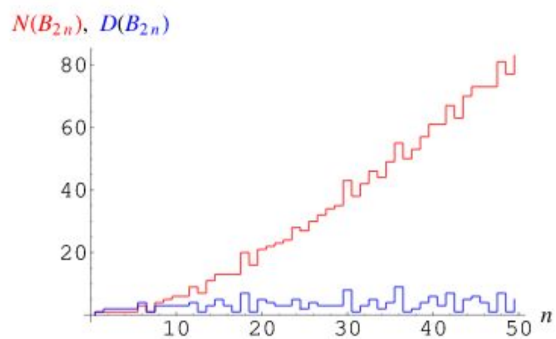
对任意正整数m，假定函数g∈C^{2m+2}[0,1]，那么有，

$$\int_0^1 g(t)dt = \frac{g(0)}{2} + \frac{g(1)}{2} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[g^{(2k-1)}(0) - g^{(2k-1)}(1)\right] - \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} g^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (0,1)$$

其中的B_{2k}是所谓**Bernoulli数**:

$$\frac{z}{e^z - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n \frac{z^n}{n!}$$

Bernoulli数B_{2k}随着k的增大
可以变得很大



$$|B_{2k}| \sim 4\sqrt{\pi k}(k/(\pi e))^{2k},$$

$$B_{2k} \sim k^{2k+1/2} \to \infty.$$

18	$\frac{43867}{798}$	+54.97117794
20	$-\frac{174611}{330}$	−529.1242424

$$B_{50} = 495057205241079648212477525/66$$

Bernoulli numbers $B_n^{\pm}$

n	fraction	decimal
0	1	+1.000000000
1	$\pm\frac{1}{2}$	±0.500000000
2	$\frac{1}{6}$	+0.166666666
3	0	+0.000000000
4	$-\frac{1}{30}$	−0.033333333
5	0	+0.000000000
6	$\frac{1}{42}$	+0.023809523
7	0	+0.000000000
8	$-\frac{1}{30}$	−0.033333333
9	0	+0.000000000
10	$\frac{5}{66}$	+0.075757575

Euler-Maclaurin公式

The formula was discovered independently by Leonhard Euler and Colin Maclaurin around 1735. **Euler needed it to compute slowly converging infinite series** **while Maclaurin used it to calculate integrals**.

我们需要的是将上述公式**复制N份之后的结果,**假定g∈C^{2m+2}[0,N]

$$\int_0^N g(t)dt = \frac{g(0)}{2} + g(1) + \cdots + \frac{g(N)}{2} + \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[g^{(2k-1)}(0) - g^{(2k-1)}(N)\right] - \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!} N g^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (0,N)$$

将这个公式运用到任意的区间[a,b]上积分，如果我们假定中间函数计算的点是均匀分布的，从而积分的步长**h=(b-a)/N**

$$T(h) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(N)\right] + \frac{B_{2m+2}h^{2m+2}}{(2m+2)!} N f^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (a,b)$$

$$T(h) = h\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right]$$

外推积分方法

$$T(h) = h\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right]$$

$$\begin{aligned} T(h) &= \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(N)\right] \\ &+ \frac{B_{2m+2}\boxed{h^{2m+2}}}{(2m+2)!} N f^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (a,b) \end{aligned}$$

而我们假定 $f \in C^{(2m+2)}[a,b]$。我们考虑两种情况：一、如果余项 $\frac{B_{2m+2}h^{2m+2}}{(2m+2)!}Nf^{(2m+2)}(\xi)$ 很小 (这可以由 $f^{(2m+2)}(\xi)$ 来控制)，那么我们可以通过 $T(h)$ 以及 Bernoulli 级数来得到积分的值。二、反过来，如果上面给出的这个公式一般并不是收敛的级数，而是一个渐近展开 (asymptotic expansion)。这里主要的原因是 Bernoulli 数 B_{2k} 随着 k 的增大可以变得很大，如果 $\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$ 不能随着 k 增大而迅速减小，那么 $T(h)$+Bernoulli 级数的方法效果是比较差的。我们需要 h 的值非常小。这个时候可以采用外推积分算法。

当h→0时，我们有 $$\lim_{h\to 0} T(h) = \int_a^b f(x)dx$$

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h)h^{2m+2}$$

其中$\tau_0, \tau_1, \tau_2, \cdots \tau_m$各级系数由Euler-Maclaurin展开给出。所有这些系数都是与h无关的。这说明T(h)可以展开成一个h^2的多项式，**这表示我们可以对T(h)进行多次计算，每次运用不同的h，然后再进行多项式的内插/外推，得到τ_0的值。**

外推积分方法

一般来说，我们会选取一系列严格递增的整数：$1=n_0<n_1<n_2\cdots< n_m$并且令相应的积分步长为**$h_i=(b-a)/n_i$**。

我们看到$h_0=(b-a)$。一个经常使用的同时也是比较自然的序列是**$n_i=2^i$**。这是Romberg早先的选择。当然其他的选择也是可以的。

对于n节点的多项式内插，我们可采用**Neville**算法。我们回顾一下Neville算法，首先零阶函数是常数，分别由每个节点处的值给出

$$T_{i0}(h) \equiv T(h_i),$$

$$i = 1, 2, \cdots, n$$

然后我们再利用迭代关系把高阶函数写出来，就是这样一个三角形的图

$$\begin{array}{c|ccccccc}
h_0^2 & T_{00}=T(h_0) & & & & \\
 & & T_{11} & & & \\
h_1^2 & T_{10}=T(h_1) & & T_{22} & & \\
 & & T_{21} & & T_{33} & \\
h_2^2 & T_{20}=T(h_2) & & T_{32} & & \\
 & & T_{31} & & & \\
h_3^2 & T_{30}=T(h_3) & & & & \\
\cdots & \cdots & & & &
\end{array}$$

$$\boxed{T_{j,k} = T_{j,k-1} + \frac{T_{j,k-1} - T_{j-1,k-1}}{\frac{h^2-h_{j-k}^2}{h^2-h_j^2} - 1}}$$

外推积分方法

当我们在计算第n_m个节点处的值$T(h_m)$时，我们需要做级数求和

$$T(h_m) = h_m\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h_m) + f(a+2h_m) + \cdots + f(b-h_m) + \frac{f(b)}{2}\right]$$

$$\boxed{T_{j,k} = T_{j,k-1} + \frac{T_{j,k-1} - T_{j-1,k-1}}{\frac{h^2 - h_{j-k}^2}{h^2 - h_j^2} - 1}}$$

比方说T_{21}由T_{20}和T_{10}给出。我们可把迭代一直往下做，最后我们得到m阶多项式记为$T_{mm}(h)$。**得到$T_{mm}(h)$后，我们把$T_{mm}(0)$作为T_0的一个近似值。**

我们来总结一下Euler-Maclaurin公式在外推积分方法中的应用，假如我们需要算一个积分，我们用梯形法近似地给出积分值，这个近似值是由级数表示，它与真实的积分值的差别由一系列Bernoulli数表示。**我们取不同步长来算这个梯形近似，然后外推到步长为0的情形，就得到了积分的值。**

外推积分方法:补充

其实Euler-Maclaurin公式可以反过来用。**如果积分很好算，而级数的计算收敛却很慢**，我们可以尝试用Euler-Maclaurin公式来加速级数收敛，**把求和化为积分。一个有名的例子就是Basel级数求和**

$$\frac{1}{1^2}+\frac{1}{2^2}+\frac{1}{3^2}+\cdots$$

我们定义f(x)=**1/(1+x)^2**，那么这个级数是从0一直求和到无穷。利用Euler-Maclaurin公式

$$f_0+f_1+\cdots=\frac{f_0}{2}+\frac{f_\infty}{2}+\int_0^\infty f(x)dx-\sum_{k=1}^{\infty}\frac{B_{2k}}{(2k)!}f^{(2k-1)}(0)$$

用在计算级数和上，这个公式的作用是生成一个收敛非常快的渐进级数。基于这个级数，只取前10项的情况下，就可以将级数和算到计算机机器精度，也就是小数点后15位。

https://www.youtube.com/watch?v=nxJI4Uk4i00

$$A_{10} + A_{11} + A_{12} + \ldots \approx$$

$$\frac{1}{6}\cdot\frac{1}{10^3} - \frac{1}{30}\cdot\frac{1}{10^5} + \frac{1}{42}\cdot\frac{1}{10^7} - \frac{1}{30}\cdot\frac{1}{10^9} + \frac{5}{66}\cdot\frac{1}{10^{11}}$$

$$- \frac{691}{2730}\cdot\frac{1}{10^{13}} + \frac{7}{6}\cdot\frac{1}{10^{15}} - \frac{3617}{510}\cdot\frac{1}{10^{17}} + \frac{43867}{798}\cdot\frac{1}{10^{19}}$$

$$\approx 0.00016633568168574660$$

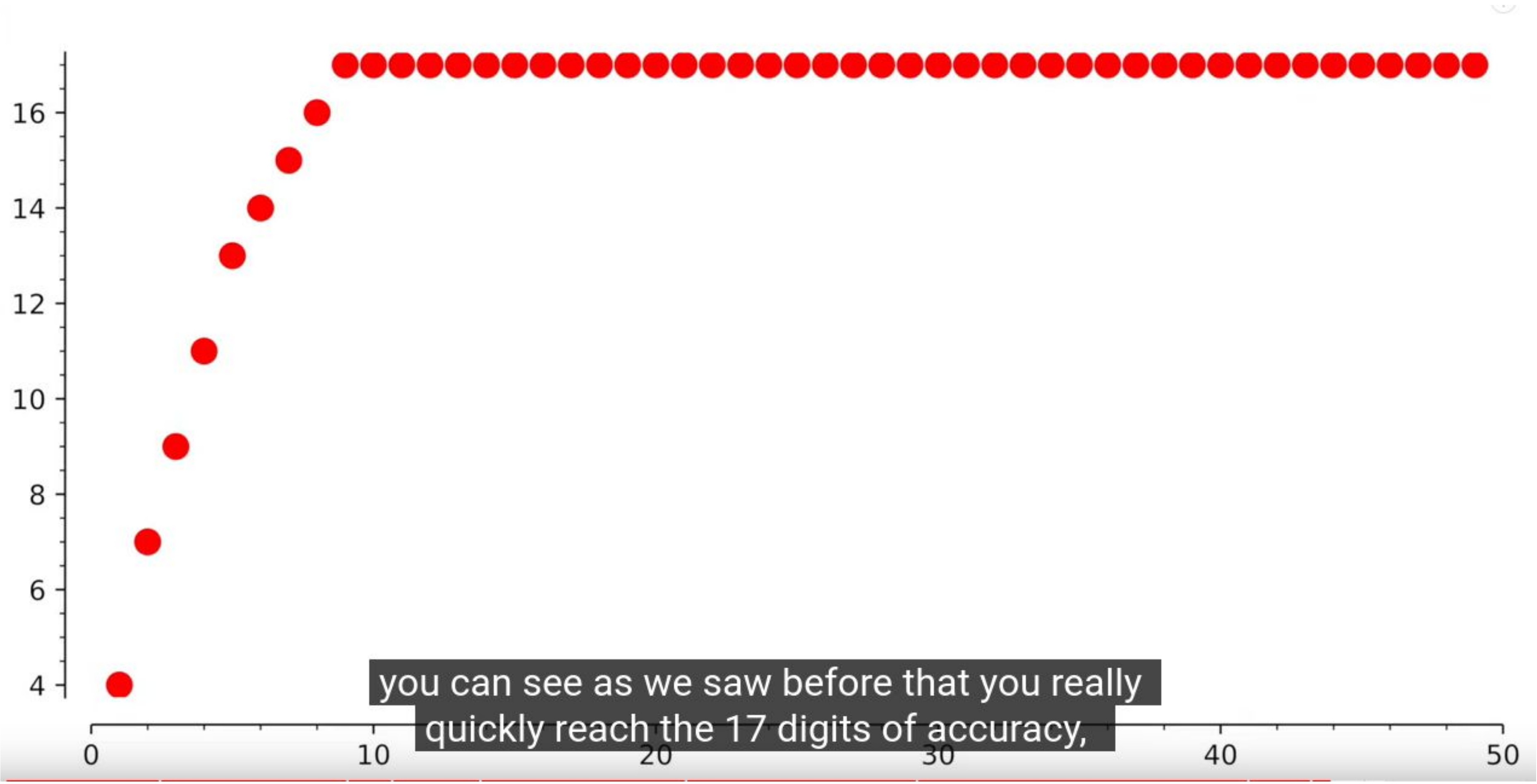
Now remember we need to combine this
number with our running tally from before

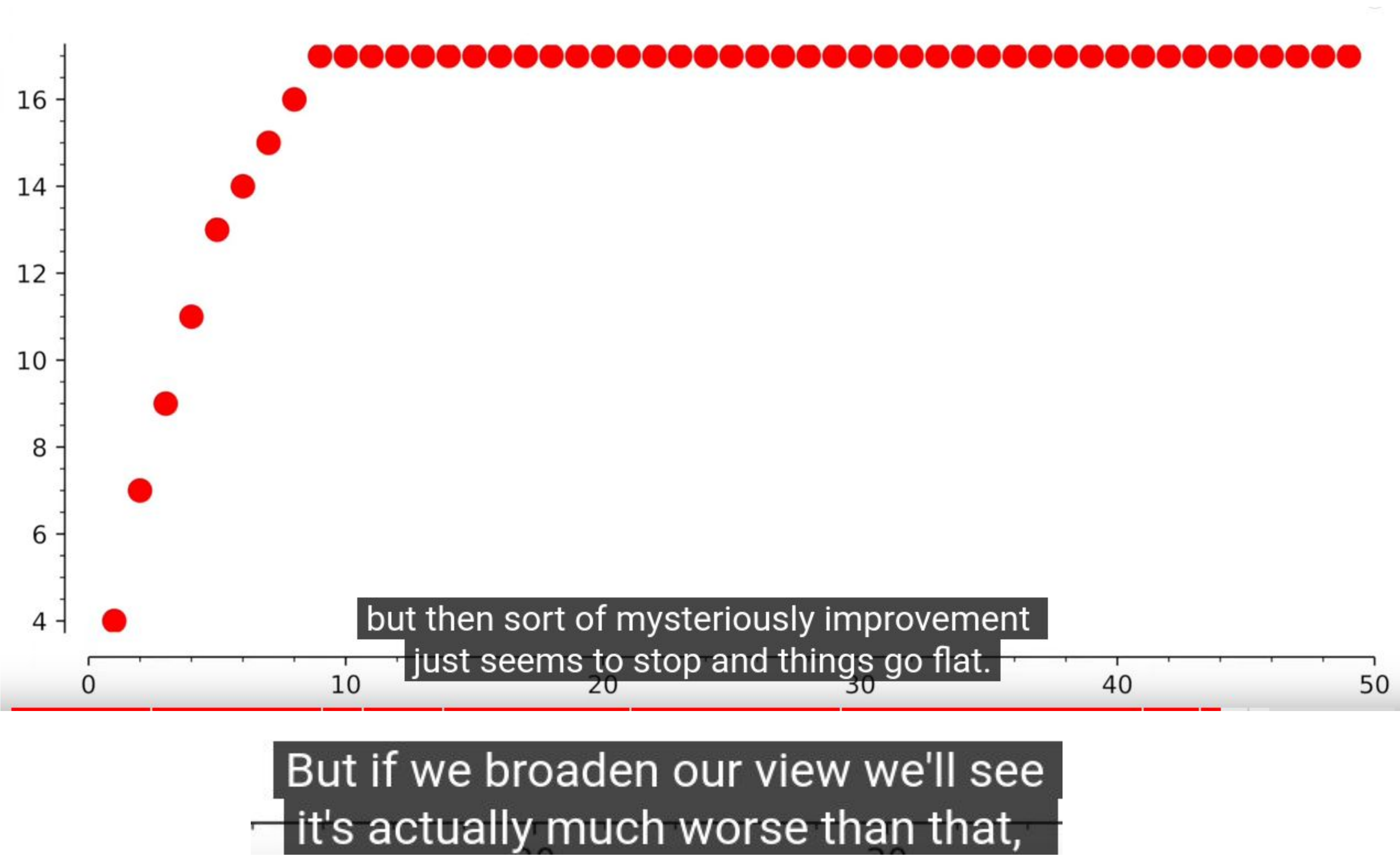
$$\begin{array}{rl} & 1.53976773116654069036 \\ + & 0.1 \\ + & 0.005 \\ + & 0.00016633568168574660 \\ \hline & 1.64493406684822643695 \end{array}$$

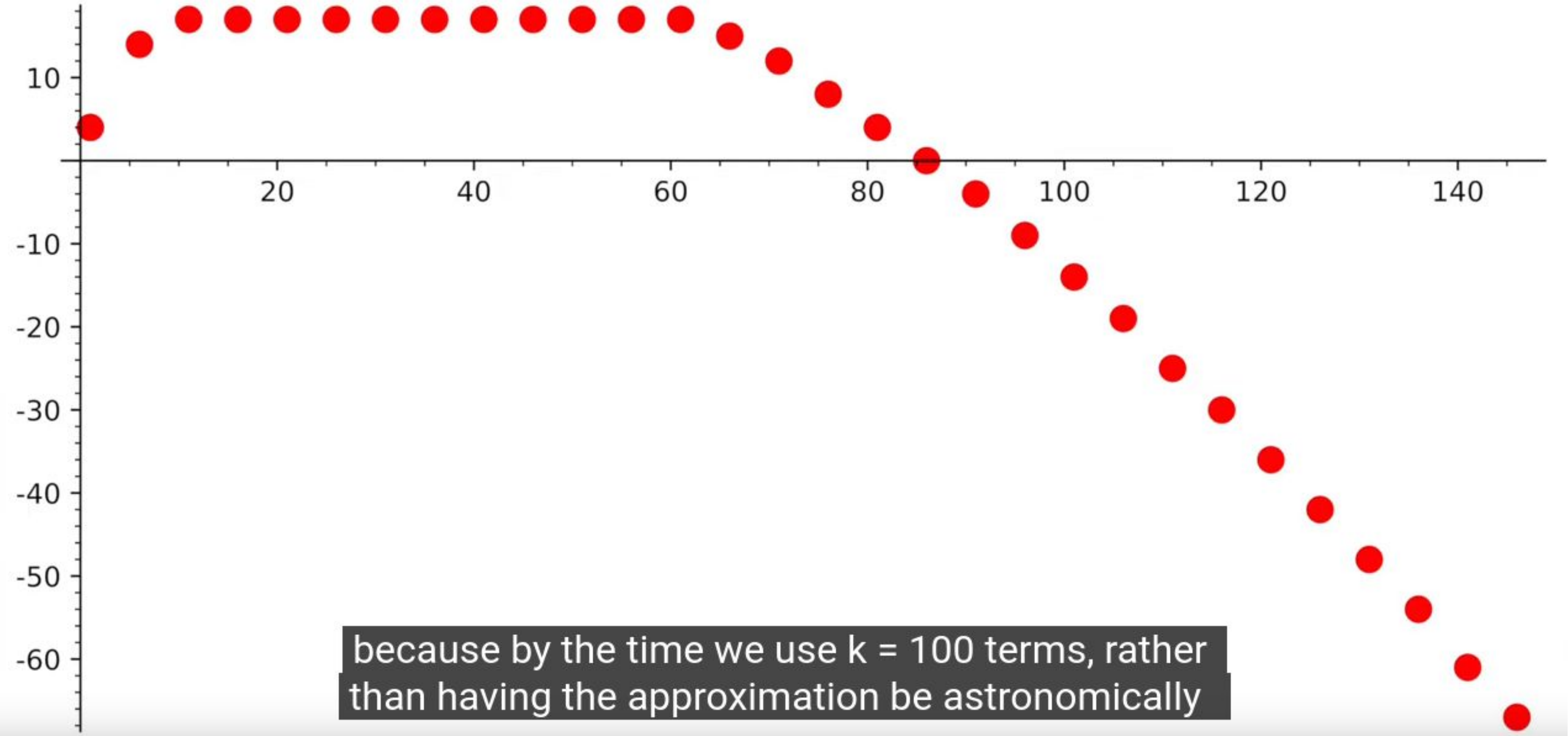
$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \approx 1.\underline{64493406684822643}695\ldots$$

17 decimal places, and that shows you just how
powerful this method is, and it convinced Euler

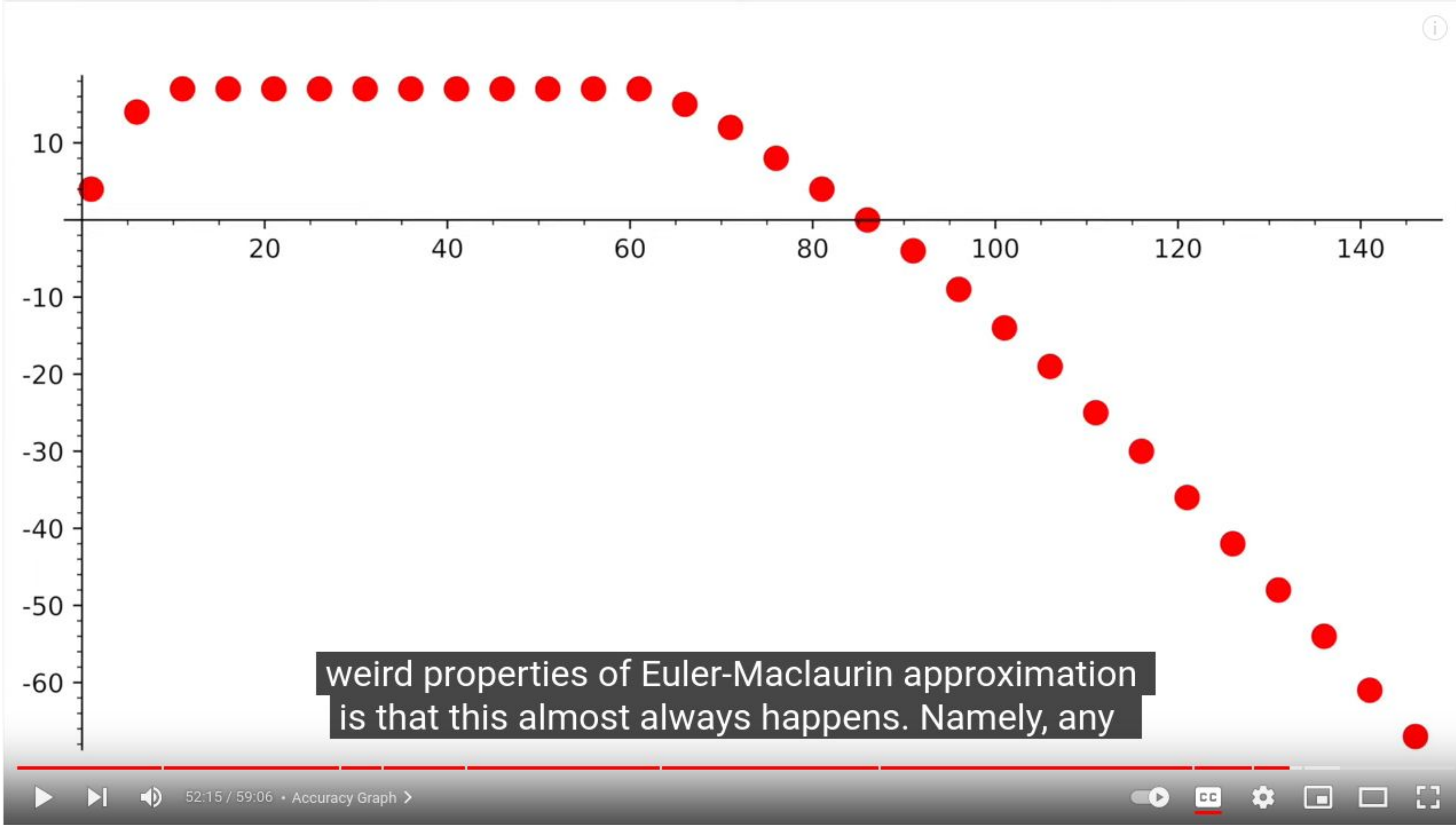
that the sum had to be π²/6, because it
agreed with π²/6 to this many decimal places.


16
14
12
10
8
6
4
0
10
20
30
40
50
you can see as we saw before that you really
quickly reach the 17 digits of accuracy,


16
14
12
10
8
6
4
0
10
20
30
40
50
but then sort of mysteriously improvement
just seems to stop and things go flat.
But if we broaden our view we'll see
it's actually much worse than that,



because by the time we use k = 100 terms, rather than having the approximation be astronomically accurate which is probably what you would expect, instead we see that we're now getting a negative number of digits of accuracy. And you might pause for a second and ask "what does that even mean?",



infinite sum we want to approximate, we tend to dive in really really close to the actual value,

but then hang there for a little bit, and then diverge.

利用正交多项式的高斯积分法

正如前面及的，如果一个函数可以用正交多项式来近似展开，我们还可利用正交多项式进行积分。前面我们已经介绍了一种最为常用的正交多项式，也就是Chebyshev多项式。事实上，还有其他的类型。我们这里做一个稍一般些的讨论。**假定区间[a,b]上定义的非负权重函数为ω(x)。定义在[a,b]上最高阶系数为1的j阶多项式为**

$$\Pi_j = \{p|p(x) = x^j + a_1 x^{j-1} + \cdots + a_j\}$$

- **存在一系列的多项式$p_n \in \Pi_n$　n=0,1,..., 满足正交关系**

$$(p_i, p_j) = 0, \quad i \neq j$$

加权内积 $(f, g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx$

- **这些正交多项式p_n可通过Gram-Schmidt正交化方法来构造**

$$p_0(x) \equiv 1, \quad p_1(x) = x - \frac{(x, p_0)}{(p_0, p_0)} p_0$$

$$p_2 = x^2 - \sum_{k=0}^{1} \frac{(x^2, p_k)}{(p_k, p_k)} p_k, \quad p_{i+1} = x^{i+1} - \sum_{k=0}^{i} \frac{(x^{i+1}, p_k)}{(p_k, p_k)} p_k$$

利用正交多项式的高斯积分法

$$p_{i+1} = x^{i+1} - \sum_{k=0}^{i} \frac{(x^{i+1}, p_k)}{(p_k, p_k)} p_k$$

这个公式分子需要计算内积i次，显然效率不是很高。事实上我们可以得到下列递推关系给出

$$\boxed{\begin{aligned} & p_{-1} \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1, \\ & p_{i+1}(x) = (x - \delta_{i+1}) p_i(x) - \gamma_{i+1}^2 p_{i-1}(x), \quad i \geq 0 \end{aligned}}$$

其中

$$\delta_{i+1} = (xp_i, p_i)/(p_i, p_i), \quad i = 0, 1, \cdots$$

$$\gamma_{i+1}^2 = (p_i, p_i)/(p_{i-1}, p_{i-1}), \quad \gamma_1^2 = 0, \quad i = 1, 2, \cdots$$

这个递推关系式，我们用**数学归纳法**很容易证明。假设对任意k<i，都有$(p_k,p_i)=0$，我们只需证明$(p_k,p_{i+1})=0$, k=0,1,···,i成立即可。

$$(p_k, p_{i+1}) = (xp_k, p_i) - \delta_{i+1}(p_k, p_i) - \gamma_{i+1}^2 (p_k, p_{i-1})$$

第一项只在k=i-1或者i时，才不为0。当k=i-1时，第二项为0，第一项和第三项抵消。当k=i时，第三项为0，第一项和第二项抵消。

利用正交多项式的高斯积分法

$$p_{-1} \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1,$$
$$p_{i+1}(x) = (x - \delta_{i+1})p_i(x) - \gamma_{i+1}^2 p_{i-1}(x), \quad i \geq 0$$

这个递推关系式，我们用**数学归纳法**很容易证明。假设对任意k<i，都有$(p_k,p_i)=0$，我们只需证明$(p_k,p_{i+1})=0$, k=0,1,···,i成立即可。

$$(p_k, p_{i+1}) = (xp_k, p_i) - \delta_{i+1}(p_k, p_i) - \gamma_{i+1}^2(p_k, p_{i-1})$$

第一项只在k=i-1或者i时，才不为0。当k=i-1时，第二项为0，第一项和第三项抵消。当k=i时，第三项为0，第一项和第二项抵消。

pi-1(x)=(x-di-1)pi-2(x)-gi-1^2pi-3(x)
-> (xpi-2,pi)=0

pi(x)=(x-di)pi-1(x)-gi^2pi-2(x)
-> (pi,pi)=(xpi-1,pi)

利用正交多项式的高斯积分法

这样构造的多项式还有两个性质

- **多项式$p_n(x)$的n个根都是实数单根并且都位于[a,b]之间。**

  例如[a,b]=[0,1], 权函数为1时：
  $p_0=1$，$p_1=x-1/2$，$p_3=(x-1/2)^2-1/12$

- **对于n个两两不同的宗量t_i，$i=0,1,\cdots,n-1$，下列系数矩阵是非奇异的**

$$A=\begin{pmatrix} p_0(t_0) & \cdots & p_0(t_{n-1}) \\ \cdots & & \cdots \\ p_{n-1}(t_0) & \cdots & p_{n-1}(t_{n-1}) \end{pmatrix}$$

由此我们可以构造 $p(x)=\sum_{i=0}^{n-1} c_i p_i(x)$

并且要求$p(t_i)=f_i$，$i=0,1,\cdots,(n-1)$，那么这个内插问题一定有唯一解$c\in R_n$。这个条件有时候又称为Haar条件。**满足Haar条件的一系列多项式p_n被称为一个Chebyshev系统。**显然，我们前面介绍的 Chebyshev多项式构成了一个Chebyshev系统。

利用正交多项式的高斯积分法

之前的求积分公式要么对节点没有特别的要求，要么节点均匀分布。事实上，我们可以想象一下，**如果我们允许节点非均匀分布，原则上可以优化我们的积分，让它达到更高的精度**。我们可以把节点均匀分布看成是不均匀分布的一种特例。我们来考察一般的插值求积分公式

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

其中**积分系数和积分节点一共是2n+2个待定参数**。我们现在要求当被积函数为1,x,⋯,x^m 时，插值求积分公式和正确的积分公式给出一样的结果，也就是说

$$f(x)=1, \quad \sum_{k=0}^{n} A_k \cdot 1 = \int_a^b dx$$

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

$$\cdots$$

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

当m一直取到2n+1时，可列2n+2个方程。这样可确定2n+2个参数。**满足这样条件的积分公式，称为高斯求积分公式。相应的节点称为高斯点。**这2n+2个方程成立，实际上告诉我们，**如果我们的被积函数是任意≤2n+1阶的多项式，那么高斯求积分公式给出的结果是个严格正确的积分结果。**

利用正交多项式的高斯积分法

$$I=\int_a^b f(x)\omega(x)dx$$

为了讨论的一般性，我们可将待求的积分扩展为带权积分，相应的求积分公式还是可以写成

$$I_n=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$$

要求出高斯求积分公式，一种方法是联立方程组求解高斯点和积分系数。但需要求解的是**2n+2阶非线性方程组**，当n较大时计算量很大，或者难以求解。我们之前介绍的解方程组的方法，像高斯消元法之类的，主要也是针对线性方程组。我们下面介绍一个方法，可以帮助我们先确定高斯点的值，再求对应的积分系数。我们先来看一个定理。

插值积分公式 $$I_n=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)$$

为高斯积分的充要条件是：

以积分节点为零点的多项式

$\varphi_{n+1}=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

与任何次数不超过 n的多项式

p(x)在区间[a,b]上带权正交，也就是

$$\boxed{\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx=0}$$

利用正交多项式的高斯积分法

先证明必要性，也就是假设求积分公式为高斯积分，我们证明带权正交这个公式成立：**因为p(x)不超过n阶，那么p(x)φ_{n+1}(x)就不超过2n+1阶**，我们可以把p(x)φ_{n+1}(x)作为一个整体当成被积函数。我们知道，对于≤2n+1阶的多项式，高斯积分公式严格成立，也就是说

$$\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k p(x_k)\phi_{n+1}(x_k)$$

而φ_{n+1}(x)在任意节点x_k处必为0，于是我们得到

$$\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0$$

利用正交多项式的高斯积分法

下面我们来看充分性。给定任意阶数不超过n的多项式p(x)，如果 $\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0,$ 那么积分公式是高斯积分。对任意被积函数f(x)∈P_{2n+1}，也就是说f(x)是不超过2n+1阶的任意多项式。我们把f(x)除以φ_{n+1}(x)，得到

$$f(x) = g_n(x)\phi_{n+1}(x) + q_n(x)$$

其中g_n(x)和q_n(x)都是不超过n阶的多项式。在积分节点处，我们有

$$f(x_k) = g_n(x_k)\phi_{n+1}(x_k) + q_n(x_k) = q_n(x_k)$$

我们下面来看f(x)的带权积分

$$\int_a^b f(x)\omega(x)dx = \int_a^b g_n(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx + \int_a^b q_n(x)\omega(x)dx = \int_a^b q_n(x)\omega(x)dx$$

$I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 为插值型求积分公式，**它必定对于阶数少于等于n的多项式函数严格成立**，于是

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

因此求积分公式对任意的≤2n+1阶的多项式都成立，那么这个求积分公式是高斯求积分公式。

利用正交多项式的高斯积分法

我们来总结一下课程的内容。

- 我们首先用Gram-Schmidt正交化方法得到一系列多项式$p_n(x)$，这些多项式满足正交关系$(p_i,p_j)=0$，当$i!=j$时。
- 然后我们介绍了高斯积分法，它的一个特点是节点值不是均匀分布的，节点的值和积分系数同时作为参数存在，于是对于一个n阶多项式，我们共有2n+2个参数。因此一个高斯积分公式可以精确确定一个2n+1阶多项式的积分。
- 这里面一个还没有解决的事情是我们如何确定节点的值，也就是高斯点的值。为了解决这个问题，我们引入了一个定理，并且给出了充分、必要性证明。这个定理讲的是多项式插值积分是高斯积分的充要条件是：以积分节点为零点的多项式$\varphi_{n+1}=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$与任何次数不超过n的多项式 $p(x)$在区间$[a,b]$上带权正交，也就是

$$\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0$$

这个定理为求高斯点提供了依据，只需要找到一个与任何次数不超过n的多项式p(x)都带权正交的n+1次多项式，那么这个多项式的n+1个不重复的零点就是高斯点。

利用正交多项式的高斯积分法

之前我们通过Gram-Schmidt正交化方法得到的n+1阶多项式p_{n+1}就是我们所需的，而且它的n+1个根都是实数单根并且都位于[a,b]之间，这正好作为高斯点的要求。

在我们知道了怎么求高斯点之后，下一步是要求积分系数。当然，我们可以联立方程组去求。但事实上，如果我们利用正交多项式的一些性质，积分系数可以用更简便的方式求出来。为了说明这一点，下面我们进一步引入一个定理。令$x_1,\cdots,x_n$为正交多项式$p_n(x)$的n个根。**同时$\omega_1,\cdots,\omega_n$为下列线性方程的解**

$$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)\omega_i = \begin{cases} (p_0, p_0) & k = 0 \\ 0 & k = 1, 2, \cdots, n-1 \end{cases}$$

注意跟之前不同：
n+1→n
2n+1→
2(n-1)+1=2n-1

那么我们一定有$\omega_i>0$，$i=1,\cdots,n$，并且对于阶数不大于(2n−1)的任意多项式$p(x)\in\Pi_{2n-1}$来说，我们一定有如下的关系

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i p(x_i)$$

这些正的数$\omega_i>0$被称为相应多项式的权重因子。

利用正交多项式的高斯积分法

首先p_n是n阶正交多项式，那么它的n个零点x_i可以定义为高斯点。假设p_k是我们要考察的被积函数，我们构造的高斯积分形式

$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)A_i$，其中$A_i$是对应的积分系数。要想这个插值积分完全给出

$\int_a^b dx\, p_k(x)\omega(x)$ 的结果，我们要求系数A_i必须满足

$$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)A_i = \int_a^b p_k(x)\omega(x)dx$$

另一方面，我们利用$p_k(x)$的正交性质(把$p_0(x)=1$作为被积函数),马上得到

$$\int_a^b p_k(x)\omega(x) = \begin{cases} \text{for } k=0 & \int_a^b p_0(x)\omega(x) = (p_0, p_0) \\ \text{for } k\neq 0 & \int_a^b p_k(x)p_0(x)\omega(x) = 0 \end{cases}$$

联立这两个方程，我们发现系数A_i正好是由我们定理中的ω_i给出。一旦有了ω_i，那么就可以完全确定高斯积分。对于我们确定下来的高斯积分，只要多项式$p(x)$不大于(2n−1)阶，我们一定有

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i p(x_i)$$

利用正交多项式的高斯积分法

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i p(x_i)$$

这里的ω_i不光是多项式的权重因子，同时也正是我们所要求的积分系数。**由于ω_i源自权重函数，所以都是正的值，因此，高斯积分的稳定性是相当好的**，不会出现像Newton-Cortes公式那样在多项式阶上去了以后出现正负相消的情况。当被积函数p(x)=1时，我们有

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i = \int_a^b \omega(x)dx = (p_0, p_0)$$

当被积函数为$p(x)=[p_k(x)]^2$ 时，我们有

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i [p_k(x_i)]^2 = \int_a^b \omega(x)[p_k(x)]^2 dx = (p_k, p_k)$$

进而，对任意$f\in C^{2n}[a,b]$，我们一定可找到一个$\xi\in[a,b]$使

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx - \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}(p_n, p_n)$$

这个也不难理解，假设f是超过2n-1阶的多项式，那么高斯积分就不再是精确的积分公式，误差由f的2n阶导数给出。

利用正交多项式的高斯积分法

$$p_{-1} \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1,$$

$$p_{i+1}(x) = (x - \delta_{i+1})p_i(x) - \gamma_{i+1}^2 p_{i-1}(x), \quad i \geq 0$$

$$\delta_{i+1} = (xp_i, p_i)/(p_i, p_i), \quad i = 0, 1, \cdots$$

$$\gamma_{i+1}^2 = (p_i, p_i)/(p_{i-1}, p_{i-1}), \quad \gamma_1^2 = 0, \quad i = 1, 2, \cdots$$

如果将前面递推关系中的系数δ_i，γ_i等排成如下的n×n三对角矩阵，

$$J_n = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & & \\ \gamma_2 & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ & & & \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix}$$

那么$p_n(x)$的根x_i恰是J_n的本征值；如果假定相应的本征矢量记为$v^{(i)} \in R^n$并且按照如下方式归一

$$v^{(i)T}v^{(i)} = (p_0, p_0) = \int_a^b \omega(x)dx$$

那么权重因子ω_i由下面式子给出

$$\omega_i = (v_1^{(i)})^2, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

如果我们要求J_n的本征值，我们只需要让行列式$\det(\lambda - J_n) = 0$。这个行列式可展开成

$$\det(\lambda - J_n) =$$

$$(\lambda - \delta_n)\det(\lambda - J_{n-1}) - \gamma_n^2 \det(\lambda - J_{n-2})$$

利用正交多项式的高斯积分法

$$\det(\lambda - J_n) = (\lambda - \delta_n)\det(\lambda - J_{n-1}) - \gamma_n^2 \det(\lambda - J_{n-2})$$

这个时候我们可以利用**数学归纳法**，假设$p_{n-1}(x)$的根必然使得行列式$\det(x-J_{n-1})$为0。而行列式展开成多项式的形式，它的最高阶系数又刚好是1。于是，我们肯定有$p_{n-1}(x)=\det(x-J_{n-1})$，$p_{n-2}(x)=\det(x-J_{n-2})$。那么上面的式子可以写成

$$\det(\lambda - J_n) = (\lambda - \delta_n)p_{n-1}(\lambda) - \gamma_n^2 p_{n-2}(\lambda)$$

我们知道$p_n(x)$正交多项式的递推关系

$$p_n(x) = (x - \delta_n)p_{n-1}(x) - \gamma_n^2 p_{n-2}(x)$$

于是$\det(\lambda-J_n)=p_n(\lambda)$。所以$p_n(x)$的零点就是$J_n$矩阵的本征值。关于本征矢量，也可以类似的用数学归纳法证明。

利用正交多项式的高斯积分法

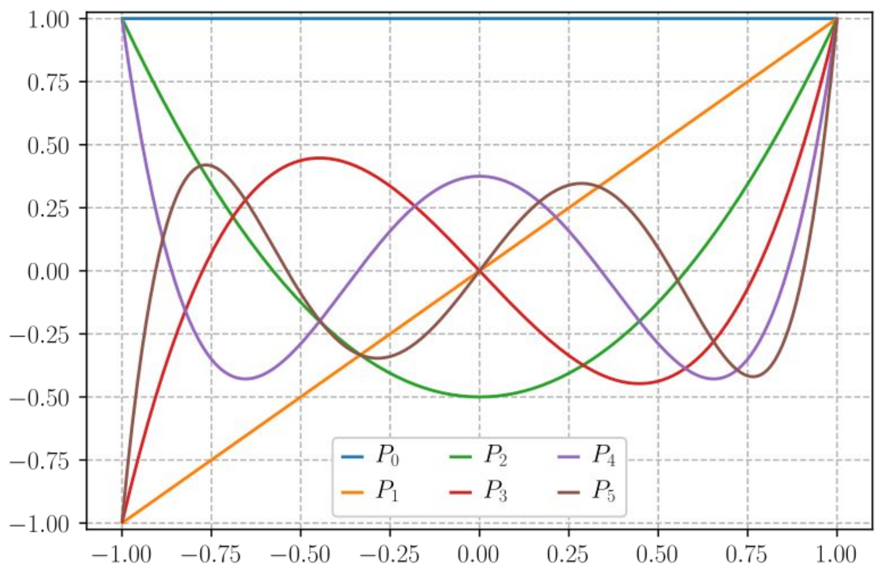
作为最为典型的正交多项式，如果选取区间[−1,+1]和ω(x)=1，我们就有Legendre多项式

$$P_n(x) = \frac{n!}{(2n)!}\frac{d^n}{dx^n}\left[x^2-1\right]^n$$

这个定义与大家所熟悉的Legendre多项式只差一个常数因子。这个定义保证了多项式的最高级系数为1. 这时的积分公式称为 Gauss-Legendre 积分公式。其他比较重要的特例还有:Jacobi 多项式和Gauss-Jacobi积分公式; Chebyshev多项式和 Gauss-Chebyshev 积分公式;Hermite 多项式和 Gauss-Hermite积分公式;Laguerre 多项式和Gauss-Laguerre 积分公式等。这些多项式所对应的区间[a,b] 以及相应权重函数ω(x)如下：

区间 $[a,b]$	$\omega(x)$	多项式名称
$[-1,1]$	1	Legendre 多项式 $P_n(x)$
$[-1,1]$	$(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$	Jacobi 多项式 $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$
$[-1,1]$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	Chebyshev 多项式 $T_n(x)$
$[0,\infty)$	e^{-x}	Laguerre 多项式 $L_n(x)$
$(-\infty,+\infty)$	e^{-x^2}	Hermite 多项式 $H_n(x)$

Gauss-Legendre积分



Number of points, n	Points, x_i		Weights, w_i	
1	0		2	
2	$\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$	±0.57735...	1	
3	0		$\frac{8}{9}$	0.888889...
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	±0.774597...	$\frac{5}{9}$	0.555556...
4	$\pm\sqrt{\frac{3}{7}-\frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	±0.339981...	$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$	0.652145...
	$\pm\sqrt{\frac{3}{7}+\frac{2}{7}\sqrt{\frac{6}{5}}}$	±0.861136...	$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$	0.347855...
5	0		$\frac{128}{225}$	0.568889...
	$\pm\frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	±0.538469...	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$	0.478629...
	$\pm\frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{\frac{10}{7}}}$	±0.90618...	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$	0.236927...

$$x=\int_8^{30}\left(2000\ln\left[\frac{140000}{140000-2100t}\right]-9.8t\right)dt \quad =\frac{30-8}{2}\int_{-1}^{1}f\left(\frac{30-8}{2}x+\frac{30+8}{2}\right)dx \quad =11\int_{-1}^{1}f(11x+19)\,dx$$

$$\begin{aligned}11\int_{-1}^{1}f(11x+19)\,dx &\approx 11\left[c_1 f(11x_1+19)+c_2 f(11x_2+19)\right]\\ &=11\left[f(11(-0.5773503)+19)+f(11(0.5773503)+19)\right]\\ &=11\left[f(12.64915)+f(25.35085)\right]\\ &=11\left[(296.8317)+(708.4811)\right]\\ &=11058.44m\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f(12.64915)&=2000\ln\left[\frac{140000}{140000-2100(12.64915)}\right]-9.8(12.64915)\\ &=296.8317\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f(25.35085)&=2000\ln\left[\frac{140000}{140000-2100(25.35085)}\right]-9.8(25.35085)\\ &=708.4811\end{aligned}$$

$$c_1=1.000000000$$

$$x_1=-0.577350269$$

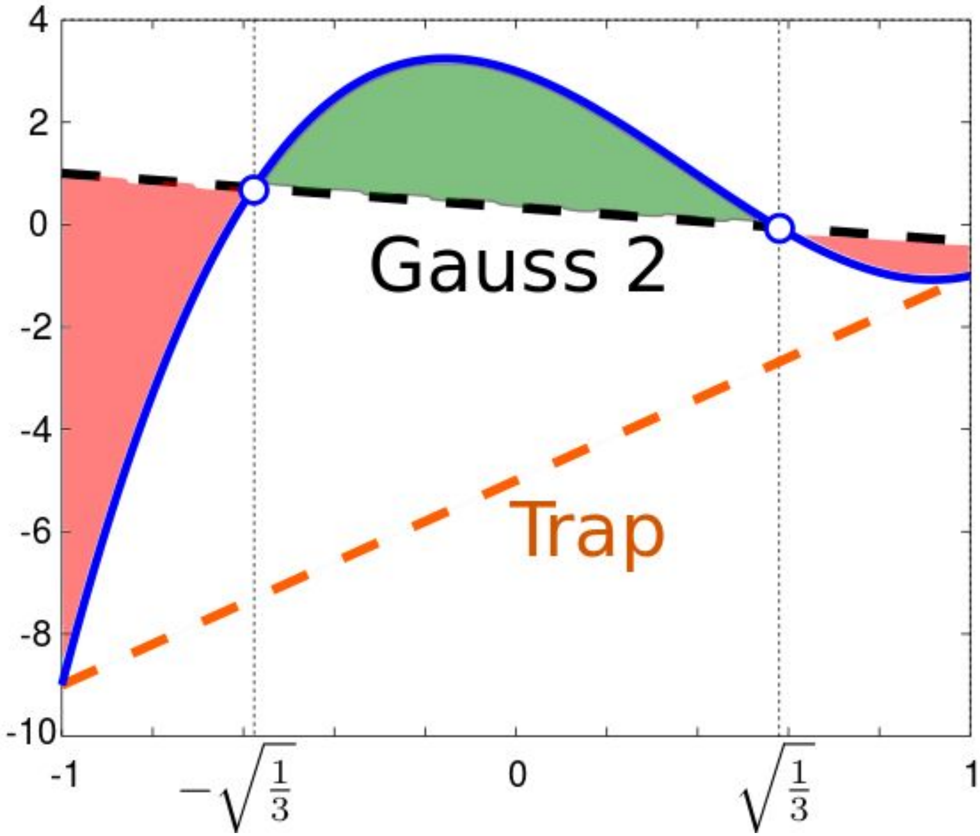
$$c_2=1.000000000$$

$$x_2=0.577350269$$

Given that the true value is 11061.34m, the absolute relative true error, $|\epsilon_t|$ is

$$\begin{aligned}|\epsilon_t|&=\left|\frac{11061.34-11058.44}{11061.34}\right|\times 100\\ &=0.0262\%\end{aligned}$$

Gauss-Legendre积分



The blue line is the polynomial $y(x) = 7x^3 - 8x^2 - 3x + 3$, whose integral in $[-1, 1]$ is $^2\!/_3$. The trapezoidal rule returns the integral of the orange dashed line, equal to $y(-1) + y(1) = -10$. The 2-point Gaussian quadrature rule returns the integral of the black dashed curve, equal to $y\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + y\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right) = \frac{2}{3}$. Such a result is exact, since the green region has the same area as the sum of the red regions.