计算方法及MATLAB实现

郑勋烨　编著

主审：高世臣　褚宝增　王祖朝　王翠香

副审：李少琪　李明霞　赵琳琳　赵俊芳

国防工业出版社

第二节　　辛普生公式和柯提斯公式

- 2.1. 辛普生公式和牛顿 - 柯提斯公式 (Simpson and Newton-Cotes Quadrature)

【定义 1】 牛顿 - 柯提斯公式 (Newton-CotesQuadrature)

对于插值型机械求积公式

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j), j = 0, 1, 2, \cdots, n \tag{2.1}$$

我们已知求积系数是插值基函数在积分区间 (同时也是插值区间) 上的积分：

$$A_j = \int_a^b l_j(x)dx = \int_a^b \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_j)\omega'_{n+1}(x_j)}dx$$

$$= \int_a^b \prod_{k \neq j, k=0}^{n} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}dx,$$

现在选取被积函数 $y=f(x)$ 在区间 $I=[a,b]$ 上的 等距节点剖分：

$$a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_{n-1}<x_n=b$$

这里步长恒定

$h_j=x_{j+1}-x_j\equiv h=\dfrac{b-a}{n}, j=0,1,2,\cdots,n-1$. 即节点可表示为

$$x_j = a + jh, j = 0, 1, 2, \cdots, n \tag{2.3}$$

又由第一积分中值定理，存在中值点 $\xi \in [a, b]$, 使得

$$\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b - a) \tag{2.4}$$

此式结合插值型机械求积公式，取系数 $A_j = (b - a)C_j$, 即

$$C_j = \frac{A_j}{b-a} = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{k\neq j,k=0}^{n} \frac{x-x_k}{x_j-x_k}dx \tag{2.5}$$

称为 柯提斯系数 (Cotes Codfficient). 显然由 $\sum_{j=0}^{n} A_j \equiv b-a$ 易知 $\sum_{j=0}^{n} C_j \equiv 1$. 即我们将系数 A_j 作了 “标准化” 处理后获得的凸线性组合系数 $C_j > 0$ 即是 柯提斯系数 (Cotes Codfficient).

而在 <u>等距节点</u> 剖分下的 插值型机械求积公式 成为

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j f(x_j), j = 0, 1, 2, \cdots, n \qquad (2.6)$$

称为 牛顿 - 柯提斯公式 (Newton-Cotes Quadrature).

【定理 1】 柯提斯系数（Cotes Codfficient） 柯提斯系数实用计算公式为

$$C_j = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{k\neq j,k=0}^{n} \frac{x-x_k}{x_j-x_k}dx = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{k\neq j,k=0}^{n} \frac{t-k}{j-k}dt \tag{2.7}$$

真正计算柯提斯系数时我们喜欢采用实用公式

$$C_j = \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{k\neq j,k=0}^{n} \frac{t-k}{j-k}dt$$

【证明】

作自变量代换 $x = a + th$, 则 $dx = hdt = \frac{b-a}{n}dt$; 且由 $x \in [a, b]$ 得 $t \in [0, n]$. 从而

$$\begin{aligned} C_j &= \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{k\neq j, k=0}^{n} \frac{x - x_k}{x_j - x_k}dx \\ &= \frac{1}{b-a}\cdot\frac{b-a}{n}\int_0^n \prod_{k\neq j, k=0}^{n} \frac{t-k}{j-k}dt \\ &= \frac{1}{n}\int_0^n \prod_{k\neq j, k=0}^{n} \frac{t-k}{j-k}dt \end{aligned} \tag{2.8}$$

【证毕】

【 1 】 n=1. 梯形公式 (Trapezoidal Quadrature) 考虑 $n=1$ 即双求积节点的牛顿 **-** 柯提斯公式. 对 $j=0,1$**,** 步长 $h=b-a$**,** 节点 $x_0=a, x_1=b$**,** 利用 **Cotes** 系数实用计算公式有

$$C_0 = \frac{1}{1}\int_0^1 \frac{t-1}{0-1}dt = -\int_0^1 (t-1)dt = -\frac{1}{2}(t-1)^2|_0^1 = \frac{1}{2} \tag{2.9a}$$

$$C_1 = \frac{1}{1}\int_0^1 \frac{t-0}{1-0}dt = \int_0^1 tdt = \frac{1}{2}t^2|_0^1 = \frac{1}{2} \tag{2.9b}$$

故此时牛顿 - 柯提斯公式即为梯形公式：

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{1} C_j f(x_j)$$
$$= (b-a)(\frac{1}{2}f(a)+\frac{1}{2}f(b)) = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) \tag{2.10}$$

【 2 】 n=2. 辛普生公式 (Simpson Quadrature) 考虑 $n=2$ 即三等距求积节点的牛顿 - 柯提斯公式. 对 $j=0,1,2$, 步长 $h=\dfrac{b-a}{2}$, 节点 $x_0=a, x_1=\dfrac{a+b}{2}, x_2=b$, 利用 **Cotes** 系数实用计算公式有

$$
\begin{aligned}
C_0 &= \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{(t-1)(t-2)}{(0-1)(0-2)}dt \\
&= \frac{1}{4}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{1}{4}(\frac{1}{3}t^3 - \frac{3}{2}t^2 + 2t)|_0^2 = \frac{1}{6}
\end{aligned}
\tag{2.11a}
$$

$$C_1 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{(t-0)(t-2)}{(1-0)(1-2)}dt$$
$$= -\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt = -\frac{1}{2}(\frac{1}{3}t^3 - t^2)|_0^2 = \frac{2}{3} \tag{2.11b}$$

$$C_2 = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{(t-0)(t-1)}{(2-0)(2-1)}dt$$
$$= \frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt = \frac{1}{4}(\frac{1}{3}t^3 - \frac{1}{2}t^2)|_0^2 = \frac{1}{6} \tag{2.11c}$$

称此时的牛顿 - 柯提斯公式为 辛普生公式 (Simpson Quadrature):

$$\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{2} C_j f(x_j) \\
&= (b-a)(\frac{1}{6}f(a) + \frac{2}{3}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)) \\
&= \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))
\end{aligned} \tag{2.12}$$

【 3 】 **n=3.** 考虑 $n=3$ 即四等距求积节点的牛顿 - 柯提斯公式. 对 $j=0,1,2,3$, 步长 $h=\dfrac{b-a}{3}$, 节点 $x_0=a, x_1=a+\dfrac{b-a}{3}=\dfrac{2a+b}{3}, x_2=a+2\cdot\dfrac{b-a}{3}=\dfrac{a+2b}{3}, x_3=b$. 利用 **Cotes** 系数实用计算公式，此时的牛顿 - 柯提斯公式为：

$$
\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{3} C_j f(x_j) \\
&= (b-a)(\frac{1}{8}f(a) + \frac{3}{8}f(\frac{2a+b}{3}) + \frac{3}{8}f(\frac{a+2b}{3}) + \frac{1}{8}f(b)) \\
&= \frac{b-a}{8}(f(a) + 3f(\frac{2a+b}{3}) + 3f(\frac{a+2b}{3}) + f(b))
\end{aligned} \tag{2.13}
$$

此公式因缺乏节点的对称性，不甚常用，因而无名.

【 4 】 n=4. 柯提斯公式 (Cotes Quadrature) 考虑 $n=4$ 即五等距求积节点的牛顿 - 柯提斯公式. 对 $j=0,1,2,3,4$, 步长 $h=\dfrac{b-a}{4}$, 节点 $x_0=a, x_1=a+\dfrac{b-a}{4}=\dfrac{3a+b}{4}, x_2=a+2\cdot\dfrac{b-a}{4}=\dfrac{a+b}{2}, x_3=a+3\cdot\dfrac{b-a}{4}=\dfrac{a+3b}{4}, x_4=b$.

利用 Cotes 系数实用计算公式，此时的牛顿 - 柯提斯公式特别地称为 柯提斯公式 (Cotes Quadrature) :

$$\begin{aligned}
&\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{j=0}^{4} C_j f(x_j) \\
&= (b-a)(\frac{7}{90}f(a) + \frac{32}{90}f(\frac{3a+b}{4}) + \frac{12}{90}f(\frac{a+b}{2}) \\
&+ \frac{32}{90}f(\frac{a+3b}{4}) + \frac{7}{90}f(b)) \\
&= \frac{b-a}{90}(7f(a) + 32f(\frac{3a+b}{4}) \\
&+ 12f(\frac{a+b}{2}) + 32f(\frac{a+3b}{4}) + 7f(b))
\end{aligned} \tag{2.14}$$

一般地，可以依据 Cotes 系数实用计算公式，算得 Cotes 系数列表如下．但对于 $n \geq 8$ 的高阶牛顿 - 柯提斯公式，系数将出现负值，造成数值不稳定．因而实际应用的是若干低阶牛顿 - 柯提斯公式，如上述梯形公式、 Simpson 公式和 Cotes 公式等.

低阶柯提斯系数表

n	C_j					
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$			
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	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$

【定理 2】 偶阶牛顿 - 柯提斯公式的代数精度 $n=2m$ 的偶阶牛顿 - 柯提斯公式至少具有 $2m+1$ 次代数精度.

【证明略】

- 2.3. **低阶牛顿 - 柯提斯公式余项估计** Residue Estimation

  我们已知对于梯形公式

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) - \frac{f^{''}(\zeta)}{12}(b-a)^3 \qquad (2.26)$$

令步长 $h=b-a$, 其积分余项为

$$R_T(f)=-\frac{f^{''}(\zeta)}{12}(b-a)^3=-\frac{f^{''}(\zeta)}{12}h^3 \tag{2.27}$$

上界估计为

$$|R_T(f)|\leq\frac{M_2}{12}h^3 \tag{2.28}$$

现在来导出辛普生公式 (Simpson Quadrature) 的余项估计.

【 定理 3 】 辛普生公式 (Simpson Quadrature) **的余项估计**

被积函数 $f(x)$ 在积分区间 $[a,b]$ 上具有 3 阶连续导函数并且在开区间 (a,b) 上存在 4 阶导函数：
$f^{(3)}(x) \in C^0[a,b] \bigcap C^1(a,b)$, 则 辛普生积分余项 为：

$$R_S(f) = -\frac{f^{(4)}(\zeta)}{2880}(b-a)^5 = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\zeta) \tag{2.29}$$

从而上界估计为

$$|R_S(f)| \le \frac{(b-a)^5}{2880}M_4 = \frac{b-a}{180}M_4 h^4 \tag{2.30}$$

其中 $\zeta = \zeta(x) \in (a,b)$ 是依赖于 x 的某个内点，步长
$h = \dfrac{b-a}{2}$.

【证明】

因辛普生公式具有 3 次代数精度，对于 3 次 Hermite 插值多项式 $H(x)$ 能精确成立．设 $H(x)$ 满足端点 $x_0=a, x_2=b$ 和中节点 $c=x_1=\dfrac{a+b}{2}$ 处的基本插值条件和中节点处的一阶密切条件：

$$H(x_j)=f(x_j),\quad j=0,1,2,\quad H^{'}(c)=f^{'}(c) \tag{2.31}$$

则由 Simpson 公式及基本插值条件有

$$\begin{aligned}&\int_a^b H(x)dx=\frac{b-a}{6}(H(a)+4H(\frac{a+b}{2})+H(b))\\&=\frac{b-a}{6}(H(a)+4H(c)+H(b))\\&=\frac{b-a}{6}(f(a)+4f(c)+f(b))\\&=S_f\end{aligned} \tag{2.32}$$

从而由本类 3 次 Hermite 插值多项式 $H(x)$ 的插值余项表达

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

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

利用被积函数 $(x-a)(x-c)^2(x-b)$ 在积分区间 $[a,b]$ 上保号非正，由积分中值定理我们有

$$
\begin{aligned}
R_S(f) &= \int_a^b f(x)dx - S_f \\
&= \int_a^b f(x)dx - \int_a^b H(x)dx \\
&= \int_a^b (f(x) - H(x))dx \\
&= \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-c)^2(x-b)dx \\
&= \frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)dx \\
&= \frac{f^{(4)}(\zeta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)dx \\
&= -\frac{f^{(4)}(\zeta)}{2880}(b-a)^5
\end{aligned} \tag{2.34}
$$

其中 $\zeta=\zeta(x)\in(a,b)$ 是依赖于 x 的某个内点. 故 辛普生积分余项 为:

$$R_S(f)=-\frac{f^{(4)}(\zeta)}{2880}(b-a)^5=-\frac{b-a}{180}h^4f^{(4)}(\zeta) \tag{2.35}$$

【证毕】

【定理 4】 柯提斯公式 (Cotes Quadrature) **的余项估计**
被积函数 $f(x)$ 在积分区间 $[a, b]$ 上具有 5 阶连续导函数并且在开区间 (a, b) 上存在 6 阶导函数：
$f^{(5)}(x) \in C^0[a, b] \bigcap C^1(a, b)$, 则 柯提斯积分余项 为：

$$R_C(f) = -\frac{f^{(6)}(\zeta)}{1935360}(b-a)^7 = -\frac{2(b-a)}{945}h^6 f^{(6)}(\zeta) \qquad (2.36)$$

从而上界估计为

$$|R_S(f)| \le \frac{2(b-a)}{945} M_6 h^6 \tag{2.37}$$

其中 $\zeta = \zeta(x) \in (a,b)$ 是依赖于 x 的某个内点，步长 $h = \dfrac{b-a}{4}$.

【证明略】

- 2.4. **例题选讲**

除了本节所述最基本的方法之外，实用的电算方法还有 *自适应求积法* (Self-Adaptative Quadrature)，即对积分区间作适当剖分，在不同区间段上根据积分核函数 $f(x)$ 的性质作不同处理，应用不同求积公式，以期在较少计算量的前提下达到精度要求．比如自适应辛普生积分公式有现成的 Matlab 命令可供调用．命令格式为：

quad('fun',a,b,tol)

其中 fun 是积分核函数 $f(x)$ ，积分区间 [a,b] ， tol 是绝对误差，缺省时默认为 10^{-6}.

【例 1】 辛普生积分及余项估计 设函数 $f(x) = e^{-x}$，求它在区间 $[0,1]$ 上的辛普生积分

$$\int_0^1 e^{-x} dx \approx S = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)) \qquad (2.38)$$

及余项上界 $|R_S(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} M_4$.

【**解**】 由辛普生积分公式

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-x}dx &\approx S = \frac{b-a}{6}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b))\\ &= \frac{1-0}{6}(e^0+4e^{-\frac{0+1}{2}}+e^{-1})\\ &= \frac{1}{6}(1+4e^{-\frac{1}{2}}+e^{-1})\\ &\approx 0.63233368000366\end{aligned} \tag{2.39}$$

因

$$M_4 = max|f^{(4)}(x)| = max|e^{-x}| = 1, \quad x \in [0,1] \tag{2.40}$$

故余项上界

$$|R_S(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880}M_4 = \frac{1}{2880} \approx 3.4722222222222222e-004 \tag{2.41}$$

【例 2】 梯形公式和辛普生公式的比较 设函数 $f(x) = lnx$，求 $f(x)$ 的在区间 $[1, 2]$ 上的梯形公式和辛普生公式积分，并与真值比较，估计误差.

【解】

由分部积分公式，积分真值为

$$I = \int_1^2 lnxdx = (xlnx - x)|_1^2 = 2ln2 - 1 \approx 0.38629436111989 \tag{2.42}$$

（１）利用梯形公式

$$
\begin{aligned}
\int_1^2 lnxdx &\approx T = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)) \\
&= \frac{2-1}{2}(ln1+ln2) \\
&= \frac{1}{2}ln2 \\
&\approx 0.34657359027997
\end{aligned}
\tag{2.43}
$$

因

$$M_2 = max|f^{('')}(x)| = max|\frac{1}{x^2}| = 1, \quad x \in [1,2] \tag{2.44}$$

故余项上界

$$|R_T(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{12}M_2 = \frac{1}{12} \approx 0.0833333333333 \tag{2.45}$$

直接估计绝对误差则有

$$R_T(f) = I - T \approx 0.03972077083992 \tag{2.46}$$

（２）利用辛普生公式

$$\begin{aligned}\int_1^2 lnxdx &\approx s = \frac{b-a}{6}(f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b))\\ &= \frac{2-1}{6}(ln1+4ln\frac{1+2}{2}+ln2)\\ &= \frac{1}{6}(4ln\frac{3}{2}+ln2)\\ &= \frac{1}{6}(4ln3-3ln2)\\ &\approx 0.38583460216543\end{aligned} \tag{2.47}$$

因

$$M_4 = max|f^{(4)}(x)| = max|\frac{6}{x^4}| = 6, \quad x \in [1, 2] \tag{2.48}$$

故余项上界

$$|R_S(f)| \le \frac{(b-a)^5}{2880} M_4 = \frac{6}{2880} \approx 0.00208333333333333 \tag{2.49}$$

直接估计绝对误差则有

$$R_S(f) = I - S \approx 4.597589544568237e - 004 \tag{2.50}$$

比较结果可见辛普生公式比梯形公式精确很多.