计算物理讲义

冯旭

1 数值计算的基础

2 线性方程组的直接解法

3 内插与函数的计算

4 数值积分

本章中我们讨论利用数值方法进行函数的积分。利用数值方法计算定积分是很多物理分支中必须面对的课题。这一章中我们将仅仅涉及普通的单自变量函数函数在一维的定积分。对于多元函数在多维空间的积分，一般采用 Monte Carlo 方法更为合适。

4.1 等间距的数值积分公式：Newton-Cortes(牛顿-柯特斯)

我们首先来考察数值积分的函数计算节点是等间距的情形。假定我们希望计算积分，

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{1}$$

讨论这类积分问题可以从我们前面讨论的多项式内插出发。我们认定 $a = x_0 < x_0 + h < \cdots < x_N = b$ 构成了区间 $[a, b]$ 的一个分割。我们知道我们可以利用 Lagrange 内插公式，

$$P_N(x) = \sum_{i=0}^{N} f_i L_i(x) \tag{2}$$

这个多项式经过所有的 $N+1$ 个点 (x_i, f_i)。利用这个内插公式计算积分话，我们得到，

$$\int_a^b P_N(x)dx = \sum_{i=0}^{N} f_i \int_a^b L_i(x)dx \tag{3}$$

我们回顾一下 $L_i(x)$ 的表达式

$$L_i(x) = \prod_{0\le m\le n, m\ne i} \frac{x - x_m}{x_i - x_m}, \quad i = 0, 1, \cdots, N. \tag{4}$$

现在我们令

$$x = a + ht, \quad t \in [0, N] \tag{5}$$

同时令

$$L_i(x) \equiv \phi_i(t) = \prod_{k=0, k\ne i}^{N} \frac{t-k}{i-k} \tag{6}$$

于是我们就得到，

$$\int_a^b P_N(x)dx = h\sum_{i=0}^{N} f_i\alpha_i, \quad \alpha_i = \int_0^N \phi_i(t)dt \tag{7}$$

作为一个例子我们取 $N=2$，我们有，

$$\alpha_0 = \int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\frac{t-2}{0-2}dt = \frac{1}{3} \tag{8}$$

以及类似的计算给出 $\alpha_1 = 4/3, \alpha_2 = 1/3$。于是我们得到著名的 Simpson 规则 (或者称为 Simpson 公式)，

$$\int_a^b P_2(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2). \tag{9}$$

对于任意的 N 点的公式，一般称为 Newton-Cortes 公式。它的形式为，

$$\int_a^b P_N(x)dx = h\sum_{i=0}^{N} f_i\alpha_i \tag{10}$$

其中权重 α_i 源于有理系数的多项式在 $[0,N]$ 上的积分，因此它们必定都是有理数。通常将它们写为分数的形式。它们还满足一个约束条件，

$$\sum_{i=0}^{N}\alpha_i = N \tag{11}$$

这可以在上面的 Newton-Cortes 公式中令 $f(x)=1$(从而 $P_N(x)\equiv 1$ 并且 $f_i \equiv 1$) 获得。我们可以将其通分，令 $\alpha_i = \sigma_i/s$，其中的 σ_i 和 s 都是正整数，s 是各个 α_i 共同的分母，这样一来公式可以写成，

$$\int_a^b P_N(x)dx = \frac{b-a}{Ns}\sum_{i=0}^{N} f_i\sigma_i \tag{12}$$

由于上面提及的对于 α_i 的约束，我们知道 $\sum_i(\sigma_i/Ns)=1$。

对于计算积分 $I(f)$ 的求积公式 $I_n(f)$，称 $I(f)-I_n(f)$ 为该公式的积分余项，记为 $R[f]$。积分余项反映了求积公式的截断误差，是衡量求积公式准确度的重要依据。假设 $I_n(f)$ 为某个插值函数 $p(x)$ 的积分，则

$$R[f] = \int_a^b [f(x)-p(x)]dx \tag{13}$$

即积分余项等于插值余项的积分。对于拉格朗日插值，我们有

$$R[f] = \int_a^b [f(x)-P_N(x)]dx = \int_a^b \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}\omega(x)dx \tag{14}$$

其中 $\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_N)$。设 $x = a+th$，那么 $\omega(x)$ 可以写成

$$\int_a^b \omega(x)dx = h^{N+2}\int_0^N \prod_{j=0}^{N}(t-j)dt \tag{15}$$

当 N 是偶数时，我们可以令 $t = u + N/2$，那么积分可以写成

$$h^{N+2}\int_{-N/2}^{N/2}\prod_{j=0}^{N}(u+\frac{N}{2}-j)du = h^{N+2}\int_{-N/2}^{N/2}\prod_{j=-N/2}^{N/2}(u-j)du \tag{16}$$

可以看出来被积函数是个奇函数，所以积分等于 0。这个式子告诉我们，如果我们想要逼近的函数本身是 N 阶多项式，那么 P_N 对 $f(x)$ 的逼近提供的是一个精确解，因为这个时候 $f^{(N+1)}(\xi)=0$。如果 N 是偶数，$P_N(x)$ 的表示可以严格表达一个 $N+1$ 阶多项式的积分，因为这个时候 $f^{(N+1)}(\xi)=\text{constant}$。尽管 $f^{(N+1)}(\xi)\neq 0$，我们却可以把这个常数提取到积分的外面，而对于 $\omega(x)$ 的积分，当 N 是偶数时，积分为 0。因此截断误差比我们预判的还要高一阶。也就是说偶数阶的牛顿-柯特斯公式与比它高一阶的公式拥有相同阶数的截断误差。

我们下面来看一个表。Newton-Cortes 积分表达式对于 $N=1,2,\cdots,6$ 的情形。

N	σ_i	Ns	误差估计	名称
1	1 1	2	$h^3(1/12)f^{(2)}(\xi)$	梯形法则
2	1 4 1	6	$h^5(1/90)f^{(4)}(\xi)$	Simpson 规则
3	1 3 3 1	8	$h^5(3/80)f^{(4)}(\xi)$	3/8 规则
4	7 32 12 32 7	90	$h^7(8/945)f^{(6)}(\xi)$	Milne 规则，也称 Cotes 公式
5	19 75 50 50 75 19	288	$h^7(275/12096)f^{(6)}(\xi)$	
6	41 216 27 272 27 216 41	840	$h^9(9/1400)f^{(8)}(\xi)$	Weddle 规则

同学们也许会说，比较梯形法则和 Simpson 规则的时候不太公平，因为梯形法则只取了两个点做内插，而 Simpson 规则取了 3 个点。我们也可以在 3 个点的时候用梯形法则，这个时候 h 由 $h=(b-a)/2$ 降到 $h=(b-a)/3$，也就是说步长和 Simpson 规则一样，但是误差一个是 $O(h^3)$，另一个是 $O(h^5)$。

从 $N=8$ 开始起的更高阶数值积分公式，会出现 σ_i 正负相消的情况，因此并不能有效地改进计算效率。这个时候的求积分公式是很不稳定的。对于 $N=1$ 我们获得的是所谓的梯形法则 (trapezoidal rule)

$$P_1(x)=\frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right] \tag{17}$$

$N=2$ 的则是 Simpson 法则

$$P_2(x)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right] \tag{18}$$

$N=3$ 的称为 3/8 规则等等，但是截断误差比 Simpson 公式还要差一点，所以并不是 N 越大越好。$N=4$ 称为 Cotes 公式

$$P_4(x)=\frac{b-a}{90}\left[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\right] \tag{19}$$

这里有个规律是系数是对称的，大家想一下是为什么。

另外，还有一点需要提一下的是关于积分公式的收敛性和稳定性。收敛性的定义比较直接，对于 n 的值可为任意正整数的一系列求积公式 $I_n(f)=\frac{b-a}{Ns}\sum_{i=0}^{N}f_i\sigma_i$。$a\leq x_0\leq x_1\leq\cdots\leq b$，若

$$\lim_{n\to\infty,h\to 0}I_n(f)=\int_a^b f(x)dx \tag{20}$$

其中 $h=\max_{1\leq k\leq n}(x_k-x_{k-1})$，则称这一系列求积分公式具有收敛性。

在讨论求积分公式的稳定性之前，我们先分析数值积分问题的敏感性和条件数。假设 $f(x)$ 为准确的被积函数，$\tilde{f}(x)$ 为实际计算时受扰动影响的被积函数，扰动的大小为 $\delta=||f(x)-\tilde{f}(x)||_\infty=\max_{a\leq x\leq b}|f(x)-\tilde{f}(x)|$。那么扰动对积分计算的影响为

$$\left|\int_a^b f(x)dx-\int_a^b\tilde{f}(x)dx\right|\leq\int_a^b|f(x)-\tilde{f}(x)|dx\leq(b-a)\delta \tag{21}$$

这说明，积分计算结果的误差最多为扰动的 $(b-a)$ 倍，积分区间的长度 $(b-a)$ 是绝对条件数的上限。一般来说，数值积分问题是不太敏感的，这点不难理解，因为积分运算本身就是一个平均的过程，它不容易受被积函数的小扰动影响。

求积分公式的稳定性是与我们如何选取积分公式有关的，比方说我们是选择梯形公式还是选择 Simpson 公式。它反映了计算过程中的扰动是否被放大，以及放大的程度。具体来说我们需要考虑积分节点的函数值出现误差时，它对结果产生的影响。假设节点函数值由 f_i 变成了 $\tilde{f}_i$，则数值积分的结果由 $I_n(f)$ 变成 $I_n(\tilde{f})$，两者之间的差满足

$$\begin{aligned}|I_n(f)-I_n(\tilde{f})| &= \frac{b-a}{Ns}\left|\sum_{i=0}^{n}\sigma_i\left[f_i-\tilde{f}_i\right]\right| \\ &\leq \frac{b-a}{Ns}\sum_{i=0}^{n}|\sigma_i|\cdot|f_i-\tilde{f}_i| \\ &\leq \frac{b-a}{Ns}\left(\sum_{i=0}^{n}|\sigma_i|\right)\epsilon \end{aligned} \tag{22}$$

其中 $\epsilon=\max_{0\leq i\leq n}|f_i-\tilde{f}_i|\leq\delta$。这时，我们分情况分析。如果 σ_i 全是正数，那么

$$|I_n(f)-I_n(\tilde{f})|\leq(b-a)\epsilon\leq(b-a)\delta \tag{23}$$

说明求积分公式的结果受扰动的影响程度与积分问题敏感性的结果一致。如果 σ_i 有正有负，比方说像 Newton-Cortes 积分在 $n\geq 8$ 的情况下就会出现 σ_i 相消。原则上 $\frac{b-a}{Ns}\left(\sum_{i=0}^{n}|\sigma_i|\right)$ 可以远远大于 $b-a$，从而导致函数值的扰动在计算结果上被放大很多。

在真实计算数值积分时，我们往往并不是将上述规则直接运用到待积分的整个区间，而是首先将积分区间分为若干个小段，然后分别在各个小段上运用这些积分公式。换句话说，我们经常使用的是所谓的延展的积分规则，例如延展的梯形规则、延展的 Simpson 规则等等。

4.2 外推积分方法

我们之前给出过一个判断积分余项的公式。这个公式是一般的 Euler-Maclaurin 公式的特殊情形。下面我们给出一般的公式并且说明如何利用这个公式给出一系列利用外推的积分方法。

我们来看下面这个定理,也称 Euler-Maclaurin 公式。对于任意正整数 m,假定函数 $g\in C^{2m+2}[0,1]$,那么我们有,

$$\begin{aligned}\int_0^1 g(t)dt &= \frac{g(0)}{2}+\frac{g(1)}{2}+\sum_{k=1}^{m}\frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[g^{(2k-1)}(0)-g^{(2k-1)}(1)\right] \\ &- \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}g^{(2m+2)}(\xi),\quad \xi\in(0,1)\end{aligned} \tag{24}$$

其中的 B_{2k} 是所谓的 Bernoulli 数，它的定义由下式给出:

$$\frac{z}{e^z-1}=\sum_{n=0}^{\infty}B_n\frac{z^n}{n!} \tag{25}$$

我们需要的是将上述公式复制 N 份之后的结果,

$$\begin{aligned}\int_0^N g(t)dt &= \frac{g(0)}{2}+g(1)+\cdots+\frac{g(N)}{2}+\sum_{k=1}^{m}\frac{B_{2k}}{(2k)!}\left[g^{(2k-1)}(0)-g^{(2k-1)}(N)\right] \\ &- \frac{B_{2m+2}}{(2m+2)!}Ng^{(2m+2)}(\xi),\quad \xi\in(0,N)\end{aligned} \tag{26}$$

这里我们假定 $g \in C^{(2m+2)}[0, N]$。将这个公式运用到任意的区间 $[a, b]$ 上的积分，如果我们假定中间函数计算的点是均匀分布的，从而积分的步长

$$h = \frac{b-a}{N} \tag{27}$$

那么 Euler-Maclaurin 公式给出，

$$\begin{aligned} T(h) &= \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=1}^{m} \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\left[f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(N)\right] \\ &+ \frac{B_{2m+2}h^{2m+2}}{(2m+2)!} N f^{(2m+2)}(\xi), \quad \xi \in (a, b) \end{aligned} \tag{28}$$

其中 $T(h)$ 代表梯形法则给出的近似式:

$$T(h) = h\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right] \tag{29}$$

而我们假定 $f \in C^{(2m+2)}[a, b]$。我们考虑两种情况：一、如果余项 $\frac{B_{2m+2}h^{2m+2}}{(2m+2)!} N f^{(2m+2)}(\xi)$ 很小 (这可以由 $f^{(2m+2)}(\xi)$ 来控制)，那么我们可以通过 $T(h)$ 以及 Bernoulli 级数来得到积分的值。二、反过来，如果上面给出的这个公式一般并不是收敛的级数，而是一个渐近展开 (asymptotic expansion)。这里主要的原因是 Bernoulli 数 B_{2k} 随着 k 的增大可以变得很大，如果 $\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$ 不能随着 k 增大而迅速减小，那么 $T(h)$+Bernoulli 级数的方法效果是比较差的。我们需要 h 的值非常小。这个时候可以采用外推积分算法。

当 $h \to 0$ 时，我们有

$$\lim_{h\to 0} T(h) = \int_a^b f(x)dx \tag{30}$$

我们发现，作为步长 h 的函数，近似式 $T(h)$ 可以有如下的渐近展开，

$$T(h) = \tau_0 + \tau_1 h^2 + \cdots + \tau_m h^{2m} + \alpha_{m+1}(h)h^{2m+2} \tag{31}$$

其中 $\tau_0 = \int_a^b f(x)dx$，$\tau_1, \tau_2, \cdots \tau_m$ 各级系数 Euler-Maclaurin 展开给出。所有这些系数都是与 h 无关的。这说明 $T(h)$ 可以展开成一个 h^2 的多项式，这表示我们可以对 $T(h)$ 进行多次计算，每次运用不同的 h，然后再进行多项式的内插/外推，得到 τ_0 的值。

一般来说，我们会选取一系列严格递增的整数系列：$1 = n_0 < n_1 < n_2 \cdots < n_m$ 并且令相应的积分步长为，

$$h_i = \frac{b-a}{n_i} \tag{32}$$

我们看到 $h_0 = (b-a)$。一个经常使用的同时也是比较自然的序列是 $n_i = 2^i$。这是 Romberg 早先的选择。当然其他的选择也是可以的。

注意这个时候我们的节点是 h_i^2, 这里 h_i 是由我们设置的 n_i 来给出, 每个 h_i^2 对应的函数是 $T(h_i)$。对于 m 个节点的多项式内插，我们可以采用 Neville 算法。我们回顾一下 Neville 算法，首先零阶函数是常数，分别由每个节点处的值给出

$$T_{i0}(h) \equiv T(h_i), \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{33}$$

然后我们再利用迭代关系把高阶函数写出来，就是这样一个三角形的图

$$
\begin{array}{c|llll}
h_0^2 & T_{00} = T(h_0) & & & \\
 & & T_{11} & & \\
h_1^2 & T_{10} = T(h_1) & & T_{22} & \\
 & & T_{21} & & T_{33} \\
h_2^2 & T_{20} = T(h_2) & & T_{32} & \\
 & & T_{31} & & \\
h_3^2 & T_{30} = T(h_3) & & & \\
\cdots & \quad \cdots & & &
\end{array}
$$

其中

$$T_{j,k} = T_{j,k-1} + \frac{T_{j,k-1} - T_{j-1,k-1}}{\frac{h^2 - h_{j-k}^2}{h^2 - h_j^2} - 1} \tag{34}$$

比方说 T_{21} 由 T_{20} 和 T_{10} 给出。我们可以把迭代一直往下做，最后我们得到 m 阶多项式记为 $T_{mm}(h)$。得到 $T_{mm}(h)$ 之后，我们把 $T_{mm}(0)$ 作为 τ_0 的一个近似值。

Romberg 选择节点有一个特点：当我们在计算第 n_m 个节点处的值 $T(h_m)$ 时，我们需要做级数求和

$$T(h_m) = h_m \left[\frac{f(a)}{2} + f(a + h_m) + f(a + 2h_m) + \cdots + f(b - h_m) + \frac{f(b)}{2} \right] \tag{35}$$

这些 f 的值足以帮助我们得到 $T(h_{m-1})$、$T(h_{m-2})$、$\cdots$、$T(h_0)$ 时候的值。事实上，我们也很容易得到 $T(h_{i+1})$ 和 $T(h_i)$ 之间的递推关系式。

我们来总结一下 Euler-Maclaurin 公式在外推积分方法中的应用，假如我们需要算一个积分，我们用梯形法近似地给出积分值，这个近似值是由级数表示，它与真实的积分值的差别由一系列 Bernoulli 数表示。我们取不同的步长来算这个梯形近似，然后外推到步长为 0 的情形，就得到了积分的值。

其实 Euler-Maclaurin 公式可以反过来用。如果积分很好算，而级数的计算收敛却很慢，我们可以尝试用 Euler-Maclaurin 公式来加速级数收敛，把求和化为积分。一个有名的例子就是 Basel 级数求和

$$\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \cdots \tag{36}$$

我们定义 $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$，那么这个级数是从 0 一直求和到无穷。利用 Euler-Maclaurin 公式

$$f_0 + f_1 + \cdots = \frac{f_0}{2} + \frac{f_\infty}{2} + \int_0^\infty f(x)dx - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} f^{(2k-1)}(0) \tag{37}$$

用在计算级数和上，这个公式的作用是生成一个收敛非常快的渐进级数。基于这个级数，只取前 10 项的情况下，就可以将级数和算到计算机机器精度，也就是小数点后 15 位。其中的计算量哪怕手算也是可以胜任的。最后得到的结果是

$$\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \cdots = \frac{\pi^2}{6} \tag{38}$$

因此 Euler-Maclaurin 公式也曾经被用来计算 π 的值。（据说当年伯努利兄弟就研究过这个问题，最后的解答是欧拉最早得到的，Basel 同时是欧拉和伯努利兄弟的故乡。）

4.3 利用正交多项式的高斯积分法

正如我们前面及的，如果一个函数可以用正交多项式来近似展开，我们还可以利用正交多项式进行积分。前面我们已经介绍了一种最为常用的正交多项式，也就是 Chebyshev 多项式。事实上，还有其他的类型。我们这里做一个稍微一般一些的讨论。假定区间 $[a,b]$ 上定义的非负权重函数为 $\omega(x)$。定义在 $[a,b]$ 上最高阶系数为 1 的 j 阶多项式为 Π_j，即 $\Pi_j = \{p|p(x) = x^j + a_1 x^{j-1} + \cdots + a_j\}$。那么下面的结论成立：

- 存在一系列的多项式 $p_n \in \Pi_n$ $n = 0, 1, \cdots$ ，它们满足正交性关系：

$$(p_i, p_j) = 0, \quad i \neq j \tag{39}$$

  这里的括号定义为 $[a,b]$ 区间内的加权内积

$$(f,g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) dx \tag{40}$$

- 这些正交多项式 p_n 可以通过 Gram-Schmidt 正交化方法来构造

具体地，我们有

$$p_0(x) \equiv 1, \quad p_1(x) = x - \frac{(x, p_0)}{(p_0, p_0)} p_0 \tag{41}$$

这样构造 p_1 的好处是，我们保证它和 p_0 正交。有了 p_0 和 p_1，我们可以继续构造

$$p_2 = x^2 - \sum_{k=0}^{1} \frac{(x^2, p_k)}{(p_k, p_k)} p_k, \quad p_{i+1} = x^{i+1} - \sum_{k=0}^{i} \frac{(x^{i+1}, p_k)}{(p_k, p_k)} p_k \tag{42}$$

这个公式分子需要计算内积 i 次，显然效率不是很高。事实上我们可以得到下列递推关系给出

$$\begin{aligned} & p_{-1} \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1, \\ & p_{i+1}(x) = (x - \delta_{i+1}) p_i(x) - \gamma_{i+1}^2 p_{i-1}(x), \quad i \geq 0 \end{aligned} \tag{43}$$

其中的系数 γ_i^2 和 δ_i 由下面的式子给出

$$\begin{aligned} & \delta_{i+1} = (x p_i, p_i)/(p_i, p_i), \quad i = 0, 1, \cdots \\ & \gamma_{i+1}^2 = (p_i, p_i)/(p_{i-1}, p_{i-1}), \quad \gamma_1^2 = 0, \quad i = 1, 2, \cdots \end{aligned} \tag{44}$$

这个递推关系式，我们用数学归纳法很容易证明。假设对于任意 $k < i$，都有 $(p_k, p_i) = 0$，我们只需要证明 $(p_k, p_{i+1}) = 0$，$k = 0, 1, \cdots, i$ 成立即可。

$$(p_k, p_{i+1}) = (x p_k, p_i) - \delta_{i+1}(p_k, p_i) - \gamma_{i+1}^2 (p_k, p_{i-1}) \tag{45}$$

第一项只在 $k = i - 1$ 或者 i 时，才不为 0。当 $k = i - 1$ 时，第二项为 0，第一项和第三项抵消。当 $k = i$ 时，第三项为 0，第一项和第二项抵消。

另外，这样构造的多项式还有两个性质

- 多项式 $p_n(x)$ 的 n 个根都是实数单根并且都位于 $[a,b]$ 之间。

- 对于 n 个两两不同的宗量 t_i，$i=0,1,\cdots,n-1$，下列系数矩阵是非奇异的。

$$A=\begin{pmatrix} p_0(t_0) & \cdots & p_0(t_{n-1}) \\ \cdots & & \cdots \\ p_{n-1}(t_0) & \cdots & p_{n-1}(t_{n-1}) \end{pmatrix} \tag{46}$$

根据正交多项式的这个性质，我们可以构造

$$p(x)=\sum_{i=0}^{n-1} c_i p_i(x) \tag{47}$$

并且要求 $p(t_i)=f_i$，$i=0,1,\cdots,(n-1)$，那么这个内插问题一定有唯一解 $c\in R^n$。这个条件有时候又称为 Haar 条件。满足 Haar 条件的一系列多项式 p_n 被称为一个 Chebyshev 系统。显然，我们前面及的 Chebyshev 多项式构成了一个 Chebyshev 系统。

我们下面来介绍高斯求积分公式。我们之前的求积分公式要么对节点没有特别的要求，要么节点均匀分布。事实上，我们可以想象一下，如果我们允许节点非均匀分布，原则上可以优化我们的积分，让它达到更高的精度。我们可以把节点均匀分布看成是不均匀分布的一种特例。我们来考察一般的插值求积分公式 $I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$，其中积分系数和积分节点一共是 $2n+2$ 个待定参数。我们现在要求当被积函数为 $1,x,\cdots,x^m$ 时，插值求积分公式和正确的积分公式给出一样的结果，也就是说

$$\begin{aligned}
&f(x)=1, \quad \sum_{k=0}^{n} A_k\cdot 1=\int_a^b dx \\
&f(x)=x, \quad \sum_{k=0}^{n} A_k\cdot x_k=\int_a^b xdx \\
&\cdots \\
&f(x)=x^m, \quad \sum_{k=0}^{n} A_k\cdot x_k^m=\int_a^b x^m dx
\end{aligned} \tag{48}$$

当 m 一直取到 $2n+1$ 时，我们可以列出 $2n+2$ 个方程。这样就可以确定 $2n+2$ 个参数。满足这样条件的积分公式，我们管它叫高斯求积分公式。相应的节点称为高斯点。这 $2n+2$ 个方程成立，实际上告诉我们，如果我们的被积函数是任意 $\leq 2n+1$ 阶的多项式，那么高斯求积分公式给出的结果是个严格正确的积分结果。

为了讨论的一般性，我们可以将待求的积分扩展为带权积分

$$I=\int_a^b f(x)\omega(x)dx \tag{49}$$

对于带权积分，相应的求积分公式还是可以写成

$$I_n=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{50}$$

要求出高斯求积分公式，一种方法是联立方程组求解高斯点和积分系数。但需要求解的是 $2n+2$ 阶非线性方程组，当 n 较大时计算量很大，或者难以求解。我们之前课程介绍的解方程组的方法，像高斯消元法之类的，主要也是针对线性方程组。我们下面介绍一个方法，可以帮助我们先确定高斯点的值，再求对应的积分系数。我们先来看一个定理。

插值积分公式 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 为高斯积分的充要条件是：以积分节点为零点的多项式 $\phi_{n+1} = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ 与任何次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上带权正交，也就是

$$\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0 \tag{51}$$

我们先证明必要性，也就是假设求积分公式为高斯积分，我们证明带权正交这个公式成立：因为 $p(x)$ 不超过 n 阶，那么 $p(x)\phi_{n+1}(x)$ 就不超过 $2n+1$ 阶，我们可以把 $p(x)\phi_{n+1}(x)$ 作为一个整体当成被积函数。我们知道，对于 $\leq 2n+1$ 阶的多项式，高斯积分公式严格成立，也就是说

$$\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k p(x_k)\phi_{n+1}(x_k) \tag{52}$$

而 $\phi_{n+1}(x)$ 在任意节点 x_k 处必为 0，于是我们得到 $\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0$。

下面我们来看充分性。给定任意阶数不超过 n 的多项式 $p(x)$，如果 $\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0$，那么积分公式是高斯积分。我们来看任意被积函数 $f(x) \in P_{2n+1}$，也就是说 $f(x)$ 是不超过 $2n+1$ 阶的任意多项式。首先我们把 $f(x)$ 除以 $\phi_{n+1}(x)$，得到

$$f(x) = g_n(x)\phi_{n+1}(x) + q_n(x) \tag{53}$$

其中 $g_n(x)$ 和 $q_n(x)$ 都是不超过 n 阶的多项式。在积分节点处，我们有

$$f(x_k) = g_n(x_k)\phi_{n+1}(x_k) + q_n(x_k) = q_n(x_k) \tag{54}$$

我们下面来看 $f(x)$ 的带权积分

$$\int_a^b f(x)\omega(x)dx = \int_a^b g_n(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx + \int_a^b q_n(x)\omega(x)dx = \int_a^b q_n(x)\omega(x)dx \tag{55}$$

因为 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 为插值型求积分公式，它必定对于阶数少于等于 n 的多项式函数严格成立，于是我们有

$$\int_a^b f(x)\omega(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k q_n(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{56}$$

因此求积分公式对于任意的 $\leq 2n+1$ 阶的多项式都成立，那么这个求积分公式是高斯求积分公式。

我们来总结一下课程的内容。我们首先用 Gram-Schmidt 正交化方法得到了一系列多项式 $p_n(x)$，这些多项式满足正交关系 $(p_i, p_j) = 0$，当 $i \neq j$ 时。然后我们介绍了高斯积分法，它的一个特点是节点的值不是均匀分布的，节点的值和积分系数同时作为参数存在，于是对于一个 n 阶多项式，我们共有 $2n+2$ 个参数。因此一个高斯积分公式可以精确确定一个 $2n+1$ 阶多项式的积分。当然，这里面一个还没有解决的事情是我们如何确定节点的值，也就是高斯点的值。为了解决这个问题，我们引入了一个定理，并且给出了充分、必要性证明。这个定理讲的是多项式插值积分 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 是高斯积分的充要条件是：以积分节点为零点的多项式 $\phi_{n+1} = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ 与任何次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上带权正交，也就是

$$\int_a^b p(x)\phi_{n+1}(x)\omega(x)dx = 0 \tag{57}$$

这个定理为求高斯点提供了依据, 只需要找到一个与任何次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 都带权正交的 $n+1$ 次多项式, 那么这个多项式的 $n+1$ 个不重复的零点就是高斯点。之前我们通过 Gram-Schmidt

正交化方法得到的 $n+1$ 阶多项式 p_{n+1} 就是我们所需要的，而且它的 $n+1$ 个根都是实数单根并且都位于 $[a,b]$ 之间，这正好作为高斯点的要求。

在我们知道了怎么求高斯点之后，下一步是要求积分系数。当然，我们可以联立方程组去求。但事实上，如果我们利用正交多项式的一些性质，积分系数可以用更简便的方式求出来。为了说明这一点，下面我们进一步引入一个定理。令 $x_1,\cdots,x_n$ 为正交多项式 $p_n(x)$ 的 n 个根。同时 $\omega_1,\cdots,\omega_n$ 为下列线性方程的解

$$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)\omega_i = \begin{cases} (p_0,p_0) & k=0 \\ 0 & k=1,2,\cdots,n-1 \end{cases} \tag{58}$$

那么我们一定有 $\omega_i>0$，$i=1,\cdots,n$，并且对于阶数不大于 $(2n-1)$ 的任意多项式 $p(x)\in\Pi_{2n-1}$ 来说，我们一定有如下的关系

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i p(x_i) \tag{59}$$

这些正的数 $\omega_i>0$ 被称为相应多项式的权重因子。

这个事情怎么理解呢？首先 p_n 是 n 阶正交多项式，那么它的零点 x_i 可以定义为高斯点。我们假设 p_k 是我们要考察的被积函数，我们构造的高斯积分形式是 $\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)A_i$，其中 A_i 是对应的积分系数。要想这个插值积分完全给出 $\int_a^b dx\, p_k(x)\omega(x)$ 的结果，我们要求系数 A_i 必须满足

$$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)A_i = \int_a^b p_k(x)\omega(x)dx \tag{60}$$

另一方面，我们利用 $p_k(x)$ 的性质 (把 $p_0(x)=1$ 作为被积函数)，马上得到

$$\int_a^b p_k(x)\omega(x) = \begin{cases} \text{for } k=0 & \int_a^b p_0(x)\omega(x) = (p_0,p_0) \\ \text{for } k\neq 0 & \int_a^b p_k(x)p_0(x)\omega(x) = 0 \end{cases} \tag{61}$$

联立这两个方程，我们发现系数 A_i 正好是由我们定理中的 ω_i 给出。一旦有了 ω_i，那么就可以完全确定高斯积分。对于我们确定下来的高斯积分，只要多项式 $p(x)$ 不大于 $(2n-1)$ 阶，我们一定有

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i p(x_i) \tag{62}$$

这里的 ω_i 不光是多项式的权重因子，同时也正是我们所要求的积分系数。由于 ω_i 源自权重函数，所以都是正的值，因此，高斯积分的稳定性是相当好的，不会出现像 Newton-Cortes 公式那样在多项式阶上去了以后出现正负相消的情况。当被积函数 $p(x)=1$ 时，我们有

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i = \int_a^b \omega(x)dx = (p_0,p_0) \tag{63}$$

当被积函数为 $p(x)=[p_k(x)]^2$ 时，我们有

$$\sum_{i=1}^{n} \omega_i[p_k(x_i)]^2 = \int_a^b \omega(x)[p_k(x)]^2dx = (p_k,p_k) \tag{64}$$

进一步，对于任意的 $f\in C^{2n}[a,b]$，我们一定可以找到一个 $\xi\in[a,b]$ 使得

$$\int_a^b \omega(x)f(x)dx - \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}(p_n,p_n) \tag{65}$$

这个也不难理解，假设 f 是超过 $2n-1$ 阶的多项式，那么高斯积分就不再是精确的积分公式，误差由 f 的 $2n$ 阶导数给出。

如果我们将前面递推关系中的系数 δ_i，γ_i 等排成如下的 $n\times n$ 三对角矩阵，

$$J_n = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & & \\ \gamma_2 & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ & & & \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix} \tag{66}$$

那么 $p_n(x)$ 的根 x_i 恰好是 J_n 的本征值; 如果假定相应的本征矢量记为 $v^{(i)}\in R^n$ 并且按照如下方式归一，

$$v^{(i)T}v^{(i)} = (p_0, p_0) = \int_a^b \omega(x)dx \tag{67}$$

那么权重因子 ω_i 由下面的式子给出

$$\omega_i = (v_1^{(i)})^2, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{68}$$

这个事情又是怎么理解呢？如果我们要求 J_n 的本征值，我们只需要让行列式 $\det(\lambda - J_n) = 0$。这个行列式可以展开成

$$\det(\lambda - J_n) = (\lambda - \delta_n)\det(\lambda - J_{n-1}) - \gamma_n^2 \det(\lambda - J_{n-2}) \tag{69}$$

这个时候我们可以利用数学归纳法，假设 $p_{n-1}(x)$ 的根必然使得行列式 $\det(x - J_{n-1})$ 为 0。而行列式展开成多项式的形式，它的最高阶系数又刚好是 1。于是，我们肯定有 $p_{n-1}(x) = \det(x - J_{n-1})$，$p_{n-2}(x) = \det(x - J_{n-2})$。那么上面的式子可以写成

$$\det(\lambda - J_n) = (\lambda - \delta_n)p_{n-1}(\lambda) - \gamma_n^2 p_{n-2}(\lambda) \tag{70}$$

我们知道 $p_n(x)$ 正交多项式的递推关系

$$p_n(x) = (x - \delta_n)p_{n-1}(x) - \gamma_n^2 p_{n-2}(x) \tag{71}$$

于是 $\det(\lambda - J_n) = p_n(\lambda)$。所以 $p_n(x)$ 的零点就是 J_n 矩阵的本征值。关于本征矢量，也可以类似的用数学归纳法证明。

作为最为典型的正交多项式，如果我们选取区间 $[-1, +1]$ 和 $\omega(x) = 1$，我们就有 Legendre 多项式

$$P_n(x) = \frac{n!}{(2n)!}\frac{d^n}{dx^n}\left[x^2 - 1\right]^n \tag{72}$$

这个定义与大家所熟悉的 Legendre 多项式之差一个常数因子。这个定义保证了多项式的最高级系数为 1. 这时的积分公式称为 Gauss-Legendre 积分公式 (Gauss- Legendre quadrature)。其他比较重要的特例还有:Jacobi 多项式和 Gauss-Jacobi 积分公式; Chebyshev 多项式和 Gauss-Chebyshev 积分公式;Hermite 多项式和 Gauss-Hermite 积分公式;Laguerre 多项式和 Gauss-Laguerre 积分公式等。这些多项式所对应的区间 $[a, b]$ 以及相应权重函数 $\omega(x)$ 在刘川老师的讲义里面有列出来。