一场有关高精度高斯－勒让德算法的角逐

亚历克斯•汤森德 (Alex Townsend) / 文　赵 京 / 译

典型的数值积分算法通常是如下面公式所演示的用有限和来给出定积分的近似值：

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} \omega_j f(x_j), \qquad (1)$$

其中，$x_1, \cdots, x_n$ 和 $\omega_1, \ldots, \omega_n$ 分别代表积分节点和加权系数。

1814 年，高斯[1] 设计了一个巧妙选择节点和加权系数的方法，它对每一个正整数 n 来讲，如果积分函数是不超过 $2n-1$ 阶的多项式的话，妙法给出的不是逼近值，而是精确值。可以证明，在所有需要 n 个节点的求积法中，这是最好的。我们现在把它称为高斯 - 勒让德公式。 第二个名字是缘于雅可比证明过那些节点正是 n 阶勒让德多项式 $P_n(x)$ 的零点，而加权系数是

$$\omega_k = 2(1-x_k^2)^{-1}[P_n'(x_k)]^{-2}.$$

但是，妙法有一个缺陷，那就是当 n 较大时，其节点和加权系数没有闭合表达式。 对这一点，高斯清楚得很。为了证明其可行性，他亲手算出了当 $n=7$ 时的节点和加权系数值，其精度达到小数点后第 16 位。从那时起，特别是计算机出现后，一场非正式的角逐开始了，越来越精确的节点和加权系数值被不断刷新。不过，领先的却并不是著名的戈卢布 - 韦尔施算法（Golub-Welsch algorithm）。独占鳌头的是比利时根特大学的伊尼亚斯•博盖尔特（Ignace Bogaert）最近给出的一个新法。下面的图 1 概括了这场角逐迄今为止的结果。

高斯 - 勒让德高精度算法的百年角逐一览图。图中每一个点代表一篇发表过的结果，点的横坐标代表发表的相关年限，竖坐标代表所适应的最大 n 值。红色的点代表由戈卢布 - 韦尔施算法演变而来的算法，其中被圈出的那个红点则代表了它最原始的算法。相关文献请参阅 http://math.mit.edu/~ajt/Gauss/Quadrature/

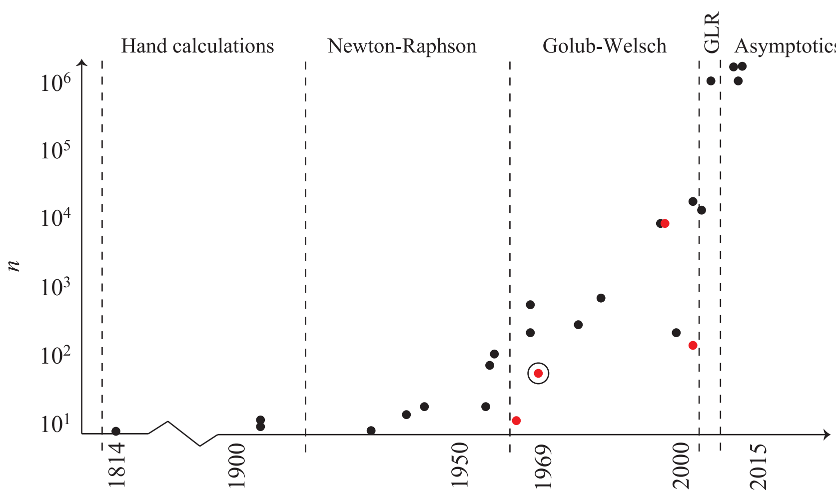

图 1

[1] C. F. Gauss, Methods nova integralium valores per approoximationem inveniendi, Comment. Soc. Reg. Scient. Gotting. Recent., (1814), 39-76.

用手工计算的时代持续了一个多世纪。塔尔奎斯特（Tallquist, 1905）、摩尔（Moors, 1905）、奈斯特尼（Nyström, 1930）和贝利（Bayly, 1938）等人用纸、笔和坚韧不拔的毅力算出了 $n \le 12$ 时的节点值。最终，通过使用大量人力，罗万（Lowan）、戴维斯（Davids）和李文森（Levenson）等人列出了 $1 \le n \le 16$ 的节点和加权系数值。

10 年之后，计算机逐渐替代了繁复的手工计算，罗列着节点和加权系数值的表格不断涌现。其中最著名的当属牛顿 - 拉夫森算法（Newton-Raphson method）。它可以找出多项式 $P_n(x)$ 的零点，其三个循环项则用来计算 P_n 和它的导数 P_n'。一波又一波的进展层出不穷。戴维斯和拉比诺维兹（Rabinowitz）1958 年做出 $n = 96$ 的结果前，加夫利克（Gawlik）的 $n = 64$ 时的结果暂时领先。最终，斯劳德（Stroud）和赛克斯特（Secrest）于 1966 年做出了 $n = 512$ 的结果。那些年可是高斯 - 勒让德求积算法的黄金岁月。

到了 60 年代，特征问题的正交算法开始红火起来，吉恩 • 戈卢布（Gene Golub）的名气越来越大。具有开拓性的戈卢布 - 韦尔施算法很快取代了卢蒂斯豪塞耳（Rutishauser）早先的结果。令人意外的是，戈卢布 - 韦尔施算法[2]无论从精度还是速度来讲绝不是高斯求积算法中的最优方案。然而，通过巧妙的运用特征手段和高斯公式，它却彻底改变了计算积分的策略。1969 年以前，人们通常是从斯劳德 - 赛克斯特表格中提取数值然后带入公式（1）中来计算的。1969 年以后，所有的算法都可以自行计算出高斯节点和加权系数了。戈卢布 - 韦尔施法的诞生让高斯节点和加权系数依赖表格的时代一去不复返了。记载着人类登月壮举的 1969 年是世界科学、技术和文明史上的重要里程碑，这一新算法的诞生给这一年更是锦上添花。

随后几年，只有几位专家，包括莱瑟（Lether, 1978）、Yakimiw（1996 年）、佩特拉斯（Petras, 1999）和 Swartrauber（2003），对牛顿 - 拉夫森公式做出改进。戈卢布 - 韦尔施法只能计算出数百个节点和加权系数，而牛顿 - 拉夫森公式却可以算出上千个。很多不了解 1969 年后进展的数学家们得出结论，那就是高斯 - 勒让德算法对 n 较大时并不适用。因此，专家们的注意力渐渐地转向自适应和分段求积算法领域。

2007 年，格拉泽（Glaser）、刘（Liu）和罗赫林（Rokhlin）设计出一个具有开创意义的算法，它可以在几秒钟之内算出一百万个节点和加权系数值[3]。按说，赞美声和大奖应该接踵而至，但可惜的是，它却没能引起太大的关注。几年之后，博盖尔特

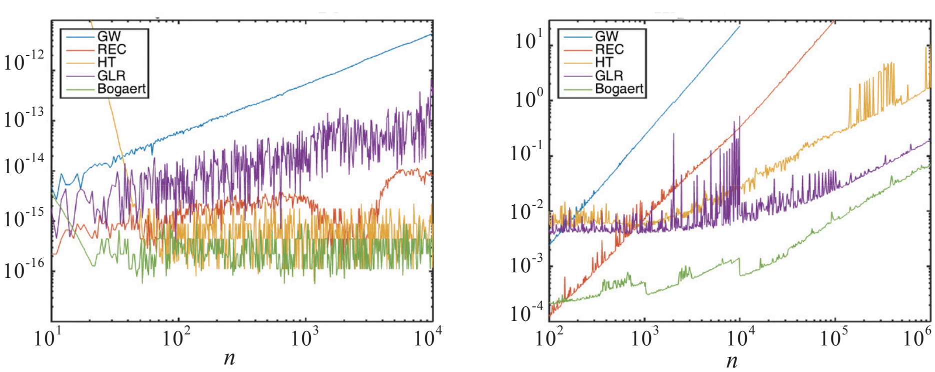

图 2

左图是高斯 - 勒让德节点和加权系数通过戈卢布 - 韦尔施（GW），三项循环牛顿 - 拉夫森（REC），渐近牛顿 - 拉夫森（HT），格拉斯 - 刘 - 罗赫林（GLR）和博盖尔特（Bogaert）5 大著名算法的误差展示；右图是其计算所需时间。因为不同算法出自不同年代并用不同计算机语言完成，所以它们出现的年月没有直接的可比性。

[2] G. H. Golub and J.H. Welsch, Calculations of Gauss quadrature rules, Math. Comp., 23 (1969), 221 – 230.

[3] A. Glaser, X. Liu, and V. Rokhlin, A fast algorithm for the calculation of the roots of special functions, SIAM J. Sci. Comput., 29 (2007), 1420 – 1438.