第 4 章 数 值 积 分

4.1　数值积分的一般问题

1.　问题的提出

考察数值积分问题，即线性泛函

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x，\quad -\infty\le a<b\le+\infty \qquad (4.1.1)$$

的近似计算问题.

Newton-Leibnitz(牛顿-莱布尼兹)公式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = F(x)\Big|_a^b, \quad F'(x) = f(x).$$

数值积分必要性：

(1) $f(x)$ 是由测量或数值计算给出的数据表时，Newton-Leibnitz 公式无法应用.

(2) $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 不能用有限形式来表达，不能应用 Newton-Leibnitz 公式.

例如 $f(x) = \sqrt{1+x^3}, \dfrac{\sin x}{x}, \sin x^2, \cos x^2, \dfrac{1}{\ln x}, e^{-x^2}$ 等等.

(3) 原函数复杂.

例如

$$\int_{\sqrt{3}}^{\pi}\frac{1}{1+x^4}\mathrm{d}x=\{\frac{1}{4\sqrt{2}}\ln\frac{x^2+\sqrt{2}x+1}{x^2-\sqrt{2}x+1}$$

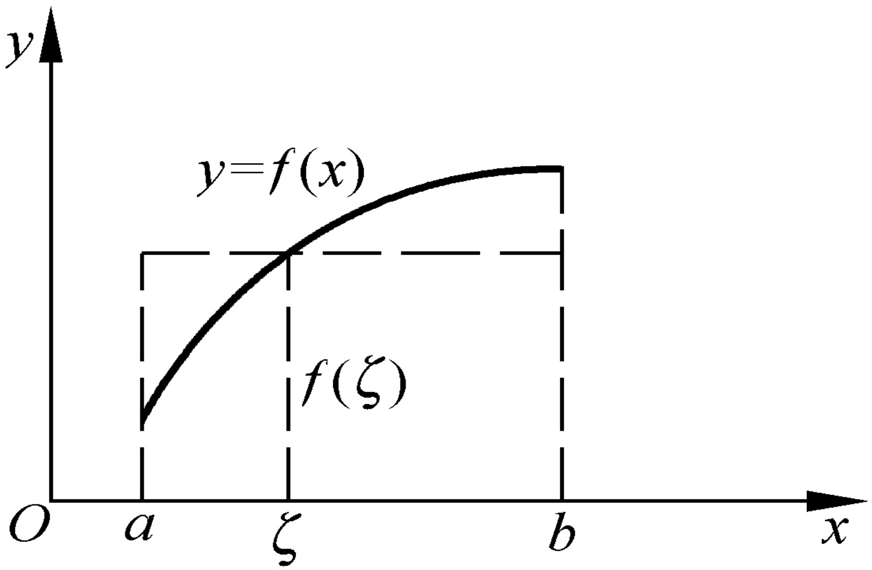
$$+\frac{1}{2\sqrt{2}}[\arctan(\sqrt{2}x+1)+\arctan(\sqrt{2}x-1)]\}\Big|_{\sqrt{3}}^{\pi}$$

2. 数值积分的基本思想

由积分中值定理知，在积分区间$[a,b]$内存在一点ξ，成立

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

就是说，底为 $b-a$ 而高为 $f(\xi)$ 的矩形面积恰等于所求曲边梯形的面积$I(f)$.



4

图

问题在于点ξ的具体位置一般是不知道的，因而难以准确算出$f(\xi)$的值.

将$f(\xi)$称为区间 $[a,b]$上的平均高度.

这样，只要对平均高度$f(\xi)$提供一种算法，相应地便获得一种数值求积方法.

用积分区间两端点“高度”$f(a)$与$f(b)$的算术平均作为平均高度$f(\xi)$的近似值,这样导出的数值求积公式是梯形公式(几何意义参看图 4.1).

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

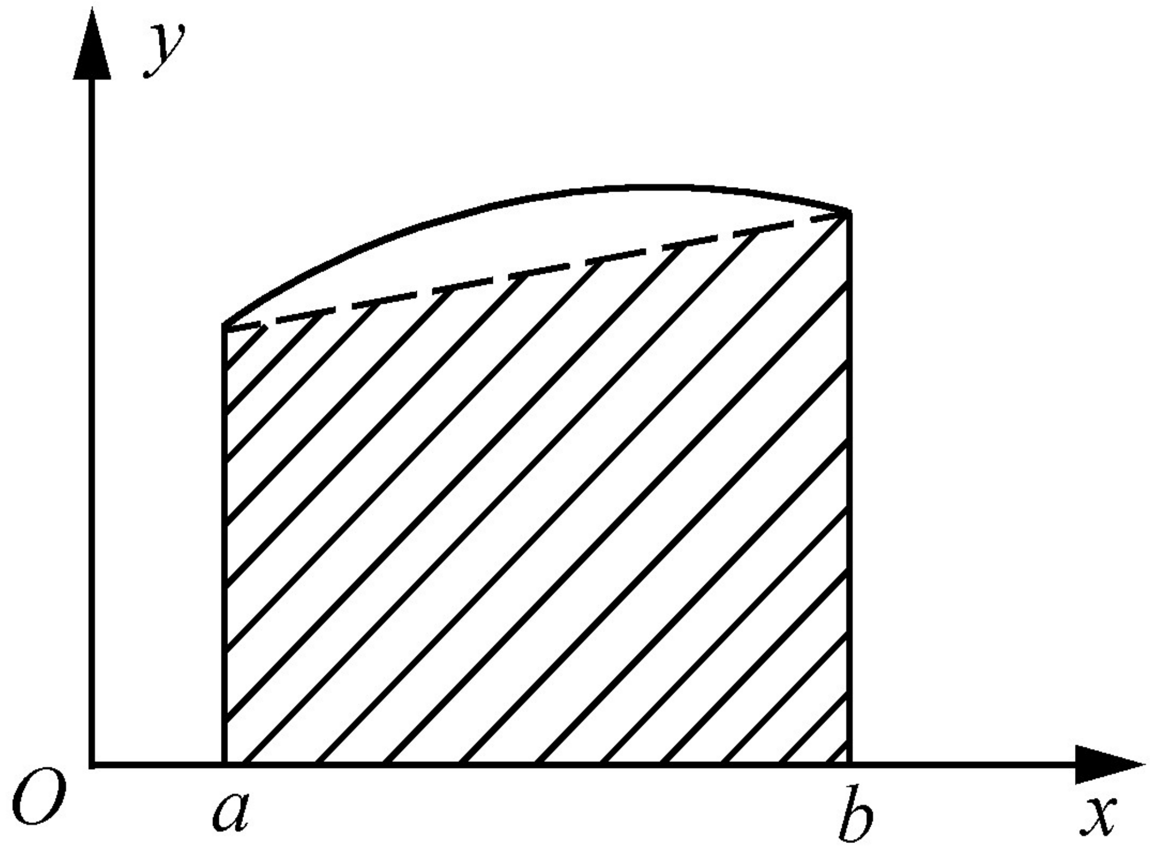


图 4.1　梯形公式

用积分区间中点的“高度”$f(\frac{a+b}{2})$ 近似地取代平均高度 $f(\xi)$，则又可导出中矩形公式(简称矩形公式)

$$R=(b-a)f(\frac{a+b}{2})$$

一般地，可以在积分区间 $[a,b]$ 上适当选取某些互异节点 x_j 然后用 $f(x_j)$ 加权平均 $Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_jf(x_j)$ 作为平均高度 $f(\xi)$ 的近似值，这样构造出的求积公式具有下列形式：

$$I(f)\approx\sum_{j=0}^{n}H_jf(x_j)$$

或写成

$$I(f)=Q(f)+E(f) \qquad (4.1.4)$$

H_j --求积系数，x_j--求积节点，$E(f)$ --求积余项(或误差)

注：（1）求积节点 $x_j\in[a,b](j=0,1,2,\cdots,n)$ 互异.

（2）H_j仅与节点x_j的选取有关，它们不依赖$f(x)$的具体形式.

数值积分公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)\text{----机械求积公式} \qquad (4.1.6)$$

特点：将积分求值问题归结为函数值的计算，这就避开了Newton-Leibnitz 公式需要寻求原函数的困难.

目标：确定H_j 及 x_j，用 $Q(f)$ 逼近 $I(f)$ 达到要求精度.

关键问题：如何确定 x_j 和 H_j ？

如何建立误差 $E(f)=I(f)-Q(f)$ 估计式?

3. 代数精度与插值型求积公式

【定义 4.1】 如果求积公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)$$

对任意 $f(x)\in M_r$（M_r 表示次数不超过 r 次的多项式集合），均能精确成立（即$E(f)=0$），而当$f(x)$是某一个 $r+1$ 次多项式时，此求积公式不能精确成立，则称此公式具有 $\boldsymbol{r}$ 次代数精度，或称此公式是 $\boldsymbol{r}$ 阶的.

$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)$ 至少具有 r 次代数精度$\Leftrightarrow$

当 $f(x)=1,x,\cdots,x^r$ 时，数值积分公式精确成立. 即

$$
\begin{cases}
\sum_{j=0}^{n}H_j=b-a,\\
\sum_{j=0}^{n}H_j x_j=\frac{1}{2}(b^2-a^2),\\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
\sum_{j=0}^{n}H_j x_j^r=\frac{1}{r+1}(b^{r+1}-a^{r+1}).
\end{cases}
$$

共有 $r+1$ 个等式， $2n+2$ 个待定常数. $r<n$ 时，有无穷多组解 $H_0,H_1,\cdots,H_n$.

问题：用 $n+1$ 个互异求积节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$，可以构造具有多高代数精度的求积公式呢?

【定理 4.1】 对于任意给定的 $n+1$ 个互异节点

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

总存在一组求积系数 $H_0,H_1,\cdots,H_n$，使求积公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n} H_j f(x_j)$$

至少具有 n 次代数精度.

【证明】 记 $L_n(x)$ 为 $f(x)$ 以 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为插值节点的 n 次 Lagrange 插值多项式，即

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^{n} l_j(x) f(x_j)$$

其中 $l_j(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}$ 是插值基函数. 取

$$H_j = \int_a^b l_j(x) \mathrm{d}x, \quad j = 0, 1, \cdots, n$$

为求积系数，于是构造数值求积公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)$$ -----插值型求积公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)=\sum_{j=0}^{n}\left[\int_a^b l_j(x)\mathrm{d}x\right]f(x_j)=\int_a^b\left[\sum_{j=0}^{n}l_j(x)f(x_j)\right]\mathrm{d}x=\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x$$

显然，H_j 只依赖 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 和积分区间，而与 $f(x)$无关.

$$I(f)=Q(f)+E(f)$$

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x+E(f)$$

$E(f)$是求积误差或求积余项.

求积误差

$$E(f)=I(f)-Q(f)\quad =\int_a^b[f(x)-L_n(x)]\mathrm{d}x=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\zeta_x)p_{n+1}(x)\mathrm{d}x$$

其中 $p_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$，$\zeta_x\in(a,b)$ 是 x 的函数.

当 $f(x)\in M_n$ 时 $E(f)=0$，因此求积公式至少具有 n 次代数精度.

【定理 4.2】 机械求积公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)$$

至少具有 n 次代数精度的充要条件是：它是插值型的. 适当选

择 x_j 和 H_j，能使公式

$$Q(f)=\sum_{j=0}^{n}H_j f(x_j)$$

代数精度最高达到 $r=2n+1$.

4.2 等距节点的 Newton-Cotes 公式

1. Newton-Cotes(牛顿-柯特斯)公式

Newton-Cotes 闭型公式:

把 $[a,b]$ 区间 n 等分. 对插值型求积公式, 取求积节点

$x_i = a + ih$, $h = \dfrac{b-a}{n}$, $i = 0,1,\cdots,n$

注: 节点等距, 对计算求积系数带来方便.

令 $x = a + th$, 求积系数 H_j 可以表示成

$$H_j = \int_a^b l_j(x)\mathrm{d}x = \frac{(-1)^{n-j}h}{j!(n-j)!}\int_0^n \prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}(t-i)\mathrm{d}t$$

$$C_j = \frac{H_j}{b-a}$$ --- Cotes 系数

于是， Newton-Cotes 求积公式即为

$$Q_n(f) = (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j f(x_j)$$

当 $n=1$ 时，

$$C_0 = -\int_0^1 (t-1)\mathrm{d}t = \frac{1}{2}, \qquad C_1 = \int_0^1 t\mathrm{d}t = \frac{1}{2}$$

得到梯形公式

$$Q_1(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)].$$

当 $n=2$ 时，

$$C_0=C_2=\frac{1}{6},\quad C_1=\frac{4}{6}.$$

Simpson(辛甫生)公式(或抛物线公式)

$$Q_2(f) = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{b+a}{2}) + f(b)].$$

几何意义如图 4.2 所示.

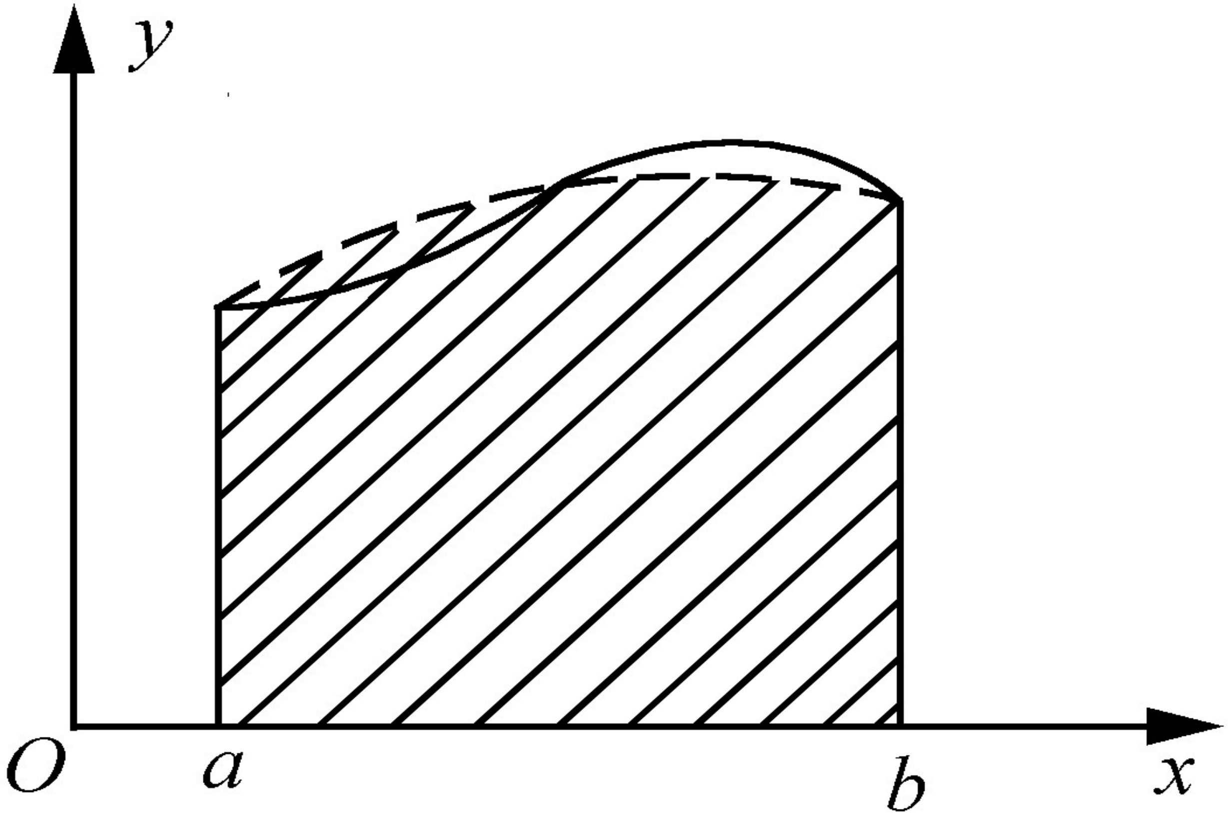


图 4.2 Simpson(辛甫生)公式

当 $n=4$ 时，得 Cotes 公式

$$Q_4(f)=\frac{2h}{45}[7f(a)+32f(a+h)+12f(a+2h)+32f(a+3h)+7f(b)]$$

注： $\sum_{j=0}^{n} C_j = 1$

$$\left(\sum_{j=0}^{n} C_j = \sum_{j=0}^{n} \frac{H_j}{b-a} = \frac{1}{b-a}\sum_{j=0}^{n} H_j = \frac{b-a}{b-a} = 1\right)$$

求积系数 $H_j = W_j A h$， A 为有理数， W_j 均为整数.

表 4.1 Newton-Cotes 闭型公式的系数与余项

n	A	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	$E(f)$
1	1/2	1	1					$-\frac{1}{12}h^3 f''(\zeta)$
2	1/3	1	4	1				$-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\zeta)$
3	3/8	1	3	3	1			$-\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\zeta)$
4	2/45	7	32	12	32	7		$-\frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\zeta)$

5	5/288	19	75	50	50	75	19	$-\frac{275}{12096}h^7 f^{(6)}(\zeta)$
6	1/140	41	216	27	272	27	216	$-\frac{9}{1400}h^9 f^{(8)}(\zeta)$
7	7/17280	751	3577	1323	2989	2989	1323	$-\frac{8183}{518400}h^9 f^{(8)}(\zeta)$
8	4/14175	989	5888	−928	10496	−4540	10496	
9	9/89600	2857	15741	1080	19344	5778	5788	
10	5/2998376	16067	106300	−48525	272400	−260550	427368	

开型 Newton-Cote 公式:

把 $[a,b]$ 区间 n 等分，令 $x_i = a + ih$，$h = \dfrac{b-a}{n}$，取

$$x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}$$

作为求积节点.

Newton-Cotes 开型公式表达式

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^{n-1} H_j f(x_j) + E(f) = (b-a)\sum_{j=1}^{n-1} C_j f(x_j) + E(f)$$

当 $n=2$ 时，只有一个节点 x_1，得**中点公式**或**中矩形公式**

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = (b-a) f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(\zeta),\ \zeta \in (a,b)$$

或
$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a) f(\frac{a+b}{2})$$

关于$n=2,3,\cdots,6$的有关系数见表 4.2.

表 4.2　Newton-Cotes 开型公式的系数与余项

n	A	W_1	W_2	W_3	$E(f)$
2	2	1			$\frac{1}{3}h^3 f''(\zeta)$
3	3/2	1	1		$\frac{3}{4}h^3 f''(\zeta)$
4	4/3	2	−1	2	$\frac{15}{45}h^5 f^{(4)}(\zeta)$
5	5/24	11	1	1	$\frac{95}{144}h^5 f^{(4)}(\zeta)$
6	3/10	11	−14	26	$\frac{41}{140}h^7 f^{(6)}(\zeta)$

注：除中点公式外，Newton-Cote 开型公式很少有什么好处.

2. Newton-Cotes 公式数值稳定性

数值稳定性问题：计算中舍入误差对计算结果产生的影响.

$f(x_j)$----精确值，$\tilde{f}(x_j)$----计算值，ε_j-----舍入误差

即 $f(x_j)-\tilde{f}(x_j)=\varepsilon_j$，设 $\varepsilon=\max_j|\varepsilon_j|$，$(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j\tilde{f}(x_j)$ 代替

$(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_jf(x_j)$ 所产生的误差为

$$\eta=(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j f(x_j)-(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j\tilde{f}(x_j)=(b-a)\sum_{j=0}^{n}C_j\varepsilon_j$$

当 Cotes 系数全为正时，有

$$|\eta|\le(b-a)\varepsilon\sum_{j=0}^{n}C_j=(b-a)\varepsilon$$

即数值计算是稳定的.

当 Cotes 系数有正有负时，$|\eta|=(b-a)\sum_{j=0}^{n}|C_j\varepsilon_j|$，成立

$$\sigma_n=\sum_{j=0}^{n}|C_j|>\sum_{j=0}^{n}C_j=1$$

并且随着n的增大，σ_n变得越来越大，此时舍入误差对求积公式的影响就越坏．即数值计算是不稳定的．

（1）闭型公式只有当 $n \le 7$, $n = 9$ 时，Cote 系数才是全正的

（2）开型公式只有对 $n = 2, 3, 5$ 时系数才全是正的．

注：高阶 Newton-Cotes 公式数值计算不稳定！

3. Newton-Cotes 公式的余项（闭型）

【引理】Newton-Cotes 公式至少具有 n 次代数精度；如果 n 是偶数，则其代数精度能提高到 $n+1$ 次．

【证明】因为 Newton-Cotes 公式

$$I(f)=Q_n(f)+E(f)$$

是等距节点的插值型求积公式，前半部分自然成立.

证后半部分：设 n 为偶数，取 $f(x)=x^{n+1}$，由误差公式

$$E(f)=I(f)-Q_n(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\left[f(x)-L_n(x)\right]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\zeta_x)p_{n+1}(x)\mathrm{d}x$$

有

$$E(x^{n+1})=\int_a^b p_{n+1}(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\mathrm{d}x$$

作代换 $x=a+th$，上式变为

$$E(x^{n+1})=h^{n+2}\int_0^n\prod_{j=0}^{n}(t-j)\mathrm{d}t$$

因为 n 是偶数， $\dfrac{h}{2}=k$ 是整数，再作代换 $u=t-k$，得到

$$E(x^{n+1})=h^{n+2}\int_{-k}^{k}\prod_{j=1}^{k}(u^2-j^2)\mathrm{d}u$$

注意到上式中被积函数是奇函数，从而证得.

$$E(x^{n+1}) = 0$$

注：偶数阶 Newton-Cotes 公式代数精度能提高到 $n+1$ 次.

验证 Simpson 公式

$$Q_2(f) = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{b+a}{2}) + f(b)].$$

代数精度正好为 3.

当 $f(x) = x^4$ 时，$\int_0^1 x^4 \mathrm{d}x = \frac{1}{5}.$ 而用 Simpson 公式有

$$\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{b+a}{2})+f(b)]=\frac{1}{6}[0+4\bullet(\frac{1}{2})^4+1^4]=\frac{5}{24}$$

所以 $E(x^4)\neq 0$.

Newton-Cotes 公式余项：

(1) 当 n 为偶数时，设 $f(x)\in C^{n+2}[a,b]$，则总存在 $\zeta\in(a,b)$，使

$$E(f)=\frac{f^{(n+2)}(\zeta)}{(n+2)!}\int_a^b xp_{n+1}(x)\mathrm{d}x$$

(2) 当 n 为奇数时，设 $f(x)\in C^{n+1}[a,b]$，则总存在 $\zeta\in(a,b)$，使

$$E(f)=\frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!}\int_a^b p_{n+1}(x)\mathrm{d}x$$

【定理 4.3】 Newton-Cotes 公式当 n 为奇数时，有 n 次代数精度；当 n 为偶数时，有 $n+1$ 次代数精度.

(1) 梯形公式余项 $(n=1)$

$$E(f)=I(f)-Q_1(f)=\int_a^b[f(x)-L_1(x)]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{2!}\int_a^b f''(\zeta_x)(x-a)(x-b)\mathrm{d}x，a<\zeta_x<b$$

函数 $(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 内不变号，由积分第一中值定理，存在 $\eta\in(a,b)$，使得梯形公式余项

$$E(f)=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)\mathrm{d}x=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad \eta\in(a,b)$$

(2) Simpson 公式余项 $(n=2)$

Simpson 公式具有 3 次代数精度，即对于次数不超过 3 的多项式 $f(x)$，求积公式

$$Q_2(f)=\frac{h}{3}[f(a)+4f(a+h)+f(b)].\qquad h=\frac{b-a}{2}$$

精确成立.

构造 3 次多项式 $H(x)$，使其满足

$$H(a)=f(a),\qquad H(a+h)=f(a+h),$$

$$H(b)=f(b),\qquad H'(a+h)=f'(a+h)$$

于是，有

$$\int_a^b H(x)\mathrm{d}x=\frac{h}{3}[H(a)+4H(a+h)+H(b)]=Q_2(f)\ .$$

故余项可表达为

$$E(f)=I(f)-Q_2(f)=\int_a^b[f(x)-H(x)]dx$$

利用 Hermite 插值余项公式

$$E(f)=I(f)-Q_2(f)=\int_a^b[f(x)-H(x)]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\zeta_x)(x-a)[x-(a+h)]^2(x-b)\mathrm{d}x，a<\zeta_x<b$$

函数 $(x-a)[x-(a+h)]^2(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上不变号，应用积分第一中值定理，存在 $\eta\in(a,b)$，使得 Simpson 公式余项

$$E(f)=\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b(x-a)[x-(a+h)]^2(x-b)\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{f^{(4)}(\eta)}{90}(\frac{b-a}{2})^5, \quad \eta\in(a,b)$$

习题 1：确定求积公式中待定参数，使其代数精度尽量高.

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx \approx A_{-1}f(-h)+A_0 f(0)+A_1 f(h)$$

解：求解这类题目，一般都应按照求积公式代数精度的定义去做. 即先列出参数满足的代数方程组，解出这些待定参数，然后用确定的求积公式判断其具有的代数精度.

求积分公式中含有三个待参数，利用代数精度定义，分别

令 $f(x)=1,\ x,\ x^2$ 时，公式准确成立，于是得关于 A_{-1}, A_0, A_1 方程组

$$A_{-1}+A_0+A_1=2h$$

$$\left(A_{-1}\times 1+A_0\times 1+A_1\times 1=\int_{-h}^{h}1\mathrm{d}x=2h,\quad f(x)=1\right)$$

$$-hA_{-1}+0+hA_1=0$$

$$\left(A_{-1}\times(-h)+A_0\times 0+A_1\times h=\int_{-h}^{h}x\mathrm{d}x=0,\quad f(x)=x\right)$$

$$h^2A_{-1}+0+h^2A_1=\frac{2}{3}h^3$$

$$\left(A_{-1}\times(-h)^2+A_0\times 0^2+A_1\times h^2=\int_{-h}^{h}x^2\mathrm{d}x=\frac{2}{3}h^3,\quad f(x)=x^2\right)$$

解此方程组，得

$$A_{-1}=\frac{1}{3}h,\ \mathrm{A}_0=\frac{4}{3}h, A_1=\frac{1}{3}h$$

于是得到至少具有 2 阶代数精度的数值积分公式

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx \approx \frac{1}{3}hf(-h)+\frac{4}{3}hf(0)+\frac{1}{3}hf(h)$$

令 $f(x)=x^3$，左边$=0$，右边$=0$，左边=右边；

令 $f(x)=x^4$，左边$=\frac{2}{5}h^5$，右边$=\frac{2}{3}h^5$，左边$\neq$右边，故此数值积分公式的代数精度为3次.

4. 复化的 Newton-Cotes 公式(改善求积精度)

基本思想：将积分区间 $[a,b]$ 划分成若干个子区间，在每个子区间上，用低阶的 Newton-Cotes 公式进行数值求积，然后将每个子区间上的数值求积的结果求和就得到整个区间 $[a,b]$ 上的数值积分.

区间划分原则：将区间 $[a,b]$ 分成 n 等份，步长 $h=\dfrac{b-a}{n}$，分点为 $x_i=a+ih(i=0,1,2,\cdots,n)$. 一般取 $n=2^k(k=0,1,2,\cdots)$.

（1）复化梯形公式

将区间 n 等分，在每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上构造梯形公式，则得复化梯形公式

$$T_n = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+f(x_{i+1})] = \frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=0}^{n-1}f(x_i)+f(b)]$$

再将区间 $2n$ 等分，即把区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 变为两个子区间

$[x_i, x_{i+\frac{1}{2}}]$，$[x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+1}]$，便得到 $2n$ 等分复化梯形公式

$$T_{2n} = \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+f(x_{i+\frac{1}{2}})] + \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1})]$$

$$= \frac{h}{4}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+2f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1})]$$

且有递推式

$$T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+U_n)$$——梯形公式递推公式

记 $U_n=h\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{1}{2}}).$

复化梯形公式的误差：

$$E_n(f)=-\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\eta_i)=-\frac{(b-a)h^2}{12}\bullet\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\eta_i),\qquad \eta_i\in(x_i,x_{i+1})$$

设函数 $f(x)\in C^2[a,b]$，则有

$$\min_{x\in[a,b]}f''(x)\le\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\eta_i)\le\max_{x\in[a,b]}f''(x)$$

根据闭区间上连续函数的介值定理，存在 $\eta\in(a,b)$，使

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

于是，得复化梯形公式余项(1 阶方法)

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

（2）复化 Simpson 公式

将区间 $[a,b]$ 分成 n 等份，取 $h=\dfrac{b-a}{n}$. 在每个小区间 $[x_i,x_{i+1}]$ 上应用 Simpson 公式，则有

$$S_n=\frac{h}{6}\sum_{i=0}^{n-1}[f(x_i)+4f(x_{i+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1})]$$

或写为

$$S_n = \frac{h}{6}[f(a) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + 2\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

进一步容易得到

$$S_n = \frac{1}{3}T_n + \frac{2}{3}U_n$$

注意到 $T_{2n} = \frac{1}{2}(T_n + U_n)$，消去$U_n$，便有

$$S_n = \frac{4T_{2n} - T_n}{4-1}$$

设 $f(x) \in C^4[a,b]$，可得复化的 Simpson 余项公式（3 阶方法）

$$E_n(f) = -\frac{(b-a)}{180} \bullet (\frac{h}{2})^4 f^{(4)}(\eta), \qquad \eta \in (a,b)$$

同理可得，复化 Cotes 公式

$$C_n=\frac{h}{90}[7f(a)+32\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{1}{4}})+12\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{1}{2}})$$

$$+32\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+\frac{3}{4}})+14\sum_{i=0}^{n-1}f(x_i)+7f(b)]$$

容易导出 S_n，S_{2n} 和 C_n 的递推公式

$$C_n=\frac{4^2S_{2n}-S_n}{4^2-1}$$

当 $f(x)\in C^6[a,b]$ 时，复化 Cotes 公式余项（5 阶方法）

$$E_n(f)=-\frac{2(b-a)}{945}\bullet(\frac{h}{4})^6f^{(6)}(\eta)\text{，}\qquad \eta\in(a,b)$$

显然，上述几个公式的余项都有 $\lim\limits_{n\to+\infty(h\to0)}E_n(f)=0$.

注：即复化梯形公式，复化 Simpson 公式及复化 Cotes 公式都是收敛的.

【例 4.1】利用复化梯形公式计算积分

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

的近似值 T_8. 并且利用递推公式 $T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+U_n)$，求出复化的 Simpson 公式 S_4 的值，且都与积分 $I=0.9460831$ 真值比较(所谓真值指其每一位数字都是有效数字).

【解】 记被积函数为 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$，积分区间 $[a,b]=[0,1]$.

采用步长对分法. $f(1)=0.8414709$, 对 $f(x)$ 在 $x=0$ 的值补充定义

$f(0)=1(\lim\limits_{x\to 0}f(x)=\lim\limits_{x\to 0}\dfrac{\sin x}{x}=1)$，应用梯形公式，于是得

$$T_1=\frac{1}{2}[f(0)+f(1)]=0.9207355$$

然后将区间二等分，再求出中点的函数值

$$f(\frac{1}{2})=0.9588510$$

利用梯形公式递推公式($T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+U_n)$)，有

$$T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}f(\frac{1}{2})=0.9397933$$

进一步二分求积区间，并计算新分点上的函数值

$$f(\frac{1}{4})=0.9896158, \qquad f(\frac{3}{4})=0.9088516$$

再利用$T_{2n}=\frac{1}{2}(T_n+U_n)$有

$$T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}[f(\frac{1}{4})+f(\frac{3}{4})]=0.9445135$$

相仿地，可得到

$$T_8 = 0.9456909$$

再应用递推公式$S_n = \frac{4T_{2n} - T_n}{4-1}$，求得

$$S_4 = \frac{4T_8 - T_4}{3} = 0.9460834$$

与真值相比，T_8具有二位有效数字，而S_4具有六位有效数字.

习题 2：若利用复化梯形求积公式求 $\int_0^1 e^{-x} dx$ 的近似值，问要将积分区间 $[0,1]$ 分成多少等份，才能保证计算结果有四位有效数字？若利用复化 Simpson 求积公式如何？

解：在本题中，$a=0,b=1,f(x)=e^{-x}$，则 $f''(x)=e^{-x}$，$M=\max\limits_{a\le x\le b}|f''(x)|=1$.

求计算结果有四位有效数字，就是要求误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-4}$.

（1）首先，由复化梯形公式的误差估计式

$$R_{T_n}(f)=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta),\eta\in(a,b)$$

得

$$\left|R_{T_n}(f)\right|\le\frac{b-a}{12}h^2\max_{a\le x\le b}|f''(x)|<\frac{1}{2}\varepsilon,\quad \varepsilon=10^{-4}$$

解得

$$h<\sqrt{\frac{6\varepsilon}{M(b-a)}}=0.017320508$$

即

$$n=[\frac{b-a}{h}]=58$$

因此，若用复化梯形公式求 $\int_0^1 \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$ 的近似值，必须将区间[0,1]分成 58 等份才能保证计算结果有四位有效数字，当然函数值还需要具有 5 位有效数字.

（2）由复化 Simpson 公式的误差估计式

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

得

$$\left|R_{S_n}(f)\right| \le \frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \max_{a\le x\le b}\left|f^{(4)}(x)\right| < \frac{1}{2}\varepsilon$$

解得

$$h < 2\left(\frac{90\varepsilon}{M(b-a)}\right)^{\frac{1}{4}}$$

此处

$$M=\max_{0\le x\le 1}\left|f^{(4)}(x)\right|=1$$

于是得

$$h<2\left(\frac{90\varepsilon}{M(b-a)}\right)^{\frac{1}{4}}=0.518994012, \qquad n=\left[\frac{b-a}{h}\right]=2$$

因此，若用复化 Simpson 公式求$\int_0^1 \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$的近似值，只须将区间$[0,1]$分成 2 等份就能保证计算结果有四位有效数字，当然函数值还需要具有 5 位有效数字.

本题表明，为达到相同的精度，复化 Simpson 求积公式所需的计算量远远小于复化梯形求积公式所需的计算量。

4.3 Romberg(龙贝格)积分法

梯形法计算简单但收敛慢，本节讨论如何提高收敛速度以节省计算量.

根据复化梯形公式的余项表达式，有

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

$$I-T_{2n}=-\frac{(b-a)(\frac{h}{2})^2}{12}f''(\overline{\eta}), \qquad \overline{\eta}\in(a,b)$$

假定 $f''(\eta)\approx f''(\overline{\eta})$，则有

$$\frac{I-T_{2n}}{I-T_n} \approx \frac{1}{4}$$

移项整理，得

$$I-T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

由此可见，当二分前后的两个积分值 T_{2n} 与 T_n 相当接近，就可以保证计算结果 T_{2n} 的误差很小.

这样直接用计算结果来估计误差的方法通常称作误差的**事后估计法**.

若用这个事后误差值作为 T_{2n} 的一种补偿，可以期望所得到的

$$T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$$

是 $I(f)$ 的一个更好近似值.根据前面讨论知，这个值恰好是复化 Simpson 积分值

$$S_n=\frac{4T_{2n}-T_n}{4-1}$$

继续对 S_n S_{2n} 实施上述过程，可以得到复化 Cotes 公式

$$C_n = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2 - 1}$$

以此类推，可以得到 Romberg 公式

$$R_n = \frac{4^3 C_{2n} - C_n}{4^3 - 1}$$

4.3.1 Richardson 外推法

由梯形公式出发，将区间 $[a,b]$ 逐次二分可提高求积公式的精度，上述加速过程还可继续下去.

把区间 $[a,b]$ 分为 n 等分时，复化梯形公式余项

$$I-T_n=-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta), \qquad \eta\in(a,b), \quad h=\frac{b-a}{n}$$

若记 $T_n=T(h)$，则把区间 $[a,b]$ 分为 $2n$ 等分时，即有 $T_{2n}=T(\frac{h}{2})$，由复化梯形公式余项

$$T(h)=I+\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta)，且 \lim_{h\to 0}T(h)=T(0)=I$$

若 $f(x)\in C^\infty[a,b]$，则梯形公式余项可展成级数形式. 即有

$$T(h)=I+\alpha_1 h^2+\alpha_2 h^4+\cdots+\alpha_l h^{2l}+\cdots$$

系数 $\alpha_l(l=1,2,\ldots)$ 与 h 无关. 上式表明 $T(h)$ 是 $O(h^2)$ 阶（1 阶方法）.

在上式中，若用 $\frac{h}{2}$ 代替 h，则有

$$T(\frac{h}{2}) = I + \alpha_1 \frac{h^2}{4} + \alpha_2 \frac{h^4}{16} + \cdots + \alpha_l (\frac{h}{2})^{2l} + \cdots$$

为了提高计算精度，组合 $T(h), T(\frac{h}{2})$，消去 h^2，记

$$T_1(h) = \frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{4-1} = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots$$

这里系数$\beta_l(l=1,2,\ldots)$以及后面出现的系数γ_k, δ_k均与 h 无关. 这样构造的$T_1(h)$与积分值$I(f)$近似的阶为$O(h^4)$（3 阶方法）.

其实，这样构造的序列$T_1(h), T_1(\frac{h}{2}), \ldots$，就是 Simpson 积分值序列$S_n, S_{2n}, \ldots$.

根据 $T_1(h) = \dfrac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{4-1} = I + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \beta_3 h^8 + \cdots$

可以得到

$$T_1(\frac{h}{2}) = I + \beta_1 \frac{h^4}{16} + \beta_2 \frac{h^6}{64} + \beta_3 (\frac{h}{2})^8 + \cdots$$

同理，为了提高计算精度，组合 $T_1(h), T_1(\frac{h}{2})$，消去 h^4，记

$$T_2(h)=\frac{16T_1(\frac{h}{2})-T_1(h)}{16-1}=\frac{4^2T_1(\frac{h}{2})-T_1(h)}{4^2-1}=I+\gamma_1 h^6+\gamma_2 h^8+\cdots$$

这样构造出的序列 $\{T_2(h)\}$ ，其实就是 Cotes 公式序列 $C_n, C_{2n},\ldots.$ 它与积分值 $I(f)$ 的逼近阶为 $O(h^6)$（5 阶方法）.

如此继续下去，每加速一次，误差的量级便提高 2 阶.

一般地，若记 $T_0(h)=T(h)$，则有

$$T_m(h)=\frac{4^m T_{m-1}(\frac{h}{2})-T_{m-1}(h)}{4^m-1} \qquad (4.3.17)$$

经过$m(m=1,2,\ldots)$次加速后，积分余项为

$$T_m(h) == I+\delta_1 h^{2(m+1)}+\delta_2 h^{2(m+2)}+\cdots$$

上述处理方法称为理查森（Richardson）外推加速方法.

令$n=2^k(k=0,1,2,\cdots)$, $T_{0,k}$表示将$[a,b]$区间2^k等分后应用复化梯形公式的数值积分值. $T_{m,k}$表示序列$\{T_{0,k}\}$经过$m(m=1,2,\ldots)$次加速值，则依据Richardson外推思想及（4.3.17）式，得到

Romberg算法

$$T_{m,k}=\frac{4^m T_{m-1,k+1}-T_{m-1,k}}{4^m-1}, \quad m=0,1,2,\cdots,k;k=i-m. \quad (4.3.18)$$

Romberg 方法具体实现过程：

第一步，在区间 $[a,b]$ 上，用梯形公式求得

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

第二步，将区间 $[a,b]$ 对分，应用梯形递推公式求得 $T_{0,1}$，由（4.3.18）式，计算得

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

求得 Simpson 公式的值. 置 $i=1$，转第四步；

第三步，对区间 $[a,b]$ 作等分 2^i，记相应的复化梯形公式递推公式求得值为 $T_{0,i}$，然后按(4.3.18)式计算序列$\{T_{m,k}\}$，由此求得 $T_{i,0}$；

第四步，若$|T_{i,0}-T_{i-1,0}|\le\varepsilon$（$\varepsilon$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.

表 4.3 Romberg 方法计算表（T 数表）

$$
\begin{array}{llllll}
T_{0,0} \rightarrow & T_{0,1} \rightarrow & T_{0,2} \rightarrow & T_{0,3} \rightarrow & \cdots & \rightarrow T_{0,i} \\
\hline
T_{1,0} & T_{1,1} & T_{1,2} & \cdots & \iddots & \\
T_{2,0} & T_{2,1} & \cdots & \iddots & & \\
T_{3,0} & \cdots & \iddots & & & \\
\vdots & \iddots & & & & \\
\hline
T_{i,0} & & & & &
\end{array}
$$

注：复化梯形公式是 Romberg 算法的基础.

Romberg 积分法优点：高速有效，易于编程计算.

Romberg 积分法缺点：每次对分区间后，要对被积函数 $f(x)$ 计算新分点处的值，而这些函数值的个数是成倍增加的.

【例 4.2】 用 Romberg 积分法，计算定积分 $\int_1^3 \frac{dx}{x}$ 并与真值 $\ln 3 = 1.098612289$ 比较.

【解】计算 T 数表如下

1.333333333 1.166666667 1.116666667 1.103210678 1.099767702

1.111111112 1.100000000 1.098725349 1.098620043

1.099259259 1.098640372 1.098613022

1.098630548 1.098612588

1.098612518

与真值比较，可见精确到六位小数.