第三章 数值积分

3.1 数值积分基本问题

3.1.1 数值求积的基本思想

实际问题当中常常需要计算积分. 有些数值方法，如微分方程和积分方程的求解，也都和积分计算相联系．依据人们所熟知的微积分基本定理，对于积分

$$I=\int_a^b f(x)dx,$$

只要找到被积函数 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$，便有下列牛顿-莱布尼兹（Newton-Leibniz）公式：

$$\int_a^b f(x)dx=F(b)-F(a).$$

但实际上有很多被积函数找不到用解析式子表达的原函数，例如 $\int_0^1\frac{\sin x}{x}dx$，$\int_0^{\pi}e^{\cos\theta}d\theta$，$\int_0^1 e^{-x^2}dx$ 等等，表面看它们并不复杂，但却无法求得 $F(x)$. 此外，有的积分即使能找到 $F(x)$ 表达式，但式子非常复杂，计算也很困难. 还有的被积函数是列表函数，也无法用牛顿-莱布尼兹公式计算. 而数值积分则只需计算 $f(x)$ 在节点 $x_i\ (i=0,1,\cdots,n)$ 上的值，计算方便且适合于在计算机上机械地实现.

本章将介绍常用的数值积分公式及其误差估计、求积公式的代数精确度、收敛性和稳定性等.

定义 1 设 $x_0,x_1,\cdots,x_n\in[a,b]$，函数 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上可积，称

$$\int_a^b f(x)dx\approx\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i) \tag{1.1}$$

为**数值求积公式**，简称**求积公式**. 记 $I(f)=\int_a^b f(x)dx,\quad I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$，称

$$R(f)=I(f)-I_n(f) \tag{1.2}$$

为求积公式(1.1)的**余项或误差**. x_i 及 A_i（$i=0,1,\cdots,n$）分别称为求积公式(1.1)的**求积节点**及**求积系数**. 这里求积系数 A_i（$i=0,1,\cdots,n$）只与结点 x_i 的选取有关，而与 $f(x)$ 无关。

这类数值积分方法通常称为机械求积，其特点是将积分求值问题归结为函数值的计算，这就避开了牛顿—莱布尼兹公式需要寻求原函数的困难. 数值求积方法是近似方法，为要保证精度，我们自然希望求积公式能对“尽可能多”的函数准确地成立，这就提出了所谓代数精度的概念.

定义 2 如果某个求积公式对于次数不超过 m 的多项式均能准确地成立，但对于 $m+1$ 次多项式就不准确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

一般地，欲使求积公式（1.1）具有 m 次代数精度，只要令它对于 $f(x)=1,x,\cdots,x^m$ 都能准确成立，这就要求

$$\begin{cases} \sum A_k = b-a, \\ \sum A_k x_k = \dfrac{1}{2}(b^2-a^2), \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \sum A_k x_k^m = \dfrac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1}). \end{cases} \tag{1.3}$$

构造出形如（1.1）的求积公式，原则上是一个确定参数 x_k 和 A_k 的代数问题.

?

例 1 试确定求积公式

$$\int_0^h f(x)dx \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0) \tag{1.4}$$

$f=1.x$

公式

x^2

使其具有尽可能高的代数精度.

解 这里有三个待定常数 A_0,A_1,A_2，将 $f(x)=1,\ x,\ x^2$ 代入(1.4)，得

$$h = A_0 + A_1,\quad \frac{h^2}{2} = A_1 h + A_2,\quad \frac{h^3}{3} = A_1 h^2,$$

解得 $A_0=\dfrac{2}{3}h$， $A_1=\dfrac{h}{3}$， $A_2=\dfrac{h^2}{6}$.

$$\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{6}[4f(0)+2f(h)+hf'(0)]. \tag{1.5}$$

直接验证，当 $f(x)=x^3$ 时，等式不成立，故最高代数精度是 2.

3.1.2 插值型求积公式与求积公式的稳定性

设给定一组节点

$$a \le x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b,$$

且已知函数 $f(x)$ 在这些节点上的值，作插值函数 $L_n(x)$.

定义 3 设 $L_n(x)$ 是 $f(x)$ 关于节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的 n 次 Lagrange 插值多项式，即 $L_n(x)=\sum_{k=0}^n l_k(x)f(x_k)$，其中 $l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\ne k}}^n \dfrac{x-x_j}{x_k-x_j}$ $(k=0,1,\cdots,n)$ 是 Lagrange 插值基函数，则称

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx I_n = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \tag{1.6}$$

为插值型求积公式。其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx, \quad k = 0, 1, \cdots, n \tag{1.7}$$

由插值余项定理知，对于插值型的求积公式（1.6），其余项

$$R[f] = I - I_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx, \tag{1.8}$$

式中ξ与变量x有关，$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$.

定理 1　形如（1.6）的求积公式至少有n次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的。

证明　如果求积公式(1.6)是插值型的，按式(1.8)，对于次数不超过n的多项式$f(x)$，其余项$R[f]$等于零，因而这时求积公式至少具有n次代数精度.

反之，如果求积公式（1.6）至少具有n次代数精度，则它必定是插值型的. 事实上，这时公式（1.6）对于插值基函数$l_k(x)$应准确成立，即有

$$\int_a^b l_k(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_j l_k(x_j) = A_k.$$

因而式（1.7）成立.

下面研究求积公式的稳定性

定义 4　在求积公式（1.1）中，若$\lim\limits_{\substack{n\to\infty \\ h\to 0}} \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \int_a^b f(x)dx$，其中$h = \max\limits_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1})$，则称求积公式（1.1）是收敛的.

在求积公式（1.1）中，由于计算$f(x_k)$可能产生误差δ_k，实际得到$\tilde{f}_k$，即$f(x_k) = \tilde{f}_k + \delta_k$. 记

$$I_n(f) = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \qquad I_n(\tilde{f}) = \sum_{k=0}^{n} A_k \tilde{f}_k.$$

对任给小正数$\varepsilon > 0$，只要误差$|\delta_k|$充分小就有

$$\left|I_n(f) - I_n(\tilde{f})\right| = \left|\sum_{k=0}^{n} A_k[f(x_k) - \tilde{f}_k]\right| \le \varepsilon, \tag{1.9}$$

它表明求积公式（1.1）计算是稳定的，由此给出：

定义 5　对任给$\varepsilon > 0$，若$\exists\delta > 0$，只要$\left|f(x_k) - \tilde{f}_k\right| \le \delta (k = 0,1,\cdots,n)$，就有（1.9）

成立，则称求积公式（1.1）是稳定的.

定理 2 若求积公式（1.1）中系数 $A_k > 0(k=0,1,\cdots,n)$, 则此求积公式是稳定的.

证明 对任意给 $\varepsilon>0$，若取 $\delta=\dfrac{\varepsilon}{b-a}$，对 $k=0,1,\cdots,n$ 都有 $\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|\le\delta$，则有

$$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right| = \left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right|$$

$$\le\sum_{k=0}^{n}\left|A_k\right|\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right|\le\delta\sum_{k=0}^{n}A_k=\delta(b-a)=\varepsilon.$$

由定义 5 可知求积公式（1.1）是稳定的．定理 2 表明只要求积系数 $A_k>0$，就能保证计算的稳定性.

3.2 等距节点的 Newton－Cotes 公式

3.2.1 Cotes 系数

设 $[a,b]$ 是一个有限区间，$x_i=x_0+ih\ (i=0,\ 1,\ \cdots,\ n)$，其中 $h=\dfrac{b-a}{n}$．称等距节点的插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{i=0}^{n}C_i^{(n)}f(x_i) \qquad (2.1)$$

为等距节点的 n 阶 Newton－Cotes（牛顿-科特斯）公式. 其中

$$C_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{i\,!(n-i)!\,n}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\ j\ne i}}^{n}(t-j)dt\ ,\quad i=0,\ 1,\ \cdots,\ n\ , \qquad (2.2)$$

称为 **Cotes 系数**.

下面计算 Cotes 系数. 因为式(2.1)是插值型求积公式，所以它可以写成

$$\int_a^b f(x)dx\ \approx\ \sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$$

且其求积系数为 $A_i=\displaystyle\int_a^b l_i(x)\,dx=\int_a^b\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}dx\ ,\quad i=0,\ 1,\ \cdots,\ n\ ,$

令 $x=a+th$，则

$$\omega_{n+1}(x)=h^{n+1}t(t-1)\cdots(t-n),\quad \omega'_{n+1}(x_i)=(-1)^{n-i}i\,!\,(n-i)!\,h^n$$

这时

$$A_i=\frac{(-1)^{n-i}h}{i!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)\,dt$$

$$=(b-a)\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}(t-j)\,dt\,.$$

记 $A_i=(b-a)C_i^{(n)}$，$i=0,\ 1,\ \cdots,\ n$，得 Newton—Cotes 公式(2. 1)及相应的 Cotes 系数(2. 2).

当 $n=1$时，

$$C_0^{(1)}=C_1^{(1)}=\frac{1}{2}\quad ,$$

这时的求积公式称为梯形公式

$$T=\frac{b-a}{2}(f(a)+f(b));\qquad (2.3)$$

当 $n=2$ 时，Cotes 系数为

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6},$$

$$C_1^{(2)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6},$$

$$C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}\quad ,$$

相应的求积公式是下列 **Simpson（辛普森）**公式

$$S=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)];\qquad (2.4)$$

而 $n=4$ 的 Newton—Cotes 公式则特别称为 Cotes 公式，其形式是

$$C=\frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]\qquad (2.5)$$

这里 $x_k=a+kh, h=\dfrac{b-a}{4}$.

下表列出 Cotes 系数表开头的一部分.

表 3-1 Cotes 系数表

	$C_k^{(n)}$					
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$			
	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		
	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$	
	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$

	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28530}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

从表中看到 $n \geq 8$ 时，Cotes 系数 $C_k^{(n)}$ 出现负值，于是有

$$\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right| > \sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} = 1,$$

特别的，假定 $C_k^{(n)}(f(x_k)-\tilde{f}_k) > 0$, 且 $\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right| = \delta$，则有

$$\begin{aligned}\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right| &= \left|\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right| \\ &= \sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)}[f(x_k)-\tilde{f}_k] \\ &= \sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right|\left|f(x_k)-\tilde{f}_k\right| = \delta\sum_{k=0}^{n}\left|C_k^{(n)}\right| > \delta\end{aligned}$$

它表明初始数据误差将会引起计算结果误差增大，即计算不稳定，故 $n \geq 8$ 的牛顿-柯斯特公式是不适用的.

3.2.2 Newton—Cotes 公式的余项

首先介绍偶数阶 Newton—Cotes 公式的性质.

先看辛普森公式（2.4）， 它是二阶 Newton—Cotes 公式，因此至少具有二次代数精度.

进一步用 $f(x)=x^3$ 进行检验，按辛普森公式计算得

$$S = \frac{b-a}{6}[a^3 + 4(\frac{a+b}{2})^3 + b^3].$$

另一方面，直接求积得

$$I = \int_a^b x^3 dx = \frac{b^4-a^4}{4}.$$

这时有 $S = I$，即辛普森公式对次数不超过三次的多项式均能准确成立，又容易验证它对 $f(x)=x^4$ 通常是不准确的，因此，辛普森公式实际上具有三次代数精度.

一般地，我们可以证明下述论断：

定理 3 当 n 为偶数时，Newton—Cotes 公式（2.1）至少有 $n+1$ 次代数精度.

证明 我们只要验证，当n为偶数时，Newton－Cotes 公式对$f(x)=x^{n+1}$的余项为零.

按余项公式（1.8），由于 $f^{(n+1)}(x)=(n+1)!$，从而有

$$R[f]=\int_a^b\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)dx.$$

引进变换$x=a+th$,并注意到$x_j=a+jh$，有

$$R[f]=h^{n+2}\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)dt,$$

若n为偶数，令$t=u+\frac{n}{2}$，有

$$R[f]=h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=0}^{n}(u+\frac{n}{2}-j)du,$$

因为被积函数$H(u)=\prod_{j=0}^{n}(u+\frac{n}{2}-j)=\prod_{j=-n/2}^{n/2}(u-j)$是个奇函数, 故$R[f]=0$.

下面研究 Newton－Cotes 求积公式的余项. 设$L_n(x)$是被积函数$f(x)$关于节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$的n次插值多项式. 如果$f(x)$在区间$[a,b]$上具有n阶导数，那么

$$R[f]=\int_a^b f(x)dx-(b-a)\sum_{i=0}^{n}C_i^{(n)}f(x_i)=\int_a^b f(x)dx-\int_a^b L_n(x)dx$$

$$=\int_a^b\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)dx,\quad \xi\in(a,b) \qquad (2.6)$$

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

下面导出梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式的余项表达式.

首先考察梯形公式，按余项公式，梯形公式（2.3）的余项

$$R_T=I-T=\int_a^b\frac{f(\xi)}{2}(x-a)(x-b)dx,$$

由于函数$(x-a)(x-b)$在区间$[a,b]$上保号（非正），应用积分中值定理，在$[a,b]$内存在一点η，使

$$R_T=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)dx$$

$$=-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3,\quad \eta\in[a,b] \qquad (2.7)$$

再研究 Simpson 公式（2.4）的余项 $R_s = I - S$. 为此构造次数不超过 3 的多项式 $H(x)$，使满足

$$H(a) = f(a),\ H(b) = f(b),\ H(b) = f(b),\ H'(c) = f'(c) \qquad (2.8)$$

这里 $c = \dfrac{a+b}{2}$ 由于 Simpson 公式具有三次代数精度，它对于这样构造出的三次式 $H(x)$ 是准确的，即

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

而利用插值条件（2.8）知，上式右端实际上等于按辛普森公式（2.4）求得的积分值 S，因而积分余项

$$R_s = I - S = \int_a^b \left[f(x) - H(x)\right]dx,$$

对于满足条件（2.8）的多项式 $H(x)$ 其插值余项是

$$f(x) - H(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)$$

故有

$$R_s = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)dx$$

函数 $(x-a)(x-c)^2(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上保号（非正），再用积分中值定理有

$$R_s = \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx$$

$$= -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta). \qquad (2.9)$$

Cotes 公式（2.5）的积分余项如下：

$$R_c = I - C = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \qquad (2.10)$$

例 2 用梯形公式、Simpson 公式和 Cotes 公式计算积分 $\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$， 精确值为

$$\frac{4-\sqrt{2}}{6} \approx 0.43096441.$$

解 利用梯形公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\ dx \approx \frac{1-0.5}{2}(\sqrt{0.5} + \sqrt{1}) \approx 0.4267767;$$

利用 Simpson 公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\ dx \approx \frac{1-0.5}{6}(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+\sqrt{1}) \approx 0.43093403;$$

利用 Cotes 公式

$$\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}\ dx \approx \frac{1-0.5}{90}(7\sqrt{0.5}+32\sqrt{0.625}+12\sqrt{0.75}+32\sqrt{0.875}+7\sqrt{1}) \approx 0.43096407$$

3.3 复化求积公式

前面已经指出高阶牛顿–柯斯特公式是不稳定的，因此，不可能通过提高阶的方法来提高求积精度. 下面介绍复化求积法的思想.

将积分区间$[a,b]$分为n等分，令 $x_k = a+kh\ (k=0,1,\cdots,n)$，其中步长$h=\dfrac{b-a}{n}$，则

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} I_k$$

其中 $I_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$，$k=0,1,\cdots,n-1$

在每个子区间$[x_k,x_{k+1}]\,(k=0,1,\cdots,n-1)$上用低阶求积公式求得$I_k$的近似值，然后将它们累加求和，作为所求积分 $I=\int_a^b f(x)dx$ 的近似值. 下面介绍常用的复化求积公式.

3.3.1 复化梯形公式

将区间$[a,b]$划分为n等分，分点 $x_k = a+kh$，$h=\dfrac{b-a}{n}$，$k=0,1,\cdots,n$ 在每个区间$[x_k,x_{k+1}]\,(k=0,1,\cdots,n-1)$上采用梯形公式（2.3），则得

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \\ &= \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right]+R_n(f) \end{aligned} \tag{3.1}$$

记

$$\begin{aligned} T_n &= \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right] \\ &= \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right] \end{aligned} \tag{3.2}$$

称为复化梯形公式，其余项可由（2.7）得

$$R_n(f) = I - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right],\ \eta_k \in (x_k, x_{k+1}).$$

由于 $f(x)\in C^2(a,b)$，且

$$\min_{0\le k\le n-1} f''(\eta_k)\le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)\le \max_{0\le k\le n-1} f''(\eta_k).$$

所以$\exists\eta\in(a,b)$ 使

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

于是复化梯形公式余项为

$$R_n(f)=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \qquad (3.3)$$

可以看出误差是h^2阶．当 $f(x)\in C^2[a,b]$，有

$$\lim_{n\to\infty}\int_a^b f(x)dx$$

即复化梯形公式是收敛的，事实上只要设 $f(x)\in C[a,b]$，则可得到收敛性，因为只要把T_n改写为

$$T_n=\frac{1}{2}\left[\frac{b-a}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k)+\frac{b-a}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)\right].$$

当$n\to\infty$时，上式右端括号内的两个和式均收敛到积分$\int_a^b f(x)dx$，所以复化梯形公式（3.2）收敛.此外，T_n的求积分系数为正，由定理 2 知复化梯形公式是稳定的

3.3.2 复化 Simpson 求积公式

将区间$[a,b]$分为n等分，在每个子区间$[x_k,x_{k+1}]$上采用 Simpson 公式（2.4），若记$x_{k+1/2}=x_k+\frac{1}{2}h$，则得

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx=\frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]+R_n(f)$$

记

$$S_n=\frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]$$

$$=\frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right], \qquad (3.4)$$

称为**复化 Simpson 求积公式**. 其余项由（2.9）得

$$R_n(f)=I-S_n=-\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\sum_{k=0}^{n-1}f^{(4)}(\eta_k),\ \eta\in(x_k,x_{k+1})$$

$f(x)\in C^4[a,b]$时，与复化梯形公式相似有

$$R_n(f)=I-S_n=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta),\ \eta\in(a,b) \tag{3.5}$$

由（3.5）看出，误差阶为h^4，收敛性是显然的．实际上，只要 $f(x)\in C[a,b]$则可得到收敛性，即

$$\lim_{n\to\infty}S_n=\int_a^b f(x)dx\,.$$

此外，由于 S_n 中求积分系数均为正数，故知复化辛普森公式计算稳定.

例 3 对于函数 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$，给出 $n=8$ 的函数表（见表 3-2），试用复化梯形公式（3.2）及复化辛普森公式（3.4）计算积分 $I=\int_0^1\dfrac{\sin x}{x}dx$，并计算误差.

表 3-2 计算结果

x	$f(x)$
0	1
1/8	0.9973978
1/4	0.9896158
3/8	0.9797267
1/2	0.9588510
5/8	0.9361556
3/4	0.9088516
7/8	0.8771925
1	0.8414709

解 将积分区间$[0,1]$划分为 8 等分，应用复化梯形法求得$T_8=0.9456909$；而如果将$[0,1]$分为 4 等分，应用复化辛普森法有 $S_4=0.9460832$.

比较上面两个结果T_8与S_4，它们都需要提供 9 个点上的函数值，计算量基本相同，然而精确度却差别很大，同积分的准确值 I=0.9460831 比较，复化梯形法的结果$T_8=0.9456909$只有两位有效数字，而复化辛普森法的结果$S_4=0.9460832$却有六位有效数字.

为了利用余项公式估计误差，要求 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$ 的高阶导数，由于

$$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos(xt)dt,$$

所以有

$$f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{d^k}{dx^k}(\cos xt)dt=\int_0^1 t^k \cos\left(xt+\frac{k\pi}{2}\right)dt,$$

于是

$$\max_{0\le x\le 1}\left|f^{(k)}(x)\right|\le \int_0^1 \left|\cos\left(xt+\frac{k\pi}{2}\right)\right| t^k dt\le \int_0^1 t^k dt=\frac{1}{k+1}.$$

由（3.3）得复化梯形公式误差

$$R_8(f)=\left|I-T_n\right|\le \frac{h^2}{12}\max_{0\le x\le 1}\left|f''(x)\right|$$

$$\le \frac{1}{12}\left(\frac{1}{8}\right)^2\frac{1}{3}=0.000434.$$

对复化辛普森公式误差，由（3.5）得

$$\left|R_4(f)\right|=\left|I-S_4\right|\le \frac{1}{2880}\left(\frac{1}{4}\right)^4\frac{1}{5}=0.271\times 10^{-6}.$$

3.4 Romberg 积分法

本节先介绍 Richardson（理查德森）外推法，然后介绍数值积分中行之有效的 Romberg（龙贝格） 积分法，它与 Richardson 外推法密切相关.

3.4.1 Richardson 外推法

设有一个量 f^*，用步长为 h 的函数 $f(h)$ 逼近，余项（或误差） $E=f^*-f(h)$ 能表示为如下渐近形式

$$E=\sum_{j=1}^{+\infty} a_j h^{\gamma_j},\quad 0<\gamma_1<\gamma_2<\cdots. \qquad (4.1)$$

其中，γ_j， a_j 是与 h 无关的常数. γ_j 是已知的，至于 a_j 只知道它们是不等于零的常数，具体的数值是未知的. 现在的问题是能否由（4.1）构成的序列，它逼近 f^* 的阶数高于 h^{γ_j} .这就是本节介绍的 Richardson 外推法的思想.

定理 4（Richardson 外推） 设 $f(h)$ 逼近 f^*，余项如（4.1）所示，则由

$$\begin{cases} f_0(h) = f(h) \\ f_m(h) = \dfrac{f_{m-1}(\rho h) - \rho^{\gamma_m} f_{m-1}(h)}{1-\rho^{\gamma_m}} \end{cases}, m = 1, 2, \cdots \tag{4.2}$$

定义的序列$\{f_m(h)\}$满足

$$f^* - f_m(h) = \sum_{j=m+1}^{+\infty} a_j^{(m)} h^{\gamma_j} \tag{4.3}$$

这里$a_j^{(m)}$是与h无关的非零常数，ρ为适当常数，且$1-\rho^{\gamma_m} \neq 0 \quad (m = 1, 2, \cdots)$.

证明 用归纳法证明。设$m = 1$，

$$f^* - f(h) = a_1 h^{\gamma_1} + \sum_{j=2}^{+\infty} a_j h^{\gamma_j} \quad , \tag{4.4}$$

再用$\rho h \quad (\rho < 1)$带入上式，则有

$$f^* - f(\rho h) = a_1 (\rho h)^{\gamma_1} + \sum_{j=2}^{+\infty} a_j (\rho h)^{\gamma_j} . \tag{4.5}$$

用式（4.5）减去式（4.4）乘以ρ^{γ_1}，得到

$$f^* - \frac{f(\rho h) - \rho^{\gamma_1} f(h)}{1-\rho^{\gamma_1}} = \sum_{j=2}^{+\infty} \frac{\rho^{\gamma_j} - \rho^{\gamma_1}}{1-\rho^{\gamma_1}} a_j h^{\gamma_j} . \tag{4.6}$$

若令

$$f_0 = f, \qquad f_1(h) = \frac{f_0(\rho h) - \rho^{\gamma_1} f_0(h)}{1-\rho^{\gamma_1}}, \qquad a_j^{(1)} = \frac{\rho^{\gamma_j} - \rho^{\gamma_1}}{1-\rho^{\gamma_1}} a_j \quad j \geq 2, \tag{4.7}$$

则有

$$f^* - f_1(h) = \sum_{j=2}^{+\infty} a_j^{(1)} h^{\gamma_j} . \tag{4.8}$$

从而证得命题对$m = 1$成立。

设命题对$m = k-1$成立，即

$$f^* - f_{k-1}(h) = \sum_{j=k}^{+\infty} a_j^{(k-1)} h^{\gamma_j} = a_k^{(k-1)} h^{\gamma_k} + \sum_{j=k+1}^{+\infty} a_j^{(k-1)} h^{\gamma_j} , \tag{4.9}$$

再用ρh带入上式，则有

$$f^* - f_{k-1}(\rho h) = a_k^{(k-1)} (\rho h)^{\gamma_k} + \sum_{j=k+1}^{+\infty} a_j^{(k-1)} (\rho h)^{\gamma_j} . \tag{4.10}$$

用式（4.10）减去式（4.9）乘以ρ^{γ_k}，即得

$$f^* - \frac{f_{k-1}(\rho h) - \rho^{\gamma_k} f_{k-1}(h)}{1-\rho^{\gamma_k}} = \sum_{j=k+1}^{+\infty} \frac{\rho^{\gamma_j} - \rho^{\gamma_k}}{1-\rho^{\gamma_k}} a_j^{(k-1)} h^{\gamma_j}.$$

在上式中，若令

$$f_k(h) = \frac{f_{k-1}(\rho h) - \rho^{\gamma_k} f_{k-1}(h)}{1-\rho^{\gamma_k}}, \tag{4.11}$$

$$a_j^{(k)} = \frac{\rho^{\gamma_j} - \rho^{\gamma_k}}{1-\rho^{\gamma_k}} a_j^{(k-1)}, \quad j > k+1, \tag{4.12}$$

则有

$$f^* - f_k(h) = \sum_{j=k+1}^{+\infty} a_j^{(k)} h^{\gamma_j}. \tag{4.13}$$

即命题对也 $m = k$ 成立，由归纳法证得此定理.

3.4.2 Romberg 积分法

令梯形公式的值 $T_n = T(h)$. 复化梯形公式的值 $T(h)$ 与积分值 $I(f)$ 之间存在 Euler-Maclaurin 求积公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}\,x = h\left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(b)\right) + \sum_{j=1}^{+\infty} a_j h^{2j}, \tag{4.14}$$

即有

$$I(f) - T(h) = \sum_{j=1}^{+\infty} a_j h^{2j}.$$

由 Richardson 外推法得到启发知，由梯形公式的简单组合可以得到比 h^2 更高阶的求和公式.若令

$$\begin{cases} T_0(h) = T(h), \\ T_m(h) = \dfrac{T_{m-1}(\frac{h}{2}) - (\frac{1}{2})^{2m} T_{m-1}(\mathrm{h})}{1-(\frac{1}{2})^{2m}} \\ \qquad = \dfrac{4^m T_{m-1}(\frac{h}{2}) - T_{m-1}(h)}{4^m - 1} \end{cases} \tag{4.15}$$

由定理 4，则 $T_m(h)$ 逼近 $I(f)$ 的阶为 $h^{2(m+1)}$ ，这个算法称为数值积分的 Romberg 方法．实际上，$T_1(h)$ 便是复化的 Simpson 方法，$T_2(h)$ 是复化的 Cotes 方法.

注： 当 $m > 2$ 时，$T_m(h)$ 与复化的 Newton-Cotes 公式之间就没有直接关系了.

令 $n=2^k\quad(k=0,1,2,\cdots)$ ，即将积分区间 $[a,b]$ 分成 2^k 等份，$T_{0,k}$ 表示将区间 2^k 等分后应用复化梯形公式的数值积分值，再应用式(4.15)就产生了Romberg序列. 现将Romberg方法综述如下：

第一步，在区间 $[a,b]$ 上，应用梯形公式求得

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

第二步，将区间 $[a,b]$ 对分，应用复化梯形公式求得 $T_{0,1}$，并按公式

$$T_{1,0}=\frac{4T_{0,1}-T_{0,0}}{4-1}$$

求得 Simpson 公式的值。置 $i=1$，转第四步；

第三步，对区间 $[a,b]$ 作 2^i 等分，记相应的复化梯形公式求得值为 $T_{0,i}$，然后按下式构造新序列（表 3-3）

$$T_{\mathrm{m,k}}=\frac{4^m T_{m-1,\mathrm{k}+1}-T_{\mathrm{m}-1,\mathrm{k}}}{4^m-1},\ m=1,2,\cdots i;\ k=i-m \qquad (4.16)$$

由此求得 $T_{i,0}$.

表 3—3　Romberg 计算表（T 数表）

$T_{0,0}$	$T_{0,1}$	$T_{0,2}$	$T_{0,3}$	$\cdots$	$T_{0,\mathrm{i}}$
$T_{1,0}$	$T_{1,1}$	$T_{1,2}$	$\cdots$	$\therefore$	
$T_{2,0}$	$T_{2,1}$	$\cdots$	$\therefore$		
$T_{3,0}$	$\cdots$	$\therefore$			
$\vdots$	$\therefore$				
$T_{i,0}$					

第四步，若 $|T_{i,0}-T_{i-1,0}|\le\varepsilon$ （ε 是事先给定的精度），则计算停止，输出 $T_{i,0}$，否则用 $i+1$ 代替 i ，转入第三步.

由于上述方法每次把区间再对分一次，Romberg 方法又称为数值积分逐次对分加速收敛法．计算过程公式列出如下

$$\begin{cases} T_{0,0}=\dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)], \\ T_{0,i}=\dfrac{1}{2}[T_{0,i-1}+\dfrac{b-a}{2^{i-1}}\sum_{j=1}^{2^{i-1}} f[a+(2j-1)\dfrac{(b-a)}{2^{i}}]] \\ \quad i=1,2,3,\cdots, \\ T_{m,k}=\dfrac{4^{m}T_{m-1,k+1}-T_{m-1,k}}{4^{m}-1} \end{cases}$$

$$m=1,2,3,\cdots,i \quad ; \quad k=i-m, \tag{4.17}$$

注：（1）应用公式（4.16），能写出

$$T_{m,k}=\sum_{j=0}^{m} C_{m,m-j}T_{0,k+j}\ , \tag{4.18}$$

即每个 $T_{m,k}$ 为 $2^{k},2^{k+1},\cdots,2^{k+m}$ 个子区间上复化梯形公式的线性组合，即 T 数表中每个元素 $T_{m,k}$ 都是第 0 行元素的线性组合．这说明复化梯形公式是 Romberg 算法的基础.

（2）可以证明：当 $f(x)\in C^{2m+2}[a,b]$ 时，$T_{m,k}$ 的余项为

$$\begin{aligned} E_{m,k}(f)&=\int_a^b f(x)dx-T_{m,k} \\ &=\frac{B_{2m+2}}{2^{(m+1)(m+2k)}\cdot(2m)!}(b-a)^{2m+3}f^{(2m+3)}(\zeta) \end{aligned} \tag{4.19}$$

其中，B_{2m+2} 是只与 m 有关而与 k 无关的常数，且 $\zeta\in(a,b)$.

（3）由余项公式（4.19）可以看出，T 数表中第 m 行的求积公式 $T_{m,k}$ 的代数精度为 $2m+1$，而且对固定的 m 成立

$$\lim_{k\to+\infty} T_{m,k}=\int_a^b f(x)dx\,. \tag{4.20}$$

这就是说，T 数表中第 m 行的元素收敛于 $I(f)$，即复化的求积公式是收敛的。这个结果还可以推广如下：只要 $f(x)$ 是有界可积的，那么不仅式（4.20）成立，而且 T 数表中第 0 列上元素也收敛于 $I(f)$，即

$$\lim_{i\to+\infty} T_{i,0}=\int_a^b f(x)dx\,. \tag{4.21}$$

Romberg 积分法高速有效，易于编制程序，适合于计算机计算．但它有一个主要缺点，每当把区间对分后，就要对被积函数 $f(x)$ 计算它在新分点处的值，而这些函数值的个数是成倍增加的。

例 4 用 Romberg 算法计算积分 $I=\int_0^1 x^{\frac{3}{2}}dx$.

解 $f(x)=x^{\frac{3}{2}}$ 在 $[0,1]$ 上仅是一次连续可微，用 Romberg 算法计算结果见下表．从表中看到 Romberg 算到 $k=5$ 的精度与复化辛普森求积精度相当．这里 I 的精确值为 0.4.

k	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	$T_5^{(k)}$
0	0.500000					
1	0.426777	0.402369				
2	0.407018	0.400432	0.400302			
3	0.407018	0.400077	0.400054	0.400050		
4	0.407018	0.400014	0.400009	0.400009	0.400009	
5	0.400118	0.400002	0.400002	0.400002	0.400002	0.400002

本题如果用 T 数表表示，则可以写成

Romberg 计算表（T 数表）

0.500000	0.426777	0.407018	0.407018	0.407018	0.400118
0.402369	0.400432	0.400077	0.400014	0.400002	
0.400302	0.400054	0.400009	0.400002		
0.400050	0.400009	0.400002			
0.400009	0.400002				
0.400002					

3. 5 Gauss 求积公式

考虑机械求积公式

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

当把求积节点 x_k 和求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots n)$ 作为未知参数时，适当选取这些参数，有可能使上述求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度，这类求积公式称为 Gauss（**高斯**）求积公式．本节阐明具有 $2n+1$ 次代数精度的求积公式是存在的．

考虑带权积分 $I=\int_a^b f(x)\rho(x)dx$，这里 $\rho(x)$ 为权函数，其求积公式为

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k), \tag{5. 1}$$

$A_k(k=0,1,\cdots n)$ 为不依赖于 $f(x)$ 的求积系数， $x_k(k=0,1,\cdots n)$ 为求积节点，可适当选取 x_k 及 $A_k(k=0,1,\cdots n)$ 使（5.1）具有 $2n+1$ 次代数精度.

定义 6 如果求积公式（5.1）具有 $2n+1$ 次代数精度，则称其节点 $x_k(k=0,1,\cdots n)$ 为 **Gauss 点**，相应公式（5.1）称为 **Gauss 求积公式**.

根据定义要使（5.1）具有 $2n+1$ 次代数精度，只要取 $f(x)=x^m$，对 $m=0,1,\cdots 2n+1$，（5.1）精确成立，则得

$$\sum_{k=0}^{n} A_k x_k^m = \int_a^b x^m \rho(x)dx \quad m=0,1,\cdots,2n+1 \quad . \tag{5.2}$$

当给定权函数 $\rho(x)$，求出右端积分，则可由（5.2）解得 A_k 及 $x_k(k=0,1,\cdots n)$.

例 5 试构造下列积分的 Gauss 求积公式：

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1). \tag{5.3}$$

解 令公式（5.3）对于 $f(x)=1,x,x^2,x^3$ 准确成立，得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \dfrac{2}{3} \\ x_0A_0 + x_1A_1 = \dfrac{2}{5} \\ x_0^2A_0 + x_1^2A_1 = \dfrac{2}{7} \\ x_0^3A_0 + x_1^3A_1 = \dfrac{2}{9} \end{cases} \tag{5.4}$$

由于

$$x_0A_0 + x_1A_1 = x_0(A_0+A_1) + (x_1-x_0)A_1,$$

利用（5.4）的 第 1 式，可将第 2 式化为

$$\frac{2}{3}x_0 + (x_1-x_0)A_1 = \frac{2}{5}.$$

同样地，利用第 2 式化第 3 式，利用第 3 式化第 4 式，分别得

$$\frac{2}{5}x_0 + (x_1-x_0)x_1A_1 = \frac{2}{7};$$

$$\frac{2}{7}x_0+(x_1-x_0)x_1^2A_1=\frac{2}{9}.$$

从上面三个式子消去$(x_1-x_0)A_1$，有

$$\frac{2}{5}x_0+(\frac{2}{5}-\frac{2}{3}x_0)x_1=\frac{2}{7};$$
$$\frac{2}{7}x_0+(\frac{2}{7}-\frac{2}{5}x_0)x_1=\frac{2}{9}.$$

进一步整理得

$$\frac{2}{5}(x_0+x_1)-\frac{2}{3}x_0x_1=\frac{2}{7};$$
$$\frac{2}{7}(x_0+x_1)-\frac{2}{5}x_0x_1=\frac{2}{9}.$$

由此解出

$$x_0x_1=\frac{5}{21},\quad x_0+x_1=\frac{10}{9},$$

从而求出

$$x_0=0.821162,\quad x_1=0.289949;$$
$$A_0=0.389111,\quad x_2=0.277556.$$

于是形如（5.3）的 Gauss 公式

$$\int_0^1\sqrt{x}f(x)dx\approx 0.389111f(0.821162)+0.277556f(0.289949).$$

从此例看到求解非线性方程组(5.2)较复杂，通常$n\geq 2$就很难求解．故一般不通过解方程（5.2）求x_k及$A_k(k=0,1,\cdots,n)$，而从分析 Gauss 点的特性来构造 Gauss 求积公式.

定理 5 插值型求积公式（5.1）的节点$a\leq x_0<x_1<\cdots<x_n\leq b$是 Gauss 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

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)dx=0 \tag{5.5}$$

证明 必要性.设$P(x)\in H_n$，则$P(x)\omega_{n+1}(x)\in H_{2n+1}$，因此，如果$x_0,x_1,\cdots,x_n$是 Gauss 点，则求积公式（5.1）对于$f(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)$精确成立，即有

$$\int_a^b P(x)\omega_{n+1}(x)\rho(x)dx=\sum_{k=0}^{n}A_kP(x)\omega_{n+1}(x_k).$$

因 $\omega_{n+1}(x_k)=0(k=0,1,\cdots,n)$，故（5.5）成立.

再证明充分性. 对于 $\forall f(x)\in H_{2n+1}$，用 $\omega_{n+1}(x)$ 除 $f(x)$，记商为 $P(x)$，余式为 $q(x)$，即 $f(x)=P(x)\omega_{n+1}(x)+q(x)$，其中 $P(x),q(x)\in H_n$. 由（5.5）可得

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx=\int_a^b q(x)\rho(x)dx. \qquad (5.6)$$

由于所给求积公式（5.1）是插值型的，它对于 $q(x)\in H_n$ 是精确的，即

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

再注意到 $\omega_{n+1}(x_k)=0(k=0,1,\cdots,n)$，知 $q(x_k)=f(x_k)(k=0,1,\cdots n)$，从而由（5.6）有

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

可见求积公式（5.1）对一切次数不超过 $2n+1$ 的多项式均精确成立.因此，$x_k(k=0,1,\cdots n)$ 为 Gauss 点.

下面讨论 Gauss 求积公式（5.1）的 余项.利用 $f(x)$ 在节点 $x_k(k=0,1,\cdots n)$ 的埃尔米特插值 $H_{2n+1}(x)$，即

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

于是

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

两端乘 $\rho(x)$，并由 a 到 b 积分，则得

$$I=\int_a^b f(x)\rho(x)dx=\int_a^b H_{2n+1}(x)\rho(x)dx+R_n[f]. \qquad (5.7)$$

其中右端第一项积分对 $2n+1$ 次多项式精确成立，故

$$R_n[f]=I-\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)=\int_a^b \frac{f^{2n+2}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)\rho(x)dx.$$

由于 $\omega_{n+1}^2(x)\rho(x)\geq 0$，故由积分中值定理得（5.1）的余项为

$$R_n[f]==\frac{f^{2n+2}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega_{n+1}^2(x)\rho(x)dx \qquad (5.8)$$

下面讨论 Gauss 求积公式的稳定性与收敛性.

定理 6 Gauss 求积公式（5.1）的求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots n)$ 全是正的.

证明 考察 $l_k(x)=\prod\limits_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}\dfrac{x-x_j}{x_k-x_j}$ 它是 n 次多项式，因而 $l_k^2(x)$ 是 $2n$ 次多项式，故 Gauss 求积公式（5.1）对于它能准确成立，即有

$$0<\int_a^b l^2(x)\rho(x)dx=\sum_{i=0}^{n}A_i l_k^2(x_i)=A_k\,.$$

推论 Gauss 求积公式(5.1)是稳定的.

不加证明的给出收敛性定理.

定理 7 设 $f(x)\in C[a,b]$，则 Gauss 求积公式（5.1）是收敛的，即

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

3.6 数值实验及程序

3.6.1 Newton-Cotes 公式数值实验

将积分区间$[a,b]$分为n等分，步长$h=\dfrac{b-a}{n}$，选取等距节点$x_k=a+kh$构造出的插值型求积公式

$$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k)$$

其中$C_k^{(n)}$称为 Cotes 系数. 通过计算可得：

$$C_k^{(n)}=\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq k}}^{n}(t-j)dt\,.$$

编写程序计算各阶 Cotes 系数，并通过 Cotes 系数计算积分.

matlab程序如下：（Newton_Cotes.m）

```
% 计算 Newton-Cotes 系数（n 取 1-8），将系数存储在矩阵 C 中.
% 利用 Newton-Cotes 公式计算函数 f_name 在区间[a,b]的定积分，区间 m 等分.
function I=Newton_Cotes(f_name,a,b,m)
syms t;
C=zeros(8,9); % 矩阵 C 记录 Newton-Cotes 系数
for n=1:8
    for k=0:n
        ff=1;  % 累乘器初值为 1
        for j=0:n
```

```
            ff=ff*(t-j); % 累乘
        end
        ff=ff/(t-k);     % 积分表达式
        C(n,k+1)=(-1)^(n-k)/(n*factorial(k)*factorial(n-k))*int(ff,t,0,n);
    end
end
% 打印 Newton-Cotes 系数表
fprintf(' k=0      k=1       k=2       k=3      k=4      k=5       k=6     k=7      k=8\n')
for i=1:8
    fprintf('n=%2d ',i)
    for j=1:i+1
        fprintf('%12f',C(i,j))
    end
    fprintf('\n')
end
% 利用 Newton-Cotes 公式计算函数 f_name 在区间[a,b]的定积分，区间 m 等分.
I=0;
h=(b-a)/m; % 步长
for k=0:m
    I=I+C(m,k+1)*feval(f_name,a+k*h); % 累加，注意数组下标从 1 开始
end
I=I*(b-a);
```

例 6 计算积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$

解 计算过程如下：

输入：I=Newton_Cotes('f1',0,1,7)

其中 f1.m 为定义的计算 $f(x)=\frac{\sin x}{x}$ 的函数.

程序运行结果：

0.500000　0.500000
0.166667　0.666667　0.166667
0.125000　0.375000　0.375000　0.125000
0.077778　0.355556　0.133333　0.355556　0.077778
0.065972　0.260417　0.173611　0.173611　0.260417　0.065972
0.048810　0.257143　0.032143　0.323810　0.032143　0.257143　0.048810
0.043461　0.207002　0.076563　0.172975　0.172975　0.076563　0.207002　0.043461
0.034885　0.207690　-0.032734　0.370229　-0.160141　0.370229　-0.032734　0.207690
0.034885

I =

0.94608307040605

从计算结果中看到 Cotes 系数在 $n \geq 8$ 时出现负值，所以 $n \geq 8$ 的 Newton-柯斯特公式是不稳定的.为了提高求积精度，通常把积分区间分为若干小区间，在每个小区间上用低阶求积公式，即采用复化求积法.

3.6.2 复化求积法数值实验及程序

计算 $\int_a^b f(x)dx$，一般将区间 $[a,b]$ 划分为 n 等分，分点 $x_k = kh$，$h = \dfrac{b-a}{n}$，$k = 0,1,2,\cdots,n$. 常见的公式有复化梯形公式和复化 Simpson 公式.

1. 复化梯形公式：$\int_a^b f(x)dx \approx T_n = \dfrac{1}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$ $\int_a^b f(x)dx \approx$

2. 复化 Simpson 公式：

$$\int_a^b f(x)dx \approx S_n = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{x+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)]$$

其中：$x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \dfrac{1}{2}h$.

matlab程序如下：（C_Trapezoid.m）

```
function T=C_Trapezoid(f_name,a,b,n)
% f_name 是被积函数，a，b 分别是积分上下限，区间 n 等分
h=(b-a)/n;   %步长
fa=feval(f_name,a);
fb=feval(f_name,b);
T=fa+fb;
for k=1:n-1
    T=T+2*feval(f_name,a+k*h);
end
T=T*h/2;
```

matlab程序如下：（C_Simpson.m）

```
function S=C_Simpson(f_name,a,b,n)
% f_name 是被积函数，a，b 分别是积分上下限，区间 n 等分
h=(b-a)/n;   %步长
fa=feval(f_name,a);
fb=feval(f_name,b);
S=fa+fb;
for k=0:n-1
    S=S+4*feval(f_name,a+k*h+0.5*h);
end
for k=1:n-1
     S=S+2*feval(f_name,a+k*h);
end
S=S*h/6;
```

例 7 分别用两种算法计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$.

解 计算过程如下：

输入：`T=C_trapezoid('f1',0,1,8)`

程序运行结果：

```
T =
   0.94569086358270
```

输入：`S=C_Simpson('f1',0,1,4)`

程序运行结果：

```
S =
   0.94608331088847
```

比较上面两个结果 T_8 与 S_4，它们都需要提供 9 个点上的函数值，计算量基本相同，然而精确度却差别很大，同积分的准确值 I=0.9460831 比较，复化 Simpson 法的结果明显优于复化梯形法的结果.

3.6.3 Romberg 求积数值实验及程序

Romberg 求积计算积分 $\int_a^b f(x)dx$ 过程可见下表（表 3-5）：

表 3-5

k	h	$T_0^{(k)}$	$T_1^{(k)}$	$T_2^{(k)}$	$T_3^{(k)}$	$T_4^{(k)}$	
0	$b-a$	$T_1^{(1)}$					
1	$\frac{b-a}{2}$	$T_0^{(1)}$ ↓→	$T_1^{(1)}$				
2	$\frac{b-a}{4}$	$T_0^{(2)}$ ↓→	$T_1^{(1)}$ ↓→	$T_2^{(0)}$			
3	$\frac{b-a}{8}$	$T_0^{(3)}$ ↓→	$T_1^{(2)}$ ↓→	$T_2^{(1)}$ ↓→	$T_3^{(0)}$		
4	$\frac{b-a}{16}$	$T_0^{(4)}$ ↓→	$T_1^{(3)}$ ↓→	$T_2^{(0)}$ ↓→	$T_3^{(1)}$ ↓→	$T_4^{(0)}$	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋱

1．表中第一列各元素利用公式：

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

计算得到，其中

$$x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(x_k+x_{k+1})=\frac{1}{2}[(a+kh)+(a+(k+1)h)]=a+(k+\frac{1}{2})h ,$$

同时要注意每次递推时，步长 h 减半.

2. 表中其余元素通过公式：

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

进行加速得到.

matlab程序如下：（Romberg.m）

```
function T=Romberg(f_name,a,b,m)
 % 利用 Newton-Cotes 公式计算函数 f_name 在区间[a,b]的定积分，总共递推 n-1 次.
T=zeros(m,m);
h=(b-a);     % 初始步长
T(1,1)=h/2*(feval(f_name,a)+feval(f_name,b));
for i=2:m
    % 逐次增加结点，计算矩阵第一列的元素
    sum=0;
    for k=0:2^(i-2)-1     %增加结点个数依次为 1，2，4，8，……
        sum=sum+feval(f_name,a+(k+1/2)*h);
    end
    T(i,1)=1/2*T(i-1,1)+h/2*sum;      % 递推
        % 每行除了第一列外，其余元素加速得到
    for j=2:i
          T(i,j)=(4^(j-1)/(4^(j-1)-1))*T(i,j-1)-(1/(4^(j-1)-1)*T(i-1,j-1));
    end
    h=h/2;   %步长减半
end
% 打印矩阵 T，即各次计算结果
for i=1:m
    fprintf('k=%2d ',i-1)
    for j=1:i
        fprintf('%12f',T(i,j))
    end
    fprintf('\n')
end
```

例 8 计算积分 $I = \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx$.

解 计算过程如下：

输入：T=Romberg('f2',0,1,6);

其中 f2.m 为定义的计算 $f(x) = x^{\frac{3}{2}}$ 的函数.

程序运行结果：

0.500000

0.426777　　0.402369

0.407018　　0.400432　　0.400303

0.401812	0.400077	0.400054	0.400050		
0.400463	0.400014	0.400009	0.400009	0.400009	
0.400118	0.400002	0.400002	0.400002	0.400002	0.400002

$f(x)=x^{\frac{3}{2}}$ 在 $[0,1]$ 上仅是一次连续可微，从计算结果中看到 Romberg 算法到 $k=5$ 的精度与 Simpson 求积精度相当. 这里 I 的精确值为 0.4 .

习　题　三

1. 确定下列求积公式中待定参数，使其代数精度尽量高.

(1) $\int_{-h}^{h} f(x)dx \approx H_{-1}f(-h)+H_0 f(0)+H_1 f(h)$；

(2) $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{1}{3}[f(-1)+2f(x_1)+3f(x_2)]$

(3) $\int_{0}^{h} f(x)dx \approx \frac{1}{2}h[f(0)+f(h)]+ah^2[f'(0)-f'(h)]$.

2、数值积分公式 $\int_0^3 f(x)dx \approx \frac{3}{2}[f(1)+f(2)]$，是否为插值型求积公式，为什么？又该公式的代数精确度为多少？（插值型求积公式特征）

3. 用辛普生公式求积分 $\int_0^1 e^{-x}dx$ 并估计误差。.

4. 分别利用梯形公式和辛普森公式计算积分 $\int_0^1 e^x dx$ 的近似值，并估计误差.

5. 利用复化梯形公式和同样的函数值的复化辛普生公式计算下列积分，并与准确值进行比较.

（1）$\int_0^1 \frac{x}{4+x^2}dx$， $n=8$　　　　（2）$\int_1^9 \sqrt{x}dx$， $n=4$

6、用 $n=4$ 的复化梯形公式计算积分 $\int_1^2 \frac{1}{x}dx$，并估计误差。

7、设 $f(-1)=1,\ f(-0.5)=4,\ f(0)=6,\ f(0.5)=9,\ f(1)=2$，用复化辛甫生公式计算 $\int_{-1}^1 f(x)dx$，若有常数 M 使 $|f^{(4)}|\le M$，则估计复化辛甫生公式的整体截断误差限。（复化辛甫生公式）

8. 用龙贝格方法计算积分 $\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 e^{-x}dx$，要求误差不超过 10^{-5} (k=3)

9. 试确定常数 A,B,C 和 a，使得数值积分公式 $\int_{-2}^2 f(x)dx \approx Af(-a)+Bf(0)+Cf(a)$ 有尽

可能高的代数精度。试问所得的数值积分公式代数精度是多少？它是否为高斯型的？（代数精度的应用和计算，高斯点的特征）