第5章

数值积分与数值微分

5.1 数值积分概论

5.1.1 数值积分的基本思想

实际问题中常常需要计算积分。在统计中,如连续型随机变量的概率分布函数、连续型随机变量或函数的数字特征、贝叶斯统计推断中后验分布,都和积分相联系。

高等数学中熟悉的微积分基本定理,对于积分

$$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{5.1.1}$$

只要找到被积函数 $f(x)$的原函数 $F(x)$,便可以根据牛顿-莱布尼茨(Newton-Leibniz)公式计算积分,即

$$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=F(b)-F(a) \tag{5.1.2}$$

但实际使用这种求积方法往往比较困难,因为大量的被积函数,诸如 $\sin x/x\ (x\neq 0)$、$\cos(x^2)$、e^{-x^2} 等,其原函数不能用初等函数表达,故不能用上述公式计算。另外,当 $f(x)$是由测量或数值计算给出一张数据表时,牛顿-莱布尼茨公式也不能直接运用。因此,有必要介绍和研究积分的数值计算问题。

由积分中值定理可知,在积分区间$[a,b]$内存在一点 ξ 满足

$$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=(b-a)f(\xi) \tag{5.1.3}$$

相当于曲边梯形面积 I 等于曲边梯形的底乘以 $f(x)$在区间$[a,b]$上的平均高度 $f(\xi)$。这样,只要提供一种算法估计平均高度 $f(\xi)$,相应地便获得一种数值求积方法。

如果用两端点“高度”$f(a)$与 $f(b)$的算术平均值作为平均高度 $f(\xi)$的近似值,可导出梯形求积公式(the Trapezoidal Rule)为

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2} \tag{5.1.4}$$

如果改用区间中点 $c=(a+b)/2$ 的“高度”$f(c)$近似地取代平均高度 $f(\xi)$,可导出中矩形求积公式(简称矩形求积公式)为

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{5.1.5}$$

更一般地,可以在区间$[a,b]$上适当选取某些节点 $x_k(k=0,1,\cdots,n)$,然后用 $f(x_k)$

$(k=0,1,\cdots,n)$的加权平均得到积分的近似值，即

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{5.1.6}$$

其中，x_k 为求积节点，A_k 为求积系数，也称为伴随节点 x_k 的积分权重。积分权重仅与节点 x_k 的选取有关，而不依赖被积函数 $f(x)$的具体形式。

这类数值积分方法通常称为机械求积，其特点是将积分问题归结为函数值的计算，这样避开了牛顿-莱布尼茨公式需要求原函数的困难。

5.1.2　代数精度的概念

数值求积方法是一种求积分的近似方法。为保证精度，希望求积公式能对“尽可能多”的函数准确成立，这就提出了代数精度的概念。

定义 1　如果某个求积公式对于次数小于或等于 m 的多项式均能成立，但对于 $m+1$ 次多项式就不一定准确，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

例 1　判断以下求积公式的代数精度。

(1) $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)\dfrac{[f(a)+f(b)]}{2}$(梯形求积公式)。

(2) $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx (b-a)f\left(\dfrac{a+b}{2}\right)$(矩形求积公式)。

(3) $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \dfrac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\dfrac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$(辛普森求积公式)。

解：(1) $\int_a^b 1\mathrm{d}x = b-a=(b-a)\dfrac{[f(a)+f(b)]}{2}=(b-a)\dfrac{[1+1]}{2}$

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

$$\int_a^b x^2\mathrm{d}x = \frac{1}{3}(b^3-a^3)\neq(b-a)\frac{[f(a)+f(b)]}{2}=(b-a)\frac{[a^2+b^2]}{2}$$

它具有 1 次代数精度。

(2) $\int_a^b 1\mathrm{d}x = b-a=(b-a)f\left(\dfrac{a+b}{2}\right)=(b-a)$

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

$$\int_a^b x^2\mathrm{d}x = \frac{1}{2}(b^3-a^3)\neq(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)=(b-a)\left(\frac{a+b}{2}\right)^2$$

它具有 1 次代数精度。

(3) $\int_a^b 1\mathrm{d}x = b-a=\dfrac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\dfrac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$

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

$$=\frac{(b-a)}{6}\left(a+4\left(\frac{a+b}{2}\right)+b\right)$$

$$\int_a^b x^2\mathrm{d}x = \frac{1}{2}(b^3-a^3)=\frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

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

$$=\frac{(b-a)}{2}(a^2+ab+b^2)$$

$$\int_a^b x^3\mathrm{d}x=\frac{1}{4}(b^4-a^4)=\frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]$$

$$=\frac{(b-a)}{6}\left(a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right)$$

$$=\frac{(b-a)}{6}\left(a^3+\frac{1}{2}a^3+\frac{3}{2}a^2b+\frac{3}{2}ab^2+\frac{1}{2}b^3+b^3\right)$$

$$=\frac{(b-a)}{4}(a^3+a^2b+ab^2+b^3)$$

另外，可验证求积公式对 x^4 不成立(特例可见例 2 中第 2 问)，故它具有 3 次代数精度。

由定义可验证该例中梯形求积公式和矩形求积公式均具有 1 次代数精度，辛普森求积公式具有 3 次代数精度。

一般地，欲使求积公式(5.1.6)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，即满足

$$\begin{cases}\displaystyle\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b 1\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}A_k=b-a\\ \displaystyle\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b x\,\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}A_kx_k=\frac{1}{2}(b^2-a^2)\\ \qquad\vdots\\ \displaystyle\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^b x^m\,\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}A_kx_k^m=\frac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1})\end{cases}\tag{5.1.7}$$

如果事先选取求积节点，如以区间$[a,b]$的等距分点作为节点，这时取 $m=n$，求解线性方程组(5.1.7)中求积系数 $A_k(k=0,1,\cdots,n)$，则求积公式至少具有 n 次代数精度。为了构造形如式(5.1.6)的求积公式，原则上要确定参数求积节点 x_k 和求积系数 A_k。

例 2 给定下面求积公式

$$\int_{-1}^{1}f(x)\mathrm{d}x\approx w_0f(-1)+w_1f(0)+w_2f(1)$$

(1) 试确定 w_0、w_1、w_2，使求积公式的代数精度尽量高。

(2) 对于确定的 w_0、w_1、w_2，上面求积公式至少有几次代数精度。

解：(1) $\int_{-1}^{1}f(x)\mathrm{d}x=\int_{-1}^{1}1\mathrm{d}x=2=w_0+w_1+w_2$

$$\int_{-1}^{1}x\,\mathrm{d}x=\int_{-1}^{1}x\,\mathrm{d}x=0=-w_0+w_2$$

$$\int_{-1}^{1}x^2\mathrm{d}x=\frac{2}{3}=w_0+w_2$$

解出 $w_0=\frac{1}{3}$、$w_1=\frac{4}{3}$、$w_2=\frac{1}{3}$。因此，$\int_{-1}^{1}f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{1}{3}[f(-1)+4f(0)+f(1)]$

(2) 代数精度为

$$\int_{-1}^{1} x^3 \mathrm{d}x = 0 = \frac{1}{3}[-1 + 4 \times 0 + 1]$$

$$\int_{-1}^{1} x^4 \mathrm{d}x = \frac{2}{5} \neq \frac{1}{3}[1 + 0 + 1]$$

它具有 3 次代数精度，其实该求积公式也是例 1 中第(3)个问题的求积公式的特例。本章后续会学习到，该求积公式为辛普森公式的特例，即 2 阶牛顿-柯特斯公式，而偶数阶牛顿-柯特斯公式至少具有 3 次代数精度。

5.1.3 插值型求积公式

插值型求积公式的基本思想是先求被积函数的插值函数，将被积函数变为较容易积分的多项式函数进行积分。因此，需要给定一组节点

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

且已知函数 $f(x)$在这些节点上的函数值 $f(x_k)(k=0,1,\cdots,n)$。根据这些节点和节点上的函数值构造插值多项式，即

$$f(x) \approx L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) \tag{5.1.8}$$

由于多项式 $L_n(x)$的基函数积分是容易计算的，可以对式(5.1.8)两边取积分，从而可得 $I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ 的近似，即

$$\begin{aligned} I_n &= \int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x \\ &= \int_a^b \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \end{aligned} \tag{5.1.9}$$

其中

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x \tag{5.1.10}$$

注意，权重与函数 $f(x)$无关。

5.1.4 求积公式的余项

下面考虑插值型求积公式的余项，即

$$\begin{aligned} R_n(f) &= \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \int_a^b [f(x) - L_n(x)]\mathrm{d}x \\ &= \int_a^b R_n(x)\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{5.1.11}$$

其中，$R_n(x)$为 $L_n(x)$关于 $f(x)$的插值余项，即

$$
\begin{aligned}
R_n(x) &= f(x) - L_n(x) \\
&= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x) \\
&= f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x] w_{n+1}(x)
\end{aligned} \tag{5.1.12}
$$

这里 $\xi \in (a,b)$ 与 x 有关，

$$
w_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_k) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \tag{5.1.13}
$$

令 $K = \int_a^b \frac{w_{n+1}(x)}{(n+1)!} \mathrm{d}x$，插值型求积公式的余项可记为

$$
\begin{aligned}
R_n(f) &= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w_{n+1}(x) \mathrm{d}x \\
&= f^{(n+1)}(\xi) \int_a^b \frac{w_{n+1}(x)}{(n+1)!} \mathrm{d}x = K f^{(n+1)}(\xi)
\end{aligned} \tag{5.1.14}
$$

由式(5.1.14)可知，K 与被积函数 $f(x)$ 无关。

根据含 $n+1$ 个节点的插值余项式(5.1.12)，如果被积函数 $f(x)$ 为最高次数不超过 n 次的多项式，因为插值余项 $R_n(x)$ 等于零，故插值型求积公式的余项 $R_n(f)$ 为零。根据求积公式的代数精度定义，插值型求积公式至少有 n 次代数精度。

对于如果插值型求积式(5.1.9)的代数精度为 $m(m \geqslant n)$，根据定义 1，即找最小的 $l(l \geqslant n)$ 使得当 $f(x) = x^l$ 时，$R_n(x^l) = \int_a^b x^l \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^l \neq 0$，而当 $f(x) = x^j$ 时，$R_n(x^j) = \int_a^b x^j \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^j = 0 (j = 0, 1, \cdots, l-1)$。找出满足上述条件的最小的 l 后，可知插值型求积式(5.1.9)的代数精度为 $m = l - 1$，即 $l = m + 1$。也就是说，当 $f(x) = x^{m+1}$ 时，插值型求积式的余项可表示为

$$
R_n(x^{m+1}) = \int_a^b x^{m+1} \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1} = K f^{(m+1)}(\eta) \neq 0 \tag{5.1.15}
$$

注意，K 为不依赖 $f(x)$ 的待定系数，$\eta \in [a,b]$，$f^{(m+1)}(\eta) = (m+1)!$，故可解出

$$
K = \frac{1}{(m+1)!} \left[\int_a^b x^{m+1} \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k x_k^{m+1} \right] \tag{5.1.16}
$$

对于一般的被积函数，只需要将式(5.1.16)求得的 K 代入式(5.1.17)，便可计算含 $n+1$ 个节点插值型求积公式，近似计算 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上积分的余项 $R_n(f)$，即

$$
R_n(f) = \int_a^b f(x) \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = K f^{(m+1)}(\eta), \quad \eta \in [a,b] \tag{5.1.17}
$$

例 3 计算以下求积公式的余项。

(1) $\int_a^b f(x) \mathrm{d}x \approx (b-a) \frac{[f(a) + f(b)]}{2}$（梯形求积公式）。

(2) $\int_a^b f(x) \mathrm{d}x \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$（矩形求积公式）。

解： 由例 1 可知，梯形求积公式和矩形求积公式的代数精度均为 1。下面先采用式(5.1.16)计算梯形求积公式的 K，即

$$K=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{3}(b^3-a^3)-(b-a)\frac{(a^2+b^2)}{2}\right]=-\frac{1}{12}(b-a)^3$$

于是可得梯形求积公式的余项为

$$R_n(f)=-\frac{1}{12}(b-a)^3f''(\eta),\quad \eta\in[a,b] \tag{5.1.18}$$

再采用式(5.1.16)计算矩形求积公式的 K,即

$$K=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{3}(b^3-a^3)-(b-a)\left(\frac{a+b}{2}\right)^2\right]=\frac{1}{24}(b-a)^3$$

于是可得矩形求积公式的余项为

$$R_n(f)=\frac{1}{24}(b-a)^3f''(\eta),\quad \eta\in[a,b] \tag{5.1.19}$$

5.1.5 插值型求积公式的收敛性与稳定性

定义 2 在求积式(5.1.6)中,若

$$\lim_{\substack{n\to\infty\\h\to 0}}\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{5.1.20}$$

其中,$h=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}\{x_i-x_{i-1}\}$,则称求积式(5.1.6)是收敛的。

在求积式(5.1.6)中,由于计算 $f(x_k)$ 可能产生误差 δ_k,实际得到 $\tilde{f}(x_k)$,即 $f(x_k)=\tilde{f}(x_k)+\delta_k$,记

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_kf(x_k),\quad \tilde{I}_n(\tilde{f})=\sum_{k=0}^{n}A_k\tilde{f}(x_k) \tag{5.1.21}$$

如果对任意小正数 $\varepsilon>0$,只要误差 $|\delta_k|$ 充分小就有

$$|I_n(f)-\tilde{I}_n(\tilde{f})|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}(x_k)]\right|\leqslant\varepsilon \tag{5.1.22}$$

表明求积式(5.1.6)是稳定的,由此给出下面定义。

定义 3 对任给 $\varepsilon>0$,若 $\exists\delta>0$,只要 $|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)|<\delta(k=0,1,\cdots,n)$,式(5.1.22)就成立,则称求积式(5.1.6)是稳定的。

定理 1 若求积式(5.1.6)中系数 $A_k>0(k=0,1,\cdots,n)$,则此求积式是稳定的。

证明: 对任给 $\varepsilon>0$,若取 $\delta=\varepsilon/(b-a)$,都要求 $|f(x_k)-\tilde{f}(x_k)|<\delta(k=0,1,\cdots,n)$,则有

$$\begin{aligned}|I_n(f)-\tilde{I}_n(\tilde{f})|&=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}(x_k)]\right|\\&\leqslant\sum_{k=0}^{n}|A_k||f(x_k)-\tilde{f}(x_k)|\\&\leqslant\delta\sum_{k=0}^{n}A_k\\&=\delta(b-a)=\varepsilon\end{aligned} \tag{5.1.23}$$

式(5.1.23)倒数第二个等式成立是由式(5.1.7)中第一个等式而得到。由定义 3 可知,求积式(5.1.6)是稳定的。该定理说明,如果所有求积系数均大于 0,就能保证求积公式的稳定性。

5.2 牛顿-柯特斯公式

5.2.1 柯特斯系数与辛普森公式

牛顿-柯特斯公式(Newton-Cotes Formulas)是梯形公式的推广。将积分区间$[a,b]$划分为n等分,步长为$h=(b-a)/n$,共计$n+1$个节点,即$x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,n)$,基于$n+1$个节点及其对应的函数值$f(x_k)(k=0,1,\cdots,n)$,可构建插值型求积公式

$$I_n(x)=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k) \tag{5.2.1}$$

其中

$$\begin{aligned}A_k&=\int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}\mathrm{d}x\\&\overset{\text{积分变换：}x=a+th}{=}\frac{b-a}{n}\int_0^n\frac{\prod\limits_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)}{\prod\limits_{j=0,j\neq k}^{n}(k-j)}\mathrm{d}t\\&=\frac{b-a}{n\prod\limits_{j=0,j\neq k}^{n}(k-j)}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)\mathrm{d}t\\&=\frac{(b-a)(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)\mathrm{d}t,\quad k=0,1,\cdots,n\end{aligned} \tag{5.2.2}$$

为将式(5.2.1)写成类似梯形公式的形式,将各个求积系数A_k中因子$(b-a)$提出至式(5.2.1)求和符号外面,插值型求积公式之牛顿-柯特斯公式为

$$I_n(x)=(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \tag{5.2.3}$$

其中柯特斯系数为

$$C_k^{(n)}=A_k/(b-a)=\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)\mathrm{d}t,\quad k=0,1,\cdots,n \tag{5.2.4}$$

由于式(5.2.4)是多项式的积分,柯特斯系数的计算不会遇到实质性的困难。

当$n=1$时,共计2个节点,分别为$x_0=a,x_1=b$,根据式(5.2.4)得

$$C_0^{(1)}=-1\int_0^1(t-1)\mathrm{d}t=\frac{1}{2},C_1^{(1)}=\int_0^1 t\mathrm{d}t=\frac{1}{2} \tag{5.2.5}$$

将其代入式(5.2.3),即为梯形求积公式。

当$n=2$时,共计3个节点,分别为$x_0=a,x_1=(a+b)/2,x_2=b$,根据式(5.2.4)得

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)\mathrm{d}t=\frac{1}{6} \tag{5.2.6}$$

$$C_1^{(2)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)\mathrm{d}t=\frac{4}{6} \tag{5.2.7}$$

$$C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)\mathrm{d}t=\frac{1}{6} \tag{5.2.8}$$

将其代入式(5.2.3)得到的相应的求积公式称为辛普森公式，即

$$S=\frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \tag{5.2.9}$$

而 $n=4$ 时的牛顿-柯特斯公式则特别称为柯特斯公式，其形式为

$$C=\frac{(b-a)}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)] \tag{5.2.10}$$

其中，$x_k=a+kh(k=0,1,\cdots,4)$，步长 $h=(b-a)/4$。

表 5.2.1 列出了 $n\leqslant 8$ 的柯特斯系数。当 $n=8$ 时，柯特斯系数有正有负，这时积分的稳定性得不到保证，即初始数据误差将会引起计算结果误差增大。事实上，当 $n\geqslant 10$ 时，柯特斯系数均出现负值。因此，在实际应用中，一般不使用高阶牛顿-柯特斯公式。

表 5.2.1　柯特斯系数

n	$C_k^{(n)}$								
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	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{12}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

5.2.2　偶数阶求积公式的代数精度

作为插值型求积公式的 n 阶牛顿-柯特斯公式，至少有 n 次代数精度。从例 1 可以看出，1 阶牛顿-柯特斯公式，即梯形公式具有 1 次代数精度；2 阶牛顿-柯特斯公式，即辛普森公式具有 3 次代数精度。一般地，可以证明以下结论。

定理 2　当 n 为偶数时，n 阶牛顿-柯特斯公式至少有 $n+1$ 次代数精度。

证明： 只需验证，当 n 为偶数时，n 阶牛顿-柯特斯公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 的余项为零。因为 $f^{(n+1)}(\xi)=(n+1)!$，按照余项式(5.1.11)有

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

$$
\begin{aligned}
&=\int_a^b w_{n+1}(x)\mathrm{d}x \\
&\overset{令 x=(a+b)/2+uh}{=} \frac{b-a}{n}\int_{-n/2}^{n/2}\left[\prod_{j=0}^{n}((a+b)/2+uh)-((a+b)/2+(j-n/2)h)\right]\mathrm{d}u \\
&=h^{n+2}\int_{-n}^{n}\left[\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)\right]\mathrm{d}u
\end{aligned}
\tag{5.2.11}
$$

令

$$
g(u)=\prod_{j=0}^{n}\left(u+\frac{n}{2}-j\right)\overset{令 l=j-n/2}{=}\prod_{l=-n/2}^{n/2}(u-l) \tag{5.2.12}
$$

因为

$$
\begin{aligned}
g(-u)&=\prod_{l=-n/2}^{n/2}(-u-l) \\
&=(-1)^{n+1}\prod_{l=-n/2}^{n/2}(u+l) \\
&\overset{k=-l}{=}(-1)^{n+1}\left(\prod_{k=-n/2}^{n/2}(u-k)\right)=(-1)^{n+1}g(u)
\end{aligned}
\tag{5.2.13}
$$

因此，当 n 为偶数时，$g(u)$为奇函数，n 阶牛顿-柯特斯公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 的余项式(5.2.12)为零。

5.2.3 牛顿-柯特斯公式的余项

一般地，当 n 为偶数时，n 阶牛顿-柯特斯公式有 $n+1$ 次代数精度；当 n 为奇数时，n 阶牛顿-柯特斯公式有 n 次代数精度。根据插值型求积公式的余项表达式可得

$$
\begin{aligned}
R(f)&=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x-(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}f(x_k) \\
&=\begin{cases} K_{n+2}f^{(n+2)}(\eta) & n \text{ 为偶数}, \\ K_{n+1}f^{(n+1)}(\eta) & n \text{ 为奇数}, \end{cases}\quad \eta\in[a,b]
\end{aligned}
\tag{5.2.14}
$$

注意，K_{n+2} 和 K_{n+1} 为不依赖 $f(x)$的待定系数。

当 n 为偶数时，可令 $f(x)=x^{n+2}$，$f^{(n+2)}(\eta)=(n+2)!$，故可解出

$$
K_{n+2}=\frac{1}{(n+2)!}\left[\int_a^b x^{n+2}\mathrm{d}x-(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}x_k^{n+2}\right] \tag{5.2.15}
$$

当 n 为奇数时，可令 $f(x)=x^{n+1}$，$f^{(n+1)}(\eta)=(n+1)!$，故可解出

$$
K_{n+1}=\frac{1}{(n+1)!}\left[\int_a^b x^{n+1}\mathrm{d}x-(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}x_k^{n+1}\right] \tag{5.2.16}
$$

一般地，牛顿-柯特斯公式通常只用 $n=1,2,4$ 时的 3 个公式。当 $n=1$ 时，梯形公式的余项为式(5.1.19)。当 $n=2$ 时，可采用式(5.2.15)计算，即

$$
\begin{aligned}
K_4&=\frac{1}{4!}\left[\int_a^b x^4\mathrm{d}x-(b-a)\sum_{k=0}^{n}C_k^{(n)}x_k^4\right] \\
&=\frac{1}{4!}\left[\frac{1}{5}(b^5-a^5)-\frac{(b-a)}{6}\left[a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4\right]\right]
\end{aligned}
$$

$$= -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 \tag{5.2.17}$$

将式(5.2.17)代入式(5.2.14)可计算辛普森公式余项为

$$R(f) = -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta) \tag{5.2.18}$$

当 $n=4$ 时，可采用式(5.2.15)计算，即

$$\begin{aligned} K_6 &= \frac{1}{6!}\left[\int_a^b x^6 \mathrm{d}x - (b-a)\sum_{k=0}^{6} C_k^{(6)} x_k^6\right] \\ &= -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 \end{aligned} \tag{5.2.19}$$

将式(5.2.19)代入式(5.2.14)可计算柯特斯公式余项为

$$R(f) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta) \tag{5.2.20}$$

5.3 复合求积公式

5.3.1 复合梯形公式

由于高阶牛顿-柯特斯公式不具有稳定性，为提高精度，通常可把积分区间分成若开个子区间(通常是等分)，再在每个子区间上用低阶求积公式，这种方法称为复合求积法。本节介绍复合梯形公式，下节将介绍复合辛普森公式。

复合梯形公式通过在每个子区间用梯形公式，然后求和得到积分的近似值。将积分区间$[a,b]$划分为 n 等分，步长为 $h=(b-a)/n$，共计 $n+1$ 个节点，即 $x_k=a+kh\,(k=0,1,\cdots,n)$，基于 $n+1$ 个节点及其对应的函数值 $f(x_k)\,(k=0,1,\cdots,n)$，在每个子区间用梯形式(5.1.4)，则得

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+f(x_{k+1})] + R_n(f) \tag{5.3.1}$$

记梯形公式所得的积分近似值为

$$T_n = \frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+f(x_{k+1})] = \frac{h}{2}\left[f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right] \tag{5.3.2}$$

称为复合梯形公式，其余项可由式(5.1.19)得

$$R_n(f) = I - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right], \quad \eta_k \in [x_k, x_{k+1}] \tag{5.3.3}$$

由于 $f(x)\in C^2[a,b]$，且

$$\min_{0\leqslant k\leqslant n-1} f''(\eta_k) \leqslant \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \leqslant \max_{0\leqslant k\leqslant n-1} f''(\eta_k) \tag{5.3.4}$$

所以，由介值定理或中间值定理，$\exists\,\eta\in[a,b]$，使

$$f''(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \tag{5.3.5}$$

于是复合梯形公式的余项为