第四章　数值积分与数值微分

Gauss 求积公式

朱升峰

华东师范大学 数学科学学院

2021 年 4 月

机械求积公式

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

- $2n+2$ 个待定参数：x_k，A_k $(k=0,1,\cdots,n)$
- 等距节点时，插值型求积公式代数精度至少为 n 次

思考：适当选取 x_k $(k=0,1,\cdots,n)$，有可能使求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度?!

例: 对求积公式

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

试确定节点与系数，使其具有尽可能高的代数精度。

解: 令求积公式对于 $f(x)=1,x,x^2,x^3$ 精确成立，则得

$$
\begin{cases}
A_0 + A_1 = 2 \\
A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\
A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\
A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0
\end{cases}
$$

解得

$$
x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3};\ A_1 = A_1 = 1.
$$

公式

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

当 $f(x) = x^4$，公式不精确成立，故代数精度为 3。

- 当 $f(x) = (x - x_0)^2(x - x_1)^2$，代入公式左端 > 0，右端因 $f(x_0) = f(x_1) = 0$，故为 0。
- 一般个节点的机械求积公式的代数精度最高为 $2n + 1$ 次。

带权积分的高斯型求积公式

研究带权积分

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

$\rho(x)$：权函数

定义 1

(机械）求积公式为

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\,,$$

有 $2n+1$ 次代数精度，则称其节点 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$ 为高斯点，公式称为高斯型求积公式.

求积节点与系数的确定

取 $f(x)=x^m, m=0,1,\cdots,2n+1$，求积公式精确成立，则得关于 A_k 与 x_k 的

$$\sum_{k=0}^{n} A_k x_k^m = \int_a^b x^m \rho(x)\mathrm{d}x \quad m=0,1,\cdots,2n+1$$

非线性方程组求解困难!

先确定节点 x_k，再利用上式解线性方程组求得 A_k 容易得多!

如何选取节点，使得插值型求积公式代数精度提高到 $2n+1$?

设 $n+1$ 个节点 $a\leqslant x_0<x_1<\cdots<x_n\leqslant b$,

$f(x)$ 的 Lagrange 插值多项式为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, l_k(x),$$

其中

$$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}.$$

求积系数的确定

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\, l_k(x) + \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}(x), \quad \xi = \xi(x) \in (a, b).$$

则

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_n(x)\rho(x)\mathrm{d}x$$

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\rho(x)\mathrm{d}x$$

余项

$$R[f] = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)\rho(x)\mathrm{d}x$$

当 $f(x)$ 取为 $1, x, \cdots, x^n$ 时有 $R[f] = 0$, 此时至少有 n 次代数精度:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\,,$$

如何选取节点使代数精度: $n \to 2n+1$

定理 2

播值型求积公式的节点 $a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$ 是高斯点的充分必要条件是以这些节点为零点的多项式

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

与任何次数不超过 n 的多项式 $p(x)$ 带权 $\rho(x)$ 正交，即

$$\int_a^b p(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)\mathrm{d}x = 0.$$

定理表明在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 $n+1$ 次正交多项式的零点就是高斯点!

有了求积节点 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$, 计算求积系数:

- 利用求积公式对 $m=0,1,\cdots,n$ 成立，解一组关于系数的线性方程组
- 利用 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的插值多项式求出求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$.

例: 确定求积公式

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

的系数 A_0, A_1 及节点 x_0, x_1，它具有最高代数精度。

解: 具有最高代数精度的求积公式是高斯型求积公式，节点为关于权函数 $\rho(x) = \sqrt{x}$ 的正交多项式零点 x_0 及 x_1，设 $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) = x^2 + bx + c$，由正交性知 $\omega(x)$ 与 1 及 x 带权正交

$$\int_0^1 \sqrt{x}\omega(x)\mathrm{d}x = 0, \quad \int_0^1 \sqrt{x}x\omega(x)\mathrm{d}x = 0.$$

即

$$\frac{2}{7} + \frac{2}{5}b + \frac{2}{3}c = 0 \quad \text{及} \quad \frac{2}{9} + \frac{2}{7}b + \frac{2}{5}c = 0$$

解得

$$b = -\frac{10}{9}, c = \frac{5}{21}$$

$$\omega(x) = x^2 - \frac{10}{9}x + \frac{5}{21}.$$

令 $\omega(x) = 0$, 则得

$$x_0 = 0.289919, \quad x_1 = 0.821162.$$

由两节点的高斯型求积公式有 3 次代数精度，故公式对 $f(x) = 1, x$ 精确成立。
当 $f(x) = 1$ 时,

$$A_0 + A_1 = \int_0^1 \sqrt{x}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{3};$$

当 $f(x) = x$ 时,

$$A_0 x_3 - A_1 x_1 - \int_0^1 \sqrt{x} \cdot x\,\mathrm{d}x = \frac{2}{5}$$

由此解出 $A = 0.277556, A_1 = 0.389111.$

Gauss 求积公式的余项

$f(x)$ 在节点的 Hermite 插值 $H_{2n+1}(x)$, 即

$$H_{2n+1}(x_k) = f(x_k), \quad H'_{2n+1}(x_k) = f'(x_k), \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

从而

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

则

$$I = \int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x = \int_a^b H_{2n+1}(x)\rho(x)\mathrm{d}x + R_n[f],$$

其中右端第一项积分对 $2n+1$ 次多项式精确成立, 故

$$\begin{aligned} R_n[f] &= I - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \underbrace{\omega_{n+1}^2(x)\rho(x)}_{>0} \mathrm{d}x. \end{aligned}$$

稳定性与收敛性

由积分中值定理

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

定理 3

Gauss 求积公式的求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$ 全是正的.

证明:

$$l_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{x-x_j}{x_k-x_j},$$

则 $l_k^2(x)$ 是 $2n$ 次多项式, 故 Gauss 求积公式对它能准确成立. 即有

$$0 < \int_a^b l_k^2(x)\rho(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i).$$

注意到 $l_k(x_i) = \delta_{ki}$, 上式右端实际等于 A_k, 从而有

$$A_k = \int_0^b l_k^2(x)\rho(x)\mathrm{d}x > 0 \qquad \square$$

推论: Gauss 求积公式是稳定的。

定理 4

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

$$\lim_{k\to\infty} \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)\rho(x)\mathrm{d}x.$$

证明: 略。

权函数 $\rho(x)$，区间 $[a,b]=[-1,1]$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\,.$$

Gauss 点是 Legendre 多项式 $P_{n+1}(x)$ 的零点，对应Gauss-Legendre 求积公式

- $P_1(x)=x$ 的零点 $x_0=0$ 作节点得

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(0)$$

求积公式对 $f(x)=1$ 准确成立，得 $A_0=2$，从而得中矩形公式

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

Gauss-Legendre 求积公式

- $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$ 的零点 $\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$ 作节点得两点 Gauss-Legendre 公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + A_1 f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

求积公式对 $f(x) = 1, x$ 准确成立，得 $A_0 = A_1 = 1$

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

- $P_3(x)$ 的零点 $x_0 = -\frac{\sqrt{15}}{5}, x_1 = 0, x_2 = \frac{\sqrt{15}}{5}$ 作节点得三点 Gauss-Legendre 公式

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

注：一般的 Gauss-Legendre 公式的节点与系数可查表获得。

Gauss-Legendre 公式的余项

余项

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

其中 $\tilde{P}_{n+1}(x)$ 是最高项系数为 1 的 Legendre 多项式，且

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

- 当 $n=1$ 时, 有

  $$R_1[f] = \frac{1}{135} f^{(4)}(\eta).$$

  它比 Simpson 公式余项 $R_1[f] = -\frac{1}{90} f^{(4)}(\eta)$ 还小，比 Simpson 公式少算一个函数值。

一般区间的变量替换

- 当一般的区间 $[a, b] \neq [-1, 1]$ 时，只要做变换

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

将 $[a, b]$ 化为 $[-1, 1]$, 这时

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

对右端积分用 Gauss-Legendre 求积公式。

- 复合Gauss 求积公式
将积分区间分隔成若干小区间，
然后在每个小区间上使用 Gauss 求积公式;
实际应用中可以使用复合 Gauss 求积公式，精度较高。

例: 用 4 点 $(n=3)$ 的 Gauss-Legendre 求积公式计算

$$I=\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x \, \mathrm{d}x.$$

解: 先将 $[0, \frac{\pi}{2}]$ 化 $[-1,1]$, 有

$$I=\int_{-1}^{1}\left(\frac{\pi}{4}\right)^3 (1+t)^2 \cos\frac{\pi}{4}(1+t)\mathrm{d}t.$$

根据表中 $n=3$ 的节点及系数值可求得

$$I \approx \sum_{k=0}^{3} A_k f(x_k) \approx 0.467402$$

(准确值 $I=0.467401\cdots$) .

Gauss-Chebyshev 公式

若 $a=-1, b=1$, 取权函数

$$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

则所建立的 Gauss 公式

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)\,,$$

称为Gauss-Chebyshev 公式，可用于计算奇异积分。
$[-1,1]$ 上关于权函数 $\rho=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式是 Chebyshev 多项式，Gauss 点为 n+1 次 Chebyshev 多项式的零点:

$$x_k=\cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right), \quad k=0,1,\cdots,n$$

计算系数 $A_k=\frac{\pi}{n+1}$; 将 $n+1$ 个点改为 n 个点，公式即为

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x \approx \frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)\,, \quad \text{其中} x_k=\cos\frac{(2k-1)}{2n}\pi$$

余项

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

例：用 5 点 $(n=5)$ 的 Gauss-Chebyshev 求积公式计算积分

$$I=\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{e}^x}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x$$

解：$f(x)=\mathrm{e}^x, f^{(2n)}(x)=\mathrm{e}^x$, 当 $n=5$ 时由公式可得

$$I=\frac{\pi}{5}\sum_{k=1}^{5}\mathrm{e}^{\cos\frac{2k-1}{10}\pi}=3.977463$$

由余项可估计误差

$$|R[f]|\leqslant\frac{\pi}{2^9\times 10!}\mathrm{e}\leqslant 4.6\times 10^{-9}.$$

无穷区间的 Gauss 求积公式

- Gauss-Laguerre 求积公式: $[0,+\infty)$
- Gauss-Hermite 求积公式: $(-\infty,+\infty)$

$[0,+\infty)$, 权函数 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x}$ 的正交多项式 Laguerre 多项式

$$L_n(x)=\mathrm{e}^x\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^n\mathrm{e}^{-x}\right)$$

对应 Gauss-Laguerre 求积公式

$$\int_0^{+\infty}\mathrm{e}^{-x}f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)\,,$$

$$A_k=\frac{[(n+1)!]^2x_k}{[L_{n+1}(x_k)]^2},\quad k=0,1,\cdots,n$$

余项

$$R[f]=\frac{[(n+1)!]^2}{[2(n+1)!]}f^{(2n+2)}(\xi),\quad \xi\in[0,+\infty)$$

Gauss-Laguerre 求积公式

例：用 Gauss-Laguerre 求积公式计算积分

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} \sin x \,\mathrm{d}x \quad \text{(准确值约为 0.5)}$$

解： 取 $n=1$, 查表得 A_0, A_1, x_0, x_1,

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} \sin x dx \approx A_0 \sin x_0 + A_1 \sin x_1 = 0.43246$$

若取 $n=2$, 可得

$$\int_0^{1\infty} \mathrm{e}^{-x} \sin x \,\mathrm{d}x \approx 0.49603$$

Gauss-Hermite 求积公式

区间：$(-\infty,+\infty)$，权函数 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x^2}$ 的正交多项式

$$H_n(x)=(-1)^n\mathrm{e}^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\mathrm{e}^{-x^2},\quad n=0,1,\cdots$$

Gauss-Hermite 求积公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-x^2}f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)$$

求积系数为

$$A_k=2^{n+1}(n+1)!\frac{\sqrt{\pi}}{[H'_{n+1}(x_k)]^2}$$

具体计算时，求积节点与系数可查表获得。余项

$$R[f]=\frac{(n+1)!\sqrt{\pi}}{2^{n+1}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\xi),\quad \xi\in(-\infty,+\infty).$$

例：用两个节点的 Gauss-Hermite 公式求积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} x^2 \,\mathrm{d}x$$

解：先求节点 x_0, x_1，由 $H_2(x) = 4x^2 - 2$，其零点为 $x_0 = -\frac{\sqrt{2}}{2}, x_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}$，由

$$A_0 = A_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

则

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} x^2 \,\mathrm{d}x \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2}\left[\left(\frac{-\sqrt{2}}{2}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2\right] = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Gauss 型求积公式代数精确度为 3，故对 $f(x) = x^2$ 求积公式精确成立，从而得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2} x^2 \,dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$