第5章 数值积分与数值微分

CHAPTER

在科研与工程实践中，经常需要求解函数的积分或导数，但在很多情况下，已知的函数关系只是一个数据表或者复杂的解析式，难以得到用于求解积分值的原函数，或者难以直接求解导数，因而不能实际计算积分值或导数值。于是，数学家回归微积分本源，用求和来近似积分，用有限差分来近似微分，创造出数值求解法。

构造数值积分公式的常用方法是用积分区间上的 n 次插值多项式代替被积函数，导出插值型求积公式，当结点等距分布时称为牛顿-科茨公式。梯形公式与抛物线公式是最基本的近似公式，其精度较差；龙贝格算法是在区间逐次分半过程中，对梯形公式近似值加权平均求得精确度较高的积分值的方法，可在等距分布时获得简练易用且稳定性好的求积公式；当用不等距结点计算时，常用高斯型求积公式，其准确度高、稳定性好且可计算无穷积分。

数值微分是用函数值及其他已知信息来估算函数导数的方法。可以根据函数在某些离散点上的值来推算某点的导数或高阶导数的近似值，通常用差商代替微商，或用一个简单的可微函数（多项式、样条函数等）的导数近似代替待解的函数导数。

5.1 机械求积法

计算连续函数 $f(x)$在$[a,b]$内的定积分时，只要找到 $f(x)$的原函数 $F(x)$（$F'(x)=f(x)$），即可由牛顿-莱布尼茨（Newton-Leibniz）公式

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

求得定积分

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

但是，当被积函数 $f(x)$未知或其原函数 $F(x)$过于复杂时，可以使用机械求积法。这种方法的特点是，直接通过一些离散结点上的函数值 $f(x_i)$的线性组合来计算定积分的近似值。这种方法将定积分计算归结为函数值计算，避开了寻找原函数的麻烦，也为编程序求解积分近似值提供了可行性。

5.1.1 数值求积基本思想

计算定积分时，被积函数 $f(x)$ 的表现形式多种多样，原函数 $F(x)$ 也五花八门，往往需要甚至不得不利用某种数值计算方法来求解定积分的近似值。

1. 难解问题

实际的待解问题中，有如下 3 种常见的难解问题。

(1) 被积函数 $f(x)$ 是用函数表或图形给出的，没有解析表达式，因而不能使用牛顿-莱布尼茨公式求解。

(2) $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 不能用初等函数的有限形式表示，如

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} \mathrm{d}x, \quad \int_0^1 \mathrm{e}^{-x^2} \mathrm{d}x$$

等，因而无法套用牛顿-莱布尼茨公式求解。

(3) 虽然原函数能用初等函数表示，但其表达式非常复杂。例如，

$$f(x) = x^2\sqrt{2x^2+3}$$

积分后的原函数为

$$F(x) = \frac{1}{4}x^2\sqrt{2x^2+3} + \frac{3}{16}x\sqrt{2x^2+3} - \frac{9}{16\sqrt{2}}\ln(\sqrt{2}x + x^2\sqrt{2x^2+3})$$

计算定积分的值非常困难，因而不便使用牛顿-莱布尼茨公式求解。

2. 定积分的几何意义

依据积分第一中值定理，如果 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，则至少存在一点 $\xi \in [a,b]$，使得

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

其几何意义如图 5-1 所示。

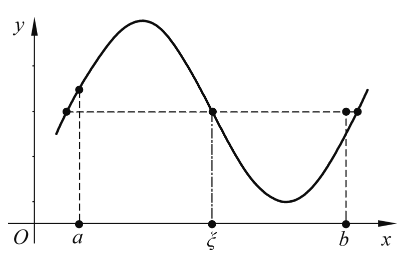


图 5-1 积分第一中值定理的几何意义

上面的 $f(x)$ 是一个非负函数，$y=f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的曲边梯形面积等于以 $f(\xi)$ 为高、$[a,b]$ 为底的矩形的面积。而 $\frac{1}{b-a}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ 可理解为 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上所有函数值的平均值。这是广义的有限个数的算术平均数。可见，找到一种 $f(\xi)$ 的近似手段即可估计函数积分的结果。

注：$f(\xi)$ 为 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的平均高度，只要找到一种求解 $f(\xi)$ 的算法，就获得了一种数值求积方法了。

3. 机械求积

如果用 $f(x)$ 积分区域两端点函数值的算数平均数近似 $f(\xi)$

$$f(\xi) \approx \frac{f(a)+f(b)}{2}$$

则积分结果近似为

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

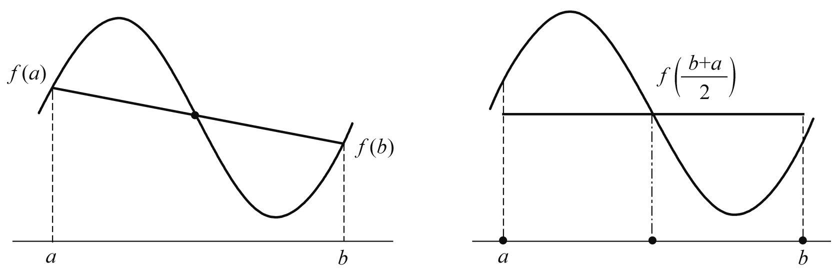
这就是梯形公式。如果用区间中点的函数值近似 $f(\xi)$

$$f(\xi) \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

则积分结果近似为

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

这就是中矩形公式。梯形公式和中矩形公式的区别如图 5-2 所示。



（a）梯形公式　　（b）中矩形公式

图 5-2　梯形公式与中矩形公式的区别

更复杂一点，可同时使用区间两端点、中点的函数值作为平均高度 $f(\xi)$的近似值

$$f(\xi) \approx \frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{6}f(b)$$

则积分结果近似为

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

这就是辛普森公式。

更一般地，在区间$[a,b]$上适当选取 $n+1$ 个结点$(x_i, f(x_i))$，$i=0,1,2,\cdots,n$，加权平均得到 $f(\xi)$的估计值，即可构造出求积公式

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

其中，x_i 为求积结点；A_i 为求积系数。由于 A_i 的值仅与结点 x_i 的选取有关，而不依赖于被积函数 $f(x)$，因此求积公式具有通用性。

例 5-1　设积分区间$[a,b]$为$[0,2]$，取 $f(x)=1$、x、x^2、x^3、e^x，分别用梯形、中矩形与辛普森公式求解定积分。

解：计算定积分的梯形、中矩形与辛普森公式分别为

$$\int_0^2 f(x)\mathrm{d}x \approx f(0) + f(2)$$

$$\int_0^2 f(x)\mathrm{d}x \approx 2f(1)$$

$$\int_0^2 f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}[f(0) + 4f(1) + f(2)]$$

代入不同的被积函数，求得定积分的近似值如表 5-1 所示。

表 5-1 定积分求值结果

$f(x)$	1	x	x^2	x^3	e^x
精确值	2	2	2.67	4	6.389
梯形公式求值	2	2	4	8	8.389
中距形公式求值	2	2	2	2	5.436
辛普森公式求值	2	2	2.67	4	6.421

可以看出，当 $f(x)=x^2$、x^3、e^x 时，辛普森公式比梯形公式与中矩形公式更精确。

5.1.2 代数精度

为了保证计算精度，自然希望求积公式对于“尽可能多”的函数都是准确的，可以通过代数精度来评判求积公式。

1. 代数精度的概念

如果某个求积公式对于次数不大于 m 的多项式均能准确成立，但用于 $m+1$ 次多项式却不一定准确，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

由于次数不大于 m 的多项式可以表示为

$$f(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_mx^m$$

故当验证求积公式的代数精度时，只需验证该求积公式对

$$f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m,x^{m+1}$$

是否成立即可。

例 5-2 验证梯形求积公式的代数精度。

解：梯形求积公式

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

(1) 当 $f(x)=1$ 时

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

因为左式=右式，所以公式准确成立。

(2) 当 $f(x)=x$ 时

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

$$\frac{b-a}{2}(a+b)=\frac{1}{2}(b^2-a^2)$$

因为左式=右式，所以公式准确成立。

(3) 当 $f(x)=x^2$ 时

$$\int_a^b x^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3}(b^3-a^3)$$

$$\frac{b-a}{2}(a^2-b^2)=\frac{1}{2}(a^2+b^2)(a+b)$$

因为左式≠右式，所以公式不成立。

综上所述，梯形求积公式具有一次代数精度。

可以验证，中矩形公式具有一次代数精度，辛普森公式具有三次代数精度。一般地，机械求积公式

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

中包含 $2n+2$ 个参数 x_k、A_k，$k=0,1,2,\cdots,n$。适当选择这些参数，可使求积公式具有不同的代数精度。

2. 求积系数 A_i

一般地，要使求积公式具有 m 次代数精度，只要令其对于 $f(x)=1,x,x^2,\cdots,x^m$ 均能准确成立，也就是说，对给定 $n+1$ 个互异结点 $x_i(i=0,1,2,\cdots,n)$，相应的求积系数 A_i 满足条件

$$\begin{cases} A_0+A_1+\cdots+A_n=b-a \\ A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=\dfrac{b^2-a^2}{2} \\ \qquad\vdots \\ A_0x_0^m+A_1x_1^m+\cdots+A_nx_n^m=\dfrac{b^{m+1}-a^{m+1}}{m+1} \end{cases}$$

如果事先选定结点 x_k，取 $m=n$，则有

$$\begin{cases} A_0+A_1+\cdots+A_n=b-a \\ A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=\dfrac{b^2-a^2}{2} \\ \qquad\vdots \\ A_0x_0^n+A_1x_1^n+\cdots+A_nx_n^n=\dfrac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} \end{cases}$$

这是关于 A_k 的线性方程组，其系数行列式为范德蒙德行列式。当 $x_i(i=0,1,2,\cdots,n)$互异时，其值非零。可通过克拉默法则唯一求得 $A_i(i=0,1,2,\cdots,n)$，进而构造出数值求积公式。但是，这种方法的计算量非常大，如果采用插值多项式来构造数值求积公式，则会减少计算量。

例 5-3　确定求积系数，使得

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx Af(-1)+Bf(0)+Cf(1)$$

具有最高的代数精度。

解：分别取 $f(x)=1,x,x^2,x^3$，则有方程组

$$\begin{cases} A+B+C=2 \\ -A+C=0 \\ A+C=\dfrac{2}{3} \end{cases}$$

解之，并构造求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}f(-1)+\frac{4}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1)$$

该公式对于 $f(x)=1,x,x^2$ 都准确成立，对于 $f(x)=x^4$ 就不准确了，故具有三次代数精度。

5.1.3 插值型求积公式

由于区间 $[a,b]$ 上的函数 $f(x)$ 可以用该区间上 $n+1$ 个点 $(x_i,f(x_i))$，$i=0,1,2,\cdots,n$ 的 n 次插值多项式 $P_n(x)$ 来近似替代，故 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的积分就可以用该区间上的插值多项式 $P_n(x)$ 来近似替代。

1. 构造求积公式

给定 $f(x)$ 的一组互异结点 $x_i(i=0,1,2,\cdots,n)$，相应的函数值分别为 $f(x_i)$，$i=0,1,2,\cdots,n$，则可构造拉格朗日插值多项式

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}l_i(x)f(x_i)=\sum_{i=0}^{n}\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)f(x_i)$$

由于代数插值多项式 $L_n(x)$ 的原函数容易求出，因此可取

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x\approx\int_a^b L_n(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\sum_{i=0}^{n}l_i(x)f(x_i)\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b\sum_{i=0}^{n}l_i(x)\mathrm{d}x\right)f(x_i)$$

故有插值型求积公式

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

该式中

$$A_i=\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\mathrm{d}x$$

2. 求积公式的代数精度

插值型求积公式的余项为

$$R[f]=\int_a^b\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\mathrm{d}x$$

当被积函数 $f(x)$ 取次数不超过 n 次的多项式时

$$\text{因为 } f^{n+1}(x)=0\quad\text{所以余项 } R[f]=0$$

这说明插值型求积公式对一切次数不超过 n 次的多项式都精确成立。可见，含有 $n+1$ 个互异结点 $x_i(i=0,1,2,\cdots,n)$ 的插值型求积公式至少具有 n 次代数精度。

反之，如果插值型求积公式至少具有 n 次代数精度，则它对于 n 次插值基函数 $l_i(x)$，$i=0,1,2,\cdots,n$ 也是准确成立的，即

$$\int_a^b l_i(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^{n}A_j l_i(x_j)\mathrm{d}x=A_i$$

可见，至少具有 n 次代数精度的求积公式必为插值型的。

综上所述，数值型求积公式为插值型求积公式的充分必要条件是，该公式至少具有 n 次代数精度。

例 5-4 已知 3 个求积结点的函数值分别为 $x_0=\frac{1}{4}$、$x_1=\frac{1}{2}$、$x_2=\frac{3}{4}$，据此构造区间 $[0,1]$ 内的插值型求积公式；分析其代数精度，并用于计算 $\int_0^1 x^3\mathrm{d}x$。

解：(1) 求得过 3 个已知点的拉格朗日插值多项式

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

故有求积公式

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x\approx\int_0^1 p_2(x)\mathrm{d}x=A_0f(x_0)+A_1f(x_1)+A_2f(x_2)$$

该式中

$$A_0=\int_0^1\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\mathrm{d}x=\int_0^1\frac{(x-1/2)(x-3/4)}{(1/4-1/2)(1/4-3/4)}\mathrm{d}x=\frac{2}{3}$$

$$A_1=\int_0^1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\mathrm{d}x=\int_0^1\frac{(x-1/4)(x-3/4)}{(1/2-1/4)(1/2-3/4)}\mathrm{d}x=\frac{1}{3}$$

$$A_2=\int_0^1\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\mathrm{d}x=\int_0^1\frac{(x-1/4)(x-1/2)}{(3/4-1/4)(3/4-1/2)}\mathrm{d}x=\frac{2}{3}$$

求得插值型求积公式为

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x\approx\frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right)+\frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right)+\frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right)$$

(2) 由于这个积分公式是求解二次插值函数积分的结果，故至少具有二次代数精度。代入$f(x)=x^3$、$f(x)=x^4$。

因为$\int_0^1 x^3\mathrm{d}x=\frac{1}{4}=\frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right)^3+\frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right)^3+\frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right)^3$

又因为$\int_0^1 x^4\mathrm{d}x=\frac{1}{5}\neq\frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right)^4+\frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right)^4+\frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right)^4$

所以该求积公式具有三次代数精度。

(3) $\int_0^1 x^3\mathrm{d}x\approx\frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right)^3+\frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right)^3+\frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right)^3=\frac{1}{4}$

因为求积公式具有三次代数精度。

所以 $\frac{1}{4}$ 实际上是$\int_0^1 x^3\mathrm{d}x$ 的精确值。

5.2　牛顿-科茨求积法

如果将积分区间$[a,b]$划分为 n 等份，记步长 $h=\frac{b-a}{n}$，选取等距结点 $x_i=a+ih\,(i=0,1,2,\cdots,n)$，则当对应函数值 $f(x_i)$已知时，以这些等距结点所导出的插值型求积公式

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

称为 n 阶牛顿-科茨(Newton-Cotes)求积公式。其中，$C_i^{(n)}$ 称为科茨系数。

5.2.1 科茨系数及求积公式

与插值型求积公式比较，可知

$$C_i^{(n)}=\frac{1}{(b-a)}A_i=\frac{1}{(b-a)}\int_a^b\prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\mathrm{d}x$$

为简化计算，做变换 $x_i=a+th$，则有

$$\mathrm{d}x=h\,\mathrm{d}t,\quad x-x_j=(t-j)h,\quad x_i-x_j=(i-j)h$$

从而有

$$\begin{aligned}C_i^{(n)}&=\frac{1}{b-a}\int_a^b\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\mathrm{d}x\\&=\frac{h}{b-a}\int_0^n\frac{t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)h^n}{i(i-1)\cdots2\times1\times(-1)\times(-2)\cdots(-(n-i))h^n}\mathrm{d}t\\&=\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t\end{aligned}$$

即科茨系数

$$C_i^{(n)}=\frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!}\int_0^n\prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n}(t-j)\mathrm{d}t$$

可以看出，科茨系数只依赖于被积区间$[a,b]$的等分数 n，与积分区间$[a,b]$及被积函数 $f(x)$ 都无关。只要给出等分数 n，就能求得 $C_i^{(n)}$，从而写出相应的牛顿-科茨求积公式。

表 5-2 列出了科茨系数表起始部分 n 从 1 到 7 的科茨系数。可以看出，科茨系数对 i 具有对称性，即 $C_i^{(n)}=C_{n-i}^{(n)}$；并且其代数和为 1，即 $\sum_{i=0}^{n}C_i^{(n)}=1$。

表 5-2 $n=1\sim7$ 的科茨系数

n								
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	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$		
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$	
7	$\frac{751}{17\,280}$	$\frac{3577}{17\,280}$	$\frac{1323}{17\,280}$	$\frac{2989}{17\,280}$	$\frac{2989}{17\,280}$	$\frac{1323}{17\,280}$	$\frac{3577}{17\,280}$	$\frac{751}{17\,280}$

当 $n=8$ 时，科茨系数会出现负数，对应求积公式的稳定性得不到保证。而且，对于高次插值多项式来说，收敛性一般不成立。故实际计算中一般不会使用高阶牛顿-科茨求积公式，实用的仅仅是 n 不大于 4 的低阶公式。

当 $n=1$ 时，$C_0^{(1)}=C_1^{(0)}=\frac{1}{2}$，牛顿-科茨求积公式为

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

这就是梯形求积公式。

当 $n=2$ 时，$C_0^{(2)}=C_2^{(2)}=\frac{1}{6}$，$C_1^{(2)}=\frac{4}{6}$，牛顿-科茨求积公式为

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

这就是辛普森求积公式。

当 $n=4$ 时，

$$C_0^{(4)}=C_4^{(4)}=\frac{7}{90},\quad C_1^{(4)}=C_3^{(4)}=\frac{16}{45},\quad C_2^{(4)}=\frac{2}{15}$$

牛顿-科茨求积公式为

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{90}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$$

这个公式称为科茨求积公式。该式中 $x_i=a+ih(i=0,1,2,3,4)$，$h=\frac{b-a}{4}$。这是在等距结点条件下的插值型求积公式，至少具有 n 次代数精度；当 n 为偶数时，则可以达到 $n+1$ 次代数精度。

5.2.2　低阶求积公式的误差估计

牛顿-科茨求积公式的余项就是插值型求积公式的余项

$$R[f]=\int_a^b \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\mathrm{d}x$$

当 $n=1$ 时，有

$$R_1[f]=I[f]-T_1=\frac{1}{2}\int_a^b f^n(\xi)(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

由于 $(x-a)(x-b)\leqslant 0$，在 $[a,b]$ 上不变号，故依积分加权平均值定理，存在 $\eta\in(a,b)$，使

$$R_1[f]=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\mathrm{d}x=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad \eta\in(a,b)$$

这就是梯形求积公式的截断误差。

当 $n=2$ 时，有

$$R_2[f]=\int_a^b \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)\mathrm{d}x$$

由于 $(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上不保号，即符号可正可负，无法直接应用积分加权平均值定理。但因辛普森求积公式具有三次代数精度，对于满足插值条件

$$\begin{cases}H(a)=f(a), & H(b)=f(b)\\ H(c)=f(c), & H'(c)=f'(c)\end{cases},c=\frac{a+b}{2}$$

的三次插值多项式 $H(x)$ 能准确成立，故有

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

由插值条件式可知，这个积分值实际上等于辛普森求积公式求得的积分值，从而有

$$R_2[f]=I[f]-S_1=\int_a^b [f(x)-H(x)]\mathrm{d}x$$

通过埃尔米特插值的余项公式，求得

$$R_2[f]=\int_a^b \frac{f^4(\xi)}{4}(x-a)(x-c)^2(x-b)\mathrm{d}x$$

由于 $(x-a)(x-c)^2(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上保号（非正），故依积分中值定理得

$$\begin{aligned} R_2[f] &= \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-c)^2(x-b)\mathrm{d}x \\ &= -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b) \end{aligned}$$

这就是辛普森求积公式的截断误差。

类似地，可以求出科茨求积公式的截断误差为

$$R_4[f]=I[f]-C_1=\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

例 5-5 如果 $f''(x)\geqslant 0$，证明用梯形求积公式求解定积分

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

得到的值大于准确值，并说明其几何意义。

证明：由梯形公式余项

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

可知，如果 $f(x)>0$，则 $R[f]<0$，于是

$$I=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = T+R[f] < T$$

也就是说，由梯形公式计算得到的积分值大于准确值。其几何意义为 $f''(x)>0$，因而 $f(x)$ 为下凸函数，梯形面积大于曲边梯形面积。证毕。

例 5-6 分别用梯形求积公式、辛普森求积公式与牛顿-科茨求积公式求解定积分

$$I=\int_{0.5}^1 \sqrt{x}\,\mathrm{d}x$$

的近似值，并与准确值比较。

解：(1) 用梯形公式计算

$$\int_{0.5}^1 \sqrt{x}\,\mathrm{d}x \approx \frac{1-0.5}{6}[f(0.5)+f(1)]=0.25\times[0.707\ 11+1]\approx 0.426\ 776\ 7$$

(2) 用辛普森公式计算

$$\int_{0.5}^1 \sqrt{x}\,\mathrm{d}x \approx \frac{1-0.5}{6}\left[\sqrt{0.5}+4\times\sqrt{\frac{0.5+1}{2}}+\sqrt{1}\right]=0.430\ 934\ 03$$