数值积分与微分

高斯积分

胡建芳

中山大学　计算机学院

课程回顾

- **复化积分：**

$$T_n(f) = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

复化梯形公式

$$S_m(f) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\sum_{i=0}^{m-1} f(x_{2i+1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) + f(b)\right)$$

复化Simpson公式

定理 1. (*Euler-MacLaurin定理*)
若积分公式$I^{(m)}$是$2m$阶公式$I(f) = I^{(m)}(h) + O(h^{2m})$，则公式

$$I^{(m+1)}(\frac{h}{2}) = I^m(\frac{h}{2}) + \frac{I^{(m)}(\frac{h}{2}) - I^{(m)}(h)}{2^{2m}-1}$$

为$2m+2$阶公式，即有$I(f) = I^{(m+1)}(h) + O(h^{2m+2})$

外推公式

高斯积分

在Newton-Cotes积分中，可以看到n为偶数时，代数精度为$n+1$。

问题. n个点的数值积分公式，最多可以具有几阶代数精度?

可以更高的代数精度吗?

高斯积分

例 1. 求a_0, a_1, x_0, x_1，使得数值积分公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1)$$

具有尽可能高的代数精度

解. 依定义，有4个未知量，列出4个方程

$$\begin{cases} a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot 1 = \int_{-1}^{1} 1dx = 2 \\ a_0 \cdot x_0 + a_1 \cdot x_1 = \int_{-1}^{1} xdx = 0 \\ a_0 \cdot x_0^2 + a_1 \cdot x_1^2 = \int_{-1}^{1} x^2dx = \frac{2}{3} \\ a_0 \cdot x_0^3 + a_1 \cdot x_1^3 = \int_{-1}^{1} x^3dx = 0 \end{cases}$$

高斯积分

由(2), $a_0x_0 = -a_1x_1$，代入(4)

$$a_0x_0^3 = -a_1x_1^3 = a_0x_0x_1^2$$

即有$x_0^2 = x_1^2$，则有$x_0 = -x_1$，代入(2)后，有

$$a_0x_0 + a_1(-x_0) = 0$$

即有$a_0 = a_1$，代入（1）后，可得

$$a_0 = a_1 = 1$$

联合$x_0 = -x_1$，代入(3)，可得

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

高斯积分

可得到

$$\begin{cases} a_0 = 1, a_1 = 1 \\ x_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

可以验证

$$a_0 x_0^4 + a_1 x_1^4 = \frac{2}{9} \neq \int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5}$$

即，格式的代数精度为3

2n-1的代数精度，可以更高吗?

高斯积分

定理 1.
n个积分点的数值积分公式，至多具有$2n-1$阶代数精度

思路： 找一个$2n$次的多项式，让数值积分有误差，即可证明数值公式至多只有$2n-1$阶代数精度。

证明. 对$n+1$个节点$\{x_i\}_{i=0}^{n}$，记数值积分公式

$$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i), \quad a_i=\int_a^b l_i(x)dx$$

高斯积分

$$p(x) = (x - x_0)^2 \cdots (x - x_n)^2$$

则有

$$\int_a^b p(x)dx > 0$$

但

$$I_n(p(x)) = \sum_{i=0}^{n} a_i p(x_i) = \sum_{i=0}^{n} 0 = 0$$

即$2n+2$次多项式$p(x)$的数值积分有误差。

高斯积分

问题. 如何构造最高阶精度的公式? **2n-1的代数精度**

更一般地，考虑如下的带权积分

$$I(f)=\int_a^b W(x)f(x)dx, \quad W(x)\geq 0$$

$W(x)$称为**权函数**。

则数值积分为

$$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i), a_i=\int_a^b W(x)l_i(x)dx$$

高斯积分

定义两个可积函数的内积为

$$(f,g)=\int_a^b W(x)f(x)g(x)dx$$

在线性代数中学过，利用Schmidt正交化过程

$$\begin{cases} g_0(x)=x^0=1 \\ g_i(x)=x^i-\sum_{j=0}^{i-1}\frac{(x^i,g_j(x))}{(g_j(x),g_j(x))}g_j(x), i=1,2,\cdots,n \end{cases}$$

可以将n次多项式函数空间的一组基函数$\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$，变为正交基函数$\{g_0(x),\cdots,g_n(x)\}$，且有

高斯积分

$$g_n(x) \in P^n(x),\ j = 0, 1, \cdots, n$$

$$(g_n(x), g_j(x)) = 0,\ j = 0, 1, \cdots, n-1$$

$$(g_n(x), x^j) = 0,\ j = 0, 1, \cdots, n-1$$

进而有

$$(g_n(x), p(x)) = 0, \forall p(x) \in P^{n-1}(x)$$

即

$$\int_a^b g_n(x)p(x)W(x)dx = 0, \forall p(x) \in P^{n-1}(x)$$

高斯积分

定义 1.
称具有最高阶代数精度的数值积分格式为*Gauss积分*，相应的积分点称为*Gauss点*

Gauss积分的构造方法

1. 求出区间$[a,b]$上权函数为$W(x)$的正交多项式$g_n(x)$
2. 求出$g_n(x)$的所有零点
3. 以这些零点作为积分点，构造的数值积分公式即为Gauss公式

高斯积分

例 2. 求积分 $\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx$ 的2点Gauss公式

解. 按Schmidt正交化过程，有

$$g_0(x) = 1$$

$$g_1(x) = x - \frac{(x, g_0(x))}{(g_0(x), g_0(x))} g_0(x)$$

$$g_2(x) = x^2 - -\frac{(x^2, g_0(x))}{(g_0(x), g_0(x))} g_0(x) - \frac{(x^2, g_1(x))}{(g_1(x), g_1(x))} g_1(x)$$

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

可以得到积分点为$\pm\sqrt{\frac{3}{5}}$。相应的积分系数为

高斯积分

$$a_1 = \int_{-1}^{1} x^2 l_1(x)dx = \int_{-1}^{1} x^2 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} dx = \frac{1}{3}$$

$$a_2 = \int_{-1}^{1} x^2 l_1(x)dx = \int_{-1}^{1} x^2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} dx = \frac{1}{3}$$

有2点Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} x^2 f(x)dx \approx \frac{1}{3}(f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + f(\sqrt{\frac{3}{5}}))$$

高斯积分

定义 2.
区间 $[-1,1]$ 上，权函数为 $W(x)=1$ 的 Gauss 型公式称为 **Gauss-Legendre**公式。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i)$$

其中x_i是Legendre多项式

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

的根。

$$\omega_i=\frac{2}{(1-x_i^2)P_n'(x_i)}$$

高斯积分

Legendre多项式有递推关系，

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x,$$

$$P_n(x) = \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x)$$

n=2时， $L_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$

n=3时， $L_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$

n=2时，公式

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

n=3时，有

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9} f(-\sqrt{\frac{3}{5}}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(\sqrt{\frac{3}{5}})$$

高斯积分

对于区间$[a,b]$上的可积函数，做变量代换$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$，得到

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t)dt$$

可以得到区间$[a,b]$上的Gauss求积公式

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n}\omega_i f(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}x_i)$$

高斯积分

区间$[0,\infty)$上，权函数$W(x)=e^{-x}$的积分公式，称为**Gauss-Laguerre公式**。

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

其中x_i是Laguerre多项式

$$L_n(x)=\frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^n\right)$$

的根，积分系数为

$$w_i=\frac{x_i}{(n+1)^2[L_{n+1}(x_i)]^2}$$

高斯积分

Laguerre多项式满足公式

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = 1 - x$$

$$L_{k+1}(x) = \frac{(2k+1-x)L_k(x) - kL_{k-1}(x)}{k+1}$$

及边界值

$$L_k(0) = 1, L_k'(0) = -k$$

可以表达为

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \frac{(-1)^k}{k!} x^k$$

高斯积分

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = -x + 1$$

$$L_2(x) = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$$

$$L_3(x) = \frac{1}{6}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)$$

$$L_4(x) = \frac{1}{24}(x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24)$$

$$L_5(x) = \frac{1}{120}(-x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120)$$

$$L_6(x) = \frac{1}{720}(x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720)$$

高斯积分

THE END