第5章 数值积分和数值微分

主讲：纪庆革
中山大学数据科学与计算机学院
软件工程与应用研究所
E-Mail: 1024180018@qq.com

数值积分

关于积分，有Newton-Leibniz公式

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

但是，在很多情况下，还是要数值积分：

1、函数由离散数据组成

2、F(x)求不出

3、F(x)非常复杂

定义**数值积分**如下：是离散点上的函数值的线性组合

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

称为积分系数，与f(x)无关，与积分区间和积分点有关

两个问题：

1、系数a_i如何选取，即**选取原则**

2、若节点可以自由选取，**取什么点好**？

定义　代数精度　如果某个求积公式对于次数不超过m的一切多项式都准确成立，而对某个$m+1$次多项式并不准确成立，则称该求积公式的**代数精确度**为m。

$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$ 为数值积分，$I(f)=\int_a^b f(x)dx$ 为积分，则称数值积分有**k阶代数精度**是指：$I_n(x^i)=I(x^i), i=0,\cdots,k; I_n(x^{k+1})\neq I(x^{k+1})$

插值型

用**插值函数的积分**，作为数值积分

$$a_i$$

$$I_n(f)=\int_a^b L_n(x)dx=\int_a^b\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)dx=\sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b l_i(x)dx\right)f(x_i)$$

代数精度

由Lagrange插值的误差表达式，$R_n(x)=\dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$，有

$$I(f)-I_n(f)=\int_a^b R_n(x)dx=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx$$

可以看出，至少$\boldsymbol{n}$阶代数精度

$$\because\ f^{(n+1)}(x)=0,\ f(x)=x^k,k\le n$$

例： 梯形求积公式具有一次代数精确度。

当 $f(x)\in C^1_{[a,b]}$，$f''(x)$在$[a,b]$上存在，

用一次多项式$P_1(x)$逼近$f(x)$有关系式

$$f(x)=P_1(x)+\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b),a\le\xi\le b$$

根据假定$f(x)$是一次多项式，则 $f''(x)\equiv 0,\therefore f(x)\equiv P_1(x)$，则

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b P_1(x)dx=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b))$$

但当$f(x)=x^2$时，

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b x^2dx=\frac{b^3-a^3}{3}\neq\frac{b-a}{2}(a^2+b^2)$$

故梯形求积公式具有一次代数精确度。

Newton-Cotes 积分

若节点可以自由选取，则一个自然的办法就是取**等距节点**。对区间做等距分割。

如插值型求积公式

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k)$$

称为Newton-Cotes积分公式，其中$C_k^{(n)}$称为柯茨系数。

设节点步长

$$h=\frac{b-a}{n},x_k=a+kh,k=0,\cdots,n$$

$$C_k^{(n)}=\frac{h}{b-a}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\frac{t-j}{k-j}dt$$

$$=\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}(t-j)dt$$

$C_i^{(n)}$ 与步长h无关，可以预先求出

$n=1$时

$$C_0^{(1)}=-\int_0^1(t-1)dt=\frac{1}{2}$$

$$C_1^{(1)}=\int_0^1 tdt=\frac{1}{2}$$

$$\Longleftrightarrow I_1(f)=(b-a)\frac{1}{2}f(a)+(b-a)\frac{1}{2}f(b)$$

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

梯形公式

$n=2$时

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}$$

抛物线公式（或辛普森(Simpson)公式）

$$I_2(f)=(b-a)\frac{1}{6}f(a)+(b-a)\frac{4}{6}f(\frac{b+a}{2})+(b-a)\frac{1}{6}f(b)$$

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

当n=4时，**牛顿-柯茨公式**为

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

它也特别称为**柯茨公式**，其中，

$$h=\frac{b-a}{4}, x_i = a+ih, i=0,1,2,3,4.$$

表7-1 柯茨系数表

n	$c_i^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$
……	……								

误差

1、梯形公式的误差估计

$$E_1(f)=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx=\frac{f''(\eta)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)dx=\frac{-(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$

此处用了积分中值定理

注：可以给出证明

2、Simpson公式的误差估计

注意到，**Simpson公式有3阶代数精度**，因此为了对误差有更精确地估计，我们用3次多项式估计误差

$$P_3(a)=f(a),P_3(b)=f(b),P_3(\frac{a+b}{2})=f(\frac{a+b}{2}),P_3'(\frac{a+b}{2})=f'(\frac{a+b}{2})$$

$$E_2(f)=I(f)-S(f)=\int_a^b\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx$$

$$=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)dx=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$$

复化积分（复合求积公式）

数值积分公式与多项式插值有很大的关系。

因此Runge现象的存在，使得我们**不能用太多的积分点计算**。

与插值类似，我们**采用分段、低阶的方法**。

复化梯形公式

做等距节点， $h=\dfrac{b-a}{n}, x_i=a+ih, i=0,\cdots,n$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx=\frac{h}{2}(f(x_i)+f(x_{i+1}))-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)$$

$$T_n(f)=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{2}(f(x_i)+f(x_{i+1}))-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)\right\}$$

$$=h\left(\frac{1}{2}f(a)+\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+\frac{1}{2}f(b)\right)-\sum_{i=0}^{n-1}\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)$$

误差

由均值定理知 $f\in C^2[a,b]\Rightarrow\exists\xi\in[a,b],s.t.,\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)=nf''(\xi)$

$$\therefore E_n(f)=-\frac{nh^3}{12}f''(\xi)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)=-\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi)$$

可以看出，复化梯形公式是收敛的。

复化Simpson公式（复合抛物线公式）

做等距节点， $h=\dfrac{b-a}{2n}, x_i=a+ih, i=0,\cdots,2n$

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx=\frac{2h}{6}(f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2}))-\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_i)$$

$$S_n(f)=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\frac{2h}{6}(f(x_{2i})+4f(x_{2i+1})+f(x_{2i+2}))-\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_i)\right\}$$

$$=\frac{h}{3}\left(f(a)+4\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{2i+1})+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_{2i})+f(b)\right)-\underline{\sum_{i=0}^{n-1}\frac{(2h)^5}{2880}f^{(4)}(\xi_i)}$$

其中$x_{2i}\le\xi_i\le x_{2i+2}$

误差

由均值定理知

$$E_n(f) = -\frac{(2h)^5 n}{2880} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)^5}{2880 n^4} f^{(4)}(\xi) = -\frac{(b-a)^5}{180(2n)^4} f^{(4)}(\xi)$$

可以看出，复化Simpson公式是收敛的。

收敛速度与误差估计

定义： 若一个积分公式的误差满足 $\lim\limits_{h\to 0}\dfrac{R[f]}{h^p}=C<\infty$ 且 $C\neq 0$，则称该公式是 p 阶收敛的。

$$T_n \sim O(h^2),\ S_n \sim O(h^4),\ C_n \sim O(h^6)$$

例：计算 $\pi=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx$

$$T_8=\frac{1}{16}\left[f(0)+2\sum_{k=1}^{7}f(x_k)+f(1)\right] \quad \text{其中 } x_k=\frac{k}{8}$$

$$=3.138988494$$

$$S_4=\frac{1}{24}\left[f(0)+4\sum_{\text{odd}}f(x_k)+2\sum_{\text{even}}f(x_k)+f(1)\right] \quad \text{其中 } x_k=\frac{k}{8}$$

$$=3.141592502$$

运算量基本相同

变步长求积公式

复合求积公式的截断误差随n的增大而减小, 但对于一个给定的积分, 选定了某种求积方法后, 如何确定适当的n, 使得计算结果达到预选给定的精度要求呢?

当然可以用前面的误差估计求n, 但这要用到高阶导数, 一般是比较困难的。

在实际计算中, 常采用积分步长h的自动选择。

具体地讲, 就是在求积过程中, 将步长逐次折半, 反复利用复合求积公式, 直到相邻两次的计算结果之差的绝对值小于允许误差为止。

注: 这是一种事后估计误差的方法。

先看事后误差估计（不同的误差表达式，事后误差估计式是不同的）

以复化梯形公式为例

$$I(f)-T_n(f)=-\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\xi)$$ n等分区间

$$I(f)-T_{2n}(f)=-\frac{(b-a)}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta)$$ 2n等分区间

近似有：

$$f''(\eta)\approx f''(\xi)\text{，则有}\frac{I-T_n}{I-T_{2n}}\approx 4$$

$$\Rightarrow I(f)-T_{2n}(f)\approx\frac{1}{3}\left(T_{2n}(f)-T_n(f)\right)$$

$\therefore$ 可用 $\left|T_{2n}-T_n\right|<\varepsilon$(允许误差)

来判断近似值T_{2n}是否已满足精度要求。

具体计算过程如下：

（1）取$n=1$, 计算

$$T_1=(b-a)\left[\frac{f(a)}{2}+\frac{f(b)}{2}\right]$$

（2）取$n=2$, 计算

$$T_2=\frac{(b-a)}{2}\left[\frac{f(a)}{2}+\frac{f(b)}{2}+f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right]$$

$$=\frac{1}{2}T_1+\frac{(b-a)}{2}f(x_1)$$

（3）取$n=4$, 计算

$$T_4=\frac{(b-a)}{4}\left[\frac{f(a)}{2}+\frac{f(b)}{2}+f(x_1)+f(x_2)+f(x_3)\right]$$

$$=\frac{1}{2}T_2+\frac{(b-a)}{4}[f(x_1)+f(x_3)]$$

式中$xi=a+ih, h=\dfrac{b-a}{4}, i=1,2,3.$

一般地计算公式为 $T_{2n}=\dfrac{1}{2}T_n+\dfrac{(b-a)}{2n}\displaystyle\sum_{i=0}^{n-1}f\left(a+(2i+1)\frac{b-a}{2n}\right)$

检验是否有 $|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$(允许误差)

如满足，T_{2n}就是满足精度要求的近似值。

注：每次都是在前一次基础上将子区间再对分，原分点上的函数值不需要重复计算，只需计算新分点上的函数值。

类似，对于复化Simpsom公式，有

$$I(f)-S_{2n}(f)\approx\frac{1}{15}\left(S_{2n}(f)-S_n(f)\right)$$

若$\left|S_{2n}(f)-S_n(f)\right|<\varepsilon$（允许误差），

则S_{2n}就是要求的近似值，

否则，再将每个子区间对分，

直到满足为止。

龙贝格公式（*Romberg*积分公式）

由前面的事后误差估计式，

$$I(f)-T_{2n}(f)\approx\frac{1}{3}\left(T_{2n}(f)-T_n(f)\right)$$

则，

$$I(f)\approx T_{2n}(f)+\frac{1}{3}\left(T_{2n}(f)-T_n(f)\right)=S_n(f)$$

类似，

$$I(f)\approx S_{2n}(f)+\frac{1}{15}\left(S_{2n}(f)-S_n(f)\right)=C_n(f)$$

注：

可以用低阶的公式组合后成为一个高阶的公式。

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (5.4.2)$$

用梯形公式二分前后的两个积分值 T_n 与 T_{2n} 按照公式(5.4.2)线性组合，其结果正好是用抛物线公式得到的积分值 S_n.

$$C_n = \frac{16}{15}S_{2n} - \frac{1}{15}S_n \qquad (5.4.4)$$

用抛物线公式二分前后的两个积分值 S_n.与S_{2n} 按照公式(5.4.4)线性组合,其结果正好是用柯茨公式得到的积分值 C_n.

$$R_n = \frac{64}{63}C_{2n} - \frac{1}{63}C_n \qquad (5.4.6)$$

称式(5.4.6)为龙贝格(Romberg)公式。

龙贝格公式是一种加速计算积分的方法。在变步长的求积过程中，运用(5.4.2)、(5.4.4)、(5.4.6)式可以将精度低的梯形值逐步加工成精度较高的抛物线值，柯茨值与龙贝格值。

龙贝格求积的计算步骤如下：

（1）计算 $f(a), f(b)$, 算出 T_1 ；

（2）把 $[a,b]$ 2等分, 计算 $f(\frac{a+b}{2})$, 算出 T_2 与 S_1；

（3）把 $[a,b]$ 4等分, 计算 $f(a+\frac{b-a}{4}), f(a+3\cdot\frac{b-a}{4})$,算出 T_4 , S_2 与C_1 ;

（4）把 $[a,b]$ 8等分, 计算 $f(a+i\frac{b-a}{8}), i=1,3,5,7$,算出 T_8, S_4与 C_2 与 R_1;

（5）把 $[a,b]$ 16等分,计算 $f(a+i\frac{b-a}{16}), i=1,3,5,\cdots,15$,算出$T_{16}$, S_8, C_4 与R_2,继续重复进行,直到

$$|R_{2n}-R_n|<\varepsilon \text{ (允许误差)}$$

时停止计算, R_{2n} 就是所求的积分值。

理查森外推加速法

定理　设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上具有任意阶导数，

$T_0(h)$ 为将 $[a,b]$ n 等分用梯形公式得到的积分值，

I 为积分准确值，则

$$T_0(h)-I=a_1h^2+a_2h^4+a_3h^6+\cdots \quad (5.4.7)$$

式中系数 $a_i(i=1,2,\cdots)$ 与 h 无关。

若将子区间分半, 即将 $[a,b]$ $2n$ 等分,
用梯形公式求得的积分值记为 $T_0(\frac{h}{2})$,
按(5. 4. 7)式

$$T_0(\frac{h}{2}) - I = a_1(\frac{h}{2})^2 + a_2(\frac{h}{2})^4 + \cdots \qquad (5.4.13)$$

将式(5. 4. 7)与式(5. 4. 13)按以下方式作线性组合

$$T_1(h) = \frac{4}{3}T_0(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}T_0(h) \qquad (5.4.14)$$

得到

$$T_1(h) = I + b_1h^4 + b_2h^6 + \cdots \qquad (5.4.15)$$

$$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n \qquad (5.4.2)$$

$$T_1(h) = \frac{4}{3}T_0(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}T_0(h) \qquad (5.4.14)$$

比较(5.4.14)式与(5.4.2)式可知,这样构造出的

$\{T_1(h)\}$ 其实就是**抛物线值序列**。

又按照(5. 4. 15)式

$$T_1(\frac{h}{2}) = I + \frac{1}{16}b_1h^4 + \frac{1}{64}b_2h^6 + \cdots$$

令 $T_2(h) = \frac{16}{15}T_1(\frac{h}{2}) - \frac{1}{15}T_1(h)$

则得到 $T_2(h) = I + C_1h^6 + C_2h^8 + \cdots$

这样构造出的 $\{T_2(h)\}$ 其实就是**柯茨**值序列。

如此继续下去，每加速一次，误差的量级便提高二阶。

一般地，按公式

$$T_m(h)=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}(\frac{h}{2})-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}(h) \qquad (7.4.16)$$

经过 m 次加速后，余项为下列形式

$$T_m(h)-I=d_1h^{2(m+1)}+d_2h^{2(m+2)}\cdots\cdots \qquad (7.4.17)$$

上述方法称为**理查森（** ***Richardson*** **）外推加速法**。

设以 $T_0^{(k)}$ 表示二分 k 次后求得到的梯形值,

且用 $T_m^{(k)}$ 来表示序列 $\{T_0^{(k)}\}$ 的 m 次加速值,

则依递推公式(5. 4. 16), 有

$$T_m^{(k)}=\frac{4^m}{4^m-1}T_{m-1}^{(k+1)}-\frac{1}{4^m-1}T_{m-1}^{(k)},\quad k=1,2,\cdots,\quad m=1,2,\cdots,k \quad (7.4.18)$$

可以逐行构造出下列三角形数表(T数表):

$$\begin{array}{llll}
T_0^{(0)} & & & \\
T_0^{(1)} & T_1^{(0)} & & \\
T_0^{(2)} & T_1^{(1)} & T_2^{(0)} & \\
T_0^{(3)} & T_1^{(2)} & T_2^{(1)} & T_3^{(0)}
\end{array}$$

可以证明，如果 $f(x)$ 充分光滑，那么 T 数表每一列的元素及对角线元素均收敛到所求的积分值 I，即

$$\lim_{k\to\infty} T_m^{(k)} = I$$

$$\lim_{m\to\infty} T_m^{(k)} = I$$

注：所谓龙贝格算法，就是在二分过程中逐步形成 T 数表的具体方法。

*Gauss*型积分公式

问题的提出：

在节点数目固定为n+1的条件下，能否适当地选择节点位置和相应的系数，使如下求积公式

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

具有**最大的**代数精度。

定义：

以$[a, b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式$\omega_{n+1}(x)$的$n+1$个零点

$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 为节点的插值型求积公式，

可使该求积公式的代数精度提高到 $2n+1$ 次。

具有 $2n+1$ 次代数精度的求积公式：

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + R_n[f] \qquad (5.5.1)$$

称为**高斯型求积公式**，相应的求积节点称为**高斯点**。

公式(5.5.1)的**余项**如下：

$$R_n[f] = \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta)\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx, \eta \in (a,b)$$

定理 1： 插值型求积公式（5.5.1）的节点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ 是**高斯点**的充分必要条件是以这些节点为零点的多项式

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

与任意次数不超过n的多项式$P(x)$**带权**$\rho(x)$**正交**，即

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)dx = 0 \qquad (5.5.5)$$

证明：　必要性（“$\Longrightarrow$”）

设 $P(x) \in H_n$ ，

则 $P(x)\omega_{n+1}(x) \in H_{2n+1}$,

如果 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是高斯点，

则求积公式(5. 5. 1)对于 $f(x) = P(x)\omega_{n+1}(x)$ 精确成立，有

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k P(x_k)\omega_{n+1}(x_k).$$

因为 $\omega_{n+1}(x_k) = 0(k = 0,1,\cdots,n)$, 故(5. 5. 5)成立。

充分性（“$\Longleftarrow$”）

对于 $\forall f(x)\in H_{2n+1}$， 用 $\omega_{n+1}(x)$ 除 $f(x)$， 记商为 $P(x)$， 余式为 $q(x)$ ， 即 $f(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)+q(x)$,

其中 $P(x),q(x)\in H_n$.

由(5. 5. 5)可得

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx=\int_a^b q(x)\rho(x)dx.$$

由于所给求积公式（5. 5. 1）是插值型的，它对于 $q(x)\in H_n$ 是精确的，即

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx=\sum_{k=0}^{n}A_k q(x_k).$$

又知 $\omega_{n+1}(x_k)=0(k=0,1,\cdots,n),$

$q(x_k)=f(x_k)(k=0,1,\cdots,n),$

从而由有

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx=\int_a^b q(x)\rho(x)dx=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k).$$

可见求积公式（5.5.1）对于一切次数不超$2n+1$的多项式均精确成立。 因此 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$ 为高斯点。**证毕。**

定理2： 积分区间[*a*, *b*]上带权$\rho(x)$的n+1次正交多项式$\varphi_{n+1}(x)$的 n+1个零点就是**一组 Gauss 点**。

注：含有n+1个节点而代数精度为2n+1的插值型求积公式是存在的,它所用的节点是[a, b]上的第n+1次正交多项式的**零点**。

注：由定理2，求 Gauss 点的问题又可转化为如何找到一组正交多项式中的一个n+1次正交多项式 $\varphi_{n+1}(x)$。

定理3　高斯公式(5.5.1)的求积系数A_k全为正，且

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b l_k^2(x)dx,\qquad k=0,1,\cdots n \tag{5.5.4}$$

证明　因为$l_k(x)$是n 次多项式，所以$l_k^2(x)$是$2n$次多项式，从而高斯公式(5.5.1)对它能准确成立，即

$$\int_a^b l_k(x)dx=\sum_{i=0}^n A_i l_k(x_i)$$

$$\int_a^b l_k^2(x)dx=\sum_{i=0}^n A_i l_k^2(x_i)$$

注意到$l_k(x_i)=\delta_{ki}$，上面二式的右端实际上等于A_k，从而有

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b l_k^2(x)dx>0$$

证毕

定理4 对于高斯公式(5. 5. 1), 其余项为

$$R(f)=\frac{1}{(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta)\int_a^b \omega_{n+1}^2(x)dx \qquad (5.5.5)$$

其中：$\eta\in[a,b], \omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n).$

注：$\int_a^b f(x)\rho(x)dx=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)+R_n[f] \qquad (5.5.1)$

证明：以 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为节点构造 $f(x)$ 的埃尔米特插值多项式 $H(x)$

$$H(x_i) = f(x_i),\ H'(x_i) = f'(x_i), \qquad i = 0,1,\cdots n$$

因为 $H(x)$ 是 $2n+1$ 次多项式, 而它的余项是

$$f(x) - H(x) = \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi)\omega_{n+1}^2(x)$$

所以高斯公式(5. 5. 1)对 $H(x)$ 能准确成立, 即

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

从而

$$R(f)=\int_a^b f(x)dx-\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b H(x)dx$$

$$=\int_a^b \frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\xi)\omega_{n+1}^2(x)dx$$

若 $f^{(2n+2)}(x)$ 在区间$[a,b]$ 上连续, 由于$\omega_{n+1}^2(x)$在$[a,b]$上不变号, 故应用积分中值定理可得

$$R(f)=\frac{1}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta)\int_a^b \omega_{n+1}^2(x)dx, \qquad \eta\in[a,b]$$

证毕

注: **与牛顿—科兹公式**比较, 高斯公式不但具有高精度, 而且它还是数值稳定的, 但是节点和求积系数的计算比较麻烦。

高斯—勒让德公式

对于任意求积区间$[a,b]$，通过变换

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

可化为区间$[-1,1]$，这时

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

因此，不失一般性，可取 $a=-1,b=1$，考查区间$[-1,1]$

上的高斯公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx\approx\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \qquad (5.5.6)$$

勒让德(Legendre)多项式

$$L_{n+1}(x)=\frac{1}{2^{n+1}(n+1)!}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}[(x^2-1)^{n+1}] \qquad (5.5.7)$$

是区间$[-1,1]$上权函数$\rho(x)=1$的正交多项式，

因此，$L_{n+1}(x)$的$n+1$个零点就是高斯公式(5. 5. 6)的$n+1$个节点。特别地，称$L_{n+1}(x)$的零点为**高斯点**，

形如(5. 5. 6)的高斯公式称为**高斯–勒让德公式**。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \qquad (5.5.6)$$

勒让德多项式性质：

$$(1-x^2)L'_{n+1}(x)=(n+1)[L_n(x)-xL_{n+1}(x)]$$

高斯-勒让德求积系数 A_i 为：

$$A_i=\frac{2(1-x_i^2)}{[(n+1)L_n(x_i)]^2}$$

由(5. 5. 7)可逐步构造出勒让德多项式:

$$p_1(x) = x$$

$$p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

$$p_4(x) = x^4 - \frac{30}{35}x^2 + \frac{3}{35}$$

$$p_5(x) = x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{5}{21}x$$

$$\vdots$$

利用勒让德多项式，取它的零点作为求积节点，即可构造高斯求积公式。

(1) 令 $P_1(x) = x = 0$, 得高斯点 $x_1 = 0$,

从而**一点高斯-勒让德公式**(中矩形公式)为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx w_1 f(0)$$

令它对 $f(x)=1$ 准确成立，所以

$w_1 = 2$, 从而得 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 2f(0)$ (5. 5. 10)

其余项为 $R(f) = \dfrac{1}{3} f''(\eta)$

(2) 若取 $P_2(x)=x^2-\frac{1}{3}=0$ 的两个零点 $\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$ 为节点, 则从而**二点高斯-勒让德公式**为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx w_1 f(-\frac{1}{\sqrt{3}})+w_2 f(\frac{1}{\sqrt{3}}) \qquad (5.5.11)$$

令它对 $f(x)=1, x$ 都准确成立，所以 $w_1=w_2=1,$

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

其余项为 $R(f)=\frac{2^5\cdot 2^4}{5\cdot 24^3}f^{(4)}(\eta)=\frac{1}{135}f^{(4)}(\eta)$

同理, 三点高斯–勒让德公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9} f(-\frac{\sqrt{15}}{5}) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(\frac{\sqrt{15}}{5}) \qquad (5.5.12)$$

其余项为 $R(f) = \frac{1}{15750} f^{(6)}(\eta)$

注：一般地， 高斯-勒让德公式 (5.5.6)的节点可以通过勒让德多项式的零点确定。

表5-2给出了高斯—勒让德公式在节点数为1,2,3,4,5,6时的节点、求积系数及余项(略，请查相关资料)。

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

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

例　用二点高斯-勒让德公式计算积分

$$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin x dx$$

解　作变量代换 $x=\frac{\pi}{4}(t+1)$，　则

$$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin x dx=\frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1}\sin\frac{\pi(t+1)}{4}dt$$

记 $f(t)=\sin\frac{\pi(t+1)}{4}$ ，因为节点 $t_i=\pm 0.5773503$ 得

$$f(t_0)=0.32589, \quad f(t_1)=0.94541$$

所以, 由二点高斯公式

$$I\approx\tfrac{\pi}{4}[f(t_0)+f(t_1)]$$

$$=\frac{\pi}{4}(0.32589+0.94541)=0.94541$$

注：计算结果比用 复合梯形公式 7个节点计算的结果还要好。

注：

一般性，考虑积分：

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

称为**权函数**

定义两个可积函数的内积为：

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

两个**函数正交**，就是指这两个函数的内积为0

（选修内容）

利用施密特（Schmidt）正交化过程，

$$\begin{cases} g_0(x) = f_0(x) \\ \vdots \\ g_n(x) = f_n(x) - \sum_{i=0}^{n-1} \dfrac{(f_n(x), g_i(x))}{(g_i(x), g_i(x))} g_i(x) \end{cases}$$

就可以将多项式基函数

$\{1, x, \cdots, x^n\}$变为正交基 $\{p_0(x), p_1(x), \cdots, p_n(x)\}$

（选修内容）

Gauss型求积公式的构造方法

(1) 求出区间 $[a,b]$ 上权函数为 $\rho(x)$ 的正交多项式 $p_n(x)$；

(2) 求出 $p_n(x)$ 的 n 个零点 $x_1, x_2, \ldots x_n$ 即为Gauss点；

(3) 计算积分系数。

（选修内容）

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

解 按 Schmidt正交化过程作出正交多项式:

$$p_0(x)=1$$

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

$$p_2(x)=x^2-\frac{(x^2,p_0(x))}{(p_0(x),p_0(x))}p_0(x)-\frac{(x^2,p_1(x))}{(p_1(x),p_1(x))}p_1(x)$$

$$=x^2-\frac{\int_{-1}^{1}x^4dx}{\int_{-1}^{1}x^2dx}-\frac{\int_{-1}^{1}x^5dx}{\int_{-1}^{1}x^4dx}x=x^2-\frac{3}{5}$$

（选修内容）

$P_2(x)$的两个零点为 $x_1=-\sqrt{\tfrac{3}{5}}$ ，$x_2=\sqrt{\tfrac{3}{5}}$，

积分系数为

$$A_1=\int_{-1}^{1}x^2 l_1(x)dx=\int_{-1}^{1}x^2\frac{x-x_2}{x_1-x_2}dx=\frac{1}{3}$$

$$A_2=\int_{-1}^{1}x^2 l_2(x)dx=\int_{-1}^{1}x^2\frac{x-x_1}{x_2-x_1}dx=\frac{1}{3}$$

故两点**Gauss**公式为

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

Thanks!