4　数值积分

在微积分中,计算连续函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的积分通常采用求原函数的方法. 也就是说,利用积分的基本公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = F(b) - F(a) \tag{4.1}$$

计算定积分的值. 这里的 $F(x)$ 为被积函数 $f(x)$ 的原函数. 但有时 $f(x)$ 的原函数无法用初等函数来表示. 例如,积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x$ 和 $\int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2}\mathrm{d}x$ 中的被积函数 $\frac{\sin x}{x}$ 和 e^{-x^2} 的原函数就不能用初等函数表示出来.

在实际中,有些函数是用函数表来表示的,对这种被积函数的积分也不能通过求原函数的方法求得.

另外,计算机只能进行四则运算和逻辑运算,不能进行求原函数的运算,所以在计算机上也无法实现这种方法.

这说明用求原函数的方法求定积分的值有很大的局限性,有必要学习求定积分的近似方法. 下面介绍一些求定积分的近似方法.

4.1　梯形求积公式、Simpson 求积公式和 Newton - Cotes 求积公式

根据代数插值法,对于任一被积函数 $f(x)$,都可以构造一个插值多项式 $p(x)$ 近似代替它,即有

$$f(x) \approx p(x) \tag{4.2}$$

对(4.2)式两边求积分得

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

而 $p(x)$ 是一个代数多项式,它的定积分容易计算.

可以根据这种想法构造出几个近似求积公式.

4.1.1　梯形求积公式

由代数插值法知道,可以以 a 和 b 作为插值节点构造一个插值多项式

$$p_1(x) = \frac{x-b}{a-b}f(a) + \frac{x-a}{b-a}f(b)$$

近似代替 $f(x)$，即有

$$f(x) \approx p_1(x) \tag{4.3}$$

对(4.3)式两边求积分得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &\approx \int_a^b p_1(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \int_a^b \left[\frac{x-b}{a-b}f(a) + \frac{x-a}{b-a}f(b)\right]\mathrm{d}x \\ &= \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \end{aligned} \tag{4.4}$$

(4.4)式是一个计算定积分的近似公式，又称为梯形求积公式. 它的几何意义如图 4-1 所示.

从图 4-1 可以看到，梯形求积公式的几何意义是用梯形区域的面积来代替曲边梯形区域的面积.

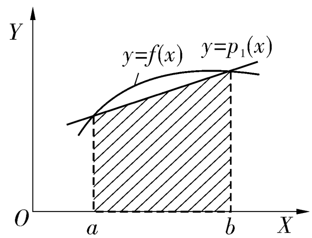

图 4-1 梯形求积公式的几何意义

4.1.2 Simpson 求积公式

把积分区间 $[a,b]$ 二等分，得到三个分点 a，$\frac{a+b}{2}$ 和 b. 根据代数插值法，可以以这三个分点作为插值节点，构造一个插值多项式

$$p_2(x) = \frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)}f(a) + \frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b-\frac{a+b}{2}\right)}f(b)$$

近似代替 $f(x)$，即有

$$f(x) \approx p_2(x) \tag{4.5}$$

对(4.5)式两边求积分得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \int_a^b p_2(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \int_a^b \left[\frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)}f(a) + \frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right.$$

$$+\frac{(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b-\frac{a+b}{2}\right)}f(b)\Bigg]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \tag{4.6}$$

(4.6)式也是一个计算定积分的近似公式,又称为 Simpson 或抛物线求积公式. 它的几何意义如图 4-2 所示.

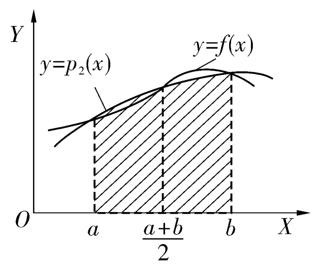

图 4-2　Simpson 求积公式的几何意义

4.1.3　Newton-Cotes 求积公式

把积分区间 $[a,b]$ n 等分,得到 $n+1$ 个分点,其分点记为 $x_i=a+ih(i=0,1,\cdots,n)$,其中 $h=\frac{b-a}{n}$. 由代数插值法知道,可以以这 $n+1$ 个分点作为插值节点,构造一个插值多项式

$$p_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}f(x_i)$$

近似代替 $f(x)$,其中 $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$. 即有

$$f(x)\approx p_n(x) \tag{4.7}$$

对(4.7)式两边求积分得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &\approx \int_a^b p_n(x)\,\mathrm{d}x = \int_a \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}f(x_i)\,\mathrm{d}x\\ &=\sum_{i=0}^{n}\left[\int_a^b\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}\mathrm{d}xf(x_i)\right]\\ &=\sum_{i=0}^{n}A_if(x_i)\end{aligned} \tag{4.8}$$

其中 $A_i=\int_a^b\frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}\mathrm{d}x$.

现在的问题是如何求 A_i. 为了求 A_i,作变换 $x=a+th$,从而得

$$\begin{aligned}\omega(x)&=\omega(a+th)=(a+th-x_0)(a+th-x_1)\cdots(a+th-x_n)\\&=h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n)\end{aligned}$$

$$x-x_i=a+th-(a+ih)=(t-i)h$$

$$\begin{aligned}\omega'(x_i)&=(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)\\&=ih(i-1)h\cdots h(-h)(-2h)\cdots[-(n-i)]h\\&=(-1)^{n-i}h^ni!\,(n-i)!\end{aligned}$$

于是 $$A_i = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}\mathrm{d}x$$

$$\xlongequal{x=a+th} \frac{(-1)^{n-i}(b-a)}{n\cdot i!\,(n-i)}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-i}\mathrm{d}t$$

若记 $$c_i^{(n)} = \frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot i!\,(n-i)}\int_0^n \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-i}\mathrm{d}t$$

则有 $A_i=(b-a)c_i^{(n)}$,从而

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b p_n(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^n (b-a)c_i^{(n)}f(x_i) \tag{4.9}$$

(4.9)式称为 Newton－Cotes(牛顿－柯特斯)公式,$c_i^{(n)}$ 称为 Newton－Cotes 系数.

可以看出,$c_i^{(n)}$ 仅依赖于 n 和 i,也就是说仅依赖于 n 和 x_i,而不依赖于被积函数 $f(x)$ 和积分区间 $[a,b]$. 而 n 和 i 都是整数,从而 $c_i^{(n)}$ 是一个常数,这个常数可以预先计算出来构成 Newton－Cotes 系数表. 在计算时,可以查 Newton－Cotes 系数表得到 Newton－Cotes 系数 $c_i^{(n)}$,而不用求积分.

n 从 1 到 6 取值的 Newton－Cotes 系数见表4－1.

表 4－1 n 从 1 到 6 的 Newton－Cotes 系数表

n	$c_0^{(n)}$	$c_1^{(n)}$	$c_2^{(n)}$	$c_3^{(n)}$	$c_4^{(n)}$	$c_5^{(n)}$	$c_6^{(n)}$
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$				
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$			
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$		
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$	
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$

例 4－1 用梯形求积公式、Simpson 求积公式和 Newton－Cotes 求积公式(取 $n=4$)计算定积分 $\int_{0.5}^1 \sqrt{x}\mathrm{d}x$.

解 ① 用梯形求积公式:

$$\int_{0.5}^1 \sqrt{x}\mathrm{d}x \approx \frac{0.5}{2}(\sqrt{0.5}+1) \approx 0.426\ 8$$

② 用 Simpson 求积公式:

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \approx \frac{0.5}{6}(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+1) \approx 0.430\ 9$$

③ 用 Newton - Cotes 求积公式:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} c_i^{(n)} f(x_i)$$

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\,dx \approx 0.5\sum_{i=0}^{4} c_i^{(4)}\sqrt{x_i}$$

$$= 0.5\left(\frac{7}{90}\sqrt{0.5}+\frac{16}{45}\sqrt{0.625}+\frac{2}{15}\sqrt{0.75}+\frac{16}{45}\sqrt{0.875}+\frac{7}{90}\sqrt{1}\right) \approx 0.431\ 0$$

4.2　求积公式的代数精确度

定义 4.1　对一般求积近似公式,如果当 $f(x)$ 为任意一个次数不高于 n 次的代数多项式时,积分近似公式

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{m} A_k f(x_k) \tag{4.10}$$

精确成立,而当 $f(x)$ 为 $n+1$ 次代数多项式时不精确成立,则称该积分近似公式具有 n 次代数精确度.

从代数精确度的定义可知,求积近似公式的精确度越高,就会有越多的 $f(x)$ 使求积近似公式精确成立.

由于任何一个求积近似公式都可以写成(4.10)式的形式,从而可以使用代数精确度的定义来证明求积公式具有多少次代数精确度.

定理 4.1　梯形求积公式具有一次代数精确度.

证明　① 证明当 $f(x)$ 为任意一个不超过一次代数多项式时,梯形求积公式精确成立.

在推导梯形求积公式时,以 a 和 b 作为插值节点构造出 $p_1(x)$,用 $p_1(x)$ 近似代替 $f(x)$,即有

$$f(x) \approx p_1(x)$$

根据插值的误差估计式有

$$f(x) - p_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b) \tag{4.11}$$

对(4.11)式从 a 到 b 求积分得

$$\int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b p_1(x)\,dx = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,dx$$

即

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\mathrm{d}x \tag{4.12}$$

显然,当 $f(x)$ 为不超过一次代数多项式时,$f''(\xi)=0$. 所以

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

也就是说,当 $f(x)$ 为不超过一次代数多项式时,梯形求积公式精确成立.

②证明当 $f(x)$ 为二次代数多项式时,梯形求积公式不精确成立.

因为当 $f(x)=x^2$ 时,有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b x^2\mathrm{d}x = \frac{b^3-a^3}{3}$$

$$\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] = \frac{b-a}{2}(a^2+b^2)$$

所以当 $f(x)=x^2$ 时,

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \neq \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

由此推出,当 $f(x)$ 为二次代数多项式时

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \neq \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

因此,梯形求积公式具有一次代数精确度.

从定理 4.1 可知,当被积函数为不超过一次代数多项式时,用梯形求积公式求积分是没有误差的.

定理 4.2 Newton – Cotes 求积公式至少具有 n 次代数精确度. 当 n 为偶数时,代数精确度至少为 $n+1$ 次.

证明 ① 证明 Newton – Cotes 求积公式至少具有 n 次代数精确度.

在推导 Newton – Cotes 求积公式时,以 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为插值节点构造插值多项式 $p_n(x)$,用 $p_n(x)$ 代替 $f(x)$,即 $f(x)\approx p_n(x)$. 根据插值的误差估计式有

$$f(x)-p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x) \tag{4.13}$$

其中 $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$. 对(4.13)式两边从 a 到 b 求积分得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \int_a^b p_n(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\mathrm{d}x$$

由(4.9)式得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n}(b-a)c_i^{(n)}f(x_i) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\mathrm{d}x \tag{4.14}$$

显然,当 $f(x)$ 为任意不超过 n 次代数多项式时,$f^{(n+1)}(\xi)=0$. 所以

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n}(b-a)c_i^{(n)}f(x_i)$$

这说明,Newton - Cotes 求积公式至少具有 n 次代数精确度.

②证明当 n 为偶数时,Newton - Cotes 求积公式的代数精确度至少为 $n+1$ 次.

设 $f(x)$ 为 $n+1$ 次代数多项式,则可令 $f(x)=\sum\limits_{k=0}^{n+1} b_k x^k$,其中 n 为偶数,从而有

$$f^{(n+1)}(x) = (b_0 + b_1 x + \cdots + b_n x^n + b_{n+1}x^{n+1})^{(n+1)} = b_{n+1}(n+1)!$$

故
$$f^{(n+1)}(\xi) = b_{n+1}(n+1)!$$

再据(4.14)式有

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n}(b-a)c_i^{(n)}f(x_i) &= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)\mathrm{d}x \\
&= b_{n+1}\int_a^b \omega(x)\mathrm{d}x \\
&= b_{n+1}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\mathrm{d}x \\
&\xlongequal{x=a+th} b_{n+1}h^{n+2}\int_0^n t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

因为 n 为偶数,可令 $n=2k,k=1,2,\cdots$. 此时,

$$\begin{aligned}
&\int_0^n t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\mathrm{d}t \\
&= \int_0^{2k} t(t-1)\cdots(t-k)[t-(k+1)]\cdots[t-(2k-1)](t-2k)\mathrm{d}t \\
&\xlongequal{u=t-k} \int_{-k}^{k}(u+k)(u+k-1)\cdots u(u-1)\cdots(u-k+1)(u-k)\mathrm{d}u
\end{aligned}$$

令 $H(u)=(u+k)(u+k-1)\cdots u(u-1)\cdots(u-k+1)(u-k)$,则有 $H(-u)=-H(u)$,即 $H(u)$ 为奇函数. 于是

$$\int_0^n t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)\mathrm{d}t = 0$$

所以,当 $f(x)$ 为 $n+1$ 次代数多项式,且 n 为偶数时,有

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n}(b-a)c_i^{(n)}f(x_i)$$

这说明,当 n 为偶数时,Newton - Cotes 求积公式的代数精确度至少为 $n+1$ 次.

从定理 4.2 可知,当被积函数为不超过 n 次代数多项式时,用 Newton - Cotes 求积公式求积分是没有误差的.

定理 4.3　Simpson 求积公式的代数精确度为 3.

证明　由定理 4.2 知,Simpson 求积公式的代数精确度至少为 3 次.

现取 $f(x)=x^4$，则由(4.1)式有

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=\int_a^b x^4\,\mathrm{d}x=\frac{b^5-a^5}{5}$$

而
$$\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=\frac{b-a}{6}\left[a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4\right]$$

从而
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\neq\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

由此推知，当 $f(x)$ 为 4 次代数多项式时

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\neq\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

这说明，当 $f(x)$ 为 4 次代数多项式时，Simpson 求积公式不能精确成立. 因此，Simpson 求积公式的代数精确度为 3.

从定理 4.3 可知，当被积函数为不超过 3 次代数多项式时，用 Simpson 求积公式求积分是没有误差的.

4.3 梯形求积公式和 Simpson 求积公式的误差估计

定理 4.4 若 $f(x)\in C^2[a,b]$，则梯形求积公式有误差估计

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\qquad(4.15)$$

其中 $a\leqslant\eta\leqslant b$.

证明 据(4.12)式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x$$

因为 ξ 依赖于 x，所以 $f''(\xi)$ 是 x 的函数. 根据题意 $f''(\xi)$ 在 $[a,b]$ 上连续，而 $(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上小于 0，从而由积分中值定理可知在 $[a,b]$ 上存在一点 η，使

$$\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x=f''(\eta)\int_a^b(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

于是，得到梯形求积公式的误差估计为

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$$

其中 $a\leqslant\eta\leqslant b$.

定理 4.5　若 $f(x)\in C^4[a,b]$,则 Simpson 求积公式有误差估计

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=-\frac{(b-a)^5}{2\,880}f^{(4)}(\eta)\tag{4.16}$$

其中 $a\leqslant\eta\leqslant b$.

证明　首先考虑构造一个三次插值多项式 $p_3(x)$ 满足条件:$p_3(a)=f(a)$, $p_3(b)=f(b)$, $p_3\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ 和 $p'_3\left(\frac{a+b}{2}\right)=f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$. 可以证明,满足上述条件的 $p_3(x)$ 与 $f(x)$ 的误差为

$$f(x)-p_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\tag{4.17}$$

其中 $a\leqslant\xi\leqslant b$.

对(4.17)式两边求积分得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\int_a^b p_3(x)\,\mathrm{d}x=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

又因 $p_3(x)$ 为三次代数多项式,而 Simpson 求积公式的代数精确度为 3,所以有

$$\begin{aligned}\int_a^b p_3(x)\,\mathrm{d}x&=\frac{b-a}{6}\left[p_3(a)+4p_3\left(\frac{a+b}{2}\right)+p_3(b)\right]\\&=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\end{aligned}$$

从而有

$$\begin{aligned}&\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\\&=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,\mathrm{d}x\end{aligned}$$

据题设,$f^{(4)}(\xi)$ 在 $[a,b]$ 上连续,而 $(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\leqslant0$,由积分中值定理可知,在 $[a,b]$ 中存在一点 η,使

$$\begin{aligned}&\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,\mathrm{d}x\\&=f^{(4)}(\eta)\int_a^b(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\,\mathrm{d}x\\&=-\frac{(b-a)^5}{120}f^{(4)}(\eta)\end{aligned}$$

因此

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

$$= \frac{1}{4!}\left[-\frac{(b-a)^5}{120} f^{(4)}(\eta) \right]$$

$$= -\frac{(b-a)^5}{2\ 880} f^{(4)}(\eta)$$

4.4 复化求积公式

在 4.1 节中介绍了梯形求积公式、Simpson 求积公式和 Newton－Cotes 求积公式. 从梯形求积公式和 Simpson 求积公式的几何意义来看,使用它们求积分会产生较大的误差,而使用 Newton－Cotes 公式似乎当 n 越大,计算出来的结果与积分准确值的误差就会越小. 但事实并非如此,可以证明,当 $n \to \infty$ 时,并非对所有的 $f(x)$,都有

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} (b-a) c_i^{(n)} f(x_i) \to 0$$

这说明 Newton－Cotes 求积公式的收敛性对某些被积函数 $f(x)$ 得不到保证. 另一方面,还可以证明当 $n \geqslant 8$ 时,Newton－Cotes 求积公式的稳定性也得不到保证.

基于上述两个原因,在实际使用 Newton－Cotes 求积公式计算定积分时,不能通过盲目加大 n 以达到提高精度的目的.

为了提高积分近似公式的精度,可以使用复化公式. 本节介绍两个复化公式:一个是复化梯形求积公式,另一个是复化 Simpson 求积公式.

4.4.1 复化梯形求积公式及其误差估计

把积分区间 $[a,b]$ n 等分,得到 $n+1$ 个分点 $x_0, x_1, \cdots, x_k, \cdots, x_n$,其中 $x_k = a + kh; k=0,1,\cdots,n; h=(b-a)/n$,使用这些分点把 $[a,b]$ 分为 n 个小区间 $[x_0,x_1]$,$[x_1,x_2]$,$\cdots$,$[x_{n-1},x_n]$. 据定积分的性质和梯形求积公式(4.4)得

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x + \int_{x_1}^{x_2} f(x)\,\mathrm{d}x + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,\mathrm{d}x \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \\
&\approx \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x_{k+1} - x_k}{2} [f(x_k) + f(x_{k+1})] \\
&= \frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} [f(x_k) + f(x_{k+1})] \\
&= \frac{h}{2} \left[f(a) + f(b) + 2\sum_{k=0}^{n-1} f(a+kh) \right] \qquad (4.18)
\end{aligned}$$

(4.18)式称为复化梯形求积公式,记为 T_n,其中 n 表示等分数.

使用复化梯形公式求积分算法

① 输入 a,b 和 n.

② $h=\frac{b-a}{n}$.

③ $\text{sum}=0$.

对 $k=1,2,\cdots,n-1$,做

$\text{sum}=\text{sum}+f(a+kh)$

④ $T=\frac{h}{2}[f(a)+f(b)+2*\text{sum}]$

⑤ 输出 T.

定理 4.6　若 $f(x)\in C^2[a,b]$,则对复化梯形求积公式 T_n,有

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-T_n=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta) \tag{4.19}$$

其中 $h=\frac{b-a}{n}, a\leqslant\eta\leqslant b$.

证明　把积分区间 $[a,b]$ n 等分,得到分点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$,使用这些分点把 $[a,b]$ 分为 n 个小区间 $[x_0,x_1]$,$[x_1,x_2]$,$\cdots$,$[x_{n-1},x_n]$,在这些小区间上直接使用梯形求积公式的误差估计式(4.15),得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-T_n&=\sum_{k=0}^{n-1}\left\{\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)\,\mathrm{d}x-\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]\right\}\\&=-\frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)\end{aligned}$$

其中 $x_k\leqslant\eta_k\leqslant x_{k+1}$.

由题设可知,$f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续,根据连续函数的性质可知,在 $[a,b]$ 中存在一点 η,使

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1}f''(\eta_k)=f''(\eta)$$

因此,得到复化梯形求积公式的误差估计为

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x-T_n=-\frac{nh^3}{12}f''(\eta)=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)$$

当使用复化梯形求积公式求积分时,有时可以使用它们的误差估计式判断 n 应取多大才能满足给定的精度要求.换句话说,就是要把积分区间 $[a,b]$ 划分多少等分才能满足给定精度要求.

例 4-2　计算积分 $\int_0^1 \mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x$ 的近似值,要求保证有 5 位有效数字.若用复化梯形求积公式计算,n 应取多少?

解 据复化梯形求积公式的误差估计式(4.19),有

$$\int_0^1 e^x dx - T_n = -\frac{1}{12n^2}e^{\eta}$$

其中 $0\leqslant\eta\leqslant 1$. 对上式两边取绝对值得

$$\left|\int_0^1 e^x dx - T_n\right| = \frac{1}{12n^2}e^{\eta} \leqslant \frac{1}{12n^2}e$$

按题目要求,选择 n 使得用复化梯形求积公式计算该积分时具有 5 位有效数字. 据题意和有效数字的定义,即须选择 n 满足

$$\frac{1}{12n^2}e \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{p-5}$$

其中 p 由 $\int_0^1 e^x dx$ 的准确值确定.

显然,

$$\int_0^1 e^x dx = e^1 - e^0 = 0.171\ 8\cdots = 0.171\ 8\cdots\times 10^1$$

从而得 $p=1$. 故须选择 n 满足

$$\frac{1}{12n^2}e \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-4}$$

$$n \geqslant \sqrt{\frac{e\times 10^4}{6}} \approx 67.308\ 8$$

因此,只要取 $n=68$ 就有 $\frac{1}{12n^2}e^{\eta} \leqslant \frac{1}{2}\times 10^{-4}$,T_n 就具有 5 位有效数字.

定理 4.7 积分近似值 T_n 与 T_{2n} 有如下关系:

$$T_{2n} = \frac{1}{2}\left[T_n + h\sum_{k=1}^{n} f\left(a + (2k-1)\frac{b-a}{2n}\right)\right] \tag{4.20}$$

其中 $h=\frac{b-a}{n}$.

证明 把区间 $[a,b]$ $2n$ 等分,实际上是在将区间 $[a,b]$ n 等分的基础上,对每个小区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 再平分一次,亦即在每个小区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上插入一个中点. 记这个中点为 $x_{k+\frac{1}{2}}$,则 $x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{h}{2} = a + \left(k+\frac{1}{2}\right)h, k=0,1,\cdots,n-1$,从而有

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\left[\int_{x_k}^{x_{k+\frac{1}{2}}} f(x)dx + \int_{x_{k+\frac{1}{2}}}^{x_{k+1}} f(x)dx\right]$$

$$\approx \sum_{k=0}^{n-1}\left\{\frac{x_{k+\frac{1}{2}} - x_k}{2}\left[f(x_k) + f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)\right] + \frac{x_{k+1} - x_{k+\frac{1}{2}}}{2}\left[f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + f(x_{k+1})\right]\right\}$$

$$= \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k) + 2f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) + f(x_{k+1})\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[T_n + h\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[T_n + h\sum_{k=1}^{n}f\left(a + \left(k - 1 + \frac{1}{2}\right)h\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[T_n + h\sum_{k=1}^{n}f\left(a + (2k-1)\frac{b-a}{2n}\right)\right]$$

从而得到

$$T_{2n} = \frac{1}{2}\left[T_n + h\sum_{k=1}^{n}f\left(a + (2k-1)\frac{b-a}{2n}\right)\right]$$

4.4.2 复化 Simpson 求积公式及其误差估计

把积分区间$[a,b]$ n 等分,n 为偶数,不妨设 $n=2m(m=1,2,\cdots)$,则分点为 $x_0,x_1,\cdots,x_{2m}$. 其中 $x_k=a+kh;k=0,1,\cdots,2m;h=(b-a)/n$. 使用这些分点把$[a,b]$分为 m 个小区间$[x_0,x_2]$,$[x_2,x_4]$,$\cdots$,$[x_{2(m-1)},x_{2m}]$. 在每个小区间$[x_{2(k-1)},x_{2k}]$$(k=1,2,\cdots,m)$上采用 Simpson 求积公式(4.6)得

$$\int_{x_{2(k-1)}}^{x_{2k}}f(x)\,dx = \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}}f(x)\,dx$$

$$\approx \frac{x_{2k}-x_{2k-2}}{6}\left[f(x_{2k-2}) + 4f(_{2k-1}) + f(x_{2k})\right]$$

$$= \frac{h}{3}\left[f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})\right]$$

从而有

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_2}f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4}f(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{2(m-1)}}^{x_{2m}}f(x)\,dx$$

$$= \sum_{k=1}^{m}\int_{x_{2(k-1)}}^{x_{2k}}f(x)\,dx \approx \sum_{k=1}^{m}\frac{h}{3}\left[f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})\right]$$

$$= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + \sum_{k=2}^{m}f(x_{2k-2}) + 4\sum_{k=1}^{m}f(x_{2k-1}) + \sum_{k=1}^{m}f(x_{2k}) + f(x_{2m})\right]$$

$$= \frac{h}{3}\left[f(a) + f(b) + 4\sum_{k=1}^{m}f(x_{2k-1}) + 2\sum_{k=1}^{m-1}f(x_{2k})\right] \tag{4.21}$$

(4.21)式称为复化 Simpson 求积公式或复化抛物线求积公式,记为 S_n,其中 n 为等分数.

定理 4.8 若 $f(x)\in C^4[a,b]$,则对复化 Simpson 求积公式 S_n 有

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - S_n = -\frac{b-a}{2\,880}(2h)^4 f^{(4)}(\eta) \tag{4.22}$$

其中 $h=\dfrac{b-a}{n}$;$a\leqslant\eta\leqslant b$.

证明 把积分区间$[a,b]n$ 等分,其中 $n=2m(m=1,2,\cdots)$,则分点为 $x_0,x_1,\cdots,x_{2m}$. 这些分点把$[a,b]$分为 m 个小区间$[x_0,x_2]$,$[x_2,x_4]$,$\cdots$,$[x_{2(m-1)},x_{2m}]$,在每个小区间$[x_{2(k-1)},x_{2k}]$$(k=1,2,\cdots,m)$上采用 Simpson 求积公式的误差估计式(4.16)得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - S_n &= \sum_{k=1}^{m}\left\{\int_{x_{2(k-1)}}^{x_{2k}} f(x)\,\mathrm{d}x - \frac{x_{2k}-x_{2k-2}}{3}\left[f(x_{2k-2})+4f(x_{2k-1})+f(x_{2k})\right]\right\}\\ &= -\frac{(2h)^5}{2\,880}\sum_{k=1}^{m} f^{(4)}(\eta_k)\end{aligned}$$

其中 $x_{2k-2}\leqslant\eta_k\leqslant x_{2k}$.

由题设可知$f''(x)$在$[a,b]$上连续,根据连续函数的性质,在$[a,b]$中存在一点η,使

$$\frac{1}{m}\sum_{k=1}^{m} f^{(4)}(\eta_k) = f^{(4)}(\eta)$$

因此,得到复化 Simpson 求积公式的误差估计式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - S_n = -\frac{b-a}{2\,880}(2h)^4 f^{(4)}(\eta)$$

使用复化 Simpson 公式求积分算法

① 输入 a,b 和 n.

②计算 $h=\dfrac{b-a}{n}$.

③$S1=0,S2=0$

对 $k=1,2,\cdots,m$,做

$S1=S1+f(a+(2*k-1)*h)$

对 $k=1,2,\cdots,m-1$,做

$S2=S2+f(a+2*k*h)$

④计算 $S=\dfrac{h}{3}(f(a)+f(b)+4*S1+2*S2)$.

⑤输出 S.

4.5 自动选取步长梯形法

在 4.4 节介绍了复化梯形求积公式。使用复化梯形求积公式求积分的近似值

是一种比较有效的方法. 但是,在使用复化梯形求积公式求积分之前必须选定 n.

对复化梯形求积公式的误差估计式(4.19)的两边求绝对值得

$$\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_n\right| = \frac{b-a}{12}h^2\,|f''(\eta)| \leqslant \frac{b-a}{12}h^2 \max_{a\leqslant x\leqslant b}|f''(x)| \tag{4.23}$$

从(4.23)式可以看到,如果 n 取得太大,虽然能使复化梯形求积公式与积分精确值的误差变得很小,但会导致计算量的增加. 如果 n 取得太小,复化梯形求积公式与积分精确值的误差就会很大,从而使复化梯形求积公式的精度难以保证. 因此,假如给定一个精度,那如何选择 n 使积分近似值满足精度要求?为了避免盲目选取 n,可以使用自动选取步长梯形法.

自动选取步长梯形法需要反复使用公式(4.20):

$$T_{2n} = \frac{1}{2}\left[T_n + h\sum_{k=1}^{n} f\left(a + (2k-1)\frac{b-a}{2n}\right)\right]$$

根据复化梯形求积公式的误差估计式(4.19)得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta_n) \quad (a \leqslant \eta_n \leqslant b)$$

和

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_{2n} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta_{2n}) \quad (a \leqslant \eta_{2n} \leqslant b)$$

将上两式相减得

$$T_{2n} - T_n = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2\left[4f''(\eta_n) - f''(\eta_{2n})\right]$$

当 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续,并假设 n 充分大时 $f''(\eta_n)\approx f''(\eta_{2n})$,则有

$$\frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \approx \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_{2n}$$

因此,假如给定一个精度 ε,要求 $\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_{2n}\right| < \varepsilon$,则可以用 $|T_{2n} - T_n| < 3\varepsilon$ 近似判断 T_{2n} 是否满足精度要求.

自动选取步长梯形法的计算步骤为:

①先用梯形求积公式(4.4)计算出积分的第一次近似值

$$T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$$

②把积分区间 $[a,b]$ 2 等分,并用(4.20)式求出积分的第二次近似值

$$\begin{aligned} T_2 &= \frac{1}{2}\left[T_1 + (b-a)\sum_{k=1}^{1} f\left(a + (2k-1)\frac{b-a}{2}\right)\right] \\ &= \frac{T_1}{2} + \frac{b-a}{2} f\left(a + \frac{b-a}{2}\right) \end{aligned}$$

然后判别 $|T_2 - T_1| < 3\varepsilon$ 是否成立,若成立,则计算停止,T_2 作为积分近似值;否则,进行下一步.

③把积分区间$[a,b]$4 等分,并用(4.20)式求出积分的第三次近似值

$$T_4=\frac{1}{2}\left[T_2+\frac{b-a}{2}\sum_{k=1}^{2}f\left(a+(2k-1)\frac{b-a}{4}\right)\right]$$
$$=\frac{T_2}{2}+\frac{b-a}{4}\sum_{k=1}^{2}f\left(a+(2k-1)\frac{b-a}{4}\right)$$

然后判别$|T_4-T_2|<3\varepsilon$是否成立,若成立,则计算停止,T_4作为积分近似值;否则,进行下一步.

④把积分区间$[a,b]$8 等分,并用(4.20)式求出积分的第四次近似值

$$T_8=\frac{1}{2}\left[T_4+\frac{b-a}{4}\sum_{k=1}^{2}f\left(a+(2k-1)\frac{b-a}{8}\right)\right]$$
$$=\frac{T_4}{2}+\frac{b-a}{8}\sum_{k=1}^{4}f\left(a+(2k-1)\frac{b-a}{8}\right)$$

然后判别$|T_8-T_4|<3\varepsilon$是否成立,若成立,则计算停止,T_8作为积分近似值;否则,要进行下一步.

……

按这样一直做下去,直到$|T_{2n}-T_n|<3\varepsilon$成立为止.$T_{2n}$即为满足精度$\varepsilon$的积分近似值.

自动选取步长梯形法算法

① 输入a,b和ε.

② 计算$h=\dfrac{b-a}{2}$,$T_1=(f(a)+f(b))\times h$,$n=1$

③ 计算$T_0=T_1$,$S=0$(T_0表示前次积分近似值,T_1表示后次积分近似值).

④ 对$k=1,2,\cdots,n$,计算

$$S=S+f\left(a+(2k-1)\times\frac{h}{n}\right)$$

⑤$T_1=\dfrac{T_0}{2}+S\times\dfrac{h}{n}$

⑥若$|T_1-T_0|<3\varepsilon$,则输出T_1的值,结束计算.否则,$n=2n$,返回③.

4.6 数值方法中的加速收敛技巧——Richardson 外推算法

Richardson(李查逊)外推算法在数值分析中有很多应用,如用在数值积分上就产生一种新的数值积分方法——Romberg(龙贝格)求积法.Romberg 求积法在下一节介绍,本节介绍 Richardson 外推算法.

假设有一个量F^*,这个量可以是函数、微分和积分等,现用一个以步长h为变

量的函数 $F_0(h)$ 近似代替它，并设 F^* 与 h 无关，且给定 F^* 与 $F_0(h)$ 的误差估计为

$$F^* - F_0(h) = a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \cdots + a_k h^{p_k} + \cdots \tag{4.25}$$

其中 $0 < p_1 < p_2 < \cdots < p_k < \cdots$；$a_k \neq 0(k = 1,2,\cdots)$ 是与 h 无关的常数.

从误差估计式(4.25)可以看到，当 h 适当小时，第一项 $a_1 h^{p_1}$ 的绝对值远比后面的项的绝对值大. 而第一项中的 h^{p_1} 是最主要的，它对误差的影响最大，通常称为 F^* 与函数 $F_0(h)$ 的误差的阶. 显然，当 h 适当小时，误差的阶 h^{p_1} 中的幂 p_1 越大，F^* 与函数 $F_0(h)$ 的误差的绝对值就会越小. 能否从函数 $F_0(h)$ 出发构造一个新的函数近似代替 F^*，使 F^* 与这个函数的误差的阶的幂比 F^* 与函数 $F_0(h)$ 的误差的阶的幂更高一些？答案是肯定的.

为了构造出一个新函数 $F_2(h)$ 近似代替 F^*，使 F^* 与这个函数的误差的阶的幂比 F^* 与函数 $F_0(h)$ 的误差的阶的幂更高一些，可以采用下面的做法.

首先把(4.25)式中的 h 用 qh 代替，得

$$F^* - F_0(qh) = a_1(qh)^{p_1} + a_2(qh)^{p_2} + \cdots + a_k(qh)^{p_k} + \cdots \tag{4.26}$$

其中 q 为常数，并满足 $1 - q^{p_1} \neq 0$. 再用 q^{p_1} 乘(4.25)式两边，得

$$q^{p_1}F^* - q^{p_1}F_0(h) = a_1(qh)^{p_1} + a_2 q^{p_1}h^{p_2} + \cdots + a_k q^{p_1}h^{p_k} + \cdots \tag{4.27}$$

(4.26)式减(4.27)式并整理后得

$$\begin{aligned}&(1 - q^{p_1})F^* - [F_0(qh) - q^{p_1}F_0(h)] \\ &= a_2(q^{p_2} - q^{p_1})h^{p_2} + a_3(q^{p_3} - q^{p_1})h^{p_3} + \cdots + a_k(q^{p_k} - q^{p_1})h^{p_k} + \cdots\end{aligned} \tag{4.28}$$

用 $1 - q^{p_1}$ 除(4.28)式两边得

$$\begin{aligned}&F^* - \frac{F_0(qh) - q^{p_1}F_0(h)}{1 - q^{p_1}} \\ &= \frac{a_2(q^{p_2} - q^{p_1})h^{p_2}}{1 - q^{p_1}} + \frac{a_3(q^{p_3} - q^{p_1})h^{p_3}}{1 - q^{p_1}} + \cdots + \frac{a_k(q^{p_k} - q^{p_1})h^{p_k}}{1 - q^{p_1}} + \cdots\end{aligned} \tag{4.29}$$

若记 $F_1(h) = \dfrac{F_0(qh) - q^{p_1}F_0(h)}{1 - q^{p_1}}$ 和 $a_k^{(1)} = \dfrac{a_k(q^{p_k} - q^{p_1})}{1 - q^{p_1}}$，$k = 2,3,\cdots$，则由(4.29)式有

$$F^* - F_1(h) = a_2^{(1)}h^{p_2} + a_3^{(1)}h^{p_3} + \cdots + a_k^{(1)}h^{p_k} + \cdots \tag{4.30}$$

其中 $a_k^{(1)}$ 是与 h 无关的常数.

从(4.30)式可以看到，若用函数 $F_1(h)$ 近似代替 F^*，则 F^* 与 $F_1(h)$ 的误差的阶为 h^{p_2}. 而 $p_2 > p_1$，因此，只要 h 适当小，F^* 与 $F_1(h)$ 的误差的绝对值比 F^* 与 $F_0(h)$ 的误差的绝对值要小些.

有了 $F_1(h)$ 以后，再从这个函数出发，构造出一个新函数 $F_2(h)$ 近似代替 F^*，使 F^* 与这个函数的误差的阶的幂比 F^* 与函数 $F_1(h)$ 的误差的阶的幂更高一些. 具体做法与前面的做法类似.

$$F^* - F_2(h) = a_3^{(2)} h^{p_3} + a_4^{(2)} h^{p_4} + \cdots + a_k^{(2)} h^{p_k} + \cdots \tag{4.31}$$

其中 $F_2(h) = \dfrac{F_1(qh) - q^{p_2} F_1(h)}{1 - q^{p_2}}$，$a_k^{(2)} = \dfrac{a_k^{(1)}(q^{p_k} - q^{p_2})}{1 - q^{p_2}}$ $(k = 3, 4, \cdots)$ 是与 h 无关的常数.

从(4.31)式可以看到,若用函数 $F_2(h)$ 近似代替 F^*,则 F^* 与 $F_2(h)$ 的误差的阶为 h^{p_3},而 $p_3 > p_2$. 因此,只要 h 适当小,F^* 与 $F_2(h)$ 的误差的绝对值比 F^* 与 $F_1(h)$ 的误差的绝对值又要小些.

依此类推,就可以构造出一系列的函数 $F_0(h), F_1(h), F_2(h), \cdots$. 当 h 适当小时,F^* 与这些函数的误差的绝对值一个比一个小. 这些函数的一般形式为

$$F_m(h) = \frac{F_{m-1}(qh) - q^{p_m} F_{m-1}(h)}{1 - q^{p_m}} \quad (m = 1, 2, \cdots) \tag{4.32}$$

其中 q 为常数,并满足 $1 - q^{p_m} \neq 0$.

(4.32)式称为 Richardson 外推算法. 用归纳法可以证明:

$$F^* - F_m(h) = a_{m+1}^{(m)} h^{p_{m+1}} + a_{m+2}^{(m)} h^{p_{m+2}} + \cdots$$

其中,$a_k^{(m)} = \dfrac{a_k^{(m-1)}(q^{p_k} - q^{p_m})}{1 - q^{p_m}}$ $(k = m+1, m+2, \cdots)$,是与 h 无关的常数.

4.7 Romberg 求积法

Romberg 求积法是应用 Richardson 外推算法的一个典型例子. 在介绍 Romberg 求积法的具体计算过程之前,先介绍一下 Romberg 求积法的理论基础,推导一个求积分近似值的 Romberg 序列.

4.7.1 Romberg 序列的推导

4.4 节已经证明,(4.19)式是复化梯形求积公式误差估计式的一种形式.

还可以证明复化梯形求积公式的另一个误差估计式

$$\int_a^b f(x)\,dx - T_n = a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \cdots \tag{4.33}$$

其中 $h = \dfrac{b-a}{n}$,$a_2, a_4, a_6, \cdots$ 都是与步长 h 无关的常数.

从误差估计(4.33)式和(4.25)式可以看到,$p_1 = 2, p_2 = 4, p_3 = 6, \cdots$,复化梯形求积公式与积分准确值的误差的阶为 h^2.

由复化梯形求积公式(4.18)可知

$$T_n = \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a + kh)\right] = T_0(h)$$

把积分区间$[a,b]$ $2n$ 等分,并且采用复化梯形公式得

$$T_{2n}=\frac{h}{2^2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{2n-1}f\left(a+k\frac{h}{2}\right)\right]=T_0\left(\frac{h}{2}\right)\tag{4.34}$$

(4.34)式实际上就是用$\frac{h}{2}$替代 T_n 中的 h 得到的,所以可以记为 $T_0\left(\frac{h}{2}\right)$.

再把积分区间$[a,b]$ $4n$ 等分,并且采用复化梯形公式得

$$T_{4n}=\frac{h}{2^3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{4n-1}f\left(a+k\frac{h}{2^2}\right)\right]=T_0\left(\frac{h}{2^2}\right)\tag{4.35}$$

(4.35)式实际上就是用$\frac{h}{2^2}$替代 T_n 中的 h 得到的,所以可以记为 $T_0\left(\frac{h}{2^2}\right)$.

按此类推,就能得到一个函数序列

$$T_0(h),T_0\left(\frac{h}{2}\right),T_0\left(\frac{h}{2^2}\right),\cdots\tag{4.36}$$

可以证明,函数序列(4.36)收敛于积分的准确值.根据误差估计式(4.33),这个函数序列中的每一个函数与积分准确值的误差的阶为 h^2.

按照 Richardson 外推算法,可以从这个函数序列出发构造一个新的函数序列,使新的函数序列收敛于积分准确值的速度比函数序列(4.36)收敛于积分准确值的速度更快些.具体做法为:

取 $m=1$ 和 $q=\frac{1}{2}$代入 Richardson 外推公式(4.32),把 F 改为 T,并注意到 $p_1=2$ 就得到一个新函数

$$T_1(h)=\frac{T_0\left(\frac{h}{2}\right)-\frac{1}{2^2}T_0(h)}{1-\frac{1}{2^2}}\tag{4.37}$$

对(4.37)式用$\frac{h}{2}$替代 h,得

$$T_1\left(\frac{h}{2}\right)=\frac{T_0\left(\frac{h}{2^2}\right)-\frac{1}{2^2}T_0\left(\frac{h}{2}\right)}{1-\frac{1}{2^2}}$$

再用$\frac{h}{2^2}$替代 h,得

$$T_1\left(\frac{h}{2^2}\right)=\frac{T_0\left(\frac{h}{2^3}\right)-\frac{1}{2^2}T_0\left(\frac{h}{2^2}\right)}{1-\frac{1}{2^2}}$$

如此类推,就可以得到一个新的函数序列

$$T_1(h), T_1\left(\frac{h}{2}\right), T_1\left(\frac{h}{2^2}\right), \cdots \tag{4.38}$$

可以证明,函数序列(4.38)收敛于积分的准确值. 由 Richardson 外推算法可知,这些函数与积分准确值的误差的阶为 h^4. 所以,当 h 适当小时,该函数序列收敛于积分准确值的速度比函数序列(4.36)收敛于积分准确值的速度要快些.

取 $m=2$ 和 $q=\frac{1}{2}$代入 Richardson 外推公式(4.32),把 F 改为 T,并注意到 $p_2=4$,仿照前面的方法,又可以得到一个新的函数序列

$$T_2(h), T_2\left(\frac{h}{2}\right), T_2\left(\frac{h}{2^2}\right), \cdots \tag{4.39}$$

可以证明,函数序列(4.39)收敛于积分的准确值. 由 Richardson 外推算法可知,这些函数与积分准确值的误差的阶为 h^6. 所以,当 h 适当小时,该函数序列收敛于积分准确值的速度比(4.36)和(4.38)两个函数序列收敛于积分准确值的速度要快些.

这样,不断地运用 Richardson 外推算法就得到一系列的函数序列:

$$\begin{array}{l}
T_0(h), T_0\left(\frac{h}{2}\right), T_0\left(\frac{h}{2^2}\right), \cdots \\
T_1(h), T_1\left(\frac{h}{2}\right), T_1\left(\frac{h}{2^2}\right), \cdots \\
T_2(h), T_2\left(\frac{h}{2}\right), T_2\left(\frac{h}{2^2}\right), \cdots \\
\qquad\vdots \\
T_m(h), T_m\left(\frac{h}{2}\right), T_m\left(\frac{h}{2^2}\right), \cdots \\
\qquad\vdots
\end{array} \tag{4.40}$$

函数序列表(4.40)的函数计算可以归纳为统一公式

$$T_m\left(\frac{h}{2^k}\right)=\frac{T_{m-1}\left(\frac{h}{2^{k+1}}\right)-\frac{1}{2^{2m}}T_{m-1}\left(\frac{h}{2^k}\right)}{1-\frac{1}{2^{2m}}}=\frac{4^m T_{m-1}\left(\frac{h}{2^{k+1}}\right)-T_{m-1}\left(\frac{h}{2^k}\right)}{4^m-1} \tag{4.41}$$

其中,$T_0(h)=T_n, T_0\left(\frac{h}{2}\right)=T_{2n}, T_0\left(\frac{h}{2^2}\right)=T_{4n}, \cdots; m=1,2,\cdots; k=0,1,\cdots$.

可以证明,函数序列表(4.40)中的每一行都收敛于积分的准确值. 实际上,还可以证明函数序列

$$T_0(h), T_1(h), \cdots, T_m(h), \cdots \tag{4.42}$$

也收敛于积分准确值. 函数序列(4.42)称为 Romberg 序列,使用该函数序列求积

分的方法称为 Romberg 求积法.

4.7.2　Romberg 求积法的计算过程

Romberg 求积法的计算过程如下：

①$T_n = T_0(h)$

②$T_{2n} = T_0\left(\frac{h}{2}\right)$　　③ $T_1(h)$

④$T_{4n} = T_0\left(\frac{h}{2^2}\right)$　　⑤$T_1\left(\frac{h}{2}\right)$　　⑥$T_2(h)$

⑦$T_{8n} = T_0\left(\frac{h}{2^3}\right)$　　⑧$T_1\left(\frac{h}{2^2}\right)$　　⑨$T_2\left(\frac{h}{2}\right)$　　⑩$T_3(h)$

$\vdots$

按这样做下去,直到 $|T_m(h) - T_{m-1}(h)| < \varepsilon$ 为止.

需说明的是,在开始计算时,要先取定 n,通常取 $n=1$. 也要先取定 ε,ε 取得越小,积分近似值就越接近于积分准确值.

例 4－3　使用 Romberg 求积法计算积分 $\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$ 的值(给定 $\varepsilon = 0.01$,且取 $n=1$).

解　①$T_1 = T_0(h) = \frac{1-0}{2} \times (4+2) = 3$

②$T_2 = T_0\left(\frac{h}{2}\right) = \frac{1}{2}\left[T_1 + \frac{4}{1+\left(\frac{1}{2}\right)^2}\right] = 3.1$

③$T_1(h) = \dfrac{4T_0\left(\frac{h}{2}\right) - T_0(h)}{3} = 3.133\,333\,3$

$$|T_1(h) - T_0(h)| = 0.133\,333 > 0.01$$

进行下一步.

④$T_4 = T_0\left(\frac{h}{2^2}\right) = \frac{1}{2}\left[T_2 + \frac{4}{1+\left(\frac{1}{4}\right)^2} + \frac{4}{1+\left(\frac{3}{4}\right)^2}\right] = 3.131\,18$

⑤$T_1\left(\frac{h}{2}\right) = \dfrac{4T_0\left(\frac{h}{2^2}\right) - T_0\left(\frac{h}{2}\right)}{3} = 3.141\,573$

⑥$T_2(h) = \dfrac{4^2 T_1\left(\frac{h}{2}\right) - T_1(h)}{4^2-1} = 3.142\,12$

此时 $$\left|T_2(h)-T_1(h)\right|=0.008\,79<0.01$$
成立,计算停止, $T_1(h)$作为满足精度要求的积分近似值.

前面介绍的是人工计算过程,那么,如何在计算机上实现 Romberg 求积法? 为了便于介绍在计算机上如何实现 Romberg 求积法,把 $T_m\left(\dfrac{h}{2^k}\right)$ 记为 $T_m^{(k)}$,则相应的 Romberg 求积法的计算过程如下所示:

①$T_0^{(0)}$

②$T_0^{(1)}$ ③$T_1^{(0)}$

④$T_0^{(2)}$ ⑤$T_1^{(1)}$ ⑥$T_2^{(0)}$

⑦$T_0^{(3)}$ ⑧$T_1^{(2)}$ ⑨$T_2^{(1)}$ ⑩$T_3^{(0)}$

⋮

按这样做下去,直到 $\left|T_m^{(0)}-T_{m-1}^{(0)}\right|<\varepsilon$ 成立为止.

由于在编写程序时,$T_m^{(k)}$ 的值要存放起来,所以需使用一个二维数组 T,即用数组元素 $T(m,k)$来存放 $T_m^{(k)}$ 的值.

Romberg 求积法算法

①输入 a,b 和 ε.

②计算 $T_0^{(0)}$:

$$T(0,0)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

③$k=1$(其中 k 用来记录把积分区间$[a,b]$2 等分的次数).

④按复化梯形公式计算 $T_0^{(k)}$:

$$T(0,k)=\frac{1}{2}\left[T(0,k-1)+\frac{b-a}{2^{k-1}}\sum_{i=1}^{2^{k-1}}f\left(a+(2i-1)\times\frac{b-a}{2^k}\right)\right]$$

⑤计算第 $k+1$ 行元素 $T_m^{(k-m)}$:

$$T(m,k-m)=\frac{4^mT(m-1,k-m+1)-T(m-1,k-m)}{4^m-1}\quad(m=1,2,\cdots,k)$$

⑥精度控制.

对指定的精度 ε,若 $\left|T(k,0)-T(k-1,0)\right|<\varepsilon$,即 $\left|T_k^{(0)}-T_{k-1}^{(0)}\right|<\varepsilon$,则终止计算,并取 $T(k,0)$即 $T_k^{(0)}$ 作为满足精度要求的积分近似值;否则,$k=k+1$,转回④继续计算.

4.8 Gauss 型求积公式

考虑定积分

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

其中 $\rho(x)$ 为区间 $[a, b]$ 上的权函数.

以 n 个不等距的节点 $x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_n, x_i \in [a, b]$ 作为插值节点,根据代数插值的理论

$$f(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \frac{\omega_n(x)}{(x-x_k)\omega_n'(x_k)} + f(x, x_1, x_2, \cdots, x_n)\omega_n(x) \tag{4.43}$$

其中 $\omega_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$.

将(4.43)式两边乘以权函数 $\rho(x)$ 并积分得

$$\begin{aligned}\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a^b \rho(x)\left[\sum_{k=1}^{n} f(x_k)\frac{\omega_n(x)}{(x-x_k)\omega_n'(x_k)}\right]\mathrm{d}x + \\ &\quad \int_a^b \rho(x) f(x, x_1, x_2, \cdots, x_n)\omega_n(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\int_a^b \frac{\rho(x)\omega_n(x)}{(x-x_k)\omega_n'(x_k)}\mathrm{d}x + \\ &\quad \int_a^b \rho(x) f(x, x_1, x_2, \cdots, x_n)\omega_n(x)\,\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{4.44}$$

令

$$A_k = \int_a^b \frac{\rho(x)\omega_n(x)}{(x-x_k)\omega_n'(x_k)}\mathrm{d}x$$

$$R[f] = \int_a^b \rho(x) f(x, x_1, x_2, \cdots, x_n)\omega_n(x)\,\mathrm{d}x$$

则有

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) + R[f]$$

舍去余项 $R[f]$ 就得到积分近似计算公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.45}$$

因为当 $f(x)$ 为不超过 $n-1$ 次代数多项式时,$f(x, x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0$,从而推得

$$R[f] = \int_a^b \rho(x) f(x, x_1, x_2, \cdots, x_n)\omega_n(x)\,\mathrm{d}x = 0$$

因此,公式(4.45)具有 $n-1$ 次代数精确度.下面对给定的 $f(x)$,寻找 x_k 和 A_k 使得求积公式(4.45)从 $n-1$ 次代数精确度提高到 $2n-1$ 次.

定理 4.9 若对任何一个不超过 $n-1$ 次的代数多项式 $q(x)$,有

$$\int_a^b \rho(x) q(x)\omega_n(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{4.46}$$

则求积公式(4.45)具有 $2n-1$ 次代数精确度.

证明 设 $f(x)$ 是次数不高于 $2n-1$ 次的多项式,用 $\omega_n(x)$ 除 $f(x)$,若记 $q(x)$ 为商,$r(x)$ 为余式,则有

$$f(x) = \omega_n(x) q(x) + r(x) \tag{4.47}$$

其中 $q(x)$ 和 $r(x)$ 都是不超过 $n-1$ 次的代数多项式.用 $\rho(x)$ 乘(4.47)式两边,并

求积分得

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)q(x)\omega_n(x)\mathrm{d}x + \int_a^b \rho(x)r(x)\mathrm{d}x$$

又因为

$$\int_a^b \rho(x)q(x)\omega_n(x)\mathrm{d}x = 0$$

再根据(4.44)式得

$$\int_a^b \rho(x)r(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} A_k r(x_k)$$

故

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} A_k r(x_k)$$

再因为

$$f(x_k) = \omega_n(x_k)q(x_k) + r(x_k) = r(x_k)$$

于是

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

这说明了当 $f(x)$ 为不超过 $2n-1$ 次代数多项式时,求积公式(4.45)准确成立.

还需证明求积公式(4.45)对 $f(x)$ 为 $2n$ 次代数多项式时是不准确成立的. 为此,令 $f(x)=\omega_n^2(x)$. 显然,它是 $2n$ 次多项式,且有

$$\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)\mathrm{d}x > 0$$

而另一方面,如果求积公式(4.45)对 $f(x)=\omega_n^2(x)$ 准确成立,就有

$$\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} A_k \omega_n^2(x_k) = 0$$

这个矛盾说明,当 $f(x)$ 为 $2n$ 次多项式时,求积公式(4.45)是不准确成立的. 因此,根据代数精确度的定义,求积公式(4.45)的代数精确度可达到 $2n-1$ 次.

这个事实说明,只要选取 x_k 满足(4.46)并取

$$A_k = \int_a^b \frac{\rho(x)\omega_n(x)}{(x-x_k)\omega_n'(x_k)}\mathrm{d}x$$

则求积公式(4.45)的代数精确度可以从 $n-1$ 次提高到 $2n-1$ 次.

(4.46)式表明,n 次代数多项式 $\omega_n(x)$ 和不超过 $n-1$ 次代数多项式 $q(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上对权函数 $\rho(x)$ 正交. 根据正交条件可以解出 $x_1,x_2,\cdots,x_n$.

下面考虑 $n=2$ 和 $\rho(x)=1$ 的情形. 不失一般性,把积分区间 $[a,b]$ 取成 $[-1,1]$. 这是因为利用变换

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

总可以把积分区间 $[a,b]$ 变成 $[-1,1]$,即有

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

其中 $g(t) = f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right)$.

现在的问题是如何选取 x_1 和 x_2,使

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

对 $f(x)$ 为三次代数多项式时准确成立.

按正交条件有

$$\int_{-1}^{1} (x - x_1)(x - x_2)\mathrm{d}x = 0$$

$$\int_{-1}^{1} x(x - x_1)(x - x_2)\mathrm{d}x = 0$$

从上面两式得 $x_1 + x_2 = 0$ 和 $x_1 x_2 = -\frac{1}{3}$,从而得到 $x_2 = -x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$. 而

$$A_1 = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}\mathrm{d}x = 1$$

$$A_2 = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}\mathrm{d}x = 1$$

于是

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

这个求积公式具有三次代数精确度,称为 $n = 2$ 时的高斯求积公式.

定义 4.2 一般地,把按正交条件(4.46)求出的节点 x_k 和按公式(4.44)计算出的系数 A_k 组成的求积公式(4.45)称为 Gauss(高斯)型求积公式. 而节点 x_k 称为 Gauss 点.

Gauss 型求积公式的优点是代数精确度高,但节点和系数的计算比较麻烦. 而利用区间$[a,b]$上关于非负权函数 $\rho(x)$ 的正交多项式簇的性质可知,正交多项式簇的 n 个零点就是 Gauss 求积公式的 n 个节点. 为此,前人对某些特定的权函数与正交多项式事先计算出它们对应的 Gauss 点和系数表,在计算时可以直接查表得到求积公式. 下面给出几种常用的 Gauss 型求积公式,即给出它们的 Gauss 点和相应的系数.

4.8.1 Gauss – Legendre(勒让得)求积公式

首先,引入 Legendre 多项式定义. Legendre 多项式为

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n$$

其中 $L_0(x) = 1$.

容易验证,$L_n(x)$是在区间$[a,b]$上关于权函数 $\rho(x) = 1$ 的正交多项式簇. 这是因为

$$\int_{-1}^{1} x^k \frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n \mathrm{d}x = x^k \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2 - 1)^n \Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} kx^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2 - 1)^n \mathrm{d}x$$

$$= -\int_{-1}^{1} kx^{k-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(x^2-1)^n \mathrm{d}x$$

$$= \cdots = (-1)^k k! \int_{-1}^{1} \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}}(x^2-1)^n \mathrm{d}x = 0 \quad (k=0,1,\cdots,n)$$

因此,根据正交多项式簇的性质,$L_n(x)$的 n 个零点就是 Gauss-Legendre 求积公式的 n 个节点.

直接按公式(4.44)可以算出 A_k,但这样计算比较复杂.考虑到

$$f(x) = \frac{\omega_n(x)\omega_n'(x)}{x-x_k}$$

是 $2n-2$ 次的代数多项式,而且

$$f(x_j) = \begin{cases} 0 & (j \neq k) \\ [\omega_n'(x_j)]^2 & (j=k) \end{cases}$$

于是

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \frac{\omega_n'(x)\omega_n^2(x)}{x-x_k}\mathrm{d}x$$

$$= \sum_{j=1}^{n} A_j f(x_j) = A_k[\omega'_n(x_k)]^2$$

另一方面,由分部积分法得

$$\int_{-1}^{1} \frac{\omega_n(x)\omega_n'(x)}{x-x_k}\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \frac{\omega_n(x)}{x-x_k}\mathrm{d}(\omega_n(x))$$

$$= \left.\frac{\omega_n^2(x)}{x-x_k}\right|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} \omega_n(x)\left[\frac{\omega_n(x)}{x-x_k}\right]'\mathrm{d}x$$

$$= \frac{2}{1-x_k^2}$$

从而有

$$A_k[\omega_n'(x_k)]^2 = \frac{2}{1-x_k^2}$$

解得

$$A_k = \frac{2}{(1-x_k^2)(\omega_n'(x_k))^2}$$

当 $n=1,2,3,4,5$ 时,Gauss－Legendre 求积公式的节点 x_k 和系数 A_k 见表 4－2.

表 4－2　Gauss－Legendre 求积公式节点 x_k 和系数 A_k

n	x_k	A_k
1	0	2
2	±0.577 350 3	1
3	±0.774 596 7 =0	0.555 555 6 0.888 888 9
4	±0.861 136 3 ±0.339 981 0	0.347 854 8 0.652 145 1
5	±0.906 179 8 ±0.538 469 3 =0	0.236 926 8 0.478 628 7 0.568 888 9

例 4－4　使用两点的 Gauss－Legendre 求积公式计算积分 $\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin t\mathrm{d}t$.

解
$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin t\mathrm{d}t \xlongequal{t=\frac{\pi(x+1)}{4}} \frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1} \sin\frac{\pi(x+1)}{4}\mathrm{d}x$$

查表得 $x_1=0.577\ 350\ 3$, $x_2=-0.577\ 350\ 3$, $A_1=A_2=1$，而

$$\sin\frac{\pi(x_1+1)}{4}\approx 0.325\ 89 \qquad \sin\frac{\pi(x_2+1)}{4}\approx 0.945\ 41$$

故
$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin t\mathrm{d}t = \frac{\pi}{4}\int_{-1}^{1} \sin\frac{\pi(x+1)}{4}\mathrm{d}x$$
$$\approx \frac{\pi}{4}(0.325\ 89+0.945\ 41)\approx 0.998\ 475\ 8$$

4.8.2　Gauss－Leguerre（拉盖尔）求积公式

所谓 Leguerre 多项式为

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

它是在区间 $[0,\infty)$ 上关于权函数 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x}$ 的正交多项式簇．而求积公式

$$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-x}f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

称为 Gauss－Leguerre 求积公式．其中 x_k 是 Leguerre 多项式的零点；系数 A_k 由下式计算：

$$A_k=\frac{(n!)^2}{x_k[L_n'(x_k)]^2}$$

当 $n=1,2,3,4,5$ 时，Gauss－Leguerre 求积公式的节点 x_k 和系数 A_k 见表 4－3.

表 4－3　Gauss－Leguerre 求积公式节点 x_k 和系数 A_k

n	x_k	A_k
1	1	1
2	0.585 786 4 3.414 213 6	0.853 553 4 0.146 446 6
3	0.415 774 6 2.294 280 4 6.289 945 1	0.711 093 0 0.278 517 7 0.010 389 3

续上表

n	x_k	A_k
4	0.322 547 7 1.745 761 1 4.536 620 3 9.395 070 9	0.603 154 1 0.357 418 7 0.038 887 9 0.000 539 3
5	0.263 560 3 1.413 403 1 3.596 425 8 7.085 810 0 12.640 801	0.521 755 6 0.398 666 8 0.075 942 4 0.003 611 8 0.000 023 4

例 4－5 使用 Gauss－Leguerre 求积公式计算积分 $\int_0^{\infty} e^{-x}\sin x\mathrm{d}x$.

解 取 $n=2$,查表得 $x_1=0.585\ 786\ 4$,$x_2=3.414\ 213\ 6$,$A_1=0.853\ 553\ 4$,$A_2=0.146\ 446\ 6$.故

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} e^{-x}\sin x\mathrm{d}x &\approx 0.853\ 553\ 4\sin(0.585\ 786\ 4)+0.146\ 446\ 6\sin(3.414\ 213\ 6)\\ &\approx 0.432\ 459\ 4\end{aligned}$$

4.8.3 Gauss－Hermite 求积公式

Hermite 多项式为

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2})$$

它是在区间$(-\infty,+\infty)$上关于权函数 $\rho(x)=e^{-x^2}$的正交多项式簇.而求积公式

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2}f(x)\mathrm{d}x\approx\sum_{k=1}^{n}A_kf(x_k)$$

称为 Gauss－Hermite 求积公式.其中 x_k 是 Hermite 多项式的零点;系数 A_k 由下式计算:

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

当 $n=1,2,3,4,5$ 时,Gauss－Hermite 求积公式的节点 x_k 和系数 A_k 见表 4－4.

表 4-4 Gauss-Hermite **求积公式节点** x_k **和系数** A_k

n	x_k	A_k
1	0	1.772 453 9
2	±0.707 106 8	0.886 226 9
3	±1.224 744 9 0	0.295 409 0 1.181 635 9
4	±1.650 680 1 ±0.524 647 6	0.081 312 8 0.804 914 1
5	±2.020 182 9 ±0.958 572 5 0	0.019 953 2 0.393 619 3 0.945 308 7

例 4-6 使用 Gauss-Hermite 求积公式计算积分 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\sin^2 x\mathrm{d}x$.

解 取 $n=2$,查表得 $x_1=0.707\ 106\ 8$,$x_2=-0.707\ 106\ 8$,$A_1=A_2=0.886\ 226\ 9$.故

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\sin^2 x\mathrm{d}x \approx (\sin^2(0.707\ 106\ 8)+\sin^2(-0.707\ 106\ 8))\times 0.886\ 226\ 9$$
$$\approx 0.748\ 025\ 4$$

定理 4.10 设 $f(x)\in C^{2n}[a,b]$,则 Gauss 求积公式的误差估计式为

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)\mathrm{d}x \tag{4.48}$$

其中 $a\leqslant\eta\leqslant b$.

证明 由 Hermite 插值得知,在节点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 上 $2n-1$ 次 Hermite 插值多项式 $H_{2n-1}(x)$ 与 $f(x)$ 误差估计为

$$f(x)-H_{2n-1}(x)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\omega_n^2(x)dx$$

其中 $a\leqslant\xi\leqslant b$.即

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

对上式两边乘 $\rho(x)$,并从 a 到 b 积分得

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)H_{2n-1}(x)\mathrm{d}x + \frac{1}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)f^{(2n)}(\xi)\omega_n^2(x)\mathrm{d}x$$

因为 Gauss 求积公式对 $2n-1$ 次多项式精确成立,即有

$$\int_a^b \rho(x)H_{2n-1}(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^{n} A_k H_{2n-1}(x_k) = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

从而得到

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) = \frac{1}{(2n)!}\int_a^b f^{(2n)}(\xi)\rho(x)\omega_n^2(x)\,dx$$

由于 $\rho(x)\omega_n^2(x)>0$，$f^{(2n)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，所以由积分中值定理得

$$\frac{1}{(2n)!}\int_a^b f^{(2n)}(\xi)\rho(x)\omega_n^2(x)\,dx = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)\,dx$$

其中 $a\leqslant\eta\leqslant b$. 于是

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\int_a^b \rho(x)\omega_n^2(x)\,dx$$

练习与思考

1. 分别使用梯形求积公式和 Simpson 求积公式计算积分 $\int_1^2 e^{\frac{1}{x}}\,dx$ 的近似值，并进行误差估计.

2. 使用 Newton－Cotes 求积公式计算积分 $\int_1^9 \sqrt{x}\,dx$ 的近似值(取 $n=4$).

3. 若 $f''(x)<0$，证明使用梯形公式计算积分 $\int_a^b f(x)\,dx$ 所得到的值比准确值小，并说明其几何意义.

4. 证明求积近似公式

$$\int_{-2}^{2} f(x)\,dx = \frac{1}{3}[8f(-1)-4f(0)+8f(1)]$$

具有 3 次代数精确度.

5. 分别使用复化梯形求积公式和复化 Simpson 求积公式计算积分 $\int_0^{\pi}\sin x\,dx$ 的近似值，取 $n=8$. 与精确值比较，它们各有多少位有效数字?

6. 计算积分 $\int_0^1 e^x\,dx$ 的近似值，要求保证有 5 位有效数字. 若用复化 Simpson 求积公式计算，n 应取多少?

7. 使用自动选取步长梯形法计算积分 $\int_0^1 \frac{2}{1+t^2}\,dt$ 的近似值.(给定 $\varepsilon=0.01$)

8. 使用 Romberg 求积法计算积分 $\int_1^9 \sqrt{x}\,dx$ 的近似值.(给定 $\varepsilon=0.01$，且取 $n=1$)

9. 试确定 x_1, x_2, A_1, A_2，使求积公式

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2)$$

成为 Gauss 求积公式.

10. 使用两点的 Gauss – Legendre 求积公式计算积分 $\int_0^{\pi} e^x \cos x dx$ 的近似值.