第五章 数值积分

在现实科学问题中，我们常常涉及到复杂函数的积分计算，对其实施精确计算往往存在着异常的困难性，有些积分理论上可证明其原函数存在，但却无法用初等函数明显表出，因而无法获得其精确的积分值。此时，我们需要借助于数值计算。鉴此，本章将探讨定积分的数值计算。

§5.1 机械求积公式

定积分求值的困难性往往源于被积函数的复杂性。因此，将复杂被积函数用简单函数近似替代是构造数值积分算法的基本思想。众所周知，从几何观点来看定积分$\int_a^b f(x)dx$ 即为由曲线$y = f(x)$，直线$x = a$、$x = b$ 及x 轴所围平面图形面积的代数和。因此，若用直线段$y = f[\theta a + (1 - \theta)b]$ $(\theta \in [0, 1])$ 近似代替曲线段$y = f(x)$ $(a \le x \le b)$，则可得**矩形积分公式**

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b - a)f[\theta a + (1 - \theta)b], \quad \theta \in [0, 1]. \tag{1}$$

特别，当取$\theta = 0, \frac{1}{2}, 1$ 时，我们分别称之为**左矩公式，中矩公式及右矩公式**。若以过点$A(a, f(a))$、$B(b, f(b))$ 的直线段

$$y = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a), \quad x \in [a, b]$$

近似代替曲线段$y = f(x)$，则得梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]. \qquad (2)$$

考虑过点$A(a, f(a))$、$C(\frac{b+a}{2}, f(\frac{b+a}{2}))$、$B(b, f(b))$ 的抛物线段近似代替曲线$y = f(x)$ $(a \le x \le b)$，则得 **Simpson 公式**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]. \qquad (3)$$

例 5.1 试分别利用中矩公式、梯形公式及 Simpson 公式计算积分

$$I = \int_0^{1/2} \frac{1}{(x+1)\sqrt{x^2+1}}dx,$$

并比较其计算精度。

解 令$\frac{1}{x+1}=t$，则其定积分精确值为

$$I=\int_{2/3}^{1}\frac{1}{\sqrt{2t^2-2t+1}}dt=\frac{1}{\sqrt{2}}\ln\frac{3(1+\sqrt{2})}{1+\sqrt{10}}.$$

若利用中矩公式计算该定积分，则有

$$I_M:=\frac{1/2}{(1/4+1)\sqrt{(1/4)^2+1}}=0.38805700005813,$$

其绝对误差为

$$e_M:=|I-I_M|=0.00362601834878;$$

若利用梯形公式计算该定积分，则有

$$I_T:=\frac{1}{4}\left(1+\frac{1}{(1/2+1)\sqrt{(1/2)^2+1}}\right)=0.39907119849999,$$

其绝对误差为

$$e_T:=|I-I_T|=0.00738818009308;$$

若利用 Simpson公式计算该定积分，则有

$$
\begin{aligned}
I_S := & \frac{1}{12}\left(1+\frac{4}{(1/4+1)\sqrt{(1/4)^2+1}}+\frac{1}{(1/2+1)\sqrt{(1/2)^2+1}}\right) \\
= & 0.39172839953875,
\end{aligned}
$$

其绝对误差为

$$
e_S := |I - I_S| = 4.538113183999437e-005.
$$

由上可知 Simpson 公式的计算精度为最佳。 ■

公式 (1)-(3) 实质是采用$[a,b]$ 上若干节点x_n 处的函数值$f(x_n)$ 进行适当加权平均获得的，这类公式的一般形式为

$$
\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{n=0}^{N} A_n f(x_n), \tag{4}
$$

其中x_n 称为**求积节点**，A_n 称为**求积系数**。鉴于其系数A_n 仅与节点选择有关而与被积函数$f(x)$ 无关，因此求积公式 (4) 具有通用性，且称之为**机械求积公式**。

§5.2 代数精度法

由 Taylor 展开定理可知，任一充分可微函数$f(x)$ 均能展开为一个关于x 的多项式与其余项的和。因此，若要求积分$\int_a^b f(x)dx$ 的近似计算具有一定精度，则需公式 (4) 对x^i 自$i=0$ 到足够大的正整数m 能准确成立。为此引入

定义 5.1 若一个求积公式 (4) 对$f(x)=x^i\ (i=0,1,\cdots,m)$ 能精确成立，但对$f(x)=x^{m+1}$ 不精确成立，则称该公式具m 次代数精度。

由定义 5.1 可直接验证矩形公式 (1) 具有 0 次代数精度，梯形公式 (2) 具 1 次代数精度，而 Simpson 公式 (3) 具 3 次代数精度。以代数精度作为标准构造求积公式的方法称为**代数精度法**。若令公式(4) 对$f(x)=x^i\ (i=0,1,\cdots,N)$ 准确成立，那么得线性方程组

$$\sum_{n=0}^{N} A_n x_n^i = \frac{b^{i+1}-a^{i+1}}{i+1}, \quad i=0,1,\cdots,N. \tag{5}$$

当给定的节点x_n 互异时，诸系数A_n 即可由 (5) 唯一确定。

例 5.2 试确定一个具有 3 次代数精度的求积公式

$$\int_0^3 f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(1) + A_2 f(2) + A_3 f(3),$$

并由该公式计算定积分$I := \int_0^3 \frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}dx$，指出其绝对误差。

解 据 (5)，要公式具 3 次代数精度，则必有

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 + A_3 = 3, \\ A_1 + 2A_2 + 3A_3 = \frac{9}{2}, \\ A_1 + 4A_2 + 9A_3 = 9, \\ A_1 + 8A_2 + 27A_3 = \frac{81}{4}. \end{cases}$$

解之得$A_0 = \frac{3}{8}$, $A_1 = \frac{9}{8}$, $A_2 = \frac{9}{8}$, $A_3 = \frac{3}{8}$. 由此即得求积公式

$$\int_0^3 f(x)dx \approx \frac{3}{8}[f(0) + 3f(1) + 3f(2) + f(3)],$$

且当将$f(x) = x^4$ 代入上式时，其不能精确成立，故所得公式具 3 次代数精度。应用该公式得

$$\tilde{I} := \frac{3}{8}\left(\frac{3e}{4} + \frac{6e^2}{9} + \frac{3e^3}{16}\right) = 4.02404510389840.$$

又其积分的精确值为

$$I = \int_0^3 \frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}dx = \frac{\exp(x)}{1+x}\Big|_0^3 = \frac{e^3}{4} - 1,$$

则上述数值积分的绝对误差为

$$|I - \tilde{I}| = 0.00266087310148. \quad \blacksquare$$

§5.3 插值求积法

插值求积法是利用被积函数$f(x)$的插值多项式计算定积分的方法，其根据被积函数在某些节点处的函数值构造一个插值多项式$P_N(x)$，然后用$P_N(x)$ 近似代替$f(x)$，而获得积分逼近公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_N(x)dx.$$

这样获得的求积公式称为**插值型求积公式**。

对于积分$\int_a^b f(x)dx$，在区间$[a,b]$上任取$N+1$个互异点$x_0, x_1, \cdots, x_N$，构造$f(x)$的带余项的 Lagrange 插值公式

$$f(x)=\sum_{n=0}^{N}\frac{\omega_{N+1}(x)}{(x-x_n)\omega'_{N+1}(x_n)}f(x_n)+R_N(f,x), \tag{6}$$

其中

$$\omega_{N+1}(x)=\prod_{i=0}^{N}(x-x_i), \quad R_N(f,x)=\frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}\omega_{N+1}(x), \quad \xi\in(a,b).$$

将 (6) 代入积分$\int_a^b f(x)dx$ 中得

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{n=0}^{N}A_n f(x_n)+R_N(f), \tag{7}$$

其中

$$A_n=\int_a^b\frac{\omega_{N+1}(x)}{(x-x_n)\omega'_{N+1}(x_n)}dx, \quad R_N(f)=\int_a^b R_N(f,x)dx. \tag{8}$$

在 (7) 略去余项$R_N(f)$ 即得**插值型求积公式**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{n=0}^{N} A_n f(x_n). \tag{9}$$

若 $\max\limits_{x\in[a,b]} |f^{(N+1)}(x)| = M_{N+1}$，则其余项$R_N(f)$ 的有如下估计式

$$|R_N(f)| \le \frac{M_{N+1}}{(N+1)!}\int_a^b |\omega_{N+1}(x)|dx. \tag{10}$$

例 5.3 取节点$x_n = n/4,\ n = 0,1,2,3,4$，试利用 4 次插值型求积公式计算定积分

$$I = \int_0^1 \sin(x^2)dx,$$

并估计其误差。

解 由 (8) 可计算出求积公式的系数

$$A_0 = 7/90,\quad A_1 = 16/45,\quad A_2 = 2/15,\quad A_3 = 16/45,\quad A_4 = 7/90.$$

因此，利用 4 次插值型求积公式有

$$\int_0^1 \sin(x^2)dx \approx \sum_{n=0}^{4} A_n \sin(x_n^2) = 0.3102614236535374.$$

又

$$\begin{aligned} M_5 &:= \max_{x\in[0,1]} \left|\frac{d^5(\sin x^2)}{dx^5}\right| \\ &= \max_{x\in[0,1]} \left|32x^5\cos(x^2) + 160x^3\sin(x^2) - 120x\cos(x^2)\right| \\ &= \left|32x^5\cos(x^2) + 160x^3\sin(x^2) - 120x\cos(x^2)\right|_{x=1} \approx 8.7089e+001, \end{aligned}$$

则据 (10)，其误差估计为

$$|R_4(f)| \le \frac{M_5}{5!}\int_0^1 \prod_{n=0}^{4} |x - x_n| dx \approx 1.1222e-003. \quad \blacksquare$$

定理 5.1 $N+1$ 个节点的求积公式 (4) 为插值型的充要条件是该公式至少有N 次代数精度。

证明 设公式 (4) 属于插值型，即为公式 (9)。因为对$f(x)=x^i\ (i=0,1,\cdots,N)$ 均有$f^{(N+1)}(x)=0$，从而此时$R_N(f)=0$，即公式 (9) 对$f(x)=x^i\ (i=0,1,\cdots,N)$ 均精确成立，故公式 (9) 至少具N 次代数精度。另一方面，若公式 (4) 至少具有N 次代数精度，则其对N 次多项式

$$l_n(x)=\frac{\omega_{N+1}(x)}{(x-x_n)\omega'_{N+1}(x_n)},\quad n=0,1,\cdots,N$$

精确成立，即

$$\int_a^b l_n(x)dx=\sum_{j=0}^{N}A_j l_n(x_j).$$

而$l_n(x_j)=\delta_{nj}$，因此$A_n=\int_a^b l_n(x)dx$。故公式 (9) 成立，即 (4)为插值型的。 ■

值得注意的是，定理 5.1 只表明$N+1$ 个节点的插值型公式至少具N 次代数精度，但并不意味着此时公式仅有N 次代数精度。如 Simpson 公式有 3 个节点，但其具 3 次代数精度。

§5.4 Newton-Cotes 公式及其复合求积法

本节，我们给出具等距节点的插值型求积公式— Newton-Cotes 求积公式，并具体讨论其二种特殊形式：梯形公式及 Simpson 公式。在此基础上，我们导出复合求积法。

§5.4.1 Newton-Cotes 公式

记$x = a + th$，当公式 (9) 取等距节点

$$x_n = a + nh, \quad n = 0, 1, 2, \cdots, N; \quad h = \frac{b-a}{N}$$

时，其系数A_n 由 (8) 得

$$A_n = \frac{(-1)^{N-n}}{n!\,(N-n)!} \int_0^N \prod_{i=0, i\neq n}^{N} (t-i)dt, \quad n = 0, 1, \cdots, N.$$

引入 Cotes 系数

$$B_n=\frac{(-1)^{N-n}}{N[n!\,(N-n)!]}\int_0^N\prod_{i=0,i\neq n}^{N}(t-i)dt,$$

则由 (9) 得**Newton-Cotes 求积公式**

$$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{n=0}^{N}B_nf(a+nh). \tag{11}$$

在实际应用公式 (11) 计算积分时，由于系数B_n 仅与n 及节点数N 有关，而与积分限a,b 无关，因此对不同的N 可事先将B_n 算出，且注意诸系数具对称性：

$$B_n=B_{N-n},\quad n=0,1,\cdots,N.$$

理论分析表明，当公式 (11) 的阶数N 较大时，其稳定性会大大地降低，因此 Newton-Cotes 公式中有实用价值的往往是一些低阶公式。

§5.4.2 两种低阶公式及其余项

在公式 (11) 中取$N=1$，则得梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]. \tag{12}$$

若$f(x)\in\mathbb{C}^{(2)}([a,b])$，则其余项由 (8) 及积分中值定理可推得

$$\begin{aligned} R_1(f) &= \int_a^b \frac{f''(\tilde{\xi})}{2!}(x-a)(x-b)dx \\ &= \frac{f''(\xi)}{2!}\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi), \quad \xi,\ \tilde{\xi}\in[a,b]. \end{aligned} \tag{13}$$

在公式 (11) 中取$N=2$，则得 Simpson 公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]. \tag{14}$$

为研究 (14) 的余项，我们需要引入如下定理。

定理 5.2 设函数$f(x) \in \mathbb{C}^{(4)}([a,b])$ 的三次插值多项式$H(x)$ 在互异节点$x_i \in [a,b]$ $(i=0,1,2)$处满足条件

$$H(x_0)=f(x_0),\ \ H(x_1)=f(x_1),\ \ H(x_2)=f(x_2),\ \ H'(x_1)=f'(x_1).$$

则$\forall x \in [a,b]$，存在$\xi \in (a,b)$使得下式成立：

$$f(x)=H(x)+\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2). \tag{15}$$

证明 若$x=x_i$ $(i=0,1,2)$，则等式显然成立；否则，作辅助函数

$$G(t)=f(t)-H(t)-(t-x_0)(t-x_1)^2(t-x_2)k(x),\ \ t\in[a,b],$$

其中$k(x)$为待定函数。由已知条件，易知

$$G(x)=G(x_0)=G(x_1)=G(x_2)=G'(x_1)=0.$$

因此，据Rolle定理存在$\xi \in (a,b)$使得$G^{(4)}(\xi)=0$，即$k(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}$。由此，当$x\neq x_i$时有

$$G(x)=f(x)-H(x)-\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)=0.$$

故(15)成立。 ■

设Simpson 公式中的函数$f(x)\in\mathbb{C}^{(4)}([a,b])$，今构造一个满足

$$H(a)=f(a),\ H(b)=f(b),\ H^{(i)}(\frac{a+b}{2})=f^{(i)}(\frac{a+b}{2})\ (i=0,1) \quad (16)$$

的三次插值多项式$H(x)$。由定理 5.2可知

$$f(x)=H(x)+\frac{f^{(4)}(\tilde{\xi})}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b),\ \ \tilde{\xi}\in(a,b). \quad (17)$$

既然 Simpson 公式具三次代数精度，则据 (17) 及积分中值定理有

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b H(x)dx+\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\tilde{\xi})(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx$$

$$=\frac{b-a}{6}\left[H(a)+4H(\frac{a+b}{2})+H(b)\right]+\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}\int_a^b(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx$$

$$=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi),\ \ \xi,\ \tilde{\xi}\in[a,b].$$

故Simpson 公式 (14) 的余项为

$$R_2(f)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi),\quad \xi\in[a,b]. \quad (18)$$

§5.4.3 复合求积公式

上述低阶公式要真正做到实用，其精度仍有待提高。为此，本段将把积分区间$[a,b]$ 等分成若干子区间$[x_n,x_{n+1}]$，其中

$$x_n = a + nh, \quad n = 0, 1, \cdots, N; \; h = \frac{b-a}{N},$$

在每个子区间上使用低阶公式，然后再将计算结果累加起来。这种公式称为**复合求积公式**.

首先，我们构造复合梯形公式。在每个子区间$[x_n,x_{n+1}]$ 上使用带余项的梯形公式

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_n) + f(x_{n+1})] - \frac{h^3}{12} f''(\eta_n), \quad \eta_n \in [x_n, x_{n+1}],$$

求和得

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{n=1}^{N-1} f(x_n) + f(b)\right] - \frac{h^3}{12}\sum_{n=0}^{N-1} f''(\eta_n).$$

故得**复合梯形公式**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{n=1}^{N-1} f(x_n)+f(b)\right], \tag{19}$$

其余项

$$\tilde{R}_1(f){=}{-}\frac{h^2}{12}\sum_{n=0}^{N-1}[f''(\eta_n)h] \approx -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx{=}{-}\frac{h^2}{12}[f'(b){-}f'(a)]. \tag{20}$$

记$x_{n+\frac{1}{2}} = \frac{x_n+x_{n+1}}{2}$，则在$[x_n, x_{n+1}]$ 上有带余项的 Simpson 公式

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)dx{=}\frac{h}{6}[f(x_n){+}4f(x_{n+\frac{1}{2}}){+}f(x_{n+1})]{-}\frac{h^5}{2880}f^{(4)}(\theta_n),\ \theta_n \in [x_n, x_{n+1}].$$

求和得

$$\int_a^b f(x)dx{=}\frac{h}{6}\left[f(a){+}4\sum_{n=0}^{N-1} f(x_{n+\frac{1}{2}}){+}2\sum_{n=1}^{N-1} f(x_n){+}f(b)\right]-\frac{h^5}{2880}\sum_{n=0}^{N-1} f^{(4)}(\theta_n).$$

故有**复合 Simpson 公式**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{n=0}^{N-1} f(x_{n+\frac{1}{2}})+2\sum_{n=1}^{N-1} f(x_n)+f(b)\right], \quad (21)$$

其余项

$$\tilde{R}_2(f) = -\frac{h^5}{2880}\sum_{n=0}^{N-1} f^{(4)}(\theta_n) \approx -\frac{h^4}{2880}\int_a^b f^{(4)}(x)dx = -\frac{h^4}{2880}[f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)]. \quad (22)$$

出于计算机编程方面的考虑，我们记

$$\tilde{x}_{2n} = x_n, \quad \tilde{x}_{2n-1} = x_{n-\frac{1}{2}}, \qquad n = 1, 2, \cdots, N,$$

而将式 (21) 写成

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{\tilde{h}}{3}\left\{f(a) - f(b) + 2\sum_{n=1}^{N}[2f(\tilde{x}_{2n-1}) + f(\tilde{x}_{2n})]\right\}, \quad (23)$$

其中

$$\tilde{h} = \frac{b-a}{2N}, \quad \tilde{x}_n = a + n\tilde{h}, \qquad n = 1, 2, \cdots, 2N.$$

例 5.4 取步长$h=\frac{1}{8}$，分别用公式 (19) 及 (23) 计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx.$$

解 记$f(x)=\frac{\sin x}{x}$，并取$f(0)=\lim\limits_{x\to 0}\frac{\sin x}{x}=1$，则由公式 (19) 得

$$I\approx\frac{1}{16}\left[f(0)+2\sum_{n=1}^{7}f(\frac{n}{8})+f(1)\right]=0.9456908635827014.$$

由公式 (23) 得

$$I\approx\frac{1}{24}\left\{f(0)-f(1)+2\sum_{n=1}^{4}\left[2f(\frac{2n-1}{8})+f(\frac{n}{4})\right]\right\}=0.9460833108884721.$$

将上述两个近似值与I 的准确值$0.9460831\cdots$ 相比较可知: 复合梯形公式仅有 2 位有效数字，而 Simpson 公式有 6 位有效数字。故在计算量基本相同的情况下, 后者精度高于前者。 ■

§5.5 变步长求积法

梯形公式与 Simpson 公式的复合使其精度获得改善，但两者均属于定步长公式，若要求达到某个计算精度，其步长的选择则成为一件困难的事情。为此，本节介绍一种在计算机上自动选择步长的变步长方法，同时也将涉及其加速收敛技巧。

§5.5.1 变步长梯形求积法

变步长梯形求积法 即是在求积区间上通过步长逐次减半使用复合梯形公式计算定积分的方法。当将求积区间$[a,b]$ 等分k 次时，其复合梯形公式的求积值为

$$T_k = \frac{b-a}{2^{k+1}}\left[f(a) + 2\sum_{n=1}^{2^k-1} f\left(a + \frac{n(b-a)}{2^k}\right) + f(b)\right], \qquad (24)$$

其满足递推关系

$$T_k = \frac{1}{2}T_{k-1} + \frac{b-a}{2^k}\sum_{n=1}^{2^{k-1}} f\left[a + \frac{2n-1}{2^k}(b-a)\right], \quad k=1,2,\cdots, \qquad (25)$$

该式称为**变步长梯形求积公式**。

由 (20) 有

$$\begin{cases} I - T_k \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)], \\ I - T_{k+1} \approx -\frac{h^2}{48}[f'(b) - f'(a)], \end{cases} \tag{26}$$

这里

$$I = \int_a^b f(x)dx, \quad h = \frac{b-a}{2^k}.$$

据 (26) 可得其事后误差估计

$$I - T_{k+1} \approx \frac{1}{3}(T_{k+1} - T_k). \tag{27}$$

鉴于上式是一个近似估计，因此我们可保守地以$|T_{k+1} - T_k|$ 作为当前步近似值T_{k+1} 的误差。若预定精度为$\varepsilon : |I - T_{k+1}| < \varepsilon$，则在实际运行变步长梯形求积公式时，不等式$|T_{k+1} - T_k| < \epsilon$ 可作为其计算终止准则，并以满足该终止准则的逼近值T_{k+1} 作为欲求的积分近似值。变步长梯形求积法的计算程序如下：

访问主页
标题页
第 22 页 共 36 页
返回
全屏显示
关闭
退出

算法 5.1 变步长梯形求积法

```
function z=vstrapezoid(a,b,tol)
t0=(b-a)*(f(a)+f(b))/2;
t1=t0/2+(b-a)*f(a+(b-a)/2)/2;  k=1;
while abs(t1-t0)>=tol & k<=1000
    k=k+1;
    for n=1:2^(k-1)
        g(n)=f(a+(b-a)*(2*n-1)/2^k);
    end
    s=sum(g);
    t0=t1;
    t1=t0/2+s*(b-a)/2^k;
end
t1
k
```

例 5.5 应用变步长梯形求积法计算定积分

$$I=\int_0^3 \frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}dx,$$

并要求其计算精度满足：$|T_k-T_{k-1}|<10^{-8}$。

解 取

$$a=0,\ \ b=3,\ \ tol=10^{-8},\ \ f(x)=\frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}.$$

运行算法 5.1，经 15 次迭代后获得满足精度要求：$|T_k-T_{k-1}|<10^{-8}$ 的积分逼近值$T_{15}=4.02138423229055$。该逼近值与精确值

$$I=\int_0^3\frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}dx=\frac{e^3}{4}-1$$

比较，误差为$|T_{15}-I|=1.493632773019726e-009.$ ■

§5.5.2 Romberg 算法

变步长求积方法不仅提高了低阶公式的精度，而且能在计算机上自动实现。但这一切均是以提高计算量为代价的。为此，本节介绍一种加速收敛技巧，其基本思想是采用 Richardson 外推。

记$T_0^{(k)}$为二分k次积分区间$[a,b]$后利用复合梯形公式所得积分逼近值，称之为**梯形值**，$T_m^{(k)}$为将梯形值序列$\{T_0^{(k)}\}$经m次外推后所得积分逼近值，即有

$$\begin{cases} T_0^{(k)} = \frac{1}{2}T_0^{(k-1)} + \frac{b-a}{2^k}\sum\limits_{n=1}^{2^{k-1}} f\left[a + \frac{2n-1}{2^k}(b-a)\right], \quad k = 1,\ 2,\ \cdots \\ T_m^{(l)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(l+1)} - T_{m-1}^{(l)}}{4^m - 1}, \quad l = 0,\ 1,\ \cdots; \quad m = 1,\ 2,\ \cdots. \end{cases} \tag{28}$$

其计算步骤可按如下箭头所示方向依次进行：

$$\begin{array}{ccccccccc}
T_0^{(0)} & & & & & & & & \\
\downarrow & \searrow & & & & & & & \\
T_0^{(1)} & \rightarrow & T_1^{(0)} & & & & & & \\
\downarrow & \searrow & & \searrow & & & & & \\
T_0^{(2)} & \rightarrow & T_1^{(1)} & \rightarrow & T_2^{(0)} & & & & \\
\downarrow & \searrow & & \searrow & & \searrow & & & \\
T_0^{(3)} & \rightarrow & T_1^{(2)} & \rightarrow & T_2^{(1)} & \rightarrow & T_3^{(0)} & & \\
\vdots & & & \ddots & & \ddots & & \ddots &
\end{array}$$

若要求逼近精确积分值I 的计算精度满足$|T_m^{(0)} - I| < \varepsilon$，则可利用终止准则$|T_m^{(0)} - T_{m-1}^{(0)}| < \varepsilon$ 结束计算，并取积分逼近值为$T_m^{(0)}$. 该方法称为 **Romberg 算法**，其计算程序如下：

算法 5.2 Romberg 算法

```
function z=romberg(a,b,tol)
h=b-a;    t(1,1)=h*(f(a)+f(b))/2;
 m=1;  l=0;  err=1;
while err>=tol
      l=l+1;  h=h/2;
   for n=1:m
    g(n)=f(a+h*(2*n-1));
   end
   s=sum(g);
   t(l+1,1)=t(l,1)/2+s*h;
  m=2*m;
   for k=1:l
   t(l+1,k+1)=(4^k*t(l+1,k)-t(l,k))/(4^k-1);
   end
   err=abs(t(l+1,l+1)-t(l,l));
end
t(l+1,l+1)
```

例 5.6 用Romberg 算法计算积分

$$I = \int_0^3 \frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}dx,$$

并要求其计算精度满足：$|T_m^{(0)} - T_{m-1}^{(0)}| < 10^{-8}$。

解 取

$$a = 0,\ \ b = 3,\ \ tol = 10^{-8},\ \ f(x) = \frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}.$$

据 Romberg 算法 3.2，可计算得满足精度：$|T_m^{(0)} - T_{m-1}^{(0)}| < 10^{-8}$ 的积分逼近值

$$\tilde{I} = 4.02138423079650.$$

该逼近值与精确积分值

$$I = \int_0^3 \frac{x\exp(x)}{(x+1)^2}dx = \frac{e^3}{4} - 1$$

比较，误差为$|\tilde{I} - I| = 4.165556788393587e - 013.$ ■

§5.6 Gauss 求积公式

插值型求积公式的精度通常与节点个数有关，要提高其精度必然以增加节点个数为代价。但是，节点的无限增加将导致其稳定性能减弱，从而使得积分和$\sum_{n=0}^{N} A_n f(x_n)$ 收敛缓慢，甚至不收敛于积分值$\int_a^b f(x)dx$。为在一定程度上克服这些缺陷，本节引入Gauss 公式。

§5.6.1 公式的构造

定义 5.2 具有$2N+1$ 次代数精度的插值型求积公式 (9) 称为Gauss 型求积公式，其节点$x_0, x_1, \cdots, x_N$ 称为Gauss 点。

从定义 5.2 可知，Gauss 型求积公式比通常同级插值型公式的精度高。不失一般性，我们假设公式 (9) 的积分限为$a=-1$, $b=1$，而对于更一般情形则可作变换

$$x = \frac{2}{b-a}\left(t - \frac{a+b}{2}\right), \tag{29}$$

其使得积分

$$\int_a^b f(t)dt = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right)dx. \tag{30}$$

定理 5.3 $x_0, x_1, \cdots, x_N$ 为 Gauss 节点的充要条件是$N+1$ 次多项式$\omega_{N+1}(x) = \prod\limits_{n=0}^{N}(x - x_n)$ 与一切次数小于或等于N 的多项式$Q(x)$ 均正交，即

$$\int_{-1}^{1} \omega_{N+1}(x) Q(x) dx = 0. \tag{31}$$

证明 设x_n $(n = 0, 1, 2, \cdots, N)$ 是 Gauss 点，则公式 (9) 对任意次数不超过$2N+1$ 的多项式均精确成立。而多项式$Q(x)\omega_{N+1}(x)$ 的次数至多为$2N+1$，则

$$\int_{-1}^{1} Q(x)\omega_{N+1}(x) dx = \sum_{n=0}^{N} A_n Q(x_n)\omega_{N+1}(x_n) = 0.$$

另一方面，设$f(x)$ 是任意次数至多为$2N+1$ 的多项式，则由代数学理论，存在次数至多为N 的多项式$Q(x)$ ，$r(x)$ 使得

$$f(x) = Q(x)\omega_{N+1}(x) + r(x). \tag{32}$$

积分得

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} Q(x)\omega_{N+1}(x)dx + \int_{-1}^{1} r(x)dx = \sum_{n=0}^{N} A_n r(x_n).$$

进一步由 (32) 得 $f(x_n) = r(x_n)$ $(n = 0, 1, 2, \cdots, N)$，因此

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{n=0}^{N} A_n f(x_n). \tag{33}$$

此外由

$$\sum_{n=0}^{N} A_n \omega_{N+1}^2(x_n) = 0, \quad \int_{-1}^{1} \omega_{N+1}^2(x)dx > 0$$

知公式 (33) 对 $2N+2$ 次多项式不精确成立，故 (33) 为 Gauss 型求积公式，即 $x_0, x_1, \cdots, x_N$ 为 Gauss 点。 ■

由定理 3.2 可知，若能找到满足 (31) 的 $N+1$ 次多项式 $\omega_{N+1}(x)$，则公式的 Gauss 点就确定了，从而确定了一个 Gauss 型求积公式，为解决这一问题，我们引入 Legendre 多项式及其相关结论。

定义 5.3 一个仅以区间$[-1,1]$上的 Gauss 点$x_n\ (n=0,1,2,\cdots,N)$为零点的$N+1$次多项式称为Legendre多项式。

定理 5.4 首项系数为 1 的 Legendre 多项式可唯一地表示为

$$\omega_{N+1}(x)=\frac{(N+1)!}{(2N+2)!}\frac{d^{N+1}[(x^2-1)^{N+1}]}{dx^{N+1}},\quad N=0,1,\cdots.$$

证明 考虑$2N+2$次多项式

$$u(x)=\underbrace{\int_{-1}^{x}\int_{-1}^{x}\cdots\int_{-1}^{x}}_{N+1}\omega_{N+1}(x)dxdx\cdots dx,$$

其满足

$$u^{(N+1)}(x)=\omega_{N+1}(x),\ \ u^{(i)}(-1)=0,\quad i=0,1,2,\cdots,N. \qquad (34)$$

设$v(x)$为任意N次多项式，则由 (34) 得

$$\int_{-1}^{1} v(x)\omega_{N+1}(x)dx = \int_{-1}^{1} v(x)u^{(N+1)}(x)dx$$

$$=[v(x)u^{(N)}(x)]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} u^{(N)}(x)v'(x)dx$$

$$=v(1)u^{(N)}(1) - \left\{[v'(x)u^{(N-1)}(x)]_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} u^{(N-1)}(x)v''(x)dx\right\}$$

$$=\cdots\cdots \quad (\text{继续逐次分部积分})$$

$$=\sum_{i=0}^{N}(-1)^i v^{(i)}(1)u^{(N-i)}(1) + \int_{-1}^{1} u(x)v^{(N+1)}(x)dx$$

$$=\sum_{i=0}^{N}(-1)^i v^{(i)}(1)u^{(N-i)}(1).$$

而据定理 5.3 知

$$\int_{-1}^{1} v(x)\omega_{N+1}(x)dx = 0,$$

则 $\sum_{i=0}^{N}(-1)^i v^{(i)}(1)u^{(N-i)}(1) = 0.$

由此及$v(x)$ 的任意性有

$$u^{(N-i)}(1)=0,\quad i=0,1,2,\cdots,N. \tag{35}$$

(34) 和 (35) 表明$x=\pm1$ 均为$u(x)$ 的$N+1$ 重零点，故

$$u(x)=c(x^2-1)^{N+1},\quad c\text{为待定常数}.$$

而$\omega_{N+1}(x)$ 的首项系数为 1，则由 (34) 的第一式有

$$c=\frac{(N+1)!}{(2N+2)!},\quad \omega_{N+1}(x)=\frac{(N+1)!}{(2N+2)!}\frac{d^{N+1}[(x^2-1)^{N+1}]}{dx^{N+1}}. \qquad \blacksquare$$

例 5.7 试构造 Gauss 型求积公式

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx A_0f(x_0)+A_1f(x_1)+A_2f(x_2),$$

并由此计算$\int_0^1\frac{\sqrt{t}}{(1+t)^2}dt$，要求精确到$10^{-4}$.

解 通过求三次 Legendre 多项式$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$ 的零点获 Gauss 点

$$x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

其公式的系数由 (8) 第一式得

$$A_0 = \frac{5}{9}, \quad A_1 = \frac{8}{9}, \quad A_2 = \frac{5}{9}.$$

故所求公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right). \qquad (36)$$

据 (29) 作变换$x = 2(t - \frac{1}{2})$，且由公式 (36) 得

$$\int_0^1 \frac{\sqrt{t}}{(1+t)^2}dt = \sqrt{2}\int_{-1}^{1} \frac{\sqrt{x+1}}{(x+3)^2}dx$$

$$\approx \sqrt{2}\left\{\frac{5}{9}\frac{\sqrt{-\sqrt{\frac{3}{5}}+1}}{(-\sqrt{\frac{3}{5}}+3)^2} + \frac{8}{9}\frac{1}{3^2} + \frac{5}{9}\frac{\sqrt{\sqrt{\frac{3}{5}}+1}}{(\sqrt{\frac{3}{5}}+3)^2}\right\} = 2.8845e-001. \quad \blacksquare$$

§5.6.2 Gauss 求积公式的特征

定理 5.5 Gauss 求积公式的全体系数$A_n > 0$，且

$$A_n = \int_{-1}^{1} \left[\frac{\omega_{N+1}(x)}{(x-x_n)\omega'_{N+1}(x)} \right]^2 dx, \quad n = 0, 1, \cdots, N.$$

证明 由于 Gauss 求积公式具$2N+1$ 次代数精度，且$2N$ 次多项式

$$l_n(x) = \left[\frac{\omega_{N+1}(x)}{(x-x_n)\omega'_{N+1}(x_n)} \right]^2, \quad n = 0, 1, \cdots, N$$

满足

$$l_n(x_j) = \begin{cases} 1, & j = n \\ 0, & j \neq n \end{cases}$$

则

$$\int_{-1}^{1} \left[\frac{\omega_{N+1}(x)}{(x-x_n)\omega'_{N+1}(x)} \right]^2 dx = \sum_{j=0}^{n} A_j l_n(x_j) = A_n, \quad n = 0, 1, \cdots, N.$$

由此即知诸系数$A_n > 0$. ■

对于一般插值型求积公式(9)，若计算每个函数$f(x_n)$ 时产生误差ε_n，则整个积分计算中产生的误差为$\varepsilon = \sum\limits_{n=0}^{N} A_n\varepsilon_n$，由此有误差估计

$$|\varepsilon| \leq \left(\sum_{n=0}^{N} |A_n|\right) \max_{0\leq n\leq N} |\varepsilon_n|. \tag{37}$$

对某些插值型求积公式，当N 增大时$\sum\limits_{n=0}^{N} |A_n|$ 将无界，此时其求积公式已失去实用价值。而对于Gauss 求积公式，一方面由于取$f(x) = 1$ 时有$\sum_{n=0}^{N} A_n = \int_{-1}^{1} 1dx = 2$。另一方面，据定理5.5诸$A_n > 0$，则由(37)有

$$|\varepsilon| \leq 2 \max_{0\leq n\leq N} |\varepsilon_n|.$$

因此Gauss公式的误差是可控的，即具较好的稳定性能。此外，若$f(x) \in \mathbb{C}([-1, 1])$，则Gauss 求积公式必收敛，且有

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{n=0}^{N} A_n f(x_n) = \int_{-1}^{1} f(x)dx.$$