《数值分析》之

数值微分和数值积分

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

http://staff.ustc.edu.cn/~yxu/

中国科学技术大学

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确精成立。因此自然的问题是：能否通过选择结点，使得积分公式更好？

中国科学技术大学

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

中国科学技术大学

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

数值结点

- $n = 5$, $x_i = \pm 0.2666354015, \pm 0.4225186537, \pm 0.8662468181$
- $n = 6$,
  $x_i = 0, \pm 0, 3239118105, \pm 0.5296567752, \pm 0.8838617007$
- $n = 8$, $x_i = 0, \pm 0.167906, \pm 0.528762, \pm 0.601019, \pm 0.911589$

UNIVERSITY OF SCIENCE & TECHNOLOGY OF CHINA
中国科学技术大学

例

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）

$$2=\int_{-1}^{1}dx=A_0+A_1,\qquad 0=\int_{-1}^{1}xdx=A_0x_0+A_1x_1$$

$$\frac{2}{3}=\int_{-1}^{1}x^2dx=A_0x_0^2+A_1x_1^2,\qquad 0=\int_{-1}^{1}x^3dx=A_0x_0^3+A_1x_1^3$$

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

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

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$x_0, x_1, \ldots, x_n$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：

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

证明

$2n+1$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

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

$\square$

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_i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
1	0	2
2	±0.5773502692	1
3	±0.7745966692 0	0.5555555556 0.8888888889
4	±0.8611363116 ±0.3399810436	0.3478548451 0.6521451549
5	±0.9061798459 ±0.5384693101 0	0.2369268851 0.4786286705 0.5688888889

n	x_k	A_k
6	±0.9324695142 ±0.6612093865 ±0.2386191861	0.1713244924 0.3607615730 0.4679139346
7	±0.9491079123 ±0.7415311856 ±0.4058451514 0	0.1294849662 0.2797053915 0.3818300505 0.4179591837
8	±0.9602898565 ±0.7966664774 ±0.5255324099 ±0.1834346425	0.1012285363 0.2223810345 0.3137066459 0.3626837834

- 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，$r\leqslant n$, 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。

- 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

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$\deg p^2 \leqslant 2n$, 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$n\to\infty$时近似积分公式

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

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)

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

中国科学技术大学

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

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

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

- 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

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

- 满足递推关系：

$$\mathcal{L}_{n+1}(x) = (2n+1-x)\mathcal{L}_n(x) - n^2\mathcal{L}_{n-1}(x), \quad n \geqslant 0$$
$$\mathcal{L}_{-1} = 0, \quad \mathcal{L}_0 = 1$$

- 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：
  $$\mathcal{H}_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}, \qquad n\geqslant 0$$
  2. 递推关系：
  $$\begin{aligned}&\mathcal{H}_{n+1}(x)=2x\mathcal{H}_n(x)-2n\mathcal{H}_{n-1}(x), \quad n\geqslant 0\\&\mathcal{H}_{-1}=0, \quad \mathcal{H}_0=1\end{aligned}$$

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

$$I_1(f)=\int_0^1 e^{-x^2}dx,\ \ I_2(f)=\int_0^4 \frac{1}{1+x^2}dx,$$
$$I_3(f)=\int_0^{2\pi}\frac{1}{2+\cos(x)}dx$$

取节点$x_i, i=0,\cdots,N$, N为$2^k, k=1,\cdots,7$,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