自适应辛普森积分

2019 年 1 月 26 日

1 辛普森法则

辛普森法则是一种数值积分方法，利用 3 个点估算定积分：

$$I(a,b)=\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right] \tag{1}$$

证明：对 $f(x)$ 在 $m=(a+b)/2$ 处做泰勒展开

$$f(x)=f(m)+f'(m)(x-m)+\frac{1}{2!}f''(m)(x-m)^2+\frac{1}{3!}f^{(3)}(x-m)^3+... \tag{2}$$

用泰勒展开式代替原来的 $f(x)$, 可得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= f(m)\int_a^b dx+f'(m)\int_a^b(x-m)dx+\frac{1}{2!}f''(m)\int_a^b(x-m)^2+\frac{1}{3!}f^{(3)}\int_a^b(x-m)^3+...\\ &=f(m)2h+\frac{1}{2}f''(m)\frac{2}{3}(h)^3+o(h^5f^{(4)}(m))\end{aligned} \tag{3}$$

其中 $h=(b-a)/2$, 将 $f(x)$ 的二阶导数近似表示为 $f''m=\frac{1}{h^2}(f(a)+f(b)-2f(m))$，则

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(a)+4f(m)+f(b)\right] \tag{4}$$

2 自适应辛普森方法

原则上，数值误差可以通过估计省略的高阶项大小（$o(h^5f^{(4)}(m))$）得出，但是高阶导数值并不容易获得。J.N.Lyness 提出用两子区间积分值之和与原区间的积分值估计误差 [1]。递归二分积分区间直到

$$|I(a,m)+I(m,b)-I(a,b)|<15\epsilon, \tag{5}$$

其中 ϵ 是设定误差限，$m=(a+b)/2$，返回函数值 $I(a,b)=I(a,m)+I(m,b)+(I(a,m)+I(m,b)-I(a,b))/15$，同时为了得到自适应的积分网格，记录下此式用辛普森法则积分所用到的坐标及权重。

3 自适应辛普森方法在三维积分的应用

对于三维积分，

$$I=\int_{x_1}^{x_2}dx\int_{y_1}^{y_2}dy\int_{z_1}^{z_2}dzf(x,y,z) \tag{6}$$

可以由三个一维积分嵌套得到

$$\begin{aligned}I&=\int_{x_1}^{x_2}dxf_1(x)\\ f_1(x)&=\int_{y_1}^{y_2}dyf_2(x,y)\\ f_2(x,y)&=\int_{z_1}^{z_2}dzf(x,y,z)\end{aligned} \tag{7}$$

其中每一步的一维积分都可由自适应辛普森方法得到。

4 算例：Lindhard 函数

$$\chi(\boldsymbol{q},\omega+i\eta)=2e^2\int_{|k|<k_F}\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}[\frac{1}{\hbar\omega+i\eta-(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})}+\frac{1}{-\hbar\omega-i\eta-(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})}] \tag{8}$$

对于三维自由电子气 $\epsilon_{\boldsymbol{k}}=\hbar^2\boldsymbol{k}^2/(2m)$，$\chi(\boldsymbol{q},0)$ 有解析解，

$$\chi(\boldsymbol{q},0)=-\frac{2e^2mk_F}{(2\pi\hbar)^2}\left\{1+\frac{(1-x^2)}{2x}\log\left|\frac{1+x}{1-x}\right|\right\} \tag{9}$$

其中 $x=\frac{q}{2k_F}$, $q=|\boldsymbol{q}|$.

4.1 数值误差

对 Lindhard function 的计算精度依赖于 ϵ 和 η 的取值, 设定更小的 ϵ 和 η 能达到更高的精度，如图 1。取 $\epsilon=10^{-6}$ 和 $\eta=10^{-6}$ 时，相对误差约为 10^{-4}。

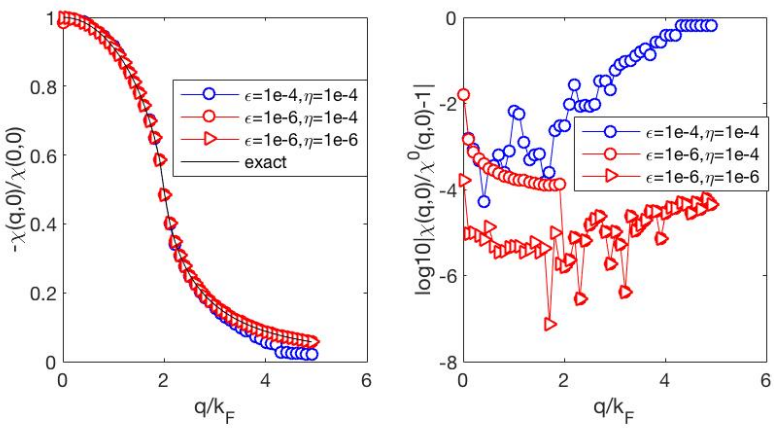

图 1: Lindhard 函数数值积分结果 (左) 及相对误差 (右), 数据点中最小的 q 为 $0.01k_F$

4.2 截断

数值积分本质上是加权求和

$$I=\sum_i w_i f_i \tag{10}$$

为了减小 k 点的数目，我们取一个截断, 使得 $|w_i f_i|<\epsilon_c$ 时，$w_i=0$。截断导致的误差和所需的 k 点数目如图 2所示，可见截断可以在保证计算精度的条件下有效地减少 k 点个数。

对于方程 7这样的三维积分，$I=\sum_i w_i f_i=\sum_x w_x\sum_y w_y\sum_z w_z f(x,y,z)$, 为了得到 w_i 及 f_i, 我们从最后一维积分出发，先找到用辛普森法则求积分用到的 $f_1(x)$ 及其权重 w_x，再寻找求 $f_1(x)$ 用到的 $f_2(x,y)$ 及其权重 w_y，最后找到求 $f_2(x,y)$ 用到的 $f(x,y,z)$ 及其权重 w_z，得到 $w_i=w_xw_yw_z, f_i=f(x,y,z)$。

4.3 积分网格

对 Lindhard 函数，取 $q_x=q_y=q_z$ 时，x,y,z 等价。自适应辛普森数值积分得到的 k 点网格如图 3, 可以看出，即使被积函数 x,y,z 等价，k 点网格的选取也依赖于积分顺序。

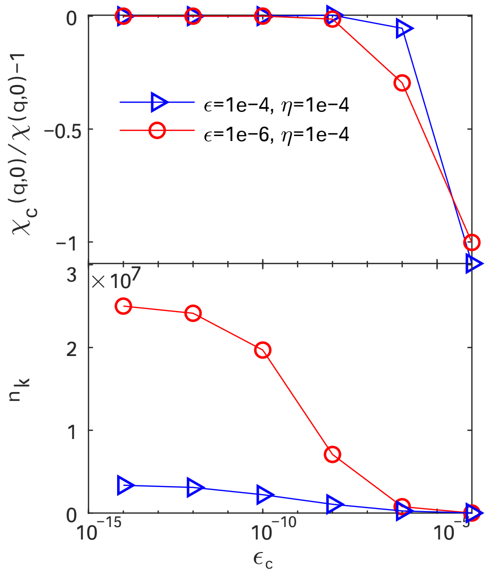

图 2: Lindhard 函数数值积分相对误差 (上), 所需 k 点数目（下）随截断 ϵ_c 的变化关系，q 为 $0.2k_F$

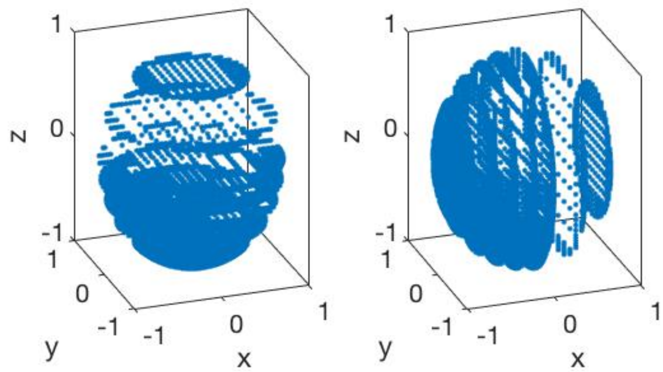

图 3: 不同积分顺序的积分网格，积分顺序左图为 zyx, 右图为 xyz(Eq. 7)，$q_x = q_y = q_z, q = 1.5k_F$,

参考文献

[1] J. N. Lyness. Notes on the adaptive simpson quadrature routine. J. ACM, 16(3):483–495, July 1969.