第八讲 数值积分与数值微分

目录

https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/NA

8-7 Gauss 求积公式

Gauss quadrature, one of the jewels of numerical analysis, is a beautiful and powerful idea.

— L.N. Trefethen, SIAM Review, 2008.

8.7 Gauss 求积公式

Gauss 求积

为什么 Gauss 求积

Newton-Cotes 公式选取等距节点, 计算方便, 但不一定是最好的选择.

事实上, 我们可以更好地选取节点, 使得求积公式具有更高的代数精度.

Gauss 求积

为什么 Gauss 求积

Newton-Cotes 公式选取等距节点, 计算方便, 但不一定是最好的选择.

事实上, 我们可以更好地选取节点, 使得求积公式具有更高的代数精度.

例 试确定 A_i 和 x_i, 使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度, 并计算代数精度.

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1).$$

(板书)

8-7-1 一般 Gauss 求积公式

定义 设 $\rho(x)$ 是 $[a,b]$ 上的权函数, 若求积公式

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

具有 $2n+1$ 次代数精度, 则称该公式为 **Gauss 求积公式**, 节点 x_i 称为 **Gauss 点**, A_i 称为 **Gauss 系数**.

✍ 注意: 求积公式的右端只包含 $f(x)$ 的函数值, 与权函数无关.

Gauss 求积公式的存在性

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^{2n+1}$ 代入, 令求积公式精确成立, 解出 A_i 和 x_i. 这样就可以使得求积公式至少具有 $2n+1$ 次代数精度, 所以, Gauss 求积公式总是存在的.

事实上, 上述求积公式的代数精度不可能超过 $2n+1$.

取 $2n+2$ 次多项式 $f(x) = (x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2$, 则 $\sum\limits_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = 0$, 但

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x > 0,$$

即求积公式对 $2n+2$ 次多项式不精确成立, 所以代数精度 $< 2n+2$.

Gauss 求积公式具有最高代数精度

定理 Gauss 求积公式是具有最高代数精度的插值型求积公式.

Gauss 求积公式具有最高代数精度

定理 Gauss 求积公式是具有最高代数精度的插值型求积公式.

如何构造 Gauss 求积公式

方法一:

将 $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^{2n+1}$ 代入, 解出 A_i 和 x_i. 但需要解一个非线性方程组, 通常非常困难，而且不一定能解出来.

可行方法:

将 x_i 和 A_i 分开计算, 即先通过特殊的方法求出 Gauss 点 x_i, 然后再用待定系数法解出 A_i. 这也是目前构造 Gauss 公式的通用方法.

Gauss 点的计算

定理 设 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$, 则插值型求积公式是 Gauss 公式的充要条件是

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

与所有次数不超过 n 的多项式正交, 即

$$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)p(x)\,\mathrm{d}x = 0, \quad \forall\, p(x) \in \mathbb{H}_n.$$

(板书)

计算 Gauss 点的一般方法

(1) 设 $\omega_{n+1}(x) = x^{n+1} + a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$;

(2) 利用 $\omega_{n+1}(x)$ 与 $p(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^n$ 正交 (带权) 的性质, 得到 $n+1$ 个线性方程, 解出 a_k, $k = 0, 1, 2, \ldots, n$;

(3) 求出多项式 $\omega_{n+1}(x)$ 的 $n+1$ 个零点, 这就是 Gauss 点.

例 试确定 A_i 和 x_i, 使得下面的求积公式具有尽可能高的代数精度

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1).$$

(板书)

Gauss 求积公式的余项

设 $p_{2n+1}(x)$ 是 $f(x)$ 关于点 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的 $2n+1$ 次 Hermite 插值多项式, 满足

$$p_{2n+1}(x_i) = f(x_i), \quad p'_{2n+1}(x_i) = f'(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

若 $f(x) \in C^{2n+2}[a, b]$, 则插值余项为

$$R_n(x) \triangleq f(x) - p_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x).$$

Gauss 求积公式的余项

设 $p_{2n+1}(x)$ 是 $f(x)$ 关于点 $x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n$ 的 $2n+1$ 次 Hermite 插值多项式, 满足

$$p_{2n+1}(x_i) = f(x_i), \quad p'_{2n+1}(x_i) = f'(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

若 $f(x) \in C^{2n+2}[a, b]$, 则插值余项为

$$R_n(x) \triangleq f(x) - p_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x).$$

由于求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度, 故

$$\int_a^b \rho(x) p_{2n+1}(x) \, \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i p_{2n+1}(x_i).$$

所以, Gauss 求积公式的余项为

$$
\begin{aligned}
R_n[f] &\triangleq \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \\
&= \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} A_i p_{2n+1}(x_i) \\
&= \int_a^b \rho(x) \Big(f(x) - p_{2n+1}(x) \Big)\,\mathrm{d}x \\
&= \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!} \omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x.
\end{aligned}
$$

假定 $f^{(2n+2)}(\xi_x)$ 在 $[a,b]$ 上关于 x 是连续的, 则由积分中值定理可知, 存在 $\eta \in (a,b)$, 使得

$$
\boxed{R_n[f] = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b \rho(x) \omega_{n+1}^2(x)\,\mathrm{d}x.}
$$

Gauss 公式的收敛性

定理 设 $f(x) \in C[a,b]$, 则 Gauss 求积公式是收敛的, 即

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x,$$

其中 x_i 是 Gauss 节点, A_i 是 Gauss 系数. (证明可参见相关参考文献)

Gauss 公式的稳定性

定理 Gauss 求积公式中的系数 A_i 全是正数, 因此 Gauss 求积公式是稳定的.

(板书)

证明概要. 令 $f(x) = l_k^2(x) = \left(\prod_{i=0,i\neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}\right)^2 \in H_{2n}$. 由于 Gauss 公式具有 $2n+1$ 次代数精度, 所以

$$\int_a^b \rho(x) l_k(x) \, \mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k(x_i) = A_k.$$

上式左边显然大于 0, 故 $A_k > 0$, 所以结论成立.

8-7-2 | Gauss-Legendre 公式

Gauss 点与正交多项式

根据 Gauss 点的性质, 如果 $\{p_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 是一组在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交的多项式族, 则 $p_{n+1}(x)$ 的零点就是 Gauss 点.

8-7-2 Gauss-Legendre 公式

Gauss 点与正交多项式

根据 Gauss 点的性质, 如果 $\{p_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ 是一组在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交的多项式族, 则 $p_{n+1}(x)$ 的零点就是 Gauss 点.

Gauss-Legendre 公式

设 $[a,b]=[-1,1]$, 权函数 $\rho(x)=1$, 则 Gauss 点即为 Legendre 多项式 $P_{n+1}(x)$ 的零点, 此时的 Gauss 公式就称为 **Gauss-Legendre 公式**, 简称 **G-L 公式**.

常见的低次 G-L 公式

- 当 $n=0$ 时, $P_{n+1}(x)=x$, 因此 Gauss 点为 $x_0=0$. 将 $f(x)=1$ 代入公式, 令等式精确成立, 解出 $A_0=2$. 可得 (一点) G-L 公式为

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2f(0)}$$

常见的低次 G-L 公式

- 当 $n=0$ 时, $P_{n+1}(x)=x$, 因此 Gauss 点为 $x_0=0$. 将 $f(x)=1$ 代入公式, 令等式精确成立, 解出 $A_0=2$. 可得 (一点) G-L 公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2f(0)$$

- 当 $n=1$ 时, $P_{n+1}(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$, 因此 Gauss 点为 $x_0=-\frac{\sqrt{3}}{3}$, $x_1=\frac{\sqrt{3}}{3}$. 将 $f(x)=1, x$ 代入后解出 $A_0=1, A_1=1$, 可得 (两点) G-L 公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)+f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

- 当 $n=2$ 时, 类似地, 可以得到 (三点) G-L 公式为

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{5}{9} f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right)}$$

- 当 $n=3$ 时, 可得 G-L 求积公式为

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx{}& \frac{90-5\sqrt{30}}{180} f\left(-\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}\right) + \frac{90+5\sqrt{30}}{180} f\left(-\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}\right)\\ &+ \frac{90+5\sqrt{30}}{180} f\left(\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}\right) + \frac{90-5\sqrt{30}}{180} f\left(\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}\right)\end{aligned}$$

- 当 $n \geq 4$ 时, 可以使用数值方法计算 $P_{n+1}(x)$ 的零点

例 用三点 G-L 公式 $(n=2)$ 计算定积分 $\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x \,\mathrm{d}x$.

(板书)

G-L 公式的余项

此时 $\omega_{n+1}(x) = \tilde{P}_{n+1}(x)$, 由 Gauss 公式余项和 Legendre 多项式性质可知, G-L 公式的余项为

$$R_n[f] = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_{-1}^{1} \tilde{P}_{n+1}^2 \, \mathrm{d}x = \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3} f^{(2n+2)}(\eta), \quad \eta \in (-1, 1).$$

这表明 G-L 公式具有很高的精度, 比如

$$R_1[f] = \frac{1}{135} f^{(4)}(\eta), \quad R_2[f] = \frac{1}{15750} f^{(6)}(\eta).$$

一般区间上的 G-L 公式

当积分区间是 $[a, b]$ 时, 我们可以做一个变量代换

$$x(t) = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2},$$

于是可得

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(x(t))\,\mathrm{d}t = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)\,\mathrm{d}t},$$

然后对上式右端的定积分使用 G-L 公式即可.

✍ 由于是计算定积分, 因此无需再将 t 换回 x.

8-7-3 Gauss-Chebyshev 公式

Gauss-Chebyshev 公式

设 $[a,b]=[-1,1]$, 权函数 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, 则 Gauss 点即为 Chebyshev 多项式 $T_{n+1}(x)$ 的零点, 此时的 Gauss 公式就称为 **Gauss-Chebyshev 公式**, 简称 **G-C 公式**.

G-C 公式

易知 $T_{n+1}(x)$ 的零点为 $\boxed{x_i = \cos\dfrac{2i+1}{2(n+1)}\pi}$, $\quad i = 0, 1, 2, \ldots, n.$

G-C 公式

易知 $T_{n+1}(x)$ 的零点为 $\boxed{x_i = \cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi}$, $\quad i = 0, 1, 2, \ldots, n.$

利用待定系数法可以求得 $A_i = \frac{\pi}{n+1}$, 所以 G-C 公式为

$$\boxed{\int_a^b \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{n+1}\sum_{i=0}^{n} f\left(\cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right)}$$

G-C 公式

易知 $T_{n+1}(x)$ 的零点为 $\boxed{x_i = \cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi}$, $\quad i = 0, 1, 2, \ldots, n.$

利用待定系数法可以求得 $A_i = \frac{\pi}{n+1}$, 所以 G-C 公式为

$$\boxed{\int_a^b \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^{n} f\left(\cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right)}$$

余项为

$$R_n[f] = \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \int_a^b \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \tilde{T}_{n+1}^2\,\mathrm{d}x = \frac{2\pi}{2^{2n+2}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad \eta \in (-1, 1).$$

例 用五点 G-C 公式 $(n=4)$ 计算奇异积分 $\displaystyle\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{e}^x}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x$.

(板书)

8-7-4 复合 Gauss 公式

复合 Gauss 公式

- Gauss 公式最突出的优点就是具有最高的代数精度. 但缺点是 Gauss 点比较难计算, 特别当节点数较多时.
- 因此在实际应用中, 通常是将积分区间分割成若干小区间, 然后在每个小区间上使用低次的 Gauss 公式, 这就是**复合 Gauss 公式**.

Clenshaw–Curtis 公式 *

Clenshaw–Curtis 公式是基于 Chebyshev 点

$$x_k = \cos(k\pi/n), \quad 0 \le k \le n, \quad \text{(即 Chebyshev 极值点)}$$

的插值型积分公式, 虽然只具有 n 次代数精度, 但计算简单快速 (可以借助 FFT), 因此被认为是与 Gauss 公式在实用性方面是同等重要的. 详细介绍请参考相关资料.

> All in all, it would seem that the Gauss and Clenshaw – Curtis formulas should perhaps be regarded as equally valuable and fundamental, with the former having an edge in elegance and the latter in simplicity.
>
> — Trefethen, Is Gauss Quadrature Better than Clenshaw–Curtis? SIAM Review, 2008.

自适应求积方法 *

为什么自适应

在实际应用中, 需要考虑的问题:

- 往往是要求误差满足一定的精度, 而不是直接给出 n (分段小区间个数) 的大小.
- 由于被积函数在不同区间的变化不一样: 在变化比较平缓的地方, 步长可以取大一些 (节省计算量); 在变化比较剧烈的地方, 则步长需要小一些, 否则误差就会比较大.

因此我们需要算法能够自己调整步长, 这就是 自适应求积方法, 详情请参考相关资料.

谢谢

THANK YOU