

7.4 Gauss求积公式

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

含 $2n+2$ 个待定参数 $x_k, A_k (k=0,1,\dots,n)$, 当 x 取等距节点时得到的插值型求积公式的代数精度至少为 n 次, 若适当选取 $x_k (k=0,1,\dots,n)$, 有可能使求积公式具 $2n+1$ 次代数精度, 这类求积公式称**Gauss求积公式**. x_k 为**Gauss点**.

只要取 $f(x)=x^m$ 对 $m=0,1,\dots,2n+1$ 精确成立, 即

$$\sum_{k=0}^n A_k x_k^m = \int_a^b x^m dx$$

解得 A_k 及 x_k 即可得Gauss求积公式.

例5 构造下列积分的Gauss求积公式：

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

解： 令其对 $f(x)=1, x, x^2, x^3$ 精确成立，得

$$\left\{ \begin{array}{l} A_0 + A_1 = \int_{-1}^1 dx = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = \int_{-1}^1 x dx = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = \int_{-1}^1 x^3 dx = 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} A_0 = 1 \\ A_1 = 1 \\ x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{array} \right.$$

故求积公式为

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

上式即为两点Gauss求积公式，至少具3次代数精度.

注：对积分区间 $[a,b]$ ，作变换 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$

则
$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right)dt$$

求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \left[f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2\sqrt{3}}\right) \right]$$

由上例知，据定义求 x_k , A_k ，计算复杂. 故从分析 Gauss 点的特性来构造 Gauss 公式.

定理： 插值型求积公式

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

的节点 $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ 是 Gauss 点的充要条件是以这些节点为零点的多项式

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

与任何次数不超过 n 次的多项式 $P(x)$ 带权正交，即

$$\int_a^b \rho(x) \omega_{n+1}(x) P(x) dx = 0$$

证明:

《必要性》

设 $P(x)$ 为 n 次多项式, 则 $\omega_{n+1}(x)P(x)$ 为 $2n+1$ 次多项式.

若 x_0, x_1, \dots, x_n 是Gauss点, 则求积公式对 $f(x)=\omega_{n+1}(x)P(x)$ 精确成立, 即

$$\int_a^b \rho(x) \omega_{n+1}(x) P(x) dx = \sum_{k=0}^n A_k P(x_k) \omega_{n+1}(x_k)$$

$$\because \omega_{n+1}(x_k) = 0$$

$$\therefore \int_a^b \rho(x) \omega_{n+1}(x) P(x) dx = 0$$

《充分性》

对任意 $2n+1$ 次多项式 $f(x)$ ，用 $\omega_{n+1}(x)$ 去除 $f(x)$ ，记商为 $P(x)$ ，余式为 $Q(x)$ ，（其中 $P(x)$ ， $Q(x)$ 都为 n 次多项式），即

$$f(x) = P(x)\omega_{n+1}(x) + Q(x)$$

由
$$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P(x)dx = 0$$

得
$$\int_a^b \rho(x)(f(x) - Q(x))dx = 0$$

即
$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \int_a^b \rho(x) Q(x) dx$$

由于求积公式对 n 次多项式精确成立，则

$$\int_a^b \rho(x) Q(x) dx = \sum_{k=0}^n A_k Q(x_k)$$

又由 $\omega_{n+1}(x_k)=0$ 知， $Q(x_k)=f(x_k)$

$$\therefore \int_a^b \rho(x) f(x) dx = \int_a^b \rho(x) Q(x) dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$

求积公式对一切次数 $\leq 2n+1$ 的多项式均精确成立，
故 x_k 为Gauss点.

几种常用的Gauss型求积公式：

对不同的 $\rho(x)$ ，选不同的正交多项式系，可导出不同的Gauss求积公式。

1、Gauss—Legendre求积公式：

Legendre多项式：区间为 $[-1,1]$ ， $\rho(x)\equiv 1$ ，由 $\{1, x, \dots, x_n, \dots\}$ 正交化得到的多项式。

表达式：

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \end{cases}$$

性质： (1) 正交性：

$$\int_a^b P_m(x)P_n(x)dx = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ \frac{2}{2n+1} & m = n \end{cases}$$

(2) 奇偶性： $P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$

(3) 递推关系：

$$\begin{cases} P(0) = 1 \\ P(1) = x \\ P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} xP_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x) \end{cases}$$

$(n=1,2,\dots)$

(4) $P_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 内有 n 个不同的实零点.

因Legendre多项式是 $[-1,1]$ 上的正交多项式，故 $P_{n+1}(x)$ 的零点就是求积公式

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$$

的Gauss点，上式称**Gauss—Legendre求积公式**。

$n=1$ 时，可得两点Gauss—Legendre求积公式：

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

$n=2$ 时，三点Gauss—Legendre求积公式：

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{5}{9} f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right)$$

当积分区间不是 $[-1,1]$ 时，可如前作变换：

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$$

二、Gauss—Chebyshev求积公式：

Chebyshev多项式是 $[-1,1]$ 上 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式系。

表达式： $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ $(n=0,1,2,\dots)$

n 次Chebyshev多项式的零点为： $x_k = \cos \frac{2k-1}{2n} \pi$

以 x_k 为求积节点，计算可得 $A_k = \frac{\pi}{n}$ $(k=1,2,\dots,n)$

故 n 个求积节点的Gauss—Chebyshev求积公式为：

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \frac{\pi}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k)$$

7.5 数值微分

先看一个实例：

已知20世纪美国人口的统计数据为：(单位:百万)

| 年份 | 1900 | 1910 | 1920 | 1930 | 1940 | 1950 | 1960 | 1970 | 1980 | 1990 |
|----|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 人口 | 76.0 | 92.0 | 106.5 | 123.2 | 131.7 | 150.7 | 179.3 | 204.0 | 226.5 | 251.4 |

试计算美国20世纪的(相对)年增长率.

若记 t 时刻的人口为 $x(t)$ ，则人口的增长率为：

$$r(t) = \frac{dx/dt}{x(t)}$$

问题： dx/dt 如何求？

基本思想：用函数值的线性组合近似函数在某点的导数值.

一、差商方法：

用差商近似导数，可得

向前差商：
$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

向后差商：
$$f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

中点方法：
$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

(h 为步长)

误差分析:

利用Taylor展式, 有

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{1}{2!}h^2 f''(a) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(a) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(a) + \dots$$

$$f(a-h) = f(a) - hf'(a) + \frac{1}{2!}h^2 f''(a) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(a) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(a) - \dots$$

故

$$\begin{aligned} f'(a) &= \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + O(h) &= \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + O(h) \\ &= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} + O(h^2) \end{aligned}$$

即中点方法的误差阶 ($O(h^2)$) 比前两种方法 ($O(h)$) 高.

二、插值型求导公式：

设函数 $f(x)$ 不一定给出，但知道 $f(x)$ 在节点处的函数值：

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

$$f(x_k) = f_k, k = 0, 1, \dots, n$$

如果 $f(x)$ 的 $n+1$ 阶导数存在，由Lagrange插值可知：

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x)$$

其中 $\xi \in [a, b]$ 并与 x 有关， $\omega_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^n (x - x_j)$

$L_n(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次Lagrange插值多项式.

对上式两边求导,有

$$f'(x) = L'_n(x) + \frac{[f^{(n+1)}(\xi)]'}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x)$$

由于 ξ 与 x 有关, $[f^{(n+1)}(\xi)]'$ 将很难确定.

但是当 $x=x_k$ 时, $f'(x_k)$ 可以求出:

$$f'(x_k) = L'_n(x_k) + \frac{[f^{(n+1)}(\xi)]'}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k)$$

$$= L'_n(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega'_{n+1}(x_k)$$

$$= L'_n(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)$$

$$k = 0, 1, \dots, n$$

记

$$E_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)$$

则

$$f'(x_k) = L'_n(x_k) + E_n(x_k) \quad k = 0, 1, \dots, n$$

上式即称为插值型求导公式。

由于插值型求导公式采取的是 n 次Lagrange插值多项式，而高次插值会产生Runge现象，因此实际应用中多采用低次插值型求导公式。

下面给出几种低阶插值型求导公式：

1、两点公式： 当 $n=1$ 时，

$$f'(x_k) = L'_1(x_k) + E_1(x_k) \quad k = 0, 1$$

$$\text{由 } L_1(x) = f_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

$$\text{得 } L'_1(x) = f_0 \frac{1}{x_0 - x_1} + f_1 \frac{1}{x_1 - x_0}$$

$$E_1(x_k) = \frac{f''(\xi)}{2} (x_k - x_j) \quad k = 0, 1, j \neq k$$

若记 $x_1 - x_0 = h$ ， 则

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= L'_1(x_0) + E_1(x_0) \\ &= \frac{1}{h}(f_1 - f_0) - \frac{h}{2}f''(\xi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= L'_1(x_1) + E_1(x_1) \\ &= \frac{1}{h}(f_1 - f_0) + \frac{h}{2}f''(\xi) \end{aligned}$$

上面两式称为带余项的**两点求导公式**.

即

$$f'(x_0) \approx f'(x_1) \approx \frac{1}{h}(f_1 - f_0)$$

由于 $E=O(h)$, 故该求导公式的精度为1阶.

2、三点公式： 当 $n=2$ 时，

$$f'(x_k) = L'_2(x_k) + E_2(x_k) \quad k=0,1,2$$

由

$$L_2(x) = f_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

得

$$L'_2(x) = f_0 \frac{(x-x_1) + (x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1 \frac{(x-x_0) + (x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f_2 \frac{(x-x_0) + (x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$E_2(x_k) = \frac{f'''(\xi)}{3!} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^2 (x_k - x_j)$$

若 x_0, x_1, x_2 为等距节点，即 $h=x_1-x_0=x_2-x_1$ ，则

$$L_2'(x_0) = f_0 \frac{-3h}{2h^2} + f_1 \frac{-2h}{-h^2} + f_2 \frac{-h}{2h^2} = \frac{1}{2h} (-3f_0 + 4f_1 - f_2)$$

$$L_2'(x_1) = f_0 \frac{-h}{2h^2} + f_1 \frac{h-h}{-h^2} + f_2 \frac{h}{2h^2} = \frac{1}{2h} (-f_0 + f_2)$$

$$L_2'(x_2) = f_0 \frac{h}{2h^2} + f_1 \frac{2h}{-h^2} + f_2 \frac{3h}{2h^2} = \frac{1}{2h} (f_0 - 4f_1 + 3f_2)$$

$$E_2(x_0) = \frac{f'''(\xi)}{3!} (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) = \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

$$E_2(x_1) = \frac{f'''(\xi)}{3!} (x_1 - x_0)(x_1 - x_2) = -\frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

$$E_2(x_2) = \frac{f'''(\xi)}{3!} (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

可得

$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \\ f'(x_1) = \frac{1}{2h}(-f_0 + f_2) - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) \\ f'(x_2) = \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \end{cases}$$

上式称为带余项的**三点求导公式**.

$$\text{其中 } f'(x_1) \approx \frac{1}{2h}(-f_0 + f_2)$$

又称为中点公式，其精度稍高。

由于 $E=O(h^2)$ ，故求导公式的精度为2阶。

3、五点公式： 当 $n=4$ 时，

$$f'(x_k) = L'_4(x_k) + E_4(x_k) \quad k = 0, 1, 2, 3, 4$$

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_0) = \frac{1}{12h}(-25f_0 + 48f_1 - 36f_2 + 16f_3 - 3f_4) + \frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_1) = \frac{1}{12h}(-3f_0 - 10f_1 + 18f_2 - 6f_3 + f_4) - \frac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_2) = \frac{1}{12h}(f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4) - \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_3) = \frac{1}{12h}(-f_0 + 6f_1 - 18f_2 + 10f_3 + 3f_4) - \frac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_4) = \frac{1}{12h}(3f_0 - 16f_1 + 36f_2 - 48f_3 + 25f_4) + \frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \end{array} \right.$$

上式称为带余项的**五点求导公式**.

由于 $E=O(h^4)$, 故求导公式的精度为4阶.

综合考虑上述三种公式, 可知五点公式的精度最高.

并且当步长 h 越小时, 误差会越小.

但, 是不是 h 越小公式精度越高呢?

由求导公式

$$f'(x_k) = L'_n(x_k) + E_n(x_k) \quad \left\{ \begin{array}{l} k = 0, 1, \dots, n \\ n = 1, 2, 4 \end{array} \right.$$

可发现

$$L'_n(x_k) = \frac{1}{a^{(k)}h} \sum_{j=0}^n A_j^{(k)} f_j \quad \text{且} \quad \sum_{j=0}^n A_j^{(k)} = 0$$

当 h 充分小时, $f_j (j=0,1,\dots,n)$ 会很接近.

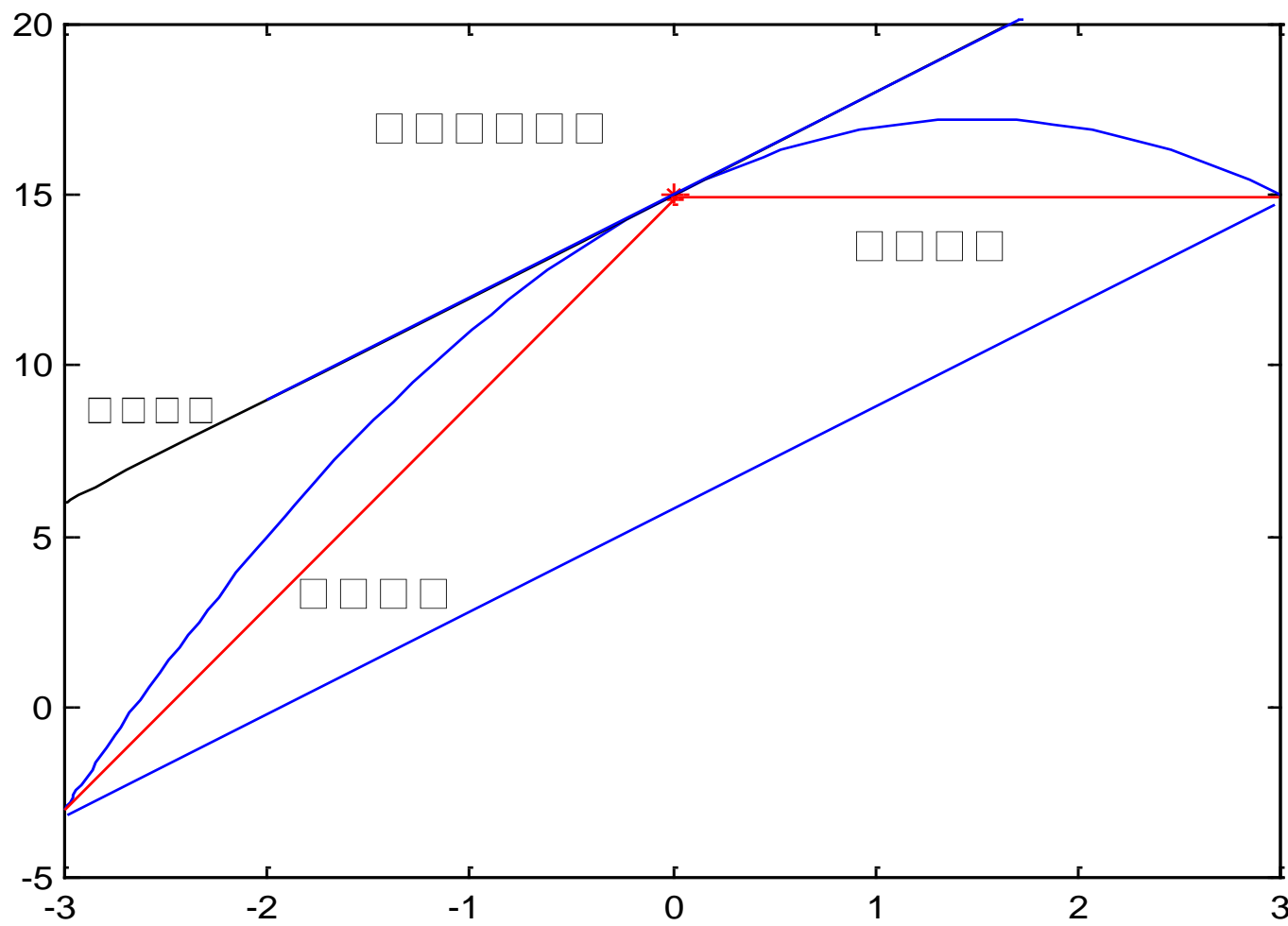
$\sum_{j=0}^n A_j^{(k)} f_j$ 中会出现相近数相减的情形, 有效数字会严重损失,

同时 $L'_n(x_k) = \frac{1}{a^{(k)}h} \sum_{j=0}^n A_j^{(k)} f_j$ 中也会出现小数 h 作除数的现象,

导致 $L'_n(x_k) = \frac{1}{a^{(k)}h} \sum_{j=0}^n A_j^{(k)} f_j$ 的舍入误差可能会很大.

因此实际应用中步长 h 不能取太小的值.

两点公式和三点公式的比较图：



低阶插值型求导公式的分段构造:

由于高次插值的Runge现象, 数值微分一般采用分段低次插值公式, 常见的就是分段两点、三点和五点公式.

1、分段两点求导公式

已知 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ $f(x_k) = f_k, k = 0, 1, \dots, n$

对于任取的相邻两点 $x_k, x_{k+1}, k = 0, 1, \dots, n-1$

由两点公式有

$$\begin{cases} f'(x_k) \approx \frac{1}{h}(f_{k+1} - f_k) \\ f'(x_{k+1}) \approx \frac{1}{h}(f_{k+1} - f_k) \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

上式称为分段两点公式.

2、分段三点求导公式

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b \quad f(x_k) = f_k, k = 0, 1, \dots, n$$

对于任取的相邻三点 $x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, k = 1, 2, \dots, n-1$

由三点公式，有

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_k) \approx \frac{1}{2h}(-f_{k-1} + f_{k+1}) \quad k = 1, 2, \dots, n-1 \\ f'(x_0) \approx \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) \\ f'(x_n) \approx \frac{1}{2h}(f_{n-2} - 4f_{n-1} + 3f_n) \end{array} \right.$$

上式称为分段三点公式。

3.分段五点求导公式

由五点公式，有 $x_{k-2}, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, x_{k+2}$, $k = 2, 3, \dots, n-2$

$$\left\{ \begin{array}{l} f'(x_k) \approx \frac{1}{12h} (f_{k-2} - 8f_{k-1} + 8f_{k+1} - f_{k+2}) \quad k = 2, 3, \dots, n-2 \\ f'(x_0) \approx \frac{1}{12h} (-25f_0 + 48f_1 - 36f_2 + 16f_3 - 3f_4) \\ f'(x_1) \approx \frac{1}{12h} (-3f_0 - 10f_1 + 18f_2 - 6f_3 + f_4) \\ f'(x_{n-1}) \approx \frac{1}{12h} (-f_{n-4} + 6f_{n-3} - 18f_{n-2} + 10f_{n-1} + 3f_n) \\ f'(x_n) \approx \frac{1}{12h} (3f_{n-4} - 16f_{n-3} + 36f_{n-2} - 48f_{n-1} + 25f_n) \end{array} \right.$$

例： 回到本节开始时的实例(美国人口)：

| | | | | | | | | | |
|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 1900 | 1910 | 1920 | 1930 | 1940 | 1950 | 1960 | 1970 | 1980 | 1990 |
| 76.0 | 92.0 | 106.5 | 123.2 | 131.7 | 150.7 | 179.3 | 204.0 | 226.5 | 251.4 |

解： 设 t 时刻的人口为 $x(t)$,人口的增长率为 $r(t)$

则
$$r(t) = \frac{dx/dt}{x(t)}$$

求增长率必须先求导数

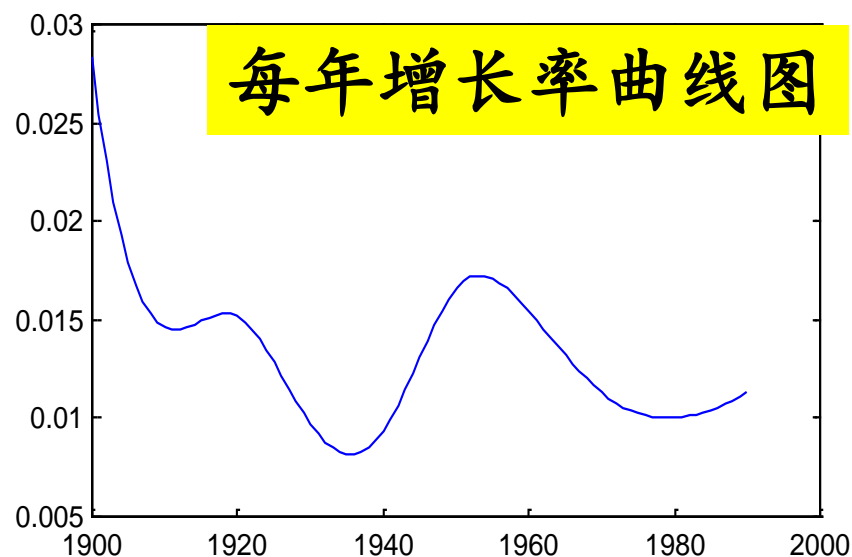
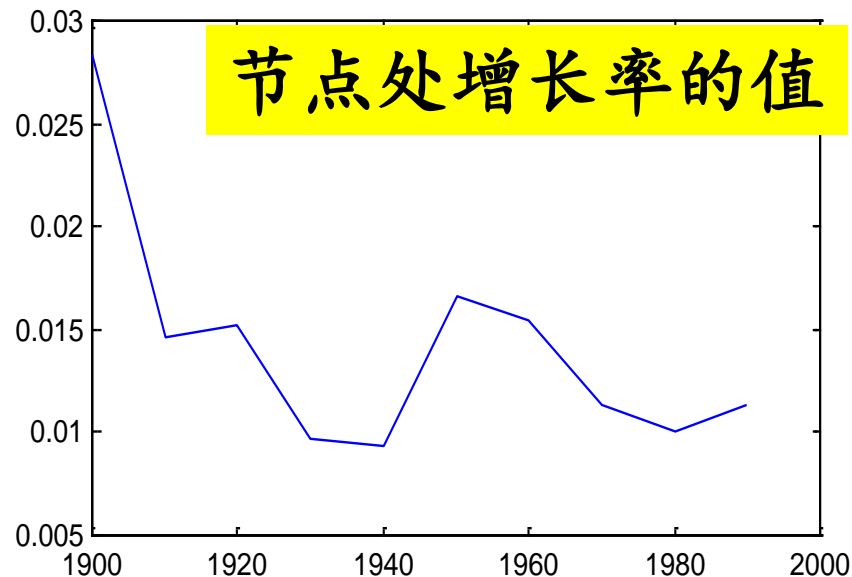
先用精度较高的分段五点公式求出节点处的导数值

| | | | | | |
|-------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $x'=2.1508$ | 1.3458 | 1.6158 | 1.1908 | 1.2267 | 2.5000 |
| 2.7633 | 2.3075 | 2.2692 | 2.8358 | | |

| | | | | | |
|----------------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $r=(dx/dt)/x=0.0283$ | 0.0146 | 0.0152 | 0.0097 | 0.0093 | 0.0166 |
| 0.0154 | 0.0113 | 0.0100 | 0.0113 | | |

将节点处的增长率作
三次样条插值：

| 年份 | 增长率 |
|------|--------|
| 1900 | 0.0283 |
| 1901 | 0.0255 |
| 1902 | 0.0230 |
| 1935 | 0.0082 |
| 1936 | 0.0081 |
| 1937 | 0.0083 |
| 1953 | 0.0172 |
| 1954 | 0.0172 |
| 1979 | 0.0100 |
| 1980 | 0.0100 |
| 1981 | 0.0109 |
| 1989 | 0.0111 |
| 1990 | 0.0113 |



三、样条求导公式:

Lagrange插值型求导公式构造比较简单,但由于误差的原因,只能求出节点处的导数值.

故可采用三次样条插值的原理进行求导,即先作 $f(x)$ 的三次样条插值多项式 $S(x)$,再求 $S(x)$ 在任意一点的一阶甚至二阶导数.

若求函数 $f(x)$ 在节点处的一阶导数值,求解三对角方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ \vdots \\ g_{n-1} \\ g_n \end{bmatrix}$$

$$g_0 = \frac{3(y_1 - y_0)}{h}$$

$$g_n = \frac{3(y_n - y_{n-1})}{h}$$

$$g_j = \frac{3(y_{j+1} - y_{j-1})}{h}$$

即可.

$$(j=1,2,\dots,n-1)$$

四、数值微分的外推算法：

利用一阶差商中的中点方法，有

$$f'(x) \approx G(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

对 $f(x)$ 在 x 点作Taylor展开：

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2!}h^2 f''(x) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}h^4 f^{(4)}(x) - \dots$$

故

$$G(h) = f'(x) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \dots$$

以 $h/2$ 代替上式中的 h ，有

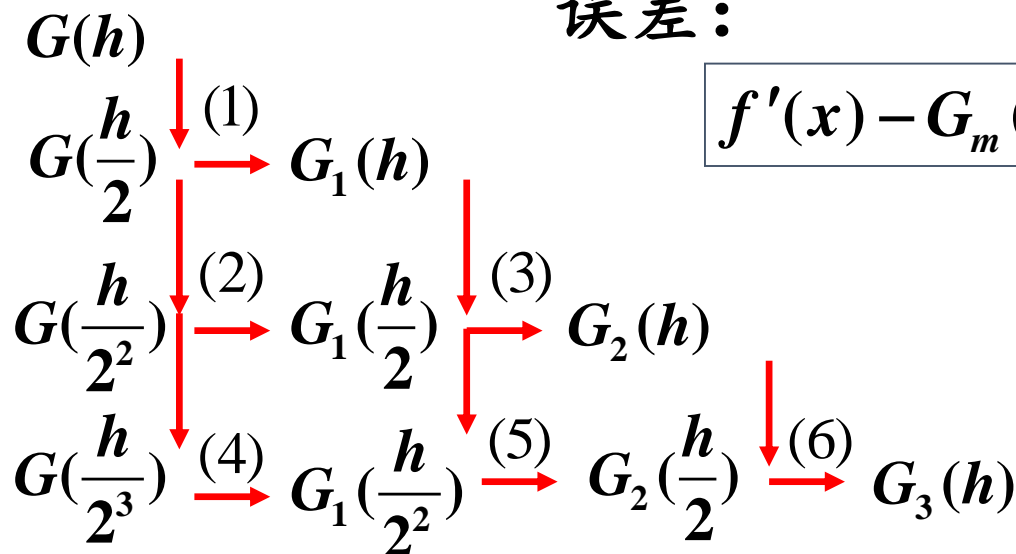
$$G\left(\frac{h}{2}\right) = f'(x) + \frac{\alpha_1 h^2}{4} + \frac{\alpha_2 h^4}{16} + \dots$$

所以有
$$\frac{4G(\frac{h}{2}) - G(h)}{3} = f'(x) - \frac{\alpha_2 h^4}{4} + \dots$$

上式是关于导数的逼近，截断误差为 $O(h^4)$ ，这就是求数值导数的外推算法。重复使用外推算法，对 h 逐次分半，若记 $G_0(h)=G(h)$ ，则有

$$G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}(\frac{h}{2}) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1} \quad (m=1,2,\dots)$$

计算过程：



误差：

$$f'(x) - G_m(h) = O(h^{2(m+1)})$$

例：用外推法计算 $f(x) = x^2 e^{-x}$ 在 $x=0.5$ 处的导数.

解：令

$$G(h) = \frac{1}{2h} \left[\left(\frac{1}{2} + h\right)^2 e^{-\left(\frac{1}{2} + h\right)} - \left(\frac{1}{2} - h\right)^2 e^{-\left(\frac{1}{2} - h\right)} \right]$$

当 $h=0.1, 0.05, 0.025$ 时，由外推法表可得

$$G(0.1) = 0.4516049081$$

$$G(0.05) = 0.4540761693 \quad G_1(0.1) = 0.4548999231$$

$$G(0.025) = 0.4546926288 \quad G_1(0.05) = 0.4548981152 \quad G_2(0.1) = 0.454897994$$

$f'(0.5)$ 的精确值为 0.454897994，可见当 $h=0.025$ 时，用中点微分公式只有三位有效数字。外推一次达五位，外推两次达9位。

THE

END