

第四章 数值逼近与数值积分

1 正交多项式

定义 1.1. 内积: (两个函数内积) 设 $f, g \in [a, b]$, $\rho(x)$ 为权函数, 称 $(f, g) = \int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx$ 为函数 f 和 g 在 $[a, b]$ 上带权 ρ 的内积。

定义 1.2. 正交: 设 $f, g \in C[a, b]$, ρ 为权函数, 若 $(f, g) = 0$, 则称 f 与 g 在 $[a, b]$ 上带权 ρ 正交。

定义 1.3. 正交多项式: 设 ϕ_n 是 $[a, b]$ 上首项系数 $a_n \neq 0$ 的 n 次多项式, $\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上权函数, 若多项式序列 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 满足:

$$(\phi_i, \phi_j) = \int_a^b \rho(x)\phi_i(x)\phi_j(x)dx = \begin{cases} 0, i \neq j \\ A_j > 0, i = j \end{cases}$$

则称 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交, 并称 $\phi_n(x)$ 为 $[a, b]$ 上带 $\rho(x)$ 的 n 次正交多项式。

1.1 Gram-Schmidt 方法

用 Gram-Schmidt 正交化方法构造 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式 (重点):

$$\phi_0(x) = 1$$

$$\phi_1(x) = x - \alpha_1$$

$$\phi_k(x) = (x - \alpha_k)\phi_{k-1}(x) - \beta_k\phi_{k-2}(x), k = 2, 3, \dots$$

其中: $\alpha_k = \frac{(x\phi_{k-1}, \phi_{k-1})}{(\phi_{k-1}, \phi_{k-1})}, \beta_k = \frac{(\phi_{k-1}, \phi_{k-1})}{(\phi_{k-2}, \phi_{k-2})}$

1.2 正交多项式性质

1. $\phi_k(x)$ 是最高次数项系数为 1 的多项式。
2. $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交

3. 区间 $[a, b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$, 正交多项式 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 必定线性无关。

4. 任意 k 次多项式均可表示为前 $k+1$ 个 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_k$ 的线性组合

$$P_k(x) = c_0\phi_0 + c_1\phi_1 + \dots + c_k\phi_k$$

定理 1.1. 设 $\{\phi_k, k \geq 0\}$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列, 则 n 次多项式 $\phi_n(x)$ 在 (a, b) 内恰有 n 个不同的实零点 ($\phi_n(x_i) = 0, i = 1, 2, \dots, n$, 即 $\phi_n(x) = a_n(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$)。

1.3 常见的多项式

1.3.1 Legendre 多项式

表达式:

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \{(x^2 - 1)^n\} \end{cases} \quad (1.1)$$

性质:

1. 正交性:

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \begin{cases} 0, n \neq m \\ \frac{2}{2n+1}, n = m \end{cases}$$

i.e. Legendre 多项式序列 P_0, P_1, \dots, P_n 是 $[-1, 1]$ 上带权 $\rho(x) = 1$ 的正交多项式序列。

2. 奇偶性: $P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$

3. 递推关系: $(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), n = 0, 1, 2, \dots$

4. $P_n(x)$ 在 $(-1, 1)$ 内有 n 个不同的实零点 $P_n(x) = a_n(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$

Legendre 多项式首项系数: $a_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$, 从表达式易知。

1.3.2 切比雪夫 (Chebyshev) 多项式

对于 $x \in [-1, 1]$, 称 n 次多项式:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.2)$$

为 chebyshev 多项式。

性质:

1. 正交性:

$$\int_{-1}^1 \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = \begin{cases} 0, n \neq m \\ \frac{\pi}{2}, n = m \neq 0 \\ \pi, n = m = 0 \end{cases}$$

i.e. Chebyshev 多项式在 $[-1, 1]$ 上带权 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交

2. 递推关系: $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), n = 1, 2, \dots$

3. 奇偶性: $T_n(-x) = (-1)^n T_n(x)$

4. $T_n(x)$ 在 $(-1, 1)$ 上有 n 个不同的实零点; $x_k = \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n}, k = 1, 2, \dots, n$

5. T_n 的首项系数是 $a_n = 2^{n-1}, n = 1, 2, \dots$

6. 任意 n 次多项式均可表示成 T_0, T_1, \dots, T_n 的线性组合: $P_n(x) = c_0 T_0 + c_1 T_1 + \dots + c_n T_n$

由性质 1 和性质 6 可知:

$$\int_{-1}^1 \frac{P_k(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = 0, k < n$$

2 最小二乘拟合

2.1 线性最小二乘拟合

已知一组数据 $(x_i, f_i), i = 0, 1, \dots, m$, 要求在函数类 $\Phi = \text{span}\{\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n\}$ 中找到一个函数 $S(x)$ 使得

$$\sum_{j=0}^m \rho(x_j)[S^*(x_j) - f_j]^2 = \min_{S(x) \in \Phi} \sum_{j=0}^m \rho(x_j)[S(x_j) - f_j]^2 \quad (2.1)$$

其中 $S(x) = a_0 \phi_0(x) + \dots + a_n \phi_n(x)$, 这就是线性最小二乘曲线拟合

$$F(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{j=0}^m \rho(x_j)[S(x_j) - f_j]^2 = \sum_{j=0}^m \rho(x_j) \left[\sum_{i=0}^n a_i \phi_i(x_j) - f_j \right]^2$$

令 $\frac{\partial F}{\partial a_i} = 0, i = 0, 1, \dots, n$ 则有:

$$\frac{\partial F}{\partial a_k} = 2 \sum_{j=0}^m \rho(x_j) \left[\sum_{i=0}^n a_i \phi_i(x_j) - f_j \right] \phi_k(x_j) = 0 \quad (2.2)$$

定义 $(\phi_k, \phi_i) = \sum_{j=0}^m \rho(x_j) \phi_k(x_j) \phi_i(x_j)$ 为 $\phi_k(x_j)$ 和 $\phi_i(x_j)$ 在离散点集 $X = \{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ 上带权 $\rho(x_j)$ 的内积, 则2.2可写为:

$$\sum_{i=0}^n (\phi_k, \phi_i) a_i = d_k, k = 0, 1, \dots, n \quad (2.3)$$

其中 $d_k = (f, \phi_k)$, 称2.3为法方程, 或写成如下矩阵形式:

$$Ga = d$$

其中 $a = (a_0, a_1, \dots, a_n)^T$, $d = (d_0, d_1, \dots, d_n)^T$,

$$G = \begin{bmatrix} (\phi_0, \phi_0) & (\phi_0, \phi_1) & \dots & (\phi_0, \phi_n) \\ (\phi_1, \phi_0) & (\phi_1, \phi_1) & \dots & (\phi_1, \phi_n) \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ (\phi_n, \phi_0) & (\phi_n, \phi_1) & \dots & (\phi_n, \phi_n) \end{bmatrix}$$

定义 2.1. 设 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n \in [a, b]$ 的任意线性组合在 $X = \{x_0, x_1, \dots, x_m\} (m \geq n)$ 上至多只有 n 个不同的零点, 则称 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 在 X 上满足 *Haar* 条件

定理 2.1. 若 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 在 $X = \{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ 上满足 *Harr* 条件, 则 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 在 x 上线性无关, 且法方程2.3的系数矩阵 G 非奇异。

2.2 非线性最小二乘拟合

例 2.1. (重点) 若已知 $(x_i, f_i), i = 0, 1, \dots, m$, 且其分布近似于指数曲线, 则可考虑用指数函数 $S = be^{ax}$ 去拟合数据。

为此, 首先给出 $F(a, b) = \sum_{i=0}^m (f_i - be^{ax_i})^2$ 则可令 $\frac{\partial F}{\partial a} = \frac{\partial F}{\partial b} = 0, \Rightarrow$

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^m [f_j - be^{ax_j}] e^{ax_j} = 0 \\ \sum_{j=0}^m [f_j - be^{ax_j}] be^{ax_j} = 0 \end{cases}$$

由 $S = be^{ax}$ 可得: $\ln S(x) = \ln b + ax$ 令: $z = \ln S(x), \beta = \ln b$ 则 $z = \beta + ax$, 选取 $\Phi = \text{span}\{1, x\}, i.e. \phi_0(x) = 1, \phi_1(x) = x$

已知 $x = \{1, 1.25, 1.5, 1.75, 2\}, f = \{5.1, 5.79, 6.53, 7.45, 8.46\}$, 则 $\ln f = \{1.629, 1.756, 1.876, 2.008, 2.135\}$ 则 $(\phi_0, \phi_0) = 5, (\phi_0, \phi_1) = 7.5, (\phi_1, \phi_1) = 11.875, d_0 = (\phi_0, \ln f) = 9.404, d_1 = (\phi_1, \ln f) = 14.424$

则有如下法方程:

$$\begin{bmatrix} 5 & 7.5 \\ 7.5 & 11.875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.404 \\ 14.424 \end{bmatrix}$$

得到: $\beta = 1.1214, \alpha = 0.5064 \Rightarrow b = e^\beta \approx 3.069, \therefore S^*(x) = 3.069e^{0.5064x}$

其他形式: $S(x) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$ 可转换为: $\frac{1}{S(x)} = a_0 + a_1 x$

2.3 正交多项式最小二乘拟合

如果能选取 $\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n$ 关于点集 $X = \{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ 上带数 $w_i, i = 0, 1, \dots, m$ 正交的函数族, i.e. $(\phi_j, \phi_k) = \sum_{i=0}^m w_i \phi_j(x_i) \phi_k(x_i) = \begin{cases} 0, i \neq k \\ A_j > 0, k = j \end{cases}$, 则法方程变为:

$$\begin{aligned} (\phi_k, \phi_k) a_k &= d_k, k = 0, 1, \dots, n \\ \Rightarrow a_k^* &= (f, \phi_k) / (\phi_k, \phi_k) = \sum_{j=0}^m w_j f_j \phi_k(x_j) / \sum_{j=0}^m w_j \phi_k^2(x_j) \end{aligned}$$

3 插值

定义 3.1. 插值: 就是寻找一个便于计算的简单函数 $\phi(x)$ 使得其满足 $\phi(x_j) = f(x_j), j = 0, 1, \dots, n$ 并以 $\phi(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值, 称 $\phi(x)$ 为插值函数, $f(x)$ 为被插函数。

3.1 Lagrange 插值

在多项式函数空间 $P_n = \text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$ 中寻找某一插值函数 $L_n(x)$ 满足下列插值条件:

$$L_n(x_j) = f(x_j), i = 0, 1, \dots, n \quad (3.1)$$

其中 $L_n(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$, 由3.1式可以确定插值函数: $L_n(x) = a_0^* + a_1^* x + \dots + a_n^* x^n$, 其中 $a_i^* (i = 0, 1, \dots, n)$ 为3.1式的解。

构造给出满足3.1的 $L_n(x)$, 选下列基函数:

$$\begin{aligned} l_i(x) &= \frac{(x-x_0) \cdots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \cdots (x-x_n)}{(x_i-x_0) \cdots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \cdots (x_i-x_n)} \\ &= \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j} \end{aligned} \quad (3.2)$$

其满足: $l_i(x_k) = \begin{cases} 0, i \neq k \\ 1, i = k \end{cases}$ 则令:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) f(x_i) \quad (3.3)$$

于是可证: $L_n(x_j) = f(x_j), j = 0, 1, \dots, n$ 称 $R(x) = f(x) - L_n(x)$ 为插值多项式的余项 ($R(x_j) = 0$)。插值余项:

$$R(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)$$

其中 $\xi \in (a, b)$, $w_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$, $\Rightarrow f(x) = L_n(x) + R(x)$, $[a, b]$ 为插值区间。

3.2 Newton 插值

若选取基函数 $\phi_0(x) = 1, \phi_1(x) = (x - x_0), \dots, \phi_k(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_k)$, 则 Newton 插值多项式可写为: $P(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})$, 则由插值条件: $P(x_j) = f(x_j), j = 0, 1, \dots, n$ 即可确定 $a_j, j = 0, 1, \dots, n$, *i.e.* $a_0 = P(x_0) = f(x_0)$.

$$a_0 = P(x_0) = f(x_0)$$

$$P(x_1) = a_0 + a_1(x_1 - x_0) = f(x_1)$$

$$P(x_2) = a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_n(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = f(x_2)$$

...

$$P(x_n) = a_0 + a_1(x_n - x_0) + \dots + a_n(x_n - x_0)(x_n - x_1) \dots (x_n - x_{n-1})$$

用差商表示:

$$\begin{aligned} a_0 &= f(x_0), a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f[x_0, x_1] \\ a_2 &= \frac{f[x_0, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_1} = f[x_0, x_1, x_2] \\ &\dots \\ a_k &= f[x_0, x_1, \dots, x_k] \end{aligned}$$

由此可得 Newton 插值多项式:

$$\rho(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \quad (3.4)$$

注: Newton 法的优势在于若新增节点, 只需要计算新增的一项。

$$R(x) = f(x) - P(x)$$

$$H_n = \text{span}\{\phi_0, \dots, \phi_n\}$$

3.3 三次样条插值

$$R(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)$$

若 $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$: 随着插值节点增加, $R(x)$ 越来越大。

龙格现象? 高次插值中易出现。随着节点增加无法改进。因此需要低次插值方法。

定义 3.2. 设 $[a, b]$ 上一个剖分: $\Delta: a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 如果函数 $S(x)$ 满足下列条件:

1. $S(x) \in C^n[a, b]$
2. $S(x)$ 在每个子区间 $[x_{i-1}, x_i], i = 1, 2, \dots, n$ 是 3 次多项式

则称 $S(x)$ 是关于节点剖分 Δ 的三次样条函数

若再给定 $f(x) \in [a, b]$ 在节点上的值 $f(x_j)$ 并使得 $S(x_j) = f(x_j), j = 0, 1, \dots, n$ 则称 $S(x)$ 为 $f(x)$ 的三次样条插值函数。

$S(x): [x_0, x_1][x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ 共 n 段, 共需确定 $4n$ 个参数。

由 $S(x) \in C^2(a, b)$ 有:

$$\begin{cases} S(x_j - 0) = S(x_j + 0) \\ S'(x_j - 0) = S'(x_j + 0) \\ S''(x_j - 0) = S''(x_j + 0) \end{cases}$$

由插值条件共有 $4n - 2$ 个条件。再利用边界条件可得 $4n$ 个方程。

边界条件的三种类型:

- I 型边界条件 $S'(x_0) = f'(x_0), S'(x_n) = f'(x_n)$
- II 型边界条件 $S''(x_0) = f''(x_0), S''(x_n) = f''(x_n)$
或 $S''(x_0) = 0, S''(x_n) = 0$, 称为自然边界条件。
- III 型边界条件 (周期样条函数条件)
 $S^{(j)}(x_0) = S^{(j)}(x_n)$

考: 两阶情况下, 满足某种边界条件下的三次样条插值函数 (给定部分参数)。

4 数值积分

定积分 $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$ 若无法积分, 积分无意义? 或者只有离散数据, 不知道表达式, 则需要定积分:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \lim_{\max(\Delta x) \rightarrow 0} \sum_{i=0}^n f(\xi_i) \Delta x_i \quad (4.1)$$

数值积分则为选取不同 ξ_i , 来使得 $\sum_{i=0}^n f(\xi_i) \Delta x_i \approx \int_a^b f(x)dx$ 和真实积分之间误差尽可能小。i.e. $I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_k f(x_k)$ 记为 $I_n(f)$, 其中 A_k 为求积系数, x_k 为节点。(方法围绕如何选择 A_k, x_k)

4.1 插值型求积公式

若已知节点 x_j 及其函数值 $f(x_j), i = 0, 1, \dots, n$ 则可获得 Lagrange 插值多项式 $L_n(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x)f(x_k)$ 。进一步有:

$$\begin{aligned} I(f) &\approx I_n(f) = \int_a^b L_n(x)dx = \sum_{k=0}^n \left[\int_a^b l_k(x)dx \right] f(x_k) \\ &= \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \end{aligned} \quad (4.2)$$

其中 $A_k = \int_a^b l_k(x)dx$

误差:

$$\begin{aligned} R_n(f) &= \int_a^b [f(x) - L_n(x)]dx \\ &= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx \end{aligned}$$

求积公式至少 n 阶精度。∵ 若 $f(x)$ 为 n 次多项式, $f^{(n+1)} = 0$, ∴ 至少 n 阶精度。

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \quad (4.3)$$

$$R_n(f) = I(f) - I_n(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x)dx \quad (4.4)$$

4.2 求积公式的代数精度 (考点!!)

定义 4.1. 重点概念! 如果 $R_n(x^m) = 0, (m = 0, 1, \dots, k)$, 则称求积公式 4.3 至少具有 k 次代数精度, 如果 $\exists R(x^{k+1}) \neq 0$ 则称 4.3 的代数精度恰为 k , 或若当 $f(x)$ 为任意次数 $\leq k$ 的多项式, 求积公式

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

精确成立, 而对于某个 $k+1$ 次多项式, 公式不精确成立, 则称求积公式具有 k 次代数精度

注: 4.3 的代数精度至少为 n , 但最多只能到 $n+1$ (有 $n+1$ 个节点, 精度上限受限于节点已给定) 如果节点和插值函数均可变 (A_k, x_k), 则可提高精度, 即高斯求积。

4.3 Gauss 型求积公式

$$\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \quad (4.5)$$

定义 4.2. 如果一组节点 $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$ 能使求积公式 4.5 具有 $2n-1$ 次代数精度, 则称 4.5 为带权 $\rho(x)$ 的 Gauss 型求积公式, 其中 x_1, x_2, \dots, x_n 称为 Gauss 点 (n 个节点)

例 4.1. 试确定 A_1, A_2 和 x_1, x_2 使得下列求积公式 $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$ 的代数精度尽可能高。

解: 选取 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 则根据 Gauss 型求积公式定义可得

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = 2 = \int_{-1}^1 1dx \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 = 0 = \int_{-1}^1 xdx \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = \frac{2}{3} = \int_{-1}^1 x^2 dx \\ A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 = 0 = \int_{-1}^1 x^3 dx \end{cases}$$

$$\text{解得: } \begin{cases} x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{cases} \begin{cases} A_1 = 1 \\ A_2 = 1 \end{cases}$$

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

$$\int_{-1}^1 x^4 dx = \frac{2}{5} \neq \frac{2}{9} \therefore \text{该公式精度达不到 } 4, \text{ 为 } 3.$$

定理 4.1. 求积公式 4.3 的节点是 Gauss 点的充要条件是函数 $w_n(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i)$ 与任意次数不超过 $n-1$ 的多项式 $p(x)$ 在 $[a, b]$ 上关于权 $\rho(x)$ 正交. i.e.

$$\int_a^b p(x)w_n(x)\rho(x)dx = 0$$

证明. • 必要性: 对任何不超过 $2n-1$ 次的多项式, 4.5 精确成立. $\forall p(x) \in H_{n-1}$, 令 $f(x) = p(x)w_n(x) \in H_{2n-1}$

- 充分性: 要证 x_k 为高斯点. $\forall f(x) \in H_{2n-1}, f(x) = p(x)w_n(x) + q(x)$, 其中 $p(x), q(x) \in H_{n-1}$, 第一项为 0, 第二项积分 $q(x)$ 满足插值求积公式, 精确成立。

□

Gauss 型求积公式的构造过程:

- 构造正交多项式得到高斯点。
- 确定求积系数 A_k , 可选取 $l_k(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \frac{x-x_i}{x_k-x_i}$ ($n-1$ 次多项式)
 $\therefore \int_a^b \rho(x)l_k(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i l_k(x_i) = A_k, (l_k(x_i) = 0, i \neq k)$

Gauss 型求积公式的误差:

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b \rho(x)f(x)dx - \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \\ &= \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b \rho(x)w_n^2(x)dx, \xi \in (a, b) \end{aligned}$$

可以证明 n 点的求积公式最多只能达到 $2n - 1$ 阶代数精度。

下面给出几种特殊的高斯求积公式, 即使用不同方法选取高斯点。

4.3.1 Gauss-Legendre 求积公式

如果选取 $[-1, 1]$ 上 Legendre 正交多项式的零点作为 Gauss 点, 即可得 Gauss-Legendre 求积公式 $\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k)$

$$A_k = \int_{-1}^1 l_k(x)dx, k = 1, 2, \dots, n \quad (4.6)$$

$$R(f) = \frac{1}{[(2n)!]^3} \frac{2^{2n+1}}{2n+1} (n!)^4 f^{(2n)}(\eta), \eta \in (-1, 1) \quad (4.7)$$

若不是 $(-1, 1)$ 区间, 而是任意 (a, b) 区间, 做积分变量的坐标变换后求解 $x = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(b-a)t, t \in (-1, 1)$

4.3.2 Gauss-Chebyshev 求积公式

如果以 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, [-1, 1]$ 上 Chebyshev 多项式的零点作为 Gauss 点, 即可构造 Gauss-Chebyshev 求积公式:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx &\approx \sum_{k=1}^n A_k f(x_k) \\ A_k &= \frac{\pi}{n} \\ x_k &= \cos \frac{2k-1}{2n} \pi, k = 1, 2, \dots, n \\ R(f) &= \frac{\pi}{2^{n-1}(2n)!} f^{(2n)}(\eta), \eta \in (-1, 1) \end{aligned}$$

例 4.2. 重要!! 构造具有下列形式的 Gauss 型求积公式:

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) \quad (4.8)$$

- 方法一: 待定系数法: 令 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 分别代入 4.8 使其精度成立即可确定 A_1, A_2, x_1, x_2

- 方法二：二次正交多项式构造

取: $\rho(x) = \sqrt{x}$, 则构造二次正交多项式如下: $\phi_0(x) = 1, \phi_1(x) = x - \frac{3}{5}$

$$\therefore \alpha_1 = \frac{(x\phi_0, \phi_0)}{(\phi_0, \phi_0)} = \frac{\int_0^1 x^{3/2} dx}{\int_0^1 x^{1/2} dx} = \frac{3}{5}$$

$$\phi_2(x) = (x - \alpha_2)\phi_1(x) - \beta_2\phi_0(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21}$$

$$\alpha_2 = \frac{(x\phi_1, \phi_1)}{(\phi_1, \phi_1)} = \frac{\int_0^1 x^{3/2}(x - \frac{3}{5})^2 dx}{\int_0^1 x^{1/2}(x - \frac{3}{5})^2 dx} = \frac{23}{45}$$

$$\beta_2 = \frac{(\phi_1, \phi_1)}{(\phi_0, \phi_0)} = \frac{\int_0^1 x^{1/2}(x - \frac{3}{5})^2 dx}{\int_0^1 x^{1/2} dx} = \frac{12}{175}$$

令 $\phi_2(x) = 0$, 则 $x_1 = 0.821162, x_2 = 0.289949, A_1 = \int_0^1 \sqrt{x}l_1(x)dx = \int_0^1 \sqrt{x} \frac{x-x_2}{x_1-x_2} \approx 0.38911, A_2 = \int_0^1 \sqrt{x}l_2(x)dx \approx 0.277556$

$$\therefore \int_0^1 \sqrt{x}f(x)dx \approx 0.38911f(x_1) + 0.277556f(x_2)$$

- 方法三：取 $\rho(x) = \sqrt{x}$, 则构造二次正交多项式如下, 选取 $\phi_0 = 1, \phi_1(x) = x + a, \phi_2(x) = x^2 + bx + c$, 则利用正交性确定 $\phi_1, \phi_2, i.e.$

$$\begin{cases} \int_0^1 \sqrt{x}(x+a)dx = 0 \\ \int_0^1 \sqrt{x}(x^2+bx+c)dx = 0 \\ \int_0^1 \sqrt{x}(x+a)(x^2+bx+c)dx = 0 \end{cases}$$