第 4 章 数值积分与微分

姚遥

南京大学智能科学与技术学院

本章目录

- 引言
- Newton-Cotes公式
- Romberg算法
- Gauss公式
- 数值微分

基本的机械求积公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.4.1}$$

- 含有 $2n+2$ 个待定参数 $x_k, A_k\ (k=0,1,\dots,n)$

Newton-Cotes公式

- 等距取 x_k ，含有 $n+1$ 个待定参数 A_k ，求积公式具有精度 $n/n+1$ 次代数精度

Gauss公式

- 适当选择 x_k, A_k ，使求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度

定义4.3 如果求积公式(4.4.1)具有 $2n+1$ 次代数精度，则称节点 $x_k\ (k=0,1,\dots,n)$ 是Gauss点

- 求解Gauss点 x_k 及对应的 A_k：根据代数精度定义，联立 $2n+2$ 个方程求解

定理4.4 对于插值型求积公式(4.4.1)，节点 $x_k\ (k=0,\cdots,n)$ 是Gauss点的**充分必要条件**，是以这些点为零点的多项式 $\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$ 与任意次数不超过 n 的多项式 $P(x)$ 均正交，即

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{4.4.2}$$

数值积分 | Gauss公式的构造

必要性：Gauss点 ($2n+1$ 次代数精度) -> 正交

- 设 $P(x)$ 是任意次数不超过 n 的多项式，则 $P(x)\omega(x)$ 的次数不超过 $2n+1$
- 如果 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 是Gauss点，则求积公式对于 $P(x)\omega(x)$ 能准确成立，即有

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k P(x_k)\omega(x_k)$$

- 但 $\omega(x_k) = 0\ (k = 0, 1, \dots, n)$，故下式成立

$$\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{4.4.2}$$

故 $P(x)$ 和 $\omega(x)$ 正交

数值积分 | Gauss公式的构造

充分性：正交 -> Gauss点 ($2n+1$ 次代数精度)

- 对于任意给定次数不超过 $2n+1$ 的多项式 $f(x)$，用 $\omega(x)$ 除 $f(x)$，记商为 $P(x)$，余式为 $Q(x)$， $P(x)$ 与 $Q(x)$ 都是次数不超过 n 的多项式：

$$f(x) = P(x)\omega(x) + Q(x)$$

- 利用式正交关系 $\int_a^b P(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = 0$，可得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b Q(x)\,\mathrm{d}x \tag{4.4.3}$$

充分性：正交 -> Gauss点 ($2n+1$ 次代数精度)

- 求积公式是插值型的，故有 n 次代数精度，故对 $Q(x)$ 能准确成立（定理4.1）

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

- 注意到 $\omega(x_k) = 0$，因此

$$Q(x_k) = P(x_k)\omega(x_k) + Q(x_k) = f(x_k)$$

- 从而有

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

知式(4.4.1)对次数不超过 $2n+1$ 的多项式均成立

数值积分 | Gauss–Ledengre公式

$a=-1$，$b=1$，考察区间 $[-1,1]$ 的Gauss公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{4.4.4}$$

Legendre多项式

- 当区间为 $[-1,1]$、权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 时，由 $\{1,x,x^2,\dots,x^n\}$ 正交化得到的多项式

$$P_0(x)=1 \qquad P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n] \quad (n=1,2,\cdots)$$

- $P_{n+1}(x)$ 与任一次数不超过 n 的多项式正交
- $P_{n+1}(x)$在区间 $(-1,1)$ 内有 $n+1$ 个不同实零点

Legendre多项式 $P_{n+1}(x)$ 的零点就是求积公式$(4.4.4)$的Gauss点

- 被称为Gauss-Legendre公式

$n = 0$ 的情况

- 取 $P_1(x) = x$ 的零点 $x_0 = 0$ 作节点构造求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0)$$

- 令上式对 $f(x) = 1$ 准确成立，即可定出 $A_0 = 2$

- 得到中矩形公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2f(0)$$

数值积分 | Gauss–Ledengre公式

$n=1$ 的情况

- 取 $P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$ 的两个零点 $\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$ 构造求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+A_1 f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

- 令上式对 $f(x)=1, x$ 准确成立，有

$$\begin{cases} A_0+A_1=2 \\ A_0\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)+A_1\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)=0 \end{cases}$$

- 解出$A_0=A_1=1$，得到两点Gauss-Legendre公式

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

数值积分 | Gauss–Ledengre公式

继续推导，得到 $n = 2$ 的三点Gauss-Legendre公式，四点、五点的公式见表4.5

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

拓展到任意求积区间 $[a, b]$

- 通过变换 $x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}$ 可以化到区间 $[-1,1]$

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

数值积分 | Gauss公式余项

定理4.5 对于Gauss公式 (4.4.1)，其余项

$$R(x) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\int_a^b \omega^2(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$$

推导如下：

- 以 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 为节点构造次数不大于 $2n+1$ 的多项式 $H(x)$，使其满足条件

$$H(x_i) = f(x_i) \qquad H'(x_i) = f'(x_i)$$

- $H(x)$ 为 Hermite插值多项式

数值积分 | Gauss公式余项

- 由于Gauss公式具有 $2n+1$ 次代数精度，它对于 $H(x)$ 能准确成立

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

- 因此余项

$$\begin{aligned} R(x) &= \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b H(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b [f(x) - H(x)]\,\mathrm{d}x \end{aligned}$$

- Hermite插值余项

$$R(x) = f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\,\omega_{n+1}^2(x) \tag{2.6.6}$$

数值积分 | Gauss公式余项

- 因此

$$R(x) = \int_a^b \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!} \omega^2(x)\,\mathrm{d}x$$

- 由于 $\omega^2(x)$ 在 $[a,b]$ 上保号，再次使用加权积分中值定理可得

$$R(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \omega^2(x)\,\mathrm{d}x$$

数值积分 | Gauss公式的稳定性：系数非负

Newton-Cotes公式不稳定

- 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负

Gauss公式不但是高精度的，而且数值稳定

- 求积系数具有非负性

定理4.6 Gauss公式(4.4.1) 求积系数 $A_k(k=0,1,\dots,n)$ 全是正的

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.4.1)$$

证明：

- 研究 n 次的Lagrange多项式基函数 $l_k(x)$

$$l_k(x) = \prod_{j=0(j\neq k)}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)}$$

- $l_k^2(x)$ 是 $2n$ 次多项式，故Gauss公式对于 $l_k^2(x)$ 能准确成立

$$0 < \int_a^b l_k^2(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} A_i\, l_k^2(x_i) = A_k$$

数值积分 | Gauss公式的稳定性：噪声鲁棒

实际计算时，通常不一定能提供准确的数据 $f_k = f(x_k)$，而只是给出含有误差（例如舍入误差）的数据 f_k^*，故实际求得的积分值为 $I_n^* = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k^*$

- I_n 和 I_n^* 之间的误差为

$$|I_n^* - I_n| = \left|\sum_{k=0}^{n} A_k(f_k^* - f_k)\right| \le \sum_{k=0}^{n} |A_k(f_k^* - f_k)|$$

- 由于Gauss公式求积系数具有非负性

$$|I_n^* - I_n| \le \sum_{k=0}^{n} A_k |f_k^* - f_k| \le \left(\sum_{k=0}^{n} A_k\right) \max_{0\le k\le n} |f_k^* - f_k|$$

- 由式 (4.1.4) 可得 $\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a$，故

$$|I_n^* - I_n| \le (b-a) \max_{0\le k\le n} |f_k^* - f_k|$$

数值积分 | 带权Gauss公式

考察积分

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

- $\rho(x)\geq 0$ 为权函数，当 $\rho(x)\equiv 1$ 时即为普通积分

仿照普通积分的处理方式，考察求积公式

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

- 如果它对于任意次数不超过 $2n+1$ 的多项式均能准确成立，则称之为Gauss型的
- 上述Gauss公式的求积节点 x_k 仍称为Gauss点

数值积分丨带权Gauss公式的构造

$\boldsymbol{x_k(k=0,1,\dots,n)}$ **是Gauss点的充要条件**：$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$ 是区间 $[a,b]$ 带权 $\rho(x)$ 的正交多项式

- 若 $a=-1, b=1$，且取权函数 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，则所建立的Gauss公式为

$$\int_a^b \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \qquad (4.4.6)$$

称为Gauss-Chebyshev公式

- 如何确定 x_k？

数值积分 | 带权Gauss公式的构造

- **回顾**：区间 $[-1,1]$ 上关于权函数 $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式是Chebyshev多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x),\ |x| \le 1$$

- 求积公式的Gauss点是 $n+1$ 次Chebyshev多项式的零点，即

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right) \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

数值积分 | 带权Gauss公式的构造

运用正交多项式的零点构造Gauss求积公式，只是针对某些特殊的权函数才有效

- 一般权函数的正交化很复杂

一般情况，借鉴4.1.2节的待定系数法

- 求积公式(4.1.3)具有 m 次代数精度，只要令其对于 $f(x)=1,x,x^2,\ldots,x^m$ 都成立

$$\begin{cases} \sum A_k = b-a \\ \sum A_k x_k = \dfrac{1}{2}(b^2-a^2) \\ \quad\vdots \\ \sum A_k x_k^m = \dfrac{1}{m+1}(b^{m+1}-a^{m+1}) \end{cases} \tag{4.1.4}$$

- 是一个确定参数x_k和A_k的代数问题

设要构造下列形式的Gauss公式

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \tag{4.4.7}$$

- 令它对于 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 准确成立，得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 = \dfrac{2}{5} \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 = \dfrac{2}{7} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 = \dfrac{2}{9} \end{cases} \tag{4.4.8}$$

- 解得 $x_0 = 0.821162, x_1 = 0.289949, A_0 = 0.389111, A_1 = 0.277556$

本章目录

数值微分 | 中点方法

按照数学分析的定义，导数是差商的极限

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

- 如果精度要求不高，则可以取差商作为倒数的近似值，即

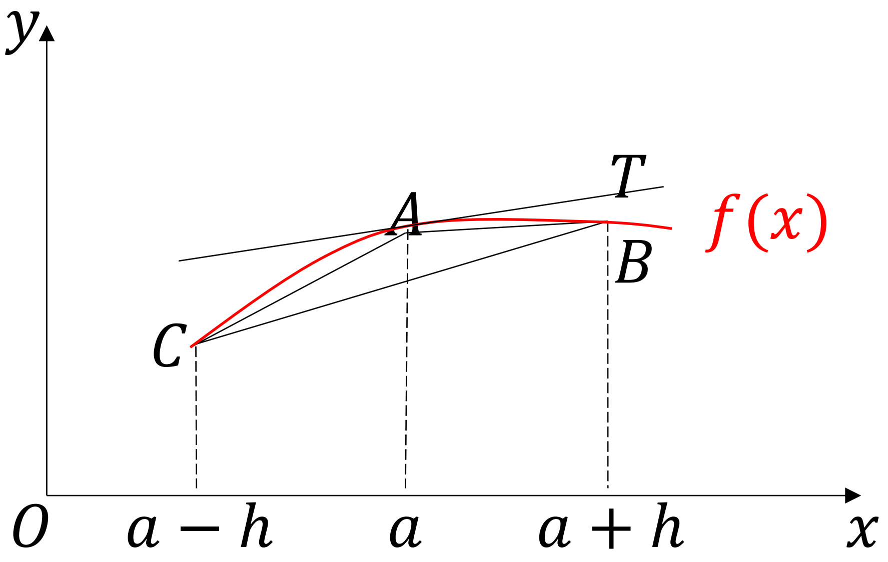
$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \qquad f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

- 中点方法（两者取平均）

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

数值微分 | 中点方法

- 三种导数近似值对应向前差商、向后差商、中心差商
- 对应AB、AC和BC的斜率
- 中点方法更为可取



机械求导方法

- 将导数的计算归结为计算 f 在若干节点上的函数值

数值微分 | 误差分析

- 利用中点公式计算导数 $f'(a)$ 的近似值，需要选择合适的步长，为此需要进行误差分析

$$G(h) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

- 分别将 $f(a \pm h)$ 在 $x = a$ 处作Taylor展开

$$f(a \pm h) = f(a) \pm hf'(a) + \frac{h^2}{2!}f''(a) \pm \frac{h^3}{3!}f'''(a) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(a) \pm \frac{h^5}{5!}f^{(5)}(a) + \cdots$$

数值微分丨误差分析

- 代入中点公式，化简

$$G(h) = f'(a) + \frac{h^2}{3!} f'''(a) + \frac{h^4}{5!} f^{(5)}(a) + \cdots$$

- **截断误差**：步长 h 越小，计算结果越准确

- **舍入误差**：当 h 很小时，$f(a+h)$ 与 $f(a-h)$ 很接近，直接相减会造成有效数字的严重损失

数值微分 | 误差分析

举例：中点公式求 $f(x)=\sqrt{x}$ 在 $x=2$ 处的一阶导数

$$G(h)=\frac{\sqrt{2+h}-\sqrt{2-h}}{2h}$$

- 取四位数字计算，结果如下表所示

h	$G(h)$	h	$G(h)$	h	$G(h)$
1	0.3660	0.05	0.3530	0.001	0.3500
0.5	0.3564	0.01	0.3500	0.0005	0.3000
0.1	0.3535	0.005	0.3500	0.0001	0.3000

- 导数的准确值 $f'(2)=0.353553$
- $h=0.1$ 的逼近效果最好，如果进一步缩小步长，则逼近效果会越来越差

数值微分 | 插值型求导公式

对于列表函数 $y = f(x)$，可以建立插值多项式 $y = P_n(x)$ 作为它的近似

- 由于多项式的求导比较容易，取 $P_n'(x)$ 的值作为 $f'(x)$ 的近似值，即

$$f'(x) \approx P_n'(x) \tag{4.5.1}$$

  统称为插值型求导公式

- 即使 $f(x)$ 与 $P_n(x)$ 的相差不多，导数的近似值 $P_n'(x)$ 与导数的真值 $f'(x)$ 仍然可能差别很大，因而在使用求导公式(4.5.1)时应特别注意误差的分析

数值微分 | 插值型求导公式：误差分析

插值余项

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (2.2.14)$$

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) \qquad (2.2.12)$$

插值型求导公式余项

$$f'(x) - P_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f^{(n+1)}(\xi)$$

- ξ 是 x 的未知函数，无法对第二项进一步化简
- 对于任意的点 x，误差 $f'(x) - P_n'(x)$ 是无法预估的

数值微分 | 插值型求导公式：误差分析

- 如果限定求某个节点 x_k 的导数值，根据

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) \qquad (2.2.12)$$

可得 $\omega_{n+1}(x_k) = 0$，所以上面第二项变为零

- 节点 x_k处的余项公式为

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k)$$

- 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

两点公式

- 已给出两个节点 x_0, x_1 上的函数值 $f(x_0), f(x_1)$，作线性插值公式

$$P_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

- 上式两端求导，记$x_1 - x_0 = h$，有

$$P_1'(x) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

- 于是有下列求导公式

$$P_1'(x_0) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)] \quad P_1'(x_1) = \frac{1}{h}[-f(x_0) + f(x_1)]$$

数值微分 | 插值型求导公式：两点公式

带余项的两点公式

- 根据余项公式

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k) \qquad (4.5.2)$$

- 故带余项的两点公式为

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

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

三点公式

- 设已给出三个节点 $x_0, x_1 = x_0 + h,\ x_2 = x_0 + 2h$ 上的函数值，作二次插值

$$P_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

- 令 $x = x_0 + th$，上式可表示为

$$P_2(x_0+th) = \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0) - t(t-2)f(x_1) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_2)$$

三点公式

- 两端对 t 求导，可以推导出

$$P_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0)-(4t-4)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)] \tag{4.5.3}$$

- 分别取 $t=0,1,2$，得到三点公式在三个节点的导数值

$$P_2'(x_0)=\frac{1}{2h}[-3f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]$$

$$P_2'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]$$

$$P_2'(x_2)=\frac{1}{2h}[f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)]$$

数值微分｜插值型求导公式：三点公式

带余项的三点公式

- 根据余项公式

$$f'(x_k) - P_n'(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_k) \tag{4.5.2}$$

- 带余项的三点求导公式

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \\ f'(x_1) &= \frac{1}{2h}[-f(x_0) + f(x_2)] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) \\ f'(x_2) &= \frac{1}{2h}[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)] + \frac{h^2}{3}f'''(\xi) \end{aligned} \tag{4.5.4}$$

- 式(4. 5. 4)是中点公式，它少用了一个函数值

数值微分 | 高阶数值微分公式

用插值多项式 $P_n(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似函数，再用 $P_n(x)$ 的 k 阶导数作为 $f(x)$ k 阶导数的近似

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x) \qquad (k = 0, 1, \dots)$$

二阶三点公式

- 将式(4.5.3)再对 t 求导一次，可以推导出

$$P_2'(x_0 + th) = \frac{1}{2h}[(2t-3)f(x_0) - (4t-4)f(x_1) + (2t-1)f(x_2)] \qquad (4.5.3)$$

$$P_2''(x_0 + th) = \frac{1}{h^2}[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)]$$

数值微分 | 高阶数值微分公式

二阶三点公式

$$P_2''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)]$$

带余项的二阶三点公式

$$f''(x_1) = \frac{1}{h^2}[f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \qquad (4.5.5)$$

- 直接用泰勒展开即可得

五点公式

- 设已给出五个节点 $x_i = x_0 + ih$，$i = 0,1,2,3,4$上的函数值，类似可得

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

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

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

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

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

m_i 代表一阶导数 $f'(x_i)$ 的近似值

数值微分丨插值型求导公式：五点公式

二阶五点公式

$$M_0=\frac{1}{12h^2}[35f(x_0)-104f(x_1)+114f(x_2)-56f(x_3)+11f(x_4)]$$
$$M_1=\frac{1}{12h^2}[11f(x_0)-20f(x_1)+6f(x_2)+4f(x_3)-f(x_4)]$$
$$M_2=\frac{1}{12h^2}[-f(x_0)+16f(x_1)-30f(x_2)+16f(x_3)-f(x_4)]$$
$$M_3=\frac{1}{12h^2}[-f(x_0)+4f(x_1)+6f(x_2)-20f(x_3)+11f(x_4)]$$
$$M_4=\frac{1}{12h^2}[11f(x_0)-56f(x_1)+114f(x_2)-104f(x_3)+35f(x_4)]$$

M_i 表示二阶导数 $f''(x_i)$ 的近似值

数值微分丨插值型求导公式：五点公式

- 对于给定的一张数据表，用五点公式求节点上的导数值往往可以获得满意的结果
- 五个相邻节点的选择原则，一般是在所考察的节点的两侧各取两个邻近的节点
- 如果一侧的节点数不足两个（一侧只有一个或没有节点），则用另一侧的节点补足

例子 利用$f(x)=\sqrt{x}$的一张数据表，按五点公式求节点上的导数值m_i，M_i，并与准确值比较

x_i	$f(x_i)$	m_i	$f'(x_i)$	$M_i/\times 10^3$	$f''(x_i)\ /\times 10^3$
100	10.000000	0.050000	0.050000	-0.24758	-0.25000
101	10.049875	0.049751	0.049752	-0.24591	-0.24630
102	10.099504	0.049507	0.049507	-0.24191	-0.24268
103	10.148891	0.049267	0.049266	-0.23958	-0.23916
104	10.198039	0.049029	0.049029	-0.23691	-0.23572
105	10.246950	0.048795	0.048795	-0.23666	-0.23236

采用样条函数 $S(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似函数，不但函数值很接近，导数值也很接近

- 对于三次样条 $S_3(x)$，有

$$\left|f^{(a)}(x)-S_3^{(a)}(x)\right|=O(h^{4-a}) \qquad (a=0,1,2,3)$$

- 用样条函数建立数值微分公式是很自然的，即

$$f^{(a)}(x)\approx S_3^{(a)}(x) \qquad (a=0,1,2,3) \qquad (4.5.6)$$

- 与前述插值型微分公式(4.5.1)不同，样条微分公式(4.5.6)可以用来计算插值范围内任何一点x(不仅是节点x_k)上的导数值

数值积分与数值微分 | 总结

4.1 引言

- 积分中值定理、梯形公式、矩形公式、机械求积、代数精度、插值型求积公式

4.2 Newton-Cotes公式

- 定义、Cotes系数、Newton-Cotes公式的稳定性
- 偶阶求积公式的代数精度、低阶求积公式的余项
- 复化求积法、误差的渐近性

4.3 Romberg算法

- 梯形法的递推化、误差的事后估计法
- Romberg公式、Richardson外推加速法

数值积分与数值微分 | 总结

4.4 Gauss公式

- 定义、Gauss点、充分必要条件
- Gauss-Legendre公式
- Gauss公式的余项和稳定性、带权的Gauss公式
- 构造加权Gauss公式的一般方法

4.5数值微分

- 中点方法、机械求导方法
- 插值型的求导公式、误差分析
- 样条求导

第四章

习题 2(1)(4)，5，7，8，12