第4章　数值积分与数值微分

§ 4.1　数值积分概论

1. 问题的提出

工程应用中常需要计算定积分。对于定积分$\int_a^b f(x)dx$，

设 $f(x)$ 在区间$[a,b]$上连续， $F(x)$ 是 $f(x)$ 的原函数，

则由$Newton — Leibniz$公式有 $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$

虽然用该公式我们已经解决了很多理论和应用问题，但还有许多解决不了的问题，或遇到下列一些困难

（1）$f(x)$的原函数不是初等函数，

如 $\int_0^1 e^{-x^2}dx,\quad \int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx,\quad \int_0^1 \sqrt{1+x^3}dx$;

（2）$f(x)$的原函数的表达式相当复杂，求值困难，

如 $f(x)=\frac{1}{1+x^6}$,

$$F(x)=\frac{1}{3}\arctan x+\frac{1}{6}\arctan x(x-\frac{1}{x})+\frac{1}{4\sqrt{3}}\ln\frac{x^2+\sqrt{3}x+1}{x^2-\sqrt{3}x+1}+C$$

（3）$f(x)$不连续，甚至没有解析表达式，

而只有通过实验或测量得出的一组离散数据

2. 数值积分的基本思想

由定积分定义

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\lambda\to 0}\sum_{i=0}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i \approx \sum_{i=0}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i \overset{\Delta}{=} \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

启发出 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

记作 $I(f)=\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = I_n(f)$

用被积函数 $f(x)$ 在积分区间 $[a,b]$ 上有限个点的函数值 $f(x_k)\ (k=0,1,2,\ldots,n)$ 进行线性组合来近似计算定积分.

优点：计算简单，避开求原函数的困难；

缺点：有误差，需要作误差分析.

求积公式: $I(f) \triangleq \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \triangleq I_n(f)$

求积余项: $E_n(f) = I(f) - I_n(f)$ 误差

求积节点: $x_i \in [a,b]$ $, i = 0,1,\ldots,n$

求积系数: A_i（相当于权, 与x_i有关, 与$f(x)$的具体表达式无关）

在工程应用中，常常要计算加权的定积分

$$I(f) \triangleq \int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \triangleq I_n(f)$$

例：$n=0$，$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0)=(b-a)f(x_0)$，矩形公式

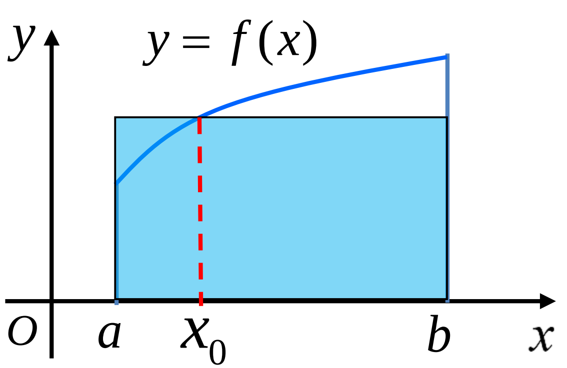
$x_0=a$，为左矩形公式；$x_0=b$，为右矩形公式；

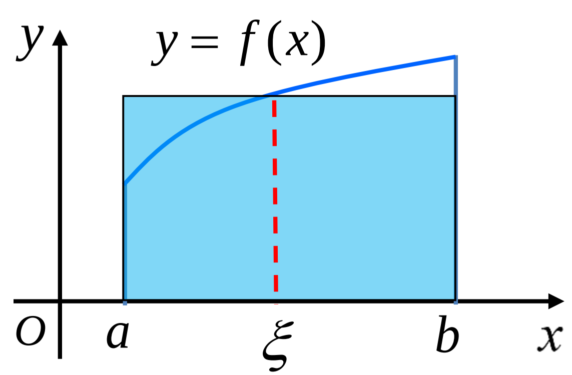
$x_0=\dfrac{a+b}{2}$，为中矩形公式。

由积分中值定理，得

$$\int_a^b f(x)dx=(b-a)f(\xi)$$

取$\boldsymbol{x_0}=\boldsymbol{\xi}$时，积分公式准确成立，但一般$\boldsymbol{\xi}$不好确定。

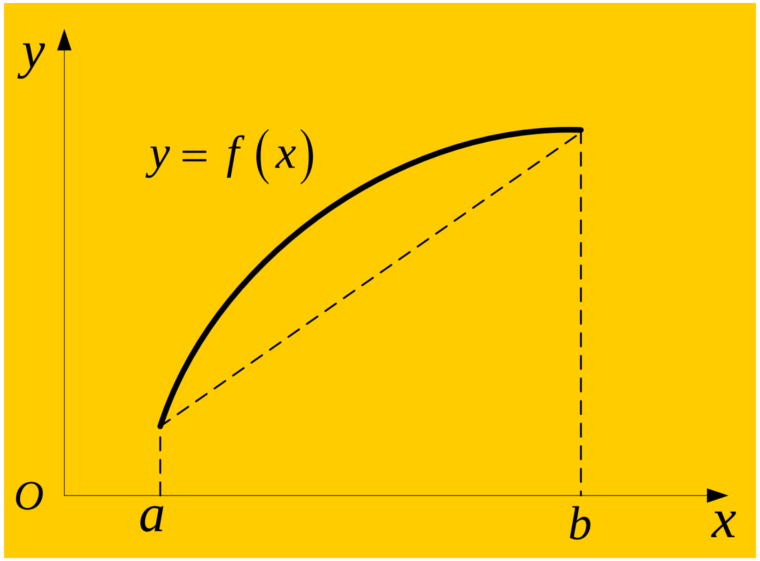




$n=1$时，若取 $x_0=a,\ x_1=b,\ A_0=A_1=\dfrac{b-a}{2}$，则

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

——梯形公式



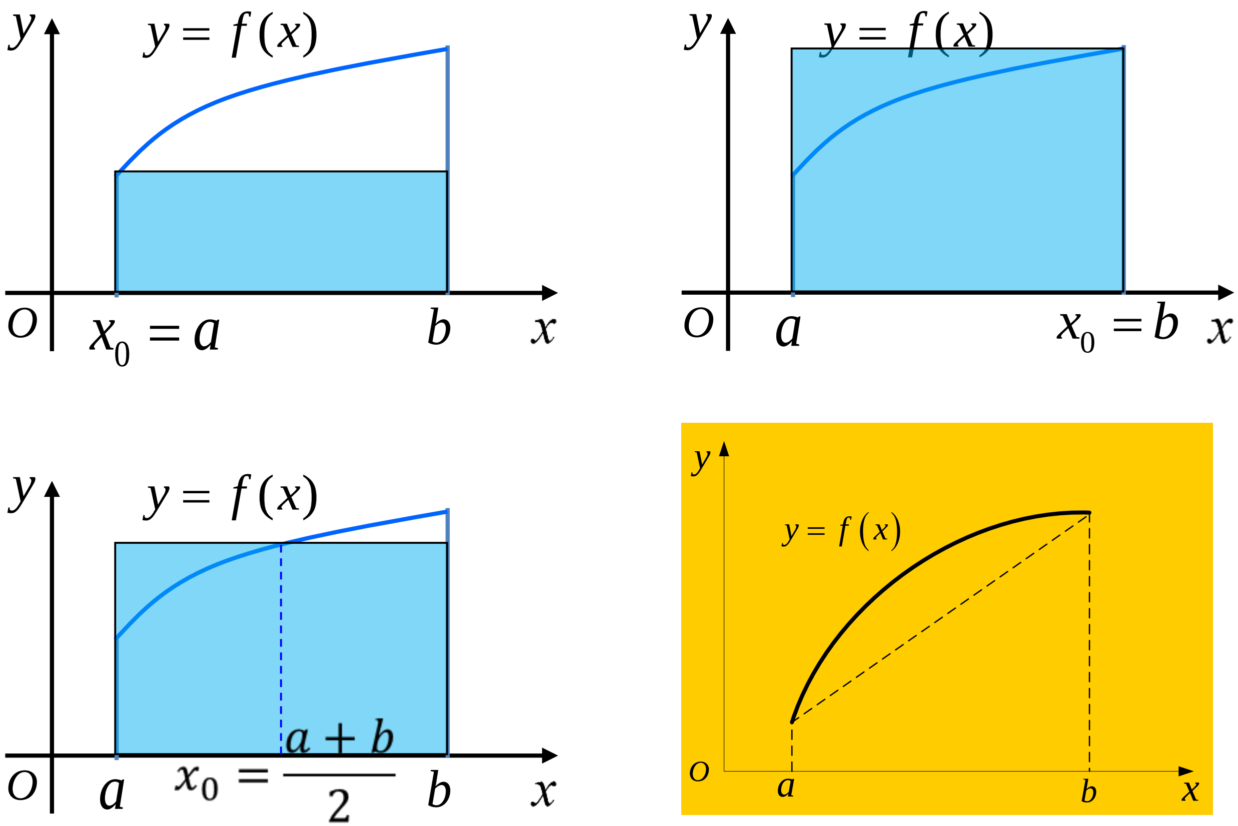
需要解决的问题

（**1**）衡量求积公式“好”与“坏”的标准；

（**2**）如何构造求积公式，即A_i 与x_i 的确定；

（**3**）误差估计；

（**4**）求积公式的收敛性和稳定性



由上面左/右矩形公式的图形可以看出，当被积函数是常函数时，左/右矩形公式是准确的；由中矩形公式和梯形公式的图形可以看出，当被积函数是常函数和一次多项式时，中矩形和梯形公式都是准确的。

这启发我们：可以通过适当选取更多的节点，使得求积公式对更高次的代数多项式都是准确的，这就是**代数精度**的概念。

问题(1) 求积公式“好”与“坏”的标准——代数精度

定义1　当被积函数f(x)是任何次数不超过m的多项式时，求积公式均能准确成立，而对m+1次多项式不能准确成立，则称求积公式有m次(或m阶)代数精度。

注：求积公式对所有次数不超过m的多项式均能准确成立等价于

当$f(x)=x^k\ (k=0,1,\dots,m)$时，求积公式准确成立。

容易验证，左/右矩形公式有0次代数精度，而中距形公式和梯形公式有1次代数精度。

例 1 **试确定求积公式**$\int_{-h}^{h} f(x)dx \approx A_{-1}f(-h)+A_0 f(0)+A_1 f(h)$**中的待定参数，使其代数精度尽量高，并指出所构造出的求积公式的代数精度。**

解：将$f(x)=1, x, x^2$分别代入公式使其准确成立，

$$\text{则有}\begin{cases} A_{-1}+A_0+A_1=2h \\ -hA_{-1}+hA_1=0 \\ h^2A_{-1}+h^2A_1=\dfrac{2}{3}h^3 \end{cases} \Rightarrow A_{-1}=A_1=\frac{1}{3}h, A_0=\frac{4}{3}h$$

故求积公式$\int_{-h}^{h} f(x)dx \approx \frac{h}{3}f(-h)+\frac{4h}{3}f(0)+\frac{h}{3}f(h)$ 至少有2次代数精度.

验证知：$f(x)=x^3$代入准确成立，$f(x)=x^4$ 代入不准确成立。

因而该公式具有**3**次代数精度。

问题（2） 求积公式的构造方法 $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

关键问题：选取求积节点 x_k，确定求积系数 A_k

方法1 待定系数法:令上面形式的求积公式至少有m次代数精度，根据此条件确定求积公式。

将 $f(x)=x^k\,(k=0\sim m)$ 分别代入公式 $\int_a^b \rho(x)f(x)dx=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$ 得：

$$
(P)\quad \begin{cases}
A_0+A_1+\cdots+A_n=C_0\\
A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=C_1\\
A_0x_0^2+A_1x_1^2+\cdots+A_nx_n^2=C_2\\
\qquad\cdots\cdots\\
A_0x_0^m+A_1x_1^m+\cdots+A_nx_n^m=C_m
\end{cases}
$$

其中 $C_k=\int_a^b \rho(x)x^k dx\ (k=0\sim m)$。

若求积节点$x_i\ (i=0:n)$给定，方程组

$$\Leftrightarrow\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ x_0^m & x_1^m & \cdots & x_n^m\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A_0\\ A_1\\ \vdots\\ A_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}C_0\\ C_1\\ \vdots\\ C_m\end{bmatrix}$$

有$m+1$个方程，$n+1$个未知数。

当$m=n$，且$x_i\ (i=0:n)$互异时，存在唯一解$A_0, A_1, \ldots, A_n$.

结论：给定 n+1 个互异节点，可以唯一确定一个至少

具有 n 次代数精度的求积公式 $I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$

方程组(P)的解分两种情况：

(1) 给定n+1个互异的节点x_k $(k = 0,1,2,\cdots,n)$, 且$m=n$时，存在唯一解；

(2) 若求积节点 $x_k\,(k=0,1,2,\ldots,n)$未给定，则(P)是m+1个方程含2n+2个未知数的非线性方程组. 当m= 2n+1时， 由n+1个互异的节点可确定至少有2n+1次代数精度的求积公式.

这样的公式称为高斯（Gauss）型求积公式.

注：待定系数法常用来讨论求积公式的存在唯一性，当求积节点数较多时，解方程组计算工作量大，因此不常用此方法构造求积公式。

3．插值型求积公式（方法2：插值法）

给定[a,b]上n+1个互异节点$x_i, i=0,1,\dots,n$,构造一个n次插值多项式，比如Lagrange插值多项式$L_n(x)$,满足

$$L_n(x)=f(x_i)=y_i,\ i=0,1,\dots,n,$$

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x)f(x_i)$$

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}=\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}(i=0,1,\dots,n)$$

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

则 $$f(x) = L_n(x) + R_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k) + R_n(x)$$

插值余项 $$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x).$$

从而 $$\boxed{\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x) L_n(x)\mathrm{d}x + \int_a^b \rho(x) R_n(x)\mathrm{d}x}$$

近似计算 $$\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x \approx \int_a^b \rho(x) L_n(x)\mathrm{d}x$$

而 $$\int_a^b \rho(x) L_n(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)\left(\sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)\right)\mathrm{d}x$$

$$= \sum_{k=0}^{n}\left(\underbrace{\int_a^b \rho(x) l_k(x)\mathrm{d}x}_{A_k}\right)\cdot f(x_k) @ \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

得到求积公式 $$\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

故插值型求积公式为

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx \approx \int_a^b \rho(x) L_n(x) dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \left(\int_a^b \rho(x) l_i(x) dx \right) f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

其中$A_i = \int_a^b \rho(x) l_i(x) dx \quad (i = 0, 1, \dots, n)$

积分余项为

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

例 2 已知三点 $x_0=\frac{1}{4}$， $x_1=\frac{1}{2}$， $x_2=\frac{3}{4}$

（**1**）推导在 **[0,1]** 区间上以这三点作为求积节点的插值型求积公式；

（2）用所求公式计算 $\int_0^1 x^2 dx$ 及 $\int_0^1 \frac{1}{1+x} dx$，并与精确值相比较。

解（1） 插值型求积公式

$$\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2)$$

其中 $A_0=\int_0^1 l_0(x)\mathrm{d}x=\int_0^1 (8x^2-10x+3)\mathrm{d}x=\frac{2}{3}$,

$$A_1=\int_0^1 l_1(x)\mathrm{d}x=-\int_0^1 (16x^2-16x+3)\mathrm{d}x=-\frac{1}{3},$$

$$A_2=\int_0^1 l_2(x)\mathrm{d}x=\int_0^1 (8x^2-6x+1)\mathrm{d}x=\frac{2}{3}$$

故所求插值型求积公式为

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

代数精度是？

$$(2)\ \int_0^1 x^2\mathrm{d}x \approx \frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right) - \frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right) = \frac{1}{24} - \frac{1}{12} + \frac{3}{8} = \frac{1}{3} \qquad \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3}$$

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x}\mathrm{d}x \approx \frac{2}{3}f\left(\frac{1}{4}\right) - \frac{1}{3}f\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{2}{3}f\left(\frac{3}{4}\right) = \frac{8}{15} - \frac{2}{9} + \frac{8}{21} \approx 0.692063492$$

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x}\mathrm{d}x = \ln 2 \approx 0.69314718$$

问题（3） 插值型求积公式的误差分析与精度

设$f(x)$在$[a,b]$上具有直到$n+1$阶的导数，则插值余项

$$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\quad（\xi与x有关）$$

当$f(x)\in C^{n+1}[a,b]$时，插值型求积公式的误差

$$E_n(x)=\int_a^b\rho(x)f(x)dx-\int_a^b\rho(x)L_n(x)dx$$

$$=\int_a^b\rho(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)dx$$

$$E_n(x)=\int_a^b \rho(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,\mathrm{d}x$$

当 $f(x)=1,x,x^2,\cdots,\ x^n$ 时，$f^{(n+1)}(\xi)=0$，故 $E_n(x)=0$

这说明插值型求积公式

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

至少具有**n**次代数精度。

结论总结为如下定理：

定理1 求积公式$I_n(f)=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$至少有$n$次代数精度的充分必要条件是，它是插值型的.

证明：充分性已证，现证必要性。

设求积公式至少具有n次代数精度，则它对于n次多项式

$$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}$$ 精确成立，即有$\int_a^b l_k(x)dx=\sum_{i=0}^{n}A_i l_k(x_i)$

由于$l_k(x_i)=\delta_{ki}$，故$\int_a^b l_k(x)\,dx=A_k$，因而求积公式是插值型的.

问题（4）求积公式的收敛性和稳定性

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

定义3.1.2（求积公式的收敛性）

在求积公式中，若$\lim\limits_{\substack{h\to 0\\(n\to\infty)}}\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)=\int_a^b f(x)dx$

其中 $h=\max\limits_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1})$，称求积公式收敛

在求积公式中，由于计算或测量数据$f(x_k)$可能产生误差δ_k，实际得到$\tilde{f}_k$，即$f(x_k)=\tilde{f}_k+\delta_k$.

$$\text{记}\ I_n(f)=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k),\quad I_n(\tilde{f})=\sum_{k=0}^{n}A_k \tilde{f}_k$$

求积公式的稳定性（定义3.1.3）：如果对任给小正数$\varepsilon>0$，

只要误差$|\delta_k|$充分小，就有

$$\left|I_n(f)-I_n(\tilde{f})\right|=\left|\sum_{k=0}^{n}A_k[f(x_k)-\tilde{f}_k]\right|\le\varepsilon$$

称求积公式是稳定的（即误差增长）。

定理3.1.2（充分条件）若求积公式中系数$A_k>0(k=0,1,\cdots,n)$，则此求积公式是稳定的.

插值求积公式的特点：

1）复杂函数的积分转化为计算多项式的积分（权为1）

2）求积系数A_k只与积分区间及节点x_k有关，而与被积分函数$f(x)$无关.

3）$n+1$个节点的插值求积公式至少具有n次代数精度。

4）求积系数之和 $\sum_{k=0}^{n} A_k = b-a$

证 因为 $\int_a^b f(x)dx = \int_a^b L(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

节点为$n+1$时，插值求积公式有n次代数精度，

所以取 $f(x)=1$时，上式严格相等，因此有

$$\int_a^b 1\cdot dx = \sum_{k=0}^{n} A_k \Rightarrow \sum_{k=0}^{n} A_k = b-a$$

§4.2 牛顿—柯特斯(Newton－Cotes)公式

1. Newton－Cotes公式

将区间 [a,b] n 等分，取步长 $h=\dfrac{b-a}{n}$，等距节点 $x_i=a+ih\ (i=0:n)$，

权函数 $\rho(x)\equiv 1$. 令 $x=a+th$，则 $Lagrange$ 插值基函数为

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{t-j}{i-j}\qquad (i=0:n)$$

故求积系数为

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

$$A_i = \frac{(-1)^{n-i} h}{i!(n-i)!} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)dt \quad (i=0:n)$$

令$C_i^{(n)} = \frac{A_i}{b-a} = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n} \int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (t-j)dt$ 称为Cotes系数.

则求积公式

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

称为 n 阶Newton—Cotes公式。

$$\boxed{\text{Cotes系数与}f(x),[a,b]\text{无关，仅与}n,i\text{有关！！}}$$

求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n} C_i^{(n)} f(x_i)$

其中$C_i^{(n)} = \frac{A_i}{b-a} = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n}\int_0^n \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n}(t-j)dt$

2. 常见的Newton—Cotes公式

（**1**）梯形公式**：** 当**n = 1，** 即**2**个节点，

Cotes系数为$C_0^{(1)} = C_1^{(1)} = \frac{1}{2}$

故求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \triangleq T$ 梯形公式。

代数精度**：** **1**次代数精度。

$$E_n(x)=\int_a^b \rho(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,dx$$

积分余项: $E_T(f)=\int_a^b \frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)dx=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)$,

其中 $f''(x)\in C[a,b]$, $\eta\in(a,b)$

第一积分中值定理:

条件: (1) $f(x),g(x)$在闭区间[a,b]上可积;

(2) $g(x)$在$[a,b]$上不变号;

(3) $f(x)$连续,

结论:在积分区间$[a,b]$上至少存在一点ξ,

有 $$\int_a^b f(x)g(x)dx=f(\xi)\int_a^b g(x)dx$$

$$E_n(x) = \int_a^b \rho(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,dx$$

（2）辛普森(Simpson)公式： 当$n = 2$，即3个节点

Cotes系数为$C_0^{(2)} = \frac{1}{6}$，$C_1^{(2)} = \frac{4}{6}$，$C_2^{(2)} = \frac{1}{6}$

故求积公式$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)] \triangleq S$

称为Simpson公式

代数精度：3次代数精度

积分余项：$E_S(f) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$ 其中$\eta \in (a,b)$

$$E_n(x) = \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)\, dx$$

（3）**Cotes公式**： 当**n = 4**， 即**5**个节点，

Cotes系数为$C_0^{(4)} = \dfrac{7}{90}$， $C_1^{(4)} = \dfrac{32}{90}$， $C_2^{(4)} = \dfrac{12}{90}$， $C_3^{(4)} = \dfrac{32}{90}$， $C_4^{(4)} = \dfrac{7}{90}$

故求积公式为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{90}[7f(a) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(b)] \triangleq C$$

称为**Cotes**公式。

代数精度：5次代数精度

积分余项：$E_C(f) = -\dfrac{2(b-a)}{945}\left(\dfrac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta)$　　其中$\eta \in (a, b)$

柯特斯系数表开头的一部分.

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	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

梯形公式1次代数精度

辛普森公式3次代数精度

牛顿柯特斯公式5次代数精度

注1：牛顿柯特斯系数：对称性；$n \geq 8$时出现负值！

注2：n阶牛顿柯特斯公式至少具有n次代数精度。

$$E_n(x)=\int_a^b \rho(x)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,dx$$

N-C公式的积分余项和代数精度

① n为偶数，设$f(x)\in C^{n+1}[a,b]$

则$E_n(f)=\dfrac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}(\xi)t(t-1)\ldots(t-n)dt$，其中$\xi\in[a,b]$,

验证知: $f(x)=x^{n+1}$时$E_n(f)=0$, 从而$I_n(f)$有$n+1$阶代数精度。

②n为奇数，$I_n(f)$有n阶代数精度。

N-C公式的积分余项和代数精度

n为偶，$I_n(f)$达到$n+1$阶代数精度。

需计算$n+1$个系数，$n+1$个函数值;

$n+1$为奇，$I_{n+1}(f)$达到$n+1$阶代数精度。

但需计算$n+2$个系数，$n+2$个函数值，

因此一般选用n为偶数的$N-C$公式。

N-C公式的稳定性：

$n \geq 8$时，$Cotes$系数出现负数，数值不稳定，不宜使用。

例3 利用梯形公式、**Simpson**公式、**Cotes**公式计算积分 $I=\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx$

解：（1）梯形公式$I \approx \frac{0.5}{2}(\sqrt{0.5}+\sqrt{1})=0.42677670$;

（2）*Simpson*公式$I \approx \frac{0.5}{6}(\sqrt{0.5}+4\sqrt{0.75}+\sqrt{1})=0.43093403$

（3）**Cotes**公式

$$I \approx \frac{0.5}{90}(7\sqrt{0.5}+32\sqrt{0.625}+12\sqrt{0.75}+32\sqrt{0.875}+7\sqrt{1})=0.43096407$$

准确值 $I=\int_{0.5}^{1}\sqrt{x}dx = x^{\frac{3}{2}}\Big|_{\frac{1}{2}}^{1} = 1-\frac{1}{2\sqrt{2}} \approx 0.43096441$

练习：分别利用梯形公式、**Simpson**公式、**Cotes**公式计算积分$\int_{1}^{2}\ln x dx$

§3.3 复化(合)求积公式

Newton－Cotes 公式： 插值型的，节点等距

存在问题：1)节点较多时，高次插值的不稳定导致高阶N-C公式的不稳定性($C_i^{(n)}$可能为负值)；

2)低阶因步长过大使得离散误差变大。

解决办法：复化求积

基本思想：将区间分成若干个子区间，在每个子区间上，用低阶N-C求积公式

$$I(f)=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} I_i$$

常用的几个公式

梯形公式 $T=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$

积分余项：$E_T=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\eta\in[a,b]$

代数精度： **1**次代数精度。

辛普森公式$S=\frac{b-a}{6}[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)]$

积分余项：$E_S=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)$

代数精度：**3**次代数精度

3.3.1 复化(合)梯形公式:

将$[a,b]$等分成n个区间，$h=\dfrac{b-a}{n}$， $x_i=a+ih,\ i=0\sim n$

在每个子区间上用梯形公式，得

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx=\frac{h}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i),\quad x_i<\xi_i<x_{i+1}$$

则 $I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx=\sum_{i=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{2}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right]-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)\right\}$

$$=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right]-\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1}f''(\xi_i)$$

$$=\underline{\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)]}-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)$$

$$=T_n+E_{T_n}$$

设$f''(x)$在$[a,b]$上连续,

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

$$h=\frac{b-a}{n}$$

$$I=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)]-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)$$

复化(合)梯形公式： $T_n(f)=\frac{h}{2}[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)+f(b)]$

余项： $E_{T_n}(f)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),\xi\in(a,b)$

稳定性：

设 $f(x_i)$ 有舍入误差 ε_i，且 $\max\limits_{0\le i\le n}|\varepsilon_i|=\frac{1}{2}\times10^{-t}$，则 $T_n(f)$ 的舍入误差为

$$|\eta_n|\le\frac{h}{2}[1+2\sum_{i=1}^{n-1}1+1]\times\frac{1}{2}\times10^{-t}=\frac{1}{2}\times10^{-t}(b-a),$$

所以复化梯形公式是数值稳定的。

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

收敛性：设$f''(x)$在$[\mathbf{a},\mathbf{b}]$上连续，则$\lim\limits_{n\to\infty} T_n = \int_a^b f(x)dx$

事实上

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

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2} \frac{b-a}{n} \left[\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\lim_{n\to\infty} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \frac{b-a}{n} + \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \frac{b-a}{n} \right]$$

$$= \frac{1}{2}\left(\int_a^b f(x)dx + \int_a^b f(x)dx \right) = \int_a^b f(x)dx$$

3.3.2 复化(合)simpson公式：

将$[a,b]$分成n个区间，$h=\dfrac{b-a}{n}$. 在每个子区间$[x_k,x_{k+1}]$上

用辛普森公式，记区间中点$x_{k+1/2}=x_k+\dfrac{h}{2}$，得

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx$$

$$=\sum_{k=0}^{n-1}\left\{\frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]-\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\right\}$$

记 $$\boxed{S_n=\frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+4f(x_{k+1/2})+f(x_{k+1})\right]=\frac{h}{6}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]}$$

称为复化辛普森求积公式

积分余项

$$E_{S_n}(f) = -\frac{h}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 \sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_k),\ \xi_k \in (x_k, x_{k+1})$$

$$= -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi), \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

$$= -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\xi), \xi \in (a,b)$$

可以证明：复化辛普森求积公式是收敛的和数值稳定的。

例 4 已知函数 $f(x)=\dfrac{\sin x}{x}$，给出 $n=8$ 的函数表(见表 3-3-1)，试用复化梯形公式及复化辛普森公式计算积分 $I=\int_0^1 \dfrac{\sin x}{x}dx$，并估计误差.

表 3-3-1

x	$f(x)$
0	1
1/8	0.9973978
1/4	0.9896158
3/8	0.9767267
1/2	0.9588510
5/8	0.9361556
3/4	0.9088516
7/8	0.8771925
1	0.8414709

解 将积分区间 $[0,1]$ 划分为 8 等分，应用复化梯形法求得 $T_8=0.9456909$；

将积分区间 $[0,1]$ 分为 4 等分，应用复化辛普森法求得 $S_4=0.9460832$.

准确值 $I=0.9460831\text{L}$

误差分析

$$E_{T_n}(f)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),\xi\in[a,b]$$

$$E_{S_n}(f)=-\frac{b-a}{2880}h^4f^{(4)}(\xi),\xi\in(a,b)$$

都需要提供9个点上的函数值，

计算量基本相同，

然而精度却差别很大。

由$f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1\cos(xt)dt\Rightarrow f^{(k)}(x)=\int_0^1\frac{d^k}{dx^k}(\cos xt)dt=\int_0^1 t^k\cos(xt+\frac{k\pi}{2})dt$

故$\max\limits_{0\le x\le 1}\left|f^{(k)}(x)\right|\le\int_0^1\left|\cos(xt+\frac{k\pi}{2})\right|t^k dt\le\int_0^1 t^k dt=\frac{1}{k+1}$

复化梯形公式误差$\left|I-T_8\right|\le\frac{h^2}{12}\max\limits_{0\le x\le 1}\left|f''(x)\right|\le\frac{1}{12}(\frac{1}{8})^2\frac{1}{3}\approx 0.434\times 10^{-3}$

复化辛普森公式误差$\left|I-S_4\right|\le\frac{1}{2880}(\frac{1}{4})^4\frac{1}{5}\approx 0.271\times 10^{-6}$

复化求积法如何选择步长h？

设给定精度ε，要求$|E_n(f)|=|I(f)-I_n(f)|<\varepsilon$,

例如：要使 $|E_{S_n}(f)|=\dfrac{(b-a)}{180}\left(\dfrac{h}{2}\right)^4|f^{(4)}(\xi)|<\varepsilon$

只要 $\dfrac{(b-a)}{180}\left(\dfrac{h}{2}\right)^4\max\limits_{\xi\in[a,b]}|f^{(4)}(\xi)|<\varepsilon$

若可估计出$\max\limits_{\xi\in[a,b]}|f^{(4)}(\xi)|<M$,

则 $$h<2\left(\frac{180\varepsilon}{(b-a)M}\right)^{1/4}$$

例 5 应用复合梯形公式计算积分$I=\int_0^1 6e^{-x^2}dx$，要求误差不超过10^{-6}，试确定所需的步长和节点个数.

$$E_{T_n}(f)=-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi),\xi\in[a,b]$$

解：令 $f(x)=6e^{-x^2}$，则 $f'(x)=-12xe^{-x^2}$，$f''(x)=12e^{-x^2}(2x^2-1)$，

$$f'''(x)=24xe^{-x^2}(3-2x^2)\neq 0,\quad x\in(0,1),$$

由于 $f''(x)$ 在 $[0,1]$ 上为单调函数，

所以 $\max\limits_{x\in[0,1]}|f''(x)|=\max\{|f''(0)|,|f''(1)|\}=\max\{|-12|,|12e^{-1}|\}=12$

由于复化梯形公式误差为 $E_n(f)=-\dfrac{h^2(1-0)}{12}f''(\xi),0<\xi<1$

$$因此\quad |E_n(f)|\leq\frac{h^2}{12}\max_{x\in[0,1]}|f''(x)|$$

$$E_{T_n}(f) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi), \xi \in [a,b]$$

要使$|E_n(f)| \le 10^{-6}$，只要 $\frac{h^2}{12}\max\limits_{x\in[0,1]}|f''(x)| \le 10^{-6}$

即 $\frac{12h^2}{12} = h^2 \le 10^{-6} \Rightarrow h \le 10^{-3}.$

取 $h = 10^{-3}$，由 $h = \frac{b-a}{n} = \frac{1}{n} \Rightarrow n = 10^3$

故可取节点数为**1001**.

§3.4 龙贝格(Romberg)求积公式

3.4.1 区间逐次半分法—— 变步长方法

§3.2、§3.3 介绍的定步长法虽然简单，但收敛速度慢，并且要事先确定一个适当的步长。而步长的选取是一个难题。故实际问题中常用变步长——区间逐次半分法进行数值积分。

基本思想：将积分区间$[a,b]$逐次分半，反复使用复合求积公式，直到相邻两次计算结果之差的绝对值达到误差精度为止，取后一次计算结果作为积分的近似值。

梯形法的逐次半分计算公式

1）将积分区间$[a,b]$ n等分：$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$

等分点 $x_i = a + ih (i = 0 \sim n)$；步长$h = \dfrac{b-a}{n}$，则复合梯形公式：

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

2）在每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上取中点 $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})(i = 0 \sim n\text{-}1)$，

共 2n+1 个分点.

用复化梯形公式求得该子区间上的积分

$$\frac{h}{4}[f(x_i)+2f(x_{i+1/2})+f(x_{i+1})],\ h\text{是二分前的步长}$$

每个子区间上的积分值相加，得

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

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

递推公式：$$\boxed{T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+\frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1}f(x_{i+1/2})}$$

例 6　计算积分 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

解　$f(0)=1$，　$f(1)=0.8414709$ ，

1）据梯形公式计算得

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

2）将区间二等分，求出 $f(\frac{1}{2})=0.9588510$ ，

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

3）进一步二分求积区间，

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

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

继续二分下去，计算结果见下表(k 代表二分次数，区间等分数 $n=2^k$).

表 3-4-1

k	1	2	3	4	5
T_n	0.9397933	0.9445135	0.9456909	0.9459850	0.9460596
k	6	7	8	9	10
T_n	0.9460769	0.9460815	0.9460827	0.9460830	0.9460831

它表明用复化梯形公式计算积分 I 要达到 7 位有效数字的精度需要二分区间 10 次，即要用到 1025 个分点，计算量很大.

例7. 用复化梯形公式计算积分$I=\int_0^1 \frac{1}{(1+x)\sqrt{x}}dx$,精确至3位有效数字。

解: $$I=\int_0^1 \frac{1}{(1+x)\sqrt{x}}dx=\int_0^1 \frac{2}{1+t^2}dt=\int_0^1 g(t)dt(\text{设}\sqrt{x}=t)$$

$$T_{2^0}=T_1=\frac{1}{2}[g(0)+g(1)]=1.5\,,\quad T_{2^1}=T_2=\frac{1}{2}T_1+\frac{1}{2}g(0.5)=1.55$$

$$T_{2^2}=T_4=\frac{1}{2}T_2+\frac{1}{4}[g(0.25)+g(0.75)]=1.5656$$

$$T_{2^3}=T_8=\frac{1}{2}T_{2^2}+\frac{1}{8}[g(0.125)+g(0.375)+g(0.625)+g(0.875)]=1.5695$$

注意到 $\left|T_{2^3}-T_{2^2}\right|\le\frac{1}{2}\times10^{-2}$, 取 $I\approx1.57$

事后估计（后验误差）

准确值 $$I=\int_0^1 \frac{1}{(1+x)\sqrt{x}}dx=\int_0^1 \frac{2}{1+t^2}dt=2\arctan t\Big|_0^1=\frac{\pi}{2}\approx1.57$$

◆在等距节点的情况下，用计算机计算积分值通常都采用区间逐次分半法进行。前一次的结果在分半之后仍可使用，易于编程。

算法如下：

将积分区间 $[a,b]$ **逐次半分为** 2^k **个区间（** $k=0,1,2,\cdots$ **是半分次数），则递推公式为：**

$$\begin{cases} T_1 = \dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] \\ T_{2^k} = \dfrac{1}{2}T_{2^{k-1}} + \dfrac{b-a}{2^k}\displaystyle\sum_{i=1}^{2^{k-1}} f[a+(2i-1)\dfrac{b-a}{2^k}] \quad (k=1,2,3,\cdots) \end{cases} \qquad (4.5)$$

由此可以得到一个梯形值序列 $\{T_{2^k}\}$**，其极限值即为定积分**

$$I(f)=\int_a^b f(x)dx$$

优点：**计算简单，由于每次的积分近似值** T_{2^k} **充分利用了前一次的近似值** $T_{2^{k-1}}$ **，所以工作量降低近一半。**

缺点：**收敛速度缓慢。**

改进方法

龙贝格算法：是基于逐次分半序列上的加速法，它是在梯形公式、辛普森公式和柯特斯公式之间的关系基础上，构造出的一种加速计算积分的方法！

3.4 .2 龙贝格(Romberg)算法

复化梯形求积公式的余项

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

$$I - T_{2n} = -\frac{(b-a)}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\bar{\xi}), \quad \bar{\xi} \in (a,b)$$

当 $f''(x) \in C_{[a,b]}$，**且** n **充分大时，** $f''(\xi) \approx f''(\bar{\xi})$，**有**

$$I - T_{2n} \approx -\frac{b-a}{12} \times \frac{1}{4}(h)^2 f''(\xi) = \frac{1}{4}(I - T_n) \Rightarrow \boxed{I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n)}$$

事后估计的理论依据

对给定的精度 $\varepsilon > 0$，**如果** $|T_{2n} - T_n| \le 3\varepsilon$，**则取** $I \approx T_{2n}$ 。

基本思想：在梯形序列$\{T_{2^k}\}: T_{2^0}, T_{2^1}, T_{2^2}, \cdots$ 的基础上，利用序列的某种线性组合构造一个新的序列，使其精度更高，收敛速度更快，这种方法又称为加速法。

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

$$\Rightarrow \boldsymbol{I} \approx \boldsymbol{T}_{2\boldsymbol{n}} + \frac{1}{3}(\boldsymbol{T}_{2\boldsymbol{n}} - \boldsymbol{T}_{\boldsymbol{n}}) = \frac{4}{3}\boldsymbol{T}_{2\boldsymbol{n}} - \frac{1}{3}\boldsymbol{T}_{\boldsymbol{n}} = \frac{4\boldsymbol{T}_{2\boldsymbol{n}} - \boldsymbol{T}_{\boldsymbol{n}}}{4-1} \triangleq \tilde{\boldsymbol{T}}$$

$$\tilde{\boldsymbol{T}} \triangleq \frac{4\boldsymbol{T}_{2\boldsymbol{n}} - \boldsymbol{T}_{\boldsymbol{n}}}{4-1}$$

$n=1$，计算右端

$$\frac{4T_2 - T_1}{4-1} = \frac{4}{3}\frac{b-a}{2}\left[\frac{1}{2}f(a) + f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{2}f(b)\right] - \frac{1}{3}(b-a)\left[\frac{1}{2}f(a) + \frac{1}{2}f(b)\right]$$

$$= (b-a)\left[\frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f(\frac{a+b}{2}) + \frac{1}{6}f(b)\right] = S_1$$

$$S_1 = \frac{4}{4-1}T_2 - \frac{1}{4-1}T_1$$ 比梯形公式有更高的代数精度。

$$S_2 = \frac{4}{4-1}T_4 - \frac{1}{4-1}T_2$$

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

$$\boxed{S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n}$$

$$\boxed{S_n = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n}$$

由梯形序列$\left\{\boldsymbol{T}_{2^k}\right\}$: $\boldsymbol{T}_{2^0}, \boldsymbol{T}_{2^1}, \boldsymbol{T}_{2^2}, \cdots$

得收敛速度较快的 Simpson 序列$\left\{\boldsymbol{S}_{2^k}\right\}$: $\boldsymbol{S}_{2^0}, \boldsymbol{S}_{2^1}, \boldsymbol{S}_{2^2}, \boldsymbol{S}_{2^3}, \cdots$

误差为$\boldsymbol{O(h^4)}$

根据 $\boxed{\text{复化辛普森求积公式的余项}}$

$$R_n = I - S_n = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\xi),$$

$$R_{2n} = I - S_{2n} = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{4}\right)^4 f^{(4)}(\tilde{\xi})$$

假定$f^{(4)}(\xi) \approx f^{(4)}(\tilde{\xi})$，两式相除，得

$$\frac{I - S_{2n}}{I - S_n} \approx \frac{1}{16}, \Rightarrow I - S_{2n} \approx \frac{1}{15}（S_{2n}\text{-}S_n）$$

$$I \approx S_{2n} + \frac{1}{15}（S_{2n}\text{-}S_n） = \frac{4^2 S_{2n}\text{-}S_n}{4^2 - 1} \stackrel{\Delta}{=} \tilde{S}$$

在 Simpson 序列$\{S_{2^k}\}$的基础上，通过线性组合公式

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

构造出收敛速度更快的 Cotes 序列$\{C_{2^k}\}: C_{2^0}, C_{2^1}, C_{2^2}, C_{2^3}, \ldots$

进一步，通过C_n与C_{2n}的线性组合公式

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

构造出龙贝格(Romberg)序列$\{R_{2^k}\}: R_{2^0}, R_{2^1}, R_{2^2}, R_{2^3}, \ldots$

用若干个积分近似值推算出更为精确的积分近似值的方法，称为外推方法。

称$\left\{T_{2^k}\right\},\left\{S_{2^k}\right\},\left\{C_{2^k}\right\},\left\{R_{2^k}\right\}$分别为梯形序列、辛普森序列、柯特斯序列和龙贝格序列。

用$\dfrac{4^m}{4^m-1},-\dfrac{1}{4^m-1}$对二分前后的计算结果做线性组合，

可得更高精度的求积公式。但 $m \geq 4$ 时，$\dfrac{4^m}{4^m-1} \approx 1,$

$-\dfrac{1}{4^m-1} \approx 0,$ 构造的求积公式与前一公式差别不大，

反而增加了计算量，实际上到*Romberg*公式为止。

$$\left.\begin{aligned}
S_n &= \frac{4}{4-1}T_{2n} - \frac{1}{4-1}T_n\,, \\
C_n &= \frac{4^2}{4^2-1}S_{2n} - \frac{1}{4^2-1}S_n\,, \\
R_n &= \frac{4^3}{4^3-1}C_{2n} - \frac{1}{4^3-1}C_n\,.
\end{aligned}\right\}$$

若$\left|R_{2^1} - R_{2^0}\right| < \varepsilon$,停； 否则，二分，表中增加一行：

$T_{2^5}, S_{2^4}, C_{2^3}, R_{2^2}$;

判断$\left|R_{2^2} - R_{2^1}\right| < \varepsilon$?是，停止；否则 继续。

Romberg算法表

$$\begin{tikzcd}
T_{2^0} \arrow[dr] & & & \\
T_{2^1} \arrow[r] \arrow[dr] & S_{2^0} \arrow[dr] & & \\
T_{2^2} \arrow[r] \arrow[dr] & S_{2^1} \arrow[r] \arrow[dr] & C_{2^0} \arrow[dr] & \\
T_{2^3} \arrow[r] \arrow[dr] & S_{2^2} \arrow[r] \arrow[dr] & C_{2^1} \arrow[r] \arrow[dr] & R_{2^0} \\
T_{2^4} \arrow[r] & S_{2^3} \arrow[r] & C_{2^2} \arrow[r] & R_{2^1} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots
\end{tikzcd}$$

记$T_m^{(k)} = \dfrac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}, (m = 1, 2, \cdots, k = 0, 1, 2, \cdots)$

$\left\{T_0^{(k)}\right\}$就是梯形序列$\left\{T_{2^k}\right\}$

$\left\{T_1^{(k)}\right\}$就是辛普森序列$\left\{S_{2^k}\right\}$

$\left\{T_2^{(k)}\right\}$就是柯特斯序列$\left\{C_{2^k}\right\}$

$\left\{T_3^{(k)}\right\}$就是龙贝格序列$\left\{R_{2^k}\right\}$

例 8 用 Romberg 算法计算 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$ 结果见下表(k 代表二分次数)：

表 3-4-2

k	T_{2^k}	$S_{2^{k-1}}$	$C_{2^{k-2}}$	$R_{2^{k-3}}$
0	0.9207355			
1	0.9397933	0.9461459		
2	0.9445153	0.9460869	0.9460830	
3	0.9456909	0.9460833	0.9460831	0.9460831

利用二分 3 次的数据(它们的精度都很差，只有两位有效数字)，通过三次加速求得 $R_1=0.9460831$，具有 7 位有效数字. 加速三次要比二分法收敛速度更快，精度更高。

小结：

1. 数值积分的法的思想；
2. 插值型求积公式：$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$, 其中$A_i = \int_a^b l_i(x)dx$；
3. Newton—Cotes 公式：常用—梯形、辛普森、柯特斯公式；
4. 复化积分公式：复化梯形、复化辛普森公式，余项；
5. 龙贝格积分法。

提高数值求积公式代数精度的方法

法一：增加节点$\{x_k\}$个数,如复化求积方法、加速的龙贝格求积方法

法二：适当选取节点$\{x_k\}$，如高斯求积公式

可以论证：$n+1$个节点的求积公式

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

最高可具有$2n+1$次代数精度。

这类求积公式就是高斯求积公式。

§3.5 Gauss型求积公式

求积公式 $\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

已经介绍的插值型求积方法:

是在给定求积节点 $x_i(i=0:n)$ 前提下，构造求积系数

$A_i(i=0:n)$ 得到求积公式。其代数精度为 n 或 n+1。

问题: 能否通过适当的选择求积节点 $x_i(i=0:n)$，确定

$A_i(i=0:n)$，使求积公式达到 2n+1 次的代数精度?

这种求积公式就是 Guass 求积公式

例如，两个节点$(n=1)$的求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-1)+f(1),$$ 具有**1**次代数精度

$$\boxed{\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}})+f(\frac{1}{\sqrt{3}}),}$$ 验证知有**3**次代数精度

高斯求积公式（满足2n+1=3）

$$-\frac{1}{\sqrt{3}},\frac{1}{\sqrt{3}}$$是高斯点

1．基本概念与定理

定义 若在区间$[a,b]$中适当选取求积节点$x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n$，使得插值型求积公式具有$2n+1$次代数精度，则称该求积公式为 Gauss 型求积公式，相应的节点$x_i(i=0:n)$为 Gauss 点。

构造高斯型求积公式的关键是求高斯点x_i和求积系数A_i。

方法1 待定系数法

要使$n+1$个节点的求积公式$\int_a^b \rho(x)f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$

具有$2n+1$次代数精度，

代入$f(x)=x^k(k=0,1,2,\cdots 2n+1)$，使求积公式精确成立

令$u_k=\int_a^b \rho(x)x^k dx$,则

$$\begin{cases} A_0+A_1+\cdots+A_n=u_0 \\ A_0x_0+A_1x_1+\cdots+A_nx_n=u_1 \\ \cdots\cdots \\ A_0x_0^{2n+1}+A_1x_1^{2n+1}+\cdots+A_nx_n^{2n+1}=u_{2n+1} \end{cases}$$

这是一个2n+2个方程、2n+2个未知数的非线性方程组，求解十分困难！

当n较大时，非线性方程组计算复杂.

方法2 求高斯点的方法

定理：对于插值型求积公式$\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$,

其节点 x_i（i=0：n）是高斯点的充分必要条件是：

以这些点为零点的$n+1$次多项式$\omega_{n+1}(x)$与任意不超过

n 次的多项式$P_m(x)$在区间$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交，

即 $$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P_m(x)dx = 0, m = 0:n$$

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

定理： 节点 x_i（$i=0\sim n$）是高斯点

$$\Leftrightarrow \int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P_m(x)dx = 0 \quad （m = 0\sim n）$$

证明： $\Leftarrow$ 对任一次数不超过$2n+1$的多项式 $f(x)$,

用$\omega_{n+1}(x)$除$f(x)$，记商为$q(x)$，余式为$m(x)$，

故 $f(x) = q(x)\omega_{n+1}(x) + m(x)$,

其中$q(x), m(x)$是不超过n次的多项式.

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

$$\therefore \int_a^b f(x)\rho(x)dx = \int_a^b [q(x)\omega_{n+1}(x) + m(x)]\rho(x)dx$$

$$= \int_a^b m(x)\rho(x)dx$$

定理：节点 x_i（$i=0\sim n$）是高斯点

$$\Leftrightarrow \int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P_m(x)dx = 0 \quad (m=0\sim n)$$

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

由于求积公式是插值型的，故对于$m(x)$ 精确成立

$$\left.\begin{aligned} &\text{即}\int_a^b m(x)\rho(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k m(x_k) \\ &\text{又}\,\omega_{n+1}(x_k)=0 \Rightarrow m(x_k) = f(x_k) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \int_a^b m(x)\rho(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

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

即求积公式对一切次数不超过$2n+1$的多项式都精确成立。

说明节点 x_i 是高斯点。

定理: 节点 x_i（$i=0\sim n$）是高斯点

$$\Leftrightarrow \int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P_m(x)dx=0 \quad (m=0\sim n)$$

证明: $\Rightarrow$ 设节点 $\boldsymbol{x_i}$ 是高斯点，则求积公式

对$\boldsymbol{f(x)=x^k\,(k=0,1,2,\cdots,2n+1)}$精确成立

$\boldsymbol{P_m(x)}$次数不超过$\boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{\omega_{n+1}(x)}$次数是$\boldsymbol{n+1}$，

$\boldsymbol{x_k}$是其零点，从而有

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

即以x_k为零点的$n+1$次多项式$\omega_{n+1}(x)$与任意不超过

n次的多项式$P_m(x)$在区间$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交.

构造高斯求积公式的步聚:

确定满足$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P_m(x)dx = 0\ (m = 0 \sim n)$

的高斯点x_i（即$\omega_{n+1}(x)$的零点）

$$\Downarrow$$

Gauss型求积公式的节点 x_i

$$\Downarrow$$ 插值型求积公式

求积系数 $A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx$, 其中$l_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$

$$\Downarrow$$

Gauss型求积公式 $I_n = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$

至少有$2n+1$次代数精度

例8：用两种不同的方法确定x_0, x_1, A_0, A_1，求出$Gauss$型求积公式

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

法一：因为两点$Gauss$型求积公式具有 3 次代数精度，

分别代入$f(x)=1$，x，x^2，x^3，使$Gauss$公式准确成立，

$$\text{即}\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_0 = -\sqrt{\dfrac{1}{3}}, x_1 = \sqrt{\dfrac{1}{3}} \\ A_0 = 1,\ A_1 = 1 \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

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

例8：用两种不同的方法确定x_0, x_1, A_0, A_1，求出Gauss型求积公式

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

法二：因为两点Gauss求积公式的Gauss点x_0, x_1是[−1, 1]上

以$\rho(x)=1$为权的某2次正交多项式$\omega_2(x)$的零点，

不妨设$\omega_2(x)=(x-x_0)(x-x_1)$. 于是

$$\left.\begin{aligned}&\int_{-1}^{1} 1\times(x-x_0)(x-x_1)\,\mathrm{d}x = 0 \Rightarrow \frac{2}{3}+2x_0x_1=0\\ &\int_{-1}^{1} x\times(x-x_0)(x-x_1)\,\mathrm{d}x = 0 \Rightarrow -\frac{2}{3}(x_0+x_1)=0\end{aligned}\right\} \Rightarrow \begin{cases} x_0 = -\sqrt{\dfrac{1}{3}} \\ x_1 = \sqrt{\dfrac{1}{3}} \end{cases}$$

求积系数 $A_0 = \int_{-1}^{1}\frac{x-x_1}{x_0-x_1}dx = 1$, $A_1 = \int_{-1}^{1}\frac{x-x_0}{x_1-x_0}dx = 1$

$$\Rightarrow \int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

练习：

用两种不同的方法确定x_0, x_1, A_0, A_1，求出$Gauss$型求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x}\, f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

答案：$x_0 = 0.821162, \quad x_1 = 0.289949,$

$$A_0 = 0.389111, \quad A_1 = 0.277556$$

对于 $\displaystyle\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$

答案：$x_0 = \dfrac{3}{7} - \dfrac{2}{7}\sqrt{\dfrac{5}{6}}, \quad x_1 = \dfrac{3}{7} + \dfrac{2}{7}\sqrt{\dfrac{5}{6}},$

$$A_0 = 1 + \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}}, \quad A_1 = 1 - \frac{1}{3}\sqrt{\frac{5}{6}}$$

Gauss求积公式的性质：

1、积分余项：$E_n(f)=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b \rho(x)w_{n+1}^2(x)dx, \eta\in(a,b)$；

2、代数精度： 具有$2n+1$次代数精度；

比如：取2n+2次多项式 $g(x)=(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2$

$$\left.\begin{aligned}&\int_a^b \rho(x)g(x)\,\mathrm{d}\,x>0\\ &\text{而}\sum_{k=0}^{n}A_k g(x_k)=0\end{aligned}\right\}\Rightarrow \int_a^b \rho(x)g(x)\,\mathrm{d}\,x\neq\sum_{k=0}^{n}A_k g(x_k)$$

因此只有$2n+1$阶代数精度；

Gauss求积公式的性质：

1、积分余项：$E_n(f)=\dfrac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+1)!}\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}^2(x)dx, \eta\in(a,b)$；

2、代数精度：　具有$2n+1$次代数精度；

3、稳定性：设 $l_k(x), k=0\sim n$为$Lagrange$基函数，

则 $l_k{}^2(x)\geq 0$ 为$2n$次代数多项式，故$Gauss$求积公式精确成立

即$\int_a^b \rho(x)l_k^2(x)dx=\sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i)=A_k \Rightarrow A_k=\int_a^b \rho(x)[l_k(x)]^2 dx>0$

求积系数都非负，公式稳定。

Gauss求积公式的性质：

1、积分余项：$E_n(f)=\dfrac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+1)!}\int_a^b \rho(x)w_{n+1}^2(x)dx, \eta\in(a,b)$；

2、代数精度：　具有$2n+1$次代数精度；

3、稳定性：　求积系数非负，公式稳定。

注：Gauss型求积公式的构造仍然比较复杂，

对于一些特定的积分区间和权函数，可以利用

正交多项式给出相应的Gauss型求积公式.

2. Gauss – Legendre型求积公式

勒让德多项式(定义): 区间[–1, 1]上定义的多项式序列

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]\quad (n=0,1,2,\cdots)$$

勒让德多项式 $P_{n+1}(x)$的 $n+1$ 个互异零点 $x_0, x_1, \cdots x_n$

就是求积公式 $\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$ 的高斯点.

$$\text{其中} A_k=\int_{-1}^{1} l_k(x)\mathrm{d}x=\frac{2}{\left(1-x_k^2\right)\left[P'_{n+1}\left(x_k\right)\right]^2}$$

2. Gauss – Legendre型求积公式

高斯一勒让德求积公式为$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{2}{\left(1-x_k^2\right)\left[P'_{n+1}\left(x_k\right)\right]^2} f\left(x_k\right)$

截断误差：$R[f] = \frac{2^{2n+3}\left[\left(n+1\right)!\right]^4}{(2n+3)\left[\left(2n+2\right)!\right]^3} f^{(2n+2)}(\eta)$，$\eta \in (-1,1)$

$$P_0(x)=1,\ \ P_1(x)=x,\quad P_2(x)=\frac{3}{2}(x^2-\frac{1}{3}),\quad P_3(x)=\frac{5}{2}(x^3-\frac{3}{5}x),$$

1）一点**Gauss**公式的**Gauss**点是**:** $x=0$

高斯求积公式$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx 2f(0)$，代数精度1次

2）两点**Gauss**公式的**Gauss**点是**:** $x_0=-\frac{1}{\sqrt{3}},\quad x_1=\frac{1}{\sqrt{3}}$

高斯求积公式$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx f(-\frac{1}{\sqrt{3}})+f(\frac{1}{\sqrt{3}})$,代数精度3次

3）三点**Gauss**公式的**Gauss**点是**:** $x_0=-\sqrt{\frac{3}{5}},\quad x_1=0,\quad x_2=\sqrt{\frac{3}{5}}$

高斯求积公式

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx\frac{5}{9}f(-\sqrt{\frac{3}{5}})+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f(\sqrt{\frac{3}{5}}),\ \text{代数精度5次}$$

高斯-勒让德（Gauss-Legendre）求积公式的节点和系数

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
0	0	2	3	±8611368 ±0.3399810	0.34785485 0.65214515
1	±0.5773503	1	4	±0.9061798 ±0.5384693 0	0.23692689 0.47862867 0.56888889
2	±0.7745967 0	0.55555556 0.88888889	5	±0.93246951 ±0.66120939 ±0.23861919	0.17132449 0.36076157 0.46791393

在上面的讨论中，我们考虑的积分区间为$[-1,1]$.

对于一般的求积区间$[a,b]$，只需作变换

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

则$[a,b]$变为$[-1,1]$，于是

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

$$\approx\frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n}A_i f\left(\frac{b-a}{2}t_i+\frac{a+b}{2}\right)$$

总结

1、梯形求积公式和辛普森求积公式精度低，复化梯形公式和复化辛普森求积公式精度较高，计算简单，使用非常广泛。

2、龙贝格求积公式，算法简单，加密节点提高积分近似程度时，前面的计算结果可以为后面的计算使用。有较简单的误差估计方法，收敛速度快.

3. 高斯求积公式，节点不规则，节点增加时，前面计算的函数值不能被后面使用，计算过程比较麻烦。但精度高，可以计算广义积分。

§3.6 数值微分

问题的提出：已知函数 $f(x)$ 的解析式或数表 $(x_i, f(x_i))\ (i = 0:n)$，如何用数值微分方法求函数在各点的导数。

1. 函数的数值微分

$$f'(a) = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = \lim_{h \to 0} \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{f\left(a+h\right) - f\left(a-h\right)}{2h}$$

向前差商 $f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$，误差 $-\frac{h}{2}f''(\eta)$

向后差商 $f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h}$，误差 $\frac{h}{2}f''(\eta)$

中心差商 $f'(a) \approx \frac{f\left(a+h\right)-f\left(a-h\right)}{2h}$，误差 $-\frac{h^2}{6}f'''(\eta)$

二阶中心差商 $f''(a) \approx \frac{f\left(a+h\right)-2f(a)+f\left(a-h\right)}{h^2}$，误差 $-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\eta)$

截断误差：步长越小，结果越准确；

舍入误差：步长不宜太小

事后估计法：

用h计算一次差商，记为D(h);

再用$\frac{h}{2}$计算一次差商，记为D($\frac{h}{2}$)；

若$\left|D(h)-D(\frac{h}{2})\right|<\varepsilon$(预先给定的数)，计算停止；

否则继续，直到满足要求为止。

2. 数据的数值微分

已知函数 $f(x)$ 的一组数据：

x_i	x_0	x_1	x_2	…	x_n
$f(x_i)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	…	$f(x_n)$

记 $x_0 = a,\ x_n = b$，则 $f(x)$ 的 n 次插值多项式为

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)} f(x_i)$$

其中 $\omega(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n)$。

当作近似 $f(x) \approx L_n(x)$ 时，

$$f'(x) \approx L_n'(x)$$

称为插值型求导公式。

误差 $f'(x) - L_n'(x) = \dfrac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'(x) + \dfrac{\omega(x)}{(n+1)!}\left[\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f^{(n+1)}(\xi)\right]$

如果只是求某个节点 x_i $(i = 0, 1, \cdots, n)$ 上的导数值，这时有

$$f'(x_i) - L_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'(x_i)$$

下面仅仅考察节点处的导数值。

为简化讨论，假定所给的节点是等距的，设步长为h

(1)两点公式：两节点x_0，$x_1 = x_0 + h$的函数值 $f(x_0)$, $f(x_1)$

则线性插值函数

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) @ \frac{x - x_1}{h} f(x_0) + \frac{x - x_0}{h} f(x_1)$$

$$\Rightarrow L_1'(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

$$f'(x_i) - L_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega'(x_i)$$

$$L_1'(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

$$\Rightarrow L_1'(x_0) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)], \quad L_1'(x_1) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

带余项的两点公式是

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] - \frac{h}{2}f''(\xi) \qquad \text{向前差商}$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h}[f(x_1) - f(x_0)] + \frac{h}{2}f''(\xi) \qquad \text{向后差商}$$

(2)三点公式：三节点 x_0，$x_1 = x_0 + h, x_2 = x_0 + 2h$ 的函数值

$f(x_0), f(x_1), f(x_2),$ 则线性插值函数

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2)$$

$$\Rightarrow L_2'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{2h^2} f(x_0) + \frac{2x-x_0-x_2}{-h^2} f(x_1) + \frac{2x-x_0-x_1}{2h^2} f(x_2)$$

带余项的三点求导公式如下：

$$f'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi)$$ 一阶中心差商

$$f'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]+\frac{h^2}{3}f'''(\xi)$$

(3)五点公式：五节点 $x_i = x_0 + ih(i = 0,1,2,3,4)$ 的函数值

$f(x_0), f(x_1), f(x_2), f(x_3), f(x_4)$，可同样推出五点公式：

用 m_i 表示一阶导数 $f'(x_i)$ 的近似值，有

$$m_0 = \frac{1}{12h}\left[-25f(x_0)+48f(x_1)-36f(x_2)+16f(x_3)-3f(x_4)\right]$$

$$m_1 = \frac{1}{12h}\left[-3f(x_0)-10f(x_1)+18f(x_2)-6f(x_3)+f(x_4)\right]$$

$$m_2 = \frac{1}{12h}\left[f(x_0)-8f(x_1)+8f(x_3)-f(x_4)\right]$$

$$m_3 = \frac{1}{12h}\left[-f(x_0)+6f(x_1)-18f(x_2)+10f(x_3)+3f(x_4)\right]$$

$$m_4 = \frac{1}{12h}\left[3f(x_0)-16f(x_1)+36f(x_2)-48f(x_3)+25f(x_4)\right]$$

用 M_i 表示二阶导数 $f''(x_i)$ 的近似值，有

$$M_0=\frac{1}{12h^2}\left[35f(x_0)-104f(x_1)+114f(x_2)-56f(x_3)+11f(x_4)\right]$$

$$M_1=\frac{1}{12h^2}\left[11f(x_0)-20f(x_1)+6f(x_2)+4f(x_3)-f(x_4)\right]$$

$$M_2=\frac{1}{12h^2}\left[-f(x_0)+16f(x_1)-30f(x_2)+16f(x_3)-f(x_4)\right]$$

$$M_3=\frac{1}{12h^2}\left[-f(x_0)+4f(x_1)+6f(x_2)-20f(x_3)+11f(x_4)\right]$$

$$M_4=\frac{1}{12h^2}\left[11f(x_0)-56f(x_1)+114f(x_2)-104f(x_3)+35f(x_4)\right]$$