对于积分区间，若长度较大时，直接利用少节点的Newton-Cotes求积公式(例如：梯形公式，Simpson公式或Cotes公式)计算时，误差比较大，为了提高数值积分的精确度，常常采用复化求积法.

一、概念

将区间$[a,b]$ n等分，步长$h=\frac{b-a}{n}$，即节点为$x_k=a+kh$, $(k=0,1,\cdots,n)$. 在每个子区间$[x_k,x_{k+1}]$ $(k=0,1,\cdots,n-1)$上, 用低阶的Newton-Cotes公式求出$f(x)$在子区间上积分的近似值I_k, 将I_k相加求和便可得到复化求积公式

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1} I_k := I_n(f) \tag{3.1}$$

这种求积分近似值的方法称为**复化求积法**.

二、几种常用的复化求积公式

1. 复化梯形公式:

在每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$$(k = 0, 1, \cdots, n-1)$上用梯形公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1})]$$

代入(3.1)式，整理得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)] \\ &:= T_n.\end{aligned}$$

称上式为**复化梯形公式**.

复化梯形公式的余项(截断误差)

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b f(x)dx - T_n = \sum_{k=0}^{n-1}[\int_k^{k+1} f(x)dx] - \sum_{k=0}^{n-1} I_k \\ &= \sum_{k=0}^{n-1}[\int_k^{k+1} f(x)dx - I_k] = \sum_{k=0}^{n-1}[-\frac{h^3}{12}f''(\xi_k)], \end{aligned}$$

其中$\xi_k \in (x_k, x_{k+1})$. 设$f \in C^2[a,b]$, 由连续函数的性质, 得$\exists \xi \in (a,b)$使得$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\xi_k) = f''(\xi)$. 因此,

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b f(x)dx - T_n = -\frac{h^3}{12}\cdot n \cdot f''(\xi) \\ &= -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\xi) = O(h^2), \quad (\xi \in (a,b)). \end{aligned}$$

2. 复化Simpson公式:

在每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$$(k = 0, 1, \cdots, n-1)$上用Simpson公式

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{6}[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})],$$

其中$x_{k+\frac{1}{2}} = x_k + \frac{1}{2}h = x_0 + (k+\frac{1}{2})h$, 代入(3.1)式，整理得

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

称上式为**复化Simpson公式**.

复化Simpson公式的余项(截断误差)

当$f \in C^4[a,b]$时，则类似可推导出复化Simpson公式的余项(截断误差)为

$$
\begin{aligned}
R(f) &= \int_a^b f(x)dx - S_n \\
&= -\frac{(b-a)}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi) \qquad (\xi \in (a,b)) \\
&= O(h^4).
\end{aligned}
$$

3. 复化Cotes公式:

将子区间$[x_k, x_{k+1}]$四等分，设其内分点依次为$x_{k+\frac{1}{4}}$, $x_{k+\frac{1}{2}}$,$x_{k+\frac{3}{4}}$, 在每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$上用Cotes公式，整理得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \frac{h}{90}[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{4}}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \\ &\quad +32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{3}{4}}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)] \\ &:= C_n,\end{aligned}$$

其中$x_{k+\frac{i}{4}} = x_k + \frac{i}{4}h = x_0 + (k+\frac{i}{4})h \quad (i = 1, 2, 3)$, 称上式为**复化Cotes公式**.

复化Cotes公式的余项(截断误差)

当$f \in C^6[a,b]$时，则复化Cotes公式的余项(截断误差)为

$$
\begin{aligned}
R(f) &= \int_a^b f(x)dx - S_n \\
&= -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\xi) \qquad (\xi \in (a,b)) \\
&= O(h^6)
\end{aligned}
$$

注:

(1) 设$f \in C[a,b]$, 容易验证: 当$h \to 0(n \to \infty)$时, T_n, S_n, C_n均收敛于积分$\int_a^b f(x)dx$.

(2) 使用复化求积公式计算积分近似值时, 可以根据求积公式的截断误差进行先验估计, 以确定合适的等分步长h. 但是截断误差的表达式中包含有被积函数的导数, 而估计被积函数导数的最大值往往是很困难的, 在实际计算时, 可采用步长逐次减半的求积法来解决这一困难.

例题

利用复化求积公式计算积分:

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx.$$

解: (1) 将区间$[0,1]$ 8等分，步长为$h=\frac{1}{8}$，积分节点为$x_k=\frac{1}{8}k\ \ (k=0,1,\cdots,8)$. 由复化梯形公式计算，求得

$$I=T_8=\frac{1}{2\cdot 8}[f(0)+2\sum_{k=1}^{7}f(x_k)+f(1)]=3.138988.$$

(2) 将区间$[0,1]$ 4等分，步长为$h=\frac{1}{4}$，采用复化Simpson公式计算，求得

$$I=S_4=\frac{1}{4\cdot 6}[f(0)+4\sum_{k=0}^{3}f(x_{k+\frac{1}{2}})+2\sum_{k=1}^{3}f(x_k)+f(1)]=3.141593.$$

通过上面的计算结果可知，在计算量基本相同时，复化Simpson公式求得的结果比复化梯形公式计算的结果要精确的多.

一、变步长的求积公式

1. **概念**:

复化求积公式称为**定步长的求积公式**.

特点：
它对提高精度是行之有效的. 但是对给定的精度，要确定一个合适的步长往往难以办到.

因此，在实际中，一般采用变步长的求积公式.

定义

*让步长逐步折半的过程中，反复使用复化求积公式进行计算，直到相邻两次计算结果之差的绝对值小于我们允许精度ε的要求时终止计算，这种方法称为***变步长的求积方法***.*

2. 变步长的梯形求积公式

将区间$[a,b]$ n等分，步长为$h=\frac{b-a}{n}$，求积节点为$x_k=a+kh$, $(k=0,1,\cdots,n)$, 则复化梯形求积公式为

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

然后把步长h折半，即把区间$[a,b]$ $2n$等分，再用复化梯形求积公式求解，得

$$\begin{aligned}
T_{2n} &= \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+2f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})] \qquad (x_{k+\frac{1}{2}}=\frac{x_k+x_{k+1}}{2}) \\
&= \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+f(x_{k+1})]+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}}) \\
&= \frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}}).
\end{aligned}$$

称上式为**变步长的梯形公式**.

注:

(1) 由变步长的梯形公式可知，求T_{2n}时，只需要计算新增加中点$x_{k+\frac{1}{2}}$处的函数值$f(x_{k+\frac{1}{2}})$，再由T_n的值，可求得T_{2n}.

(2) 通常将区间$[a,b]$的等分数依次取为

$$1=2^0,\quad 2=2^1,\quad 4=2^2,\quad 8=2^3,\cdots.$$

通过式子$|T_{2^k}-T_{2^{k-1}}|<\varepsilon$ (ε为预先给定的允许精度) 来控制对分次数. 只要满足式子$|T_{2^k}-T_{2^{k-1}}|<\varepsilon$，终止计算，则$T_{2^k}$为所求积分的近似值. 否则再分.

例题（见P_{261} 例9.3)

用变步长的梯形公式计算

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

3. T_{2n}作为$I(f)$的近似值的截断误差

由复化梯形公式的截断误差表达式$R(f)=-\frac{(b-a)}{12}h^2f''(\xi)$, $(\xi\in(a,b))$, 得

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \int_a^b f(x)dx = T_n - \frac{(b-a)}{12}\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 f''(\xi_1), \quad (\xi_1\in(a,b)) \\
I(f) &= \int_a^b f(x)dx = T_{2n} - \frac{(b-a)}{12}\left(\frac{b-a}{2n}\right)^2 f''(\xi_2), \quad (\xi_2\in(a,b)).
\end{aligned}
$$

若$f''(x)$在$[a,b]$上变化不大时，则$f''(\xi_1)\approx f''(\xi_2)$. 由上面的两个式子可得

$$\frac{I(f)-T_n}{I(f)-T_{2n}}\approx 4,$$

整理得

$$I(f)\approx T_{2n}+\frac{1}{4-1}(T_{2n}-T_n)=\frac{4}{3}T_{2n}-\frac{1}{3}T_n.$$

所以对应于近似值的截断误差近似为$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$.

注：通过类似的推导，可得

(1) 对复化Simpson公式，若$f^{(4)}(x)$在区间$[a,b]$上变化不大时，有

$$I(f) \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n).$$

(2) 对复化Cotes公式，若$f^{(6)}(x)$在区间$[a,b]$上变化不大时，有

$$I(f) \approx C_{2n} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2n} - C_n).$$

二、Romberg算法

把区间$[a,b]$分成$2n$等分，由复化梯形公式计算$I(f)$的近似值T_{2n}的误差大致为$\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$. 若用$T_{2n}+\frac{1}{3}(T_{2n}-T_n)$作为$I(f)$的近似值，比$I_{2n}$更精确，可大大减小误差，提高精确程度.

Romberg算法是利用变步长的梯形求积序列$\{T_{2^k}\}$经过外推加速而逼近积分精确值的一种算法.

1. **(1)** T_n**与**S_n**之间的关系**:

由于

$$T_n=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)],$$

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

因而

$$\begin{aligned}
\frac{4T_{2n}-T_n}{3} &= \frac{2}{3}T_n + \frac{2}{3}h\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) - \frac{1}{3}T_n \\
&= \frac{1}{3}T_n + \frac{2(b-a)}{3n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}}) \\
&= \frac{b-a}{6n}[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b) + 4\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+\frac{1}{2}})].
\end{aligned}$$

再由复化Simpson公式，所以

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

注：上式说明将步长减半前后计算出来的复化梯形公式值T_n和T_{2n}可以生成复化Simpson公式中S_n的值. 将误差由$O(h^2)$变成$O(h^4)$，从而提高了逼近精度，说明S_n比T_{2n}要精确的多.
见 P_{259}例9.2.

(2) S_n与C_n之间的关系:

同理，利用S_n和C_n的表达式，可得

$$C_n = \frac{4^2 S_{2n} - S_n}{4^2 - 1} = \frac{16}{15} S_{2n} - \frac{1}{15} S_n.$$

通过上式可知，上式将误差由$O(h^4)$变为$O(h^6)$, 逼近精度又一次提高.

(3) :

利用C_n和$I(f) \approx C_{2n} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2n} - C_n)$的表达式，可知$C_{2n} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2n} - C_n)$比$C_{2n}$更精确的近似值. 记为$R_n$, 即

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

通过上式可知，上式将误差由$O(h^6)$变为$O(h^8)$, 逼近精度再次提高.

注:

(1) 通过上面(1),(2),(3)的推到，可知由序列$\{T_{2^k}\}$即可直接逐次求得序列$\{S_{2^k}\}$, $\{C_{2^k}\}$和$\{R_{2^k}\}$. 像这样用积分的若干个近似值推算出更精确近似值的方法称为外推方法.

(2) 序列$\{T_{2^k}\}$,$\{S_{2^k}\}$, $\{C_{2^k}\}$和$\{R_{2^k}\}$分别称为梯形序列，Simpson序列，Cotes序列和Romberg序列.

(3) 利用Romberg序列还可以继续外推，但由于外推后构造新的求积序列与原序列差别不大，因此通常只外推到Romberg序列为止.

(4) 通过关系式$S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$计算$S_n$ 比直接用复化Simpson公式计算S_n的计算量小的多.

2.

定义

利用Romberg序列求积分的算法称为 **Romberg算法**. 公式

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

称为 **Romberg公式**.

3. **Romberg算法的计算流程表**

$$\begin{bmatrix} k & T_{2^k} & S_{2^{k-1}} & C_{2^{k-2}} & R_{2^{k-3}} \\ 0 & T_1 & & & \\ 1 & T_2 & S_1 & & \\ 2 & T_4 & S_2 & C_1 & \\ 3 & T_8 & S_4 & C_2 & R_1 \\ 4 & T_{16} & S_8 & C_4 & R_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}.$$

例题：见P_{265}例9.4.