2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第四章 数值积分与微分

主讲人：张治国

zgzhang@szu.edu.cn

深圳大学 医学部 生物医学工程学院

SHENZHEN UNIVERSITY HEALTH SCIENCE CENTER SCHOOL OF BIOMEDICAL ENGINEERING

本章内容

第四章 数值积分与微分

§1 Newton-Cotes公式

✓ 1-1 插值性求积公式及Cotes系数

1-2 低阶Newton-Cotes公式的余项

1-3 Newton-Cotes公式的稳定性

§2 复合求积法

✓ 2-1 复合求积公式

2-2 复合求积公式的余项及收敛的阶

2-3 步长的自动选择

2-4 复合Simpson求积的算法设计

本章内容

第四章 数值积分与微分

§3 Romberg算法

§4 Gauss求积法

§5 广义积分的数值方法

§6 数值微分

6-1 插值型求导公式

6-2 样条求导公式

§1 Newton-Cotes公式

- 对于积分

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

如果知道 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$，则由Newton-Leibniz公式有

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b)-F(a)$$

- 但是在工程技术和科学研究中，常会见到以下现象：
  - $f(x)$ 的解析式根本不存在，只给出了 $f(x)$ 的一些数值
  - $f(x)$ 的原函数 $F(x)$ 求不出来，如 $F(x)$ 不是初等函数
  - $f(x)$ 的表达式结构复杂，求原函数较困难

§1 Newton-Cotes公式

- 以上这些现象，Newton-Leibniz公式很难发挥作用，只能建立积分的近似计算方法。
- 这类方法很多，最常用的一种方法是数值积分法，利用插值多项式来构造数值求积公式。
- 利用插值方法建立的数值积分法分三种：
  1. 利用等距节点的Lagrange插值多项式建立的Newton-Cotes公式
  2. 利用加速技术建立的Romberg算法
  3. 利用Hermite插值多项式等建立的Gauss型求积公式

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- 问题描述：设 $f(x) \in C[a,b]$ ，求定积分

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{1.1}$$

的近似值。

- 方法：将 $[a, b]$ 进行 n 等分，令 $h = (b - a) / n$，称之为步长。取分点

$$x_k = a + kh, \qquad k = 0,1,\cdots,n$$

为节点，则 $f(x)$ 可表示为其Lagrange插值多项式及其余项之和：

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x) + R_n(x) = L(x) + R_n(x) \tag{1.2}$$

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- 将(1.2)代入(1.1)得

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)dx\right)f(x_k)+\int_a^b R_n(x)dx$$

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

其中

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b\left(\prod_{j=0,j\neq k}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)dx \tag{1.3}$$

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- 令

$$I_n=\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k)=A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)+\cdots+A_n f(x_n) \qquad (1.4)$$

$$R(I_n)=\int_a^b R_n(x)dx=\frac{1}{(n+1)!}\int_a^b f^{(n+1)}(\xi_x)\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)dx \qquad (1.5)$$

- 则有

$$I=I_n+R(I_n) \qquad (1.6)$$

- 以上表明，可以用数值 I_n 近似代替定积分值 I，其误差为 $R(I_n)$。
- 公式(1.4)为插值型求积公式，A_k 为求积系数， $R(I_n)$ 为数值积分的余项。

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

简化计算求积系数 A_k

- 设 $x=a+th$，因 $x\in[a,b]$，故 $t\in[0,n]$。因此

$$x-x_j=(t-j)h \qquad j=0,1,\cdots,n$$

$$x_k-x_j=(k-j)h \qquad j,k=0,1,\cdots,n,\ j\neq k$$

- 将上述结果代入(1.3)中，得

$$A_k=\frac{h(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)dt$$

$$=(b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n\prod_{j=0,j\neq k}^{n}(t-j)dt$$

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- 令

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \prod_{j=0, j\neq k}^{n} (t-j)dt \qquad (1.7)$$

- 则

$$A_k = (b-a)C_k^{(n)} \qquad (1.8)$$

- Newton-Cotes求积公式

$$I_n = (b-a)\sum_{k=0}^{n} C_k^{(n)} f(x_k) \qquad (1.9)$$

$C_k^{(n)}$ 称为Cotes系数。其中 n 表示对求积区间 $[a, b]$ 的等分数，k 是节点下标。$C_k^{(n)}$ 的计算只与 n 有关，与 $f(x)$ 和积分区间无关。

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- $C_k^{(n)}$ 的计算

当 $n=1$ 时，

$$C_0^{(1)}=-\int_0^1(t-1)dt=\frac{1}{2},\quad C_1^{(1)}=\int_0^1 tdt=\frac{1}{2}$$

当 $n=2$ 时，

$$C_0^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2(t-1)(t-2)dt=\frac{1}{6}$$

$$C_1^{(2)}=-\frac{1}{2}\int_0^2 t(t-2)dt=\frac{4}{6}$$

$$C_2^{(2)}=\frac{1}{4}\int_0^2 t(t-1)dt=\frac{1}{6}$$

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

Cotes系数表

n	$C_k^{(n)}$								
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	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$				
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	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- Newton-Cotes公式中最重要的 $n = 1, 2, 4$ 的情形：

$$T = I_1 = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b)\right] \tag{1.10}$$

$$S = I_2 = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] \tag{1.11}$$

$$C = I_4 = \frac{b-a}{90}\left[7f(a) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(b)\right] \tag{1.12}$$

分别称为梯形公式，Simpson公式及Cotes公式。

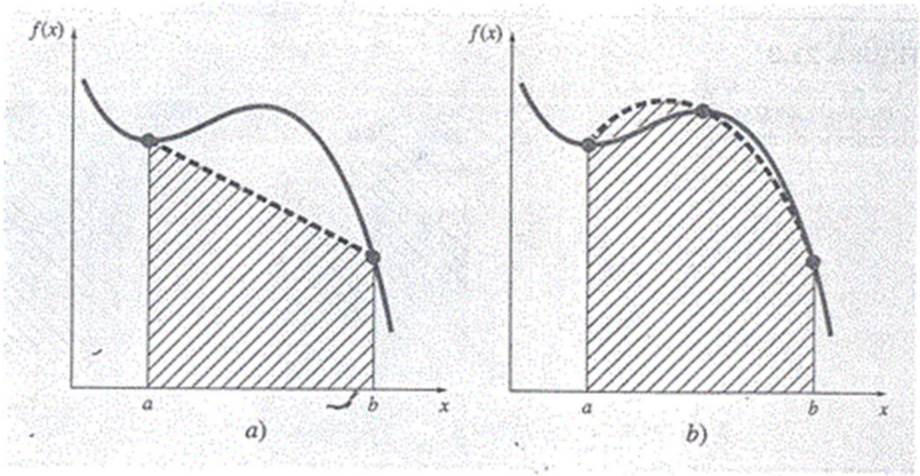
1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- 例： 用梯形公式和Simpson公式对幂函数 x^{μ} （ $\mu = 0, 1, 2, 3, 4$ ）和指数函数 e^x 在区间 $[-2, 0]$ 上积分。
- 数值结果列于下表：

函数 $f(x)$	1	x^1	x^2	x^3	x^4	e^x
精确值	2	–2	2.667	–4	6.4	0.865
梯形值	2	–2	4	–8	16	1.135
Simpson值	2	–2	2.667	–4	6.667	0.869

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

- 以上结果说明Simpson公式对于较多函数求积分比梯形公式较准确。



- 如果某个求积分公式对于比较多的函数能够准确成立，那么这个公式的使用价值比较大，可以说这个公式的精度比较高。

1-1 插值型求积公式及Cotes系数

定义代数精度的概念：

- 定义1. 若某个求积公式，对于任何次数不超过 m 的代数多项式都能准确成立，但对于 $m+1$ 次数代数多项式不能准确成立，则称该求积公式具有 m 次的代数精度。

- 梯形公式，Simpson公式及Cotes公式分别有1、3、5阶代数精度。

1-2 低阶Newton-Cotes公式的余项

- 梯形公式、Simpson公式、Cotes公式的余项分别如下（推导略，见pp124-127）：

1. 梯形公式的余项：

$$R(T) = -\frac{(b-a)^3}{12} f''(\eta), \qquad \eta \in (a,b) \tag{1.14}$$

2. Simpson公式的余项：

$$R(S) = -\frac{b-a}{180}\left(\frac{b-a}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b) \tag{1.15}$$

3. Cotes公式的余项：

$$R(C) = -\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{b-a}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \quad \eta \in (a,b) \tag{1.16}$$

1-3 Newton-Cotes公式的稳定性

- 考察Cotes系数

$$C_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!} \int_0^n \prod_{j=0, j\neq k}^{n} (t-j)dt$$

只与积分区间 $[a, b]$ 的节点 x_j 的划分有关，与函数 $f(x)$ 无关，其值可以精确给定。

- 因此用Newton-Cotes公式计算积分的舍入误差主要由函数 $f(x_k)$ 的计算引起。

1-3 Newton-Cotes公式的稳定性

关于稳定性的结论：

- 即 $\forall k \le n, C_k^{(n)} > 0$ 时， Newton-Cotes公式是稳定的。
- 事实上，当 $n < 8$ 时， $C_k^{(n)}$ 全为正数，公式都是稳定的。
- 若 $C_k^{(n)}$ 有正有负（如 $n \ge 8$ ），公式的稳定性将无法保证。
- 因此,在实际应用中一般不使用高阶Newton-Cotes公式，而是采用低阶复合求积法（见下节）。

§2 复合求积法

2-1 复合求积公式

- 为提高求积的精确度，将积分区间 $[a, b]$ 等份成 n 个子区间，在每个子区间上利用低阶求积公式， 然后将所有子区间的计算结果求和，就得到 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上积分的近似值，该方法称为复合求积法。

- 公式推导：将积分区间 $[a, b]$ 等份成 n 个子区间，

  $[x_k, x_{k+1}]$，$k = 0,1,\cdots,n-1$，各区间的长度（步长）

  为 $h=(b-a)/n$。

2-1 复合求积公式

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

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

因此
$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{2}[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$
$$= \frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right]$$
$$= \frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right]$$

- 将
$$T_n = \frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right] \tag{2.1}$$

称为复合梯形公式。

2-1 复合求积公式

2. 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}],\ k=0,1,\cdots,n-1$ 上利用Simpson公式，得

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

因此$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left(f(x_k)+4f\left(\frac{x_k+x_{k+1}}{2}\right)+f(x_{k+1})\right)$

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

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

- 将 $S_n=\dfrac{b-a}{6n}\left[f(a)+4\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+1/2})+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right]$ (2.2)

称为复合Simpson公式。

2-1 复合求积公式

3. 在每个子区间 $[x_k, x_{k+1}],\ k=0,1,\cdots,n-1$ 上利用Cotes公式，同理可得

$$C_n = \frac{b-a}{90n}\left[7f(a) + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/4}) + 12\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+1/2}) \right.$$

$$\left. + 32\sum_{k=0}^{n-1} f(x_{k+3/4}) + 14\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 7f(b)\right] \quad (2.3)$$

称为复合Cotes公式。

2-1 复合求积公式

- 例1 依次用 $n = 8$ 的复合梯形公式、$n = 4$ 的复合Simpson公式及 $n = 2$ 的Cotes公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

- 解：当 $n = 8$ 时，$h = 1/8 = 0.125$，所需各节点数值见下表

k	x_k	$f(x_k)$	k	x_k	$f(x_k)$
0	0	1.0000000	5	0.625	0.9361556
1	0.125	0.9973978	6	0.75	0.9088516
2	0.25	0.9896158	7	0.875	0.8771925
3	0.375	0.9767267	8	1	0.8414709
4	0.5	0.9588510			

2-1 复合求积公式

- 由公式(2.1)，(2.2)，(2.3)，有

$$T_8=\frac{1}{16}\left[f(0)+2\sum_{k=1}^{7}f(x_k)+f(1)\right]=0.9556909$$

$$S_4=\frac{1}{24}\{f(0)+f(1)+2[f(0.25)+f(0.5)+f(0.75)]+$$
$$4[f(0.125)+f(0.375)+f(0.625)+f(0.875)]\}$$
$$=0.9460833$$

$$C_2=0.9460832$$

（精确值为 $I=0.9460831$）

- 可见，复合梯形公式精度较低，复合Simpson公式精度和复杂度都令人满意，使用更普遍。

2-2 复合求积公式的余项及收敛的阶

- 当 n 足够大时，复合求积公式的余项近似表达式为（证明略，见pp128-129）

复合梯形公式：

$$I - T_n \approx -\frac{h^2}{12}[f'(b) - f'(a)] \qquad (2.5)$$

复合Simpson公式：

$$I - S_n \approx -\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 [f'''(b) - f'''(a)] \qquad (2.7)$$

复合Cotes公式：

$$I - C_n \approx -\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 [f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)] \qquad (2.9)$$

- 当 $n \to \infty$ $(h \to 0)$ 时，复合求积公式 T_n，S_n，及 C_n 都收敛于定积分值 I，且收敛速度一个比一个快。

2-2 复合求积公式的余项及收敛的阶

- 为了比较数值积分公式收敛的快慢，引入收敛阶的概念。
- 定义2.1 如果一种复合求积公式 I_n，当 $h \to 0$ 时，有

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-I_n}{h^p}=c \qquad (c\neq 0)$$

则称求积公式 I_n 是 $p\,(\geq 1)$ 阶收敛的。

- 综上易知，复合求积公式 T_n，S_n，及 C_n 分别是2，4及6阶收敛的。

2-3 步长的自动选取

- 计算精度与步长有关，但如何根据精度自动选择步长?

- 由复合梯形公式余项公式，有

$$I - T_{2n} \approx \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \tag{2.10}$$

- 步长的自动选取：规定的误差限为ε，令 $\Delta = |T_{2n} - T_n|/3$，只要 $\Delta \le \varepsilon$ 成立，则停止计算。
- 先取步长 $h = b - a$ ，计算 T_1 ，步长折半计算 T_2，则 $\Delta = |T_2 - T_1|/3$ ；如果 $\Delta \le \varepsilon$ ，则停止计算，取 $I \approx T_2$；如果 $\Delta > \varepsilon$ ，则步长折半，计算 T_4及 $\Delta = |T_4 - T_2|/3$ ，…，直到 $\Delta \le \varepsilon$ 。这时最后一个步长和算得的积分值就是最终满足精度的合适的步长和积分近似值。

2-3 步长的自动选取

- 由Simpson公式的余项公式，得

$$I - S_{2n} \approx \frac{1}{15}(S_{2n} - S_n) \tag{2.11}$$

- 由Cotes余项的近似公式，得

$$I - C_{2n} \approx \frac{1}{63}(C_{2n} - C_n) \tag{2.12}$$

- 类似地，记 $\Delta = \frac{1}{15}|S_{2n} - S_n|$ 或 $\Delta = \frac{1}{63}|C_{2n} - C_n|$，在确定步长时，采用类似上面的步长逐次折半的方法，用 Δ 是否小于 ε 作为步长折半计算是否停止的标志。

2-3 步长的自动选取

- 例2 用变步长的复合Simpson公式计算定积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

给定误差限 $\varepsilon = 0.5 \times 10^{-6}$。

2-3 步长的自动选取

- 解：取 $h=b-a=1$ ，则

$$S_1=\frac{1}{6}[f(0)+4f(0.5)+f(1)]=0.9461459$$

- 将步长折半，$h=0.5$ ，则

$$S_2=\frac{1}{12}\{f(0)+4[f(0.25)+f(0.75)]+2f(0.5)+f(1)\}$$
$$=0.94608688$$

- 由于$\Delta=|S_2-S_1|/15=0.39\times10^{-4}>\varepsilon$，故步长折半，$h=0.25$,

$$S_4=0.9460833$$

- 由于$\Delta=|S_4-S_2|/15=2.4\times10^{-7}<\varepsilon$ ，故

$$I\approx S_4=0.9460833$$

§6 数值微分

6-1 插值型求导公式

- 问题：不管 $f(x)$ 的表达式是否给定，已知 $f(x)$ 在 $n+1$ 个互异的节点

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

上的函数值 $\{f_k\}_{k=0}^{n}$，若 $f(x)$ 导数存在，那么如何采用数值方法去求 $f(x_k)$ 导数?

- 公式的简单推导：

假设 $f^{(n+1)}(x)$ 存在，则

$$f(x) = L_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\,,\quad \xi_x \in [a,b] \qquad (6.1)$$

6-1 插值型求导公式

- 对(6.1)式求导，得

$$f'(x) = L_n'(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\right)' + \frac{\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right)'}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)$$

- 当 $x = x_k, k = 0,1,\cdots,n$ 时，有

$$f'(x_k) = L_n'(x_k) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0, j\neq k}^{n}(x_k - x_j)\right), \ k = 0,1,\cdots,n \qquad (6.2)$$

- 因此，利用 $L_n'(x_k)$ 近似代替 $f'(x_k)$ ：

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

所产生的误差为

$$E_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\left(\prod_{j=0, j\neq k}^{n}(x_k - x_j)\right), \ k = 0,1,\cdots,n \qquad (6.3)$$

6-1 插值型求导公式

- 应用时多采用 $n=1, 2, 4$ 的二点、三点和五点插值求导公式：

- 1. 两点公式：当 $n=1$ 时，

$$L_1'(x)=\sum_{k=0}^{1} f_k\left(\prod_{j=0,j\neq k}^{1}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)'=\sum_{k=0}^{1} f_k\prod_{j=0,j\neq k}^{1}\frac{1}{x_k-x_j} \qquad (6.4)$$

令 $h=x_1-x_0$ ，得如下两点公式：

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{1}{h}(f_1-f_0)-\dfrac{h}{2}f^{(2)}(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{1}{h}(f_1-f_0)+\dfrac{h}{2}f^{(2)}(\xi) \end{cases} \qquad (6.5)$$

6-1 插值型求导公式

- 2. 三点公式：

$$
\begin{cases}
f'(x_0) = \dfrac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) + \dfrac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi) & (6.7) \\
f'(x_1) = \dfrac{1}{2h}(-f_0 + f_2) - \dfrac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi) & (6.8) \\
f'(x_2) = \dfrac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \dfrac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi) & (6.9)
\end{cases}
$$

称之为带余项的三点数值微分公式，其中(6.8)也称为（三点）中点公式。

6-1 插值型求导公式

- 3. 五点公式：见P154

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{1}{12h}(-5f_0+48f_1-36f_2+16f_3-3f_4)+\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{1}{12h}(-3f_0-10f_1+18f_2-6f_3+f_4)-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_2)=\dfrac{1}{12h}(f_0-8f_1+8f_3-f_4)-\dfrac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_3)=\dfrac{1}{12h}(-f_0+6f_1-18f_2+10f_3+3f_4)-\dfrac{h^4}{20}f^{(5)}(\xi) \\ f'(x_4)=\dfrac{1}{12h}(3f_0-16f_1+36f_2-48f_3+25f_4)+\dfrac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \end{cases} \tag{6.10}$$

6-1 插值型求导公式

- 当步长充分小时，舍入误差可能很大；并且可能出现在相邻节点处函数值接近出现相近数相减而丧失有效数字（详见p155）。

- 数值微分公式中的步长选择应兼顾截断误差与舍入误差，并非步长越小结果越精确。不适度地减少步长，可能会使总的误差扩大。

- 步长最佳值应该使截断误差与舍入误差匹配。

6-1 插值型求导公式

- 例1 已知$f(x)=\ln x$，利用两点公式计算$f'(1.8)$的近似值，依次取 $h=10^n$，$n=0,-1,-2,-3,-4,-5,-6$ 。
- 解：由两点公式

$$f'(1.8)\approx\frac{f(1.8+h)-f(1.8)}{h}$$

- 截断误差

$$|E(1.8)|\le\frac{h}{2}\max_{1.8\le x\le 1.8+h}|f''(x)|=\frac{h}{2\times 1.8^2}=\frac{h}{6.48}$$

6-1 插值型求导公式

- 取不同步长，计算结果如下表

h	$f'(1.8)$	$E(1.8)$	相邻两次计算的差
1	0.4418328	1.54321×10^{-1}	9.884×10^{-2}
0.1	0.5406722	1.54321×10^{-2}	1.335×10^{-2}
0.01	0.5540180	1.54321×10^{-3}	1.382×10^{-3}
0.001	0.5554000	1.54321×10^{-4}	1.491×10^{-4}
0.0001	0.5555491	1.54321×10^{-5}	9.486×10^{-5}
0.00001	0.555644	1.54321×10^{-6}	8.11×10^{-4}
0.000001	0.556455	1.54321×10^{-7}	

- 真实值为 $1/1.8 = 0.5555556$，与 $h = 0.0001$ 对应的值最接近（并非 h 越小越好）。

6-1 插值型求导公式

- 例2 给出函数表如下所示，利用三点公式求各节点的数值导数。

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f(x_i)$	1.2051709	1.4214028	1.6498588	1.8918247	2.1487213	2.4221188

6-1 插值型求导公式

- 解：$h=0.1$，由三点公式，得

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)] \\ f'(x_5) \approx \dfrac{1}{2h}[f(x_3)-4f(x_4)+3f(x_5)] \end{cases}$$

其余各点，利用中点公式(5.8)，有

$$f'(x_i) \approx \frac{1}{2h}[-f(x_{i-1})+(x_{i+1})],\quad i=1,2,3,4$$

- 计算结果如下：

x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f'(x_i)$	2.1011985	2.2234395	2.3521095	2.4943125	2.6514705	2.8164795

本章重点

- 了解数值微分和积分的必要性和基础（插值多项式及其理论）
- 掌握Newton−Cotes公式和复合求积公式
- 了解求积公式的稳定性、收敛阶、和自动选择步长的方法