计 算 方 法

梅立泉

School of Mathematics and Statistics, Xi'an Jiaotong University

要求

1 了解函数的内积、范数的概念, 及常用的正交多项式

要求

1. 了解函数的内积、范数的概念，及常用的正交多项式
2. 掌握正规方程组的得出、最小二乘拟合，最优平方逼近

要求

1. 了解函数的内积、范数的概念，及常用的正交多项式
2. 掌握正规方程组的得出、最小二乘拟合，最优平方逼近

函数最优逼近

函数逼近问题. **最优平方逼近和最优一致逼近**多项式$p(x)$, 使得在整个区间$[a,b]$上或在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$ 上$p(x)$ 与$f(x)$ 的误差在两种不同度量意义下达到最小.

函数逼近问题. **最优平方逼近和最优一致逼近**多项式$p(x)$, 使得在整个区间$[a,b]$上或在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$ 上$p(x)$ 与$f(x)$ 的误差在两种不同度量意义下达到最小.

连续函数空间$C[a,b]$.

Definition

设V是$C[a,b]$的一个线性子空间, 函数$\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$ $\in V\subset C[a,b]$, $c_i\in R\,(i=0,1,\cdots,n)$, 如果关系式

$$c_0\phi_0(x)+c_1\phi_1(x)+\cdots+c_n\phi_n(x)=0,\forall x\in[a,b]$$

当且仅当$c_0=c_1=\cdots=c_n=0$时成立, 则称$\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,$ $\phi_n(x)$线性无关; 否则称$\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$ 线性相关.

Definition

若线性子空间V是由$n+1$个线性无关的函数$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots,$ $\phi_n(x)$所构成，即$\forall p(x) \in V$都有

$$p(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \cdots + c_n\phi_n(x).$$

则称$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$是线性子空间$V$的一组基函数，$V$是由$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ 生成的线性子空间，记为

$$V = Span\{\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)\} .$$

Definition

若线性子空间V是由$n+1$个线性无关的函数$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$所构成，即$\forall p(x) \in V$都有

$$p(x) = c_0\phi_0(x) + c_1\phi_1(x) + \cdots + c_n\phi_n(x).$$

则称$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$是线性子空间$V$的一组基函数，$V$是由$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ 生成的线性子空间，记为

$$V = Span\left\{\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)\right\}.$$

并称V是$n+1$维空间，系数$c_0, c_1, \cdots, c_n$称为$p(x)$ 在基$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$下的坐标. $p(x)$称为广义多项式.

特别地, 若取$\phi_i(x) = x^i\ (i = 0, 1, \cdots, n)$, 显然$\phi_i(x) \in C[a, b]$, $\phi_i(x)(i = 0, 1, \cdots, n)$线性无关. $\phi_i(x) = x^i\ (i = 0, 1, \cdots, n)$是它的一组基. $H_n = Span\{1, x, x^2, \cdots, x^n\}$ 是$C[a, b]$的$n + 1$维子空间.

特别地，若取$\phi_i(x)=x^i\ (i=0,1,\cdots,n)$，显然$\phi_i(x)\in C[a,b]$，$\phi_i(x)(i=0,1,\cdots,n)$线性无关. $\phi_i(x)=x^i\ (i=0,1,\cdots,n)$是它的一组基. $H_n=Span\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$ 是$C[a,b]$的$n+1$维子空间.

Definition

已知函数$f(x)$, $g(x)$在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$上的函数值$f(x_i)$, $g(x_i)$ 和权系数$\omega_i(i=1,2,\cdots,m)$，则

$$(f,g)=\sum_{i=1}^{m}\omega_i f(x_i)g(x_i)$$

称为函数f与g在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$上关于权系数ω_i的内积.

Definition

给定$f, g \in C[a,b]$, $\omega(x)$是区间$[a,b]$上的权函数, 则

$$(f,g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x)\,\mathrm{d}x$$

称为函数f与g在区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$的内积, 式中积分上、下限可取无穷大.

函数的内积和范数

Definition

给定$f, g \in C[a,b]$, $\omega(x)$是区间$[a,b]$上的权函数, 则

$$(f,g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) \,\mathrm{d}x$$

称为函数f与g在区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$的内积, 式中积分上、下限可取无穷大.

权系数$\omega_i > 0$, 权函数$\omega(x) \geq 0$, $\forall x \in [a,b]$. 今后凡未给出ω_i或$\omega(x)$时, 均默认为$\omega_i \equiv 1$, 或者$\omega(x) \equiv 1$.

函数的内积和范数

Definition

给定$f, g \in C[a,b]$, $\omega(x)$是区间$[a,b]$上的权函数, 则

$$(f,g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) \,\mathrm{d}x$$

称为函数f与g在区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$的内积, 式中积分上、下限可取无穷大.

权系数$\omega_i > 0$, 权函数$\omega(x) \geq 0$, $\forall x \in [a,b]$. 今后凡未给出ω_i或$\omega(x)$时, 均默认为$\omega_i \equiv 1$, 或者$\omega(x) \equiv 1$.

容易验证上面定义的两种内积具有以下性质:

（1）$(f,g) = (g,f)$;

函数的内积和范数

Definition

给定$f,g\in C[a,b]$, $\omega(x)$是区间$[a,b]$上的权函数，则

$$(f,g)=\int_a^b \omega(x)f(x)g(x)\,\mathrm{d}x$$

称为函数f与g在区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$的内积，式中积分上、下限可取无穷大.

权系数$\omega_i>0$，权函数$\omega(x)\geq 0$，$\forall x\in[a,b]$. 今后凡未给出ω_i或$\omega(x)$时，均默认为$\omega_i\equiv 1$，或者$\omega(x)\equiv 1$.

容易验证上面定义的两种内积具有以下性质：

（1）$(f,g)=(g,f)$； （2）$\forall\alpha\in R$，$(\alpha f,g)=\alpha(f,g)$；

Definition

给定$f, g \in C[a, b]$, $\omega(x)$是区间$[a, b]$上的权函数, 则

$$(f, g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) \,\mathrm{d}x$$

称为函数f与g在区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$的内积, 式中积分上、下限可取无穷大.

权系数$\omega_i > 0$, 权函数$\omega(x) \geq 0$, $\forall x \in [a, b]$. 今后凡未给出ω_i或$\omega(x)$时, 均默认为$\omega_i \equiv 1$, 或者$\omega(x) \equiv 1$.

容易验证上面定义的两种内积具有以下性质:

(1) $(f, g) = (g, f)$;　　(2) $\forall \alpha \in R$, $(\alpha f, g) = \alpha(f, g)$;
(3) $(f + h, g) = (f, g) + (h, g)$;

Definition

给定$f, g \in C[a,b]$, $\omega(x)$是区间$[a,b]$上的权函数, 则

$$(f,g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) \, \mathrm{d}x$$

称为函数f与g在区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$的内积, 式中积分上、下限可取无穷大.

权系数$\omega_i > 0$, 权函数$\omega(x) \geq 0$, $\forall x \in [a,b]$. 今后凡未给出ω_i或$\omega(x)$时, 均默认为$\omega_i \equiv 1$, 或者$\omega(x) \equiv 1$.

容易验证上面定义的两种内积具有以下性质:

（1）$(f,g) = (g,f)$; （2）$\forall \alpha \in R$, $(\alpha f, g) = \alpha (f,g)$;
（3）$(f+h, g) = (f,g) + (h,g)$;
（4）$(f,f) \geq 0$, $(f,f) = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0$.

Definition

由内积可以定义函数$f(x)$的2-范数$||f(x)||_2 = (f, f)^{1/2}$,

(i) 若$f(x)$是定义在点集$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$上的列表函数, 则

$$||f(x)||_2 = \left(\sum_{i=1}^{m} \omega_i f^2(x_i)\right)^{1/2}.$$

Definition

由内积可以定义函数$f(x)$的2-范数$||f(x)||_2 = (f, f)^{1/2}$,

(i) 若$f(x)$是定义在点集$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$上的列表函数, 则

$$||f(x)||_2 = \Big(\sum_{i=1}^{m} \omega_i f^2(x_i)\Big)^{1/2}.$$

(ii) 若$f(x)$是定义在区间$[a, b]$上的连续函数, 则

$$||f(x)||_2 = \Big(\int_a^b \omega(x) f^2(x)\,\mathrm{d}x\Big)^{1/2}.$$

对于定义在区间$[a,b]$上的连续函数$f(x)$, 除了2-范数以外, 还有以下两种常用范数:

$$||f||_\infty = \max_{a\le x\le b}|f(x)|,\ (\infty\text{-范数}),$$

$$||f||_1 = \int_a^b |f(x)|\,\mathrm{d}x,\ (1\text{-范数}).$$

对于定义在区间$[a, b]$上的连续函数$f(x)$, 除了2-范数以外, 还有以下两种常用范数：

$$||f||_\infty = \max_{a \le x \le b} |f(x)|, \text{（}\infty\text{-范数）},$$

$$||f||_1 = \int_a^b |f(x)|\, \mathrm{d}x, \text{（1-范数）}.$$

以上定义的三种范数满足范数定义的三条性质：

（1）$||f|| \ge 0$, $||f|| = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0$ ；

对于定义在区间$[a,b]$上的连续函数$f(x)$, 除了2-范数以外, 还有以下两种常用范数:

$$||f||_\infty = \max_{a\le x\le b}|f(x)|,\ （\infty\text{-范数}）,$$

$$||f||_1 = \int_a^b |f(x)|\,\mathrm{d}x,\ （1\text{-范数}）.$$

以上定义的三种范数满足范数定义的三条性质:

（1）$||f|| \ge 0,\ ||f|| = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0$;

（2）$\forall\, \alpha \in R,\ ||\alpha f|| = |\alpha|\,||f||$;

函数的内积和范数

对于定义在区间$[a,b]$上的连续函数$f(x)$, 除了2-范数以外, 还有以下两种常用范数：

$$||f||_\infty = \max_{a\le x\le b}|f(x)|,（\infty\text{-范数}）,$$

$$||f||_1 = \int_a^b |f(x)|\,\mathrm{d}x,（1\text{-范数}）.$$

以上定义的三种范数满足范数定义的三条性质：

（1） $||f|| \ge 0,\ ||f|| = 0 \Leftrightarrow f \equiv 0$;

（2） $\forall\,\alpha \in R,\ ||\alpha f|| = |\alpha|\,||f||$;

（3） $||f+g|| \le ||f|| + ||g||$.

Definition

函数逼近问题: Find $p(x) \in V \subset (c[a,b], \|\cdot\|)$, such that

$$\|f(x) - p(x)\| = \min_{g(x)\in V} \|f(x) - g(x)\|.$$

Beinstein多项式$B_n(f,x) \mapsto f(x)$

$$B_n(f,x) = \sum_{k=0}^{n} C_n^k f(\frac{k}{n}) x^k (1-x)^{n-k}.$$

权函数$\omega(x)$满足

- $\omega(x) \geq 0, \forall x \in [a,b]$.
- $\int_a^b \omega(x)dx > 0$.
- $\int_a^b x^k \omega(x)dx \quad (k = 0,1,2,\cdots)$存在.

Definition

（1）设$f(x), g(x)$是定义在点集$X=\{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$上的列表函数，若内积

$$(f, g)=\sum_{i=1}^{m} \omega_i f(x_i) g(x_i)=0 \ ,$$

则称f与g在点集X关于权系数ω_i正交.

Definition

（1）设$f(x), g(x)$是定义在点集$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$上的列表函数，若内积

$$(f, g) = \sum_{i=1}^{m} \omega_i f(x_i) g(x_i) = 0 \ ,$$

则称f与g在点集X关于权系数ω_i正交.

（2）设$f(x), g(x)$是定义在区间$[a, b]$上的连续函数，若内积

$$(f, g) = \int_a^b \omega(x) f(x) g(x) \, \mathrm{d}x = 0,$$

则称f与g在区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$正交. $[a, b]$称为**正交区间**.

Definition

若函数族$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x), \cdots$,满足：

$$(g_i, g_j) = \int_a^b \omega(x) g_i(x) g_j(x) \,\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & j \neq i, \\ \gamma_i > 0, & j = i. \end{cases}$$

则称$\{g_k(x)\}$是区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的正交函数族.

若$\gamma_i \equiv 1$, 则称为标准正交函数族. 特别当$\{g_k(x)\}$是（k次）多项式时，简称$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x), \cdots$,是正交多项式.

Definition

若函数族$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x), \cdots$,满足：

$$(g_i, g_j) = \int_a^b \omega(x) g_i(x) g_j(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & j \neq i, \\ \gamma_i > 0, & j = i. \end{cases}$$

则称$\{g_k(x)\}$是区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的正交函数族.

若$\gamma_i \equiv 1$, 则称为标准正交函数族. 特别当$\{g_k(x)\}$是（k次）多项式时, 简称$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x), \cdots$,是正交多项式.

Property

设$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_n(x)$($n$任意)是正交多项式, 则它们线性无关.

Corollary

任意次数低于n的k次多项式$p_k(x)(k < n)$与n次正交多项式$g_n(x)$正交.

Corollary

任意次数低于n的k次多项式$p_k(x)(k < n)$与n次正交多项式$g_n(x)$正交.

证明 由$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x)$线性无关知, $p_k(x)$可由$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x)$线性表示, 即

$$p_k(x) = c_0 g_0(x) + c_1 g_1(x) + \cdots + c_k g_k(x).$$

从而, $(p_k, g_n) = (\sum_{j=0}^{k} c_j g_j, g_n) = \sum_{j=0}^{k} c_j (g_j, g_n) = 0 \ (k < n).$

Property

在正交区间$[a, b]$或$[\min x_i, \max x_i]$上$n(n \geq 1)$ 次正交多项式$g_n(x)$恰有n个不同的实零点.

Property

在正交区间$[a,b]$或$[\min x_i, \max x_i]$上$n(n \geq 1)$ 次正交多项式$g_n(x)$恰有n个不同的实零点.

证明 （1）在正交区间上$g_n(x)$必有奇重零点.

Property

在正交区间$[a,b]$或$[\min x_i, \max x_i]$上$n(n \geq 1)$ 次正交多项式$g_n(x)$恰有n个不同的实零点.

证明 （1）在正交区间上$g_n(x)$必有奇重零点.

反证法 假定方程 $g_n(x)=0$ 无奇重根, 即$g_n(x)=0$全是偶重根, 则$g_n(x)=(x-\alpha_1)^{r_1}(x-\alpha_2)^{r_2}\cdots(x-\alpha_j)^{r_j}q(x)$, 其中$q(x)\neq 0$且不变号（不妨设$q(x)>0$）, $r_1,r_2,\cdots,r_j$均是偶数且$r_1+r_2+\cdots+r_j \leq n$. 由$q(x)>0$知$g_n(x)\geq 0$, 从而

$$0=(g_0,g_n)=(1,g_n)=\sum_{i=1}^{m}\omega_i g_n(x_i)>0,$$

或者$0=(g_0,g_n)=(1,g_n)=\int_a^b \omega(x)g_n(x)\,\mathrm{d}x>0$, 得到矛盾.

（2）证结论　设奇重零点$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k$的重数分别为$r_1, r_2, \cdots, r_k$且$r_1 + r_2 + \cdots + r_k \le n$，则

$$g_n(x) = (x-\alpha_1)^{r_1}(x-\alpha_2)^{r_2}\cdots(x-\alpha_k)^{r_k}\, q(x),$$

其中$q(x)$不变号，设$q(x) \ge 0$. 假定$k < n$，构造k次多项式

$$p_k(x) = (x-\alpha_1)(x-\alpha_2)\cdots(x-\alpha_k).$$

由推论知

$$0 = (p_k, g_n) = \sum_{i=1}^{m} \omega_i (x_i-\alpha_1)^{r_1+1}(x_i-\alpha_2)^{r_2+1}\cdots(x_i-\alpha_k)^{r_k+1} q(x_i) > 0,$$

$$0 = (p_k, g_n) = \int_a^b \omega(x)(x-\alpha_1)^{r_1+1}\cdots(x-\alpha_k)^{r_k+1} q(x)\,\mathrm{d}x > 0\ .$$

得到矛盾，这说明$k \ge n$.

（2）证结论　设奇重零点$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k$的重数分别为$r_1, r_2, \cdots, r_k$且$r_1 + r_2 + \cdots + r_k \le n$，则

$$g_n(x) = (x-\alpha_1)^{r_1}(x-\alpha_2)^{r_2}\cdots(x-\alpha_k)^{r_k}\, q(x),$$

其中$q(x)$不变号，设$q(x) \ge 0$. 假定$k < n$，构造k次多项式

$$p_k(x) = (x-\alpha_1)(x-\alpha_2)\cdots(x-\alpha_k).$$

由推论知

$$0 = (p_k, g_n) = \sum_{i=1}^{m} \omega_i (x_i - \alpha_1)^{r_1+1}(x_i - \alpha_2)^{r_2+1}\cdots(x_i - \alpha_k)^{r_k+1} q(x_i) > 0,$$

$$0 = (p_k, g_n) = \int_a^b \omega(x)(x-\alpha_1)^{r_1+1}\cdots(x-\alpha_k)^{r_k+1} q(x)\,\mathrm{d}x > 0\ .$$

得到矛盾，这说明$k \ge n$.$g_n(x)$是n次多项式，它最多有n个零点，故$k = n$. 由此可知$r_1 = r_2 = \cdots = r_n = 1$，即$g_n(x)$有$n$个不同的实零点.

Property

设$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x), \cdots$是最高次项系数为1的正交多项式，则有以下三项递推关系

$$g_{k+1}(x) = (x - b_k)g_k(x) - c_k g_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots,$$

其中$b_k = \beta_k/\gamma_k$，$c_k = \gamma_k/\gamma_{k-1}$，$\beta_k = (xg_k, g_k)$，$\gamma_k = (g_k, g_k)$.

Property

设$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_k(x), \cdots$是最高次项系数为1的正交多项式，则有以下三项递推关系

$$g_{k+1}(x) = (x - b_k)g_k(x) - c_k g_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots,$$

其中$b_k = \beta_k/\gamma_k$，$c_k = \gamma_k/\gamma_{k-1}$，$\beta_k = (xg_k, g_k)$，$\gamma_k = (g_k, g_k)$.

证明 $xg_k(x)$是$k+1$次多项式，它可由正交多项式$g_0(x), g_1(x), \cdots, g_{k+1}(x)$线性表示，即

$$xg_k(x) = b_0 g_0(x) + b_1 g_1(x) + \cdots + b_k g_k(x) + b_{k+1} g_{k+1}(x).$$

比较上式两边x^{k+1}的系数得$b_{k+1} = 1$.

对上式两边用$g_j(x)(j=0,1,\cdots,k)$作内积，

得$(xg_k,g_j)=b_j(g_j,g_j)$. 所以

$$b_j=(xg_k,g_j)/(g_j,g_j),\quad j=0,1,\cdots,k.$$

正交多项式

对上式两边用$g_j(x)(j=0,1,\cdots,k)$作内积，

得$(xg_k,g_j)=b_j(g_j,g_j)$. 所以

$$b_j=(xg_k,g_j)/(g_j,g_j),\quad j=0,1,\cdots,k.$$

1) 当$j=0,1,\cdots,k-2$时，由

于$x\,g_j(x)$是$j+1(1\le j+1\le k-1)$次多项式，于是

$$(xg_k,g_j)=(g_k,xg_j)=0.$$

故 $b_j=0,\ j=0,1,\cdots,k-2.$

对上式两边用$g_j(x)(j=0,1,\cdots,k)$作内积，

得$(xg_k,g_j)=b_j(g_j,g_j)$. 所以

$$b_j=(xg_k,g_j)/(g_j,g_j),\quad j=0,1,\cdots,k.$$

1) 当$j=0,1,\cdots,k-2$时，由

于$x\,g_j(x)$是$j+1(1\le j+1\le k-1)$次多项式，于是

$$(xg_k,g_j)=(g_k,xg_j)=0.$$

故 $b_j=0,\ j=0,1,\cdots,k-2.$

2) 当$j=k-1$时，$xg_{k-1}(x)$是k次多项式，于是

$$xg_{k-1}(x)=b_0^*g_0(x)+b_1^*g_1(x)+\cdots+b_{k-1}^*g_{k-1}(x)+g_k(x).$$

则 $(xg_k,g_{k-1})=(g_k,xg_{k-1})=(g_k,g_k)=\gamma_k$，故

$$b_{k-1}=(xg_k,g_{k-1})/(g_{k-1},g_{k-1})=\gamma_k/\gamma_{k-1}.$$

3) 当$j = k$时，$b_k = (xg_k, g_k)/(g_k, g_k) = \beta_k/\gamma_k$.

3) 当$j=k$时，$b_k=(xg_k,g_k)/(g_k,g_k)=\beta_k/\gamma_k$. 由以上可得

$$xg_k(x)=b_{k-1}g_{k-1}(x)+b_kg_k(x)+g_{k+1}(x)$$

$$=\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}g_{k-1}(x)+\frac{\beta_k}{\gamma_k}g_k(x)+g_{k+1}(x).$$

$$\therefore\quad g_{k+1}(x)=(x-\frac{\beta_k}{\gamma_k})g_k(x)-\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}g_{k-1}(x).$$

3) 当$j=k$时，$b_k=(xg_k,g_k)/(g_k,g_k)=\beta_k/\gamma_k$. 由以上可得

$$
\begin{aligned}
xg_k(x) &= b_{k-1}g_{k-1}(x)+b_kg_k(x)+g_{k+1}(x) \\
&= \frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}g_{k-1}(x)+\frac{\beta_k}{\gamma_k}g_k(x)+g_{k+1}(x).
\end{aligned}
$$

$$\therefore \quad g_{k+1}(x)=(x-\frac{\beta_k}{\gamma_k})g_k(x)-\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}g_{k-1}(x).$$

注意$g_0(x)\equiv 1$, 由$xg_0(x)=b_0g_0(x)+g_1(x)$,
有$(g_0,xg_0)=b_0(g_0,g_0)$. 由此可得

$$b_0=(g_0,xg_0)/(g_0,g_0)=\beta_0/\gamma_0.$$

所以, $g_1(x)=(x-b_0)g_0(x)=x-\beta_0/\gamma_0$

于是可由以下三项递推关系逐次构造正交多项式序列$\{g_k(x)\}$.

$$\begin{cases} g_0(x) = 1, \\ g_1(x) = x - \beta_0/\gamma_0, \\ g_{k+1}(x) = (x - b_k)g_k(x) - c_k g_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots \end{cases}$$

1) 勒让德(Legendre)多项式

<u>*Rodrigues′ Formula*</u> $$p_k(x) = \frac{1}{2^k k!}\frac{\mathrm{d}^k(x^2-1)^k}{\mathrm{d}x^k},\ k = 0, 1, 2, \cdots .$$

是在区间$[-1,1]$上关于$\omega(x) \equiv 1$正交的正交多项式.

1) 勒让德(Legendre)多项式

<u>*Rodrigues' Formula*</u> $p_k(x) = \dfrac{1}{2^k k!}\dfrac{\mathrm{d}^k(x^2-1)^k}{\mathrm{d}x^k},\ k = 0, 1, 2, \cdots.$

是在区间$[-1,1]$上关于$\omega(x)\equiv 1$正交的正交多项式.

三项递推关系：

$$(k+1)p_{k+1}(x) = (2k+1)\,x\,p_k(x) - k\,p_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots.$$

$p_k(x)$的最高次项x^k的系数$a_k = \frac{(2k)!}{2^k(k!)^2}$.

1) 勒让德(Legendre)多项式

<u>*Rodrigues' Formula*</u> $\quad p_k(x)=\dfrac{1}{2^k k!}\dfrac{\mathrm{d}^k(x^2-1)^k}{\mathrm{d}x^k},\ k=0,1,2,\cdots.$

是在区间$[-1,1]$上关于$\omega(x)\equiv 1$正交的正交多项式.

三项递推关系：

$$(k+1)p_{k+1}(x)=(2k+1)\,x\,p_k(x)-k\,p_{k-1}(x),\quad k=1,2,\cdots.$$

$p_k(x)$的最高次项x^k的系数$a_k=\frac{(2k)!}{2^k(k!)^2}$.

前几个勒让德多项式为

$$p_0(x)=1,\ p_1(x)=x,\ p_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),\ p_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x),$$

$$(p_k,p_k)=\int_{-1}^{1}p_k^2(x)\mathrm{d}x=\frac{2}{2k+1}.$$

2) 拉盖尔(Laguerre)多项式

$$L_k(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^k(x^k e^{-x})}{\mathrm{d}x^k}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

在区间$[0, +\infty)$上关于权函数$\omega(x) = e^{-x}$正交.

2) 拉盖尔(Laguerre)多项式

$$L_k(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^k(x^k e^{-x})}{\mathrm{d}x^k}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

在区间$[0, +\infty)$上关于权函数$\omega(x) = e^{-x}$正交.

三项递推关系

$$L_{k+1}(x) = (1 + 2k - x)L_k(x) - k^2 L_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots$$

$L_k(x)$的最高次项x^k的系数$a_k = (-1)^k$.

2) 拉盖尔(Laguerre)多项式

$$L_k(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^k(x^k e^{-x})}{\mathrm{d}x^k}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

在区间$[0, +\infty)$上关于权函数$\omega(x) = e^{-x}$正交.

三项递推关系

$$L_{k+1}(x) = (1 + 2k - x)L_k(x) - k^2 L_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots$$

$L_k(x)$的最高次项x^k的系数$a_k = (-1)^k$.

前几个拉盖尔多项式为

$$L_0(x) = 1, \ L_1(x) = -x + 1, \ L_2(x) = x^2 - 4x + 2,$$

$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6,$$

$$(L_k, L_k) = \int_0^{+\infty} e^{-x} L_k^2(x) \, \mathrm{d}x = (k!)^2.$$

3) 埃尔米特(Hermite)多项式

$$H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^k e^{-x^2}}{\mathrm{d}x^k}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

在区间$(-\infty, +\infty)$上关于权函数$\omega(x) = e^{-x^2}$正交.

3) 埃尔米特(Hermite)多项式

$$H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^k e^{-x^2}}{\mathrm{d}x^k}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

在区间$(-\infty, +\infty)$上关于权函数$\omega(x) = e^{-x^2}$正交.

三项递推关系

$$H_{k+1}(x) = 2xH_k(x) - 2kH_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots,$$

$H_k(x)$的最高次项x^k的系数 $a_k = 2^k$.

3) 埃尔米特(Hermite)多项式

$$H_k(x)=(-1)^k e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^k e^{-x^2}}{\mathrm{d}x^k},\quad k=0,1,2,\cdots,$$

在区间$(-\infty,+\infty)$上关于权函数$\omega(x)=e^{-x^2}$正交.

三项递推关系

$$H_{k+1}(x)=2xH_k(x)-2kH_{k-1}(x),\quad k=1,2,\cdots,$$

$H_k(x)$的最高次项x^k的系数 $a_k=2^k$.

前几个埃尔米特多项式为

$$H_0(x)=1,\ H_1(x)=2x,\ H_2(x)=4x^2-2,$$

$$H_3(x)=8x^3-12x,\ H_4(x)=16x^4-48x^2+12,$$

$$(H_k,H_k)=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}H_k^2(x)\,\mathrm{d}x=2^k(k!)\sqrt{\pi}\,.$$

4) 切比雪夫(Chebyshev)多项式

$$T_k(x) = cos(k\, arccos x), \quad -1 \le x \le 1, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots ,$$

显然，$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$

4) 切比雪夫(Chebyshev)多项式

$$T_k(x) = cos(k\, arccosx), \ -1 \leq x \leq 1, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

显然，$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x$.切比雪夫多项式具有以下性质：

Property

切比雪夫多项式在区间$[-1, 1]$关于权函数$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交.

4) 切比雪夫(Chebyshev)多项式

$$T_k(x) = cos(k\, arccosx),\ -1 \le x \le 1, \quad k = 0, 1, 2, \cdots,$$

显然，$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x$.切比雪夫多项式具有以下性质：

Property

切比雪夫多项式在区间$[-1, 1]$关于权函数$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交.

证明

$$(T_k, T_j) = \int_{-1}^{1} \frac{T_k(x)T_j(k)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x \overset{x=cos\theta}{=} \int_0^{\pi} cosk\theta\, cosj\theta\,\mathrm{d}\theta = \begin{cases} 0, & k \neq j, \\ \pi, & k = j = 0, \\ \frac{\pi}{2}, & k = j \neq 0. \end{cases}$$

Property

三项递推关系

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots,$$

Property

三项递推关系

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots,$$

证明 $\theta \triangleq arccosx$, 则 $T_k(x) = cosk\theta$. 所以,

$$T_{k+1}(x)+T_{k-1}(x) = cos(k+1)\theta+cos(k-1)\theta = 2cos\theta cosk\theta = 2xT_k(x).$$

常用的几个正交多项式

Property

三项递推关系

$$T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \cdots,$$

证明 $\theta \triangleq arccosx$, 则 $T_k(x) = cosk\theta$. 所以,

$$T_{k+1}(x)+T_{k-1}(x) = cos(k+1)\theta+cos(k-1)\theta = 2cos\theta cosk\theta = 2xT_k(x).$$

由三项递推关系可得前几个切比雪夫多项式:

$$T_0(x) = 1, \; T_1(x) = x, \; T_2(x) = 2x^2 - 1, \; T_3(x) = 4x^3 - 3x,$$
$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1, \; T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x, \cdots,$$

Property

$T_k(x)$是最高次项为 $2^{k-1}x^k$的k次多项式，且$T_{2k}(x)$只含x的偶次幂，$T_{2k+1}(x)$只含x的奇次幂.

Property

$T_k(x)$是最高次项为 $2^{k-1}x^k$的k次多项式，且$T_{2k}(x)$只含x的偶次幂，$T_{2k+1}(x)$只含x的奇次幂.

Property

$T_k(x)$在区间$[-1,1]$上有k个零点

$$x_i = cos\frac{2i+1}{2k}\pi, \quad i = 0, 1, \cdots, k-1.$$

Property

$T_k(x)$是最高次项为 $2^{k-1}x^k$的k次多项式，且$T_{2k}(x)$只含x的偶次幂，$T_{2k+1}(x)$只含x的奇次幂.

Property

$T_k(x)$在区间$[-1,1]$上有k个零点

$$x_i = cos\frac{2i+1}{2k}\pi, \quad i = 0, 1, \cdots, k-1.$$

Property

在区间$[-1,1]$上$|T_k(x)| \le 1$，在$k+1$个极值点$x_i = cos\frac{i\pi}{k}$ $(i = 0, 1, \cdots, k)$ 处，$T_k(x)$依次交替地取最大值*1*和最小值*-1*.

Property

（切比雪夫多项式的极性） 设$p_n(x)$是最高次项系数为*1*的n次多项式，则

$$\max_{-1\le x\le 1}|p_n(x)| \ge \max_{-1\le x\le 1}|2^{1-n}T_n(x)| = 2^{1-n}.$$

常用的几个正交多项式

Property

（切比雪夫多项式的极性） 设$p_n(x)$是最高次项系数为1的n次多项式，则

$$\max_{-1\le x\le 1}|p_n(x)| \ge \max_{-1\le x\le 1}|2^{1-n}T_n(x)| = 2^{1-n}.$$

证明 反证法 假定存在最高次项系数为1的n次多项式$\bar{p}_n(x)$，使

$$\max_{-1\le x\le 1}|\bar{p}_n(x)| < \max_{-1\le x\le 1}|2^{1-n}T_n(x)| = 2^{1-n}.$$

令$E(x) = 2^{1-n}T_n(x) - \bar{p}_n(x)$．显然，$E(x)$是不超过$n-1$次的多项式.

在$T_n(x)$的$n+1$个极值点x_i $(i=0,1,\cdots,n)$处

$$
\begin{aligned}
E(x_0) &= 2^{1-n} - \bar{p}_n(x_0) > 0,\\
E(x_1) &= -2^{1-n} - \bar{p}_n(x_1) < 0,\\
E(x_2) &= 2^{1-n} - \bar{p}_n(x_2) > 0,\\
&\cdots
\end{aligned}
$$

$$
E(x_n) = (-1)^n 2^{1-n} - \bar{p}_n(x_n) = \begin{cases} >0, & n\text{是偶数},\\ <0, & n\text{是奇数}. \end{cases}
$$

据此，由连续函数的零点存在定理知方程$E(x)=0$在区间$[-1,1]$上有n个根，而$E(x)$是不超过$n-1$次的多项式，$E(x)=0$最多有$n-1$个根，得到矛盾. 这个矛盾说明假定不成立.

Property

使 $\max_{-1\leq x\leq 1}|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|$的值尽可能小的实数$-1\leq x_0,\cdots,x_n\leq 1$的选取是$x_i=\cos\frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}, i=0,1,\cdots,n,$ 而且最小值是$\frac{1}{2^n}$. 事实上，最小值是通过

$$(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=\frac{1}{2^n}T_{n+1}(x)$$

达到的，这里$T_{n+1}(x)$是$n+1$次*Chebyshev*多项式。

切比雪夫(Chebyshev)插值

Property

使 $\max_{-1\leq x\leq 1} |(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|$的值尽可能小的实数$-1\leq x_0,\cdots,x_n\leq 1$的选取是$x_i=\cos\frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}, i=0,1,\cdots,n$,而且最小值是$\frac{1}{2^n}$. 事实上，最小值是通过

$$(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=\frac{1}{2^n}T_{n+1}(x)$$

达到的，这里$T_{n+1}(x)$是$n+1$次*Chebyshev*多项式。

由定理知：如果插值区间$[-1,1]$的$n+1$个插值节点取为$n+1$次Chebyshev多项式$T_{n+1}(x)$的根，那么就能使插值误差最小化，

$$x_i=\cos\frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}, i=0,1,\cdots,n$$

切比雪夫(Chebyshev)插值

采用Chebyshev多项式$T_{n+1}(x)$的根作为插值节点的插值多项式称为**Chebyshev插值多项式**。

Chebyshev插值多项式通过选取插值点可以消除Runge现象。

切比雪夫(Chebyshev)插值

采用Chebyshev多项式$T_{n+1}(x)$的根作为插值节点的插值多项式称为**Chebyshev插值多项式**。

Chebyshev插值多项式通过选取插值点可以消除Runge现象。

推广到一般的插值区间$[a, b]$

Property

在区间$[a, b]$上，*Chebyshev*插值节点

$$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\cos\frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}, i = 0, 1, \cdots, n$$

不等式

$$|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)| \leq \frac{(\frac{b-a}{2})^{n+1}}{2^n}$$

Definition

设$f(x)$是定义在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$上的列表函数或者$f(x)$是定义在区间$[a,b]$ 上表达式复杂的连续函数. 构造广义多项式

$$p(x)=c_0\phi_0(x)+c_1\phi_1(x)+\cdots+c_n\phi_n(x)$$

使

$$||p(x)-f(x)||_2^2$$

达到最小. 其中$c_0,c_1,\cdots,c_n$是待定参数, $\phi_i(x)(i=0,1,\cdots,n)$是已知的一组线性无关的函数（称为基函数, 它的选取与具体问题有关.）. 取$p(x)$作为$f(x)$的近似表达式就是最优平方逼近问题.

$f(x)$是定义在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$上的列表函数，设在点x_i处的函数值为y_i，

$$||p-f||_2^2=(p-f,p-f)=\sum_{i=1}^{m}\omega_i(p(x_i)-y_i)^2.$$

这时所求得的$p(x)$称为**最小二乘拟合函数**.

最小二乘拟合

$f(x)$是定义在点集$X = \{x_1, x_2, \cdots, x_m\}$上的列表函数，设在点$x_i$处的函数值为$y_i$，

$$\|p - f\|_2^2 = (p - f, p - f) = \sum_{i=1}^{m} \omega_i (p(x_i) - y_i)^2.$$

这时所求得的$p(x)$称为**最小二乘拟合函数**.

若取$\phi_i(x) = x^i \ (i = 0, 1, \cdots, n)$，则

$$p(x) = p_n(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots + c_n x^n$$

称为**最小二乘拟合多项式**. 取$p(x)$作为函数$f(x)$的近似表达式的误差为

$$\|p - f\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \omega_i \big(p(x_i) - y_i\big)^2}.$$

当$f(x)$是定义在区间$[a,b]$上的连续函数时,

$$||p-f||_2^2=(p-f,p-f)=\int_a^b \omega(x)\big(p(x)-f(x)\big)^2\,\mathrm{d}x.$$

这时所求得的$p(x)$称为$f(x)$在区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$的**最优平方逼近函数**.

其误差为

$$||p-f||_2=\Big(\int_a^b \omega(x)\big(p(x)-f(x)\big)^2\,\mathrm{d}x\Big)^{1/2}.$$

正规方程组

求最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数$p(x)$的问题，即求解以下无条件极值问题

$$\min S(c_0, c_1, \cdots, c_n) = \min ||p - f||_2^2 .$$

求最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数$p(x)$的问题, 即求解以下无条件极值问题

$$\min S(c_0, c_1, \cdots, c_n) = \min ||p - f||_2^2 \ .$$

因

$$S = ||p - f||_2^2 = (p - f, p - f) = (p, p) - 2(p, f) + (f, f)$$
$$= \Big(\sum_{i=0}^{n} c_i\phi_i, \sum_{j=0}^{n} c_j\phi_j\Big) - 2\Big(\sum_{i=0}^{n} c_i\phi_i, f\Big) + (f, f)$$
$$= \sum_{i=0}^{n} c_i \sum_{j=0}^{n} c_j(\phi_i, \phi_j) - 2\sum_{i=0}^{n} c_i(\phi_i, f) + (f, f).$$

由多元函数求极值的条件, 令

$$\frac{\partial S}{\partial c_k} = 0, \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$

而

$$\frac{\partial S}{\partial c_k} = \sum_{j=0}^{n} c_j(\phi_k, \phi_j) + \sum_{i=0}^{n} c_i(\phi_i, \phi_k) - 2(\phi_k, f)$$
$$= 2\sum_{j=0}^{n} c_j(\phi_k, \phi_j) - 2(\phi_k, f).$$

得到关于参数$c_0, c_1, \cdots, c_n$的线性方程组

$$\sum_{j=0}^{n}(\phi_k, \phi_j)c_j = (\phi_k, f), \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$

称为最优平方逼近问题的**正规方程组或法方程组**. 从正规方程组求得$c_0, c_1, \cdots, c_n$ 后, 代入即得最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数$p(x)$.

正规方程组

正规方程组可以改写为$(\phi_k, p-f)=0, \quad k=0,1,\cdots,n.$
这说明$p(x)-f(x)$与所有基函数$\phi_k(x)$ $(k=0,1,\cdots,n)$正交.

正规方程组

正规方程组可以改写为$(\phi_k, p - f) = 0, \quad k = 0, 1, \cdots, n.$
这说明$p(x) - f(x)$与所有基函数$\phi_k(x)$ $(k = 0, 1, \cdots, n)$正交.

正规方程组的矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} (\phi_0, \phi_0) & (\phi_0, \phi_1) & \cdots & (\phi_0, \phi_n) \\ (\phi_1, \phi_0) & (\phi_1, \phi_1) & \cdots & (\phi_1, \phi_n) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\phi_n, \phi_0) & (\phi_n, \phi_1) & \cdots & (\phi_n, \phi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\phi_0, f) \\ (\phi_1, f) \\ \cdots \\ (\phi_n, f) \end{pmatrix}.$$

方程组的系数矩阵是对称正定矩阵.所以, 正规方程组的解存在且唯一, 即最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数$p(x)$ 存在且唯一. 正规方程组可用改进平方根法或共轭梯度法求解.
通常n较大时, 正规方程组是病态方程组, 一般取$n \leq 6$.

正规方程组

若取$\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_n$是一组正交函数$g_0, g_1, \cdots, g_n$，则正规方程组简化为

$$(g_k, g_k)c_k = (g_k, f), \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$

从而，$c_k = (g_k, f)/(g_k, g_k), \quad k = 0, 1, \cdots, n.$

将$c_k(k = 0, 1, \cdots, n)$代入，即得$f(x)$的最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(g_k, f)}{(g_k, g_k)} g_k(x).$$

正规方程组

当$f(x)$是定义在点集$X=\{x_1,x_2,\cdots,x_m\}$上的列表函数时，内积

$$(\phi_k,\phi_j)=\sum_{i=1}^{m}\omega_i\phi_k(x_i)\phi_j(x_i),\quad k,j=0,1,\cdots,n.$$

$$(\phi_k,f)=\sum_{i=1}^{m}\omega_i\phi_k(x_i)f(x_i)=\sum_{i=1}^{m}\omega_i\phi_k(x_i)y_i,\ k=0,1,\cdots,n.$$

于是正规方程组可以写成

$$G^TWG\,c=G^TW\,y$$

其中

$$G=\begin{pmatrix}\phi_0(x_1) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_n(x_1)\\ \phi_0(x_2) & \phi_1(x_2) & \cdots & \phi_n(x_2)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \phi_0(x_m) & \phi_1(x_m) & \cdots & \phi_n(x_m)\end{pmatrix},$$

$$W = diag(\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_m), \quad y = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T.$$

正规方程组

$$W = diag(\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_m), \quad y = (y_1, y_2, \cdots, y_m)^T.$$

特别当权系数$\omega_i \equiv 1$时，方程组为

$$G^T G\, c = G^T y.$$

这时,若取$\phi_i(x) = x^i \ (i = 0, 1, \cdots, n)$，则矩阵

$$G = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \cdots & x_m^n \end{pmatrix}.$$

正规方程组

再由内积$(\phi_k,\phi_j)=\sum_{i=1}^{m}\phi_k(x_i)\phi_j(x_i)=\sum_{i=1}^{m}x_i^{k+j}\,(k,j=0,1,\cdots,n)$
知正规方程组又可以表示为

正规方程组

再由内积$(\phi_k,\phi_j)=\sum_{i=1}^{m}\phi_k(x_i)\phi_j(x_i)=\sum_{i=1}^{m}x_i^{k+j}\,(k,j=0,1,\cdots,n)$
知正规方程组又可以表示为

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m}1 & \sum_{i=1}^{m}x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m}x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m}x_i & \sum_{i=1}^{m}x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m}x_i^{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=1}^{m}x_i^n & \sum_{i=1}^{m}x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m}x_i^{2n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m}y_i \\ \sum_{i=1}^{m}x_iy_i \\ \cdots \\ \sum_{i=1}^{m}x_i^ny_i \end{pmatrix}.$$

一般，求函数$f(x)$的最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数有三种方法：

（1）根据问题的特点选择一组线性无关的基函数$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$，通过解正规方程组(5.2.9)或(5.2.9′)，求得最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数.

一般，求函数$f(x)$的最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数有三种方法：

（1）根据问题的特点选择一组线性无关的基函数$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$，通过解正规方程组(5.2.9)或(5.2.9′)，求得最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数.

（2）利用三项递推关系构造正交多项式$g_0(x), g_1(x)$，$\cdots, g_k(x), \cdots$. 由

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(g_k, f)}{(g_k, g_k)} g_k(x).$$

得到最小二乘拟合多项式或最优平方逼近函数.

一般，求函数$f(x)$的最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数有三种方法：

（1）根据问题的特点选择一组线性无关的基函数$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$，通过解正规方程组(5.2.9)或$(5.2.9')$，求得最小二乘拟合函数或最优平方逼近函数.

（2）利用三项递推关系构造正交多项式$g_0(x), g_1(x)$，$\cdots, g_k(x), \cdots$. 由

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(g_k, f)}{(g_k, g_k)} g_k(x).$$

得到最小二乘拟合多项式或最优平方逼近函数.

（3）作变量替换，利用已知的正交多项式作为基函数构造拟合函数.

例5.4 求函数$f(x)=e^x$在区间$[0,1]$上的最优逼近二次多项式.

解法1 设$p_2(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$,

则

例5.4 求函数$f(x)=e^x$在区间$[0,1]$上的最优逼近二次多项式.

解法1 设$p_2(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$,

则$\phi_0(x)=1, \phi_1(x)=x, \phi_2(x)=x^2$.

$$(\phi_k,\phi_j)=\int_0^1 x^{k+j}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{k+j+1},$$

例5.4 求函数$f(x)=e^x$在区间$[0,1]$上的最优逼近二次多项式.

解法1 设$p_2(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$,

则$\phi_0(x)=1,\phi_1(x)=x,\phi_2(x)=x^2$.

$$(\phi_k,\phi_j)=\int_0^1 x^{k+j}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{k+j+1},$$

$$(\phi_0,f)=\int_0^1 e^x\,\mathrm{d}x=e-1,(\phi_1,f)=\int_0^1 xe^x\,\mathrm{d}x=1,(\phi_2,f)=e-2.$$

由正规方程组(5.2.9′)有

$$\begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} e-1 \\ 1 \\ e-2 \end{pmatrix}.$$

解之，得 $c_0\approx 1.012\,99$, $c_1\approx 0.851\,14$, $c_2\approx 0.839\,17$. 从而,
$p_2(x)=1.012\,99+0.851\,14x+0.839\,17x^2$.

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式.

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$$g_0(x) = 1$$

$\beta_0 = (xg_0, g_0) = \int_0^1 x\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}$, $\gamma_0 = (g_0, g_0) = \int_0^1 \mathrm{d}x = 1$, 故

$$g_1(x) = x - \beta_0/\gamma_0 = x - \frac{1}{2}.$$

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$$g_0(x) = 1$$

$$\beta_0 = (xg_0, g_0) = \int_0^1 x\,\mathrm{d}x = \tfrac{1}{2}, \quad \gamma_0 = (g_0, g_0) = \int_0^1 \mathrm{d}x = 1, \quad \text{故}$$

$$g_1(x) = x - \beta_0/\gamma_0 = x - \frac{1}{2}.$$

$$\beta_1 = (xg_1, g_1) = \int_0^1 x(x - \frac{1}{2})^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{24},$$

$$\gamma_1 = (g_1, g_1) = \int_0^1 (x - \frac{1}{2})^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{12},$$

$$b_1 = \beta_1/\gamma_1 = 1/2, \quad c_1 = \gamma_1/\gamma_0 = 1/12.$$

$$g_2(x) = (x - b_1)g_1(x) - c_1 g_0(x) = (x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12}.$$

$$(g_2, g_2) = \int_0^1 ((x-\frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12})^2 \,\mathrm{d}x = \frac{1}{180},$$
$$(g_0, f) = \int_0^1 e^x \,\mathrm{d}x = e-1,$$
$$(g_1, f) = \int_0^1 (x-\frac{1}{2})e^x \,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}(3-e),$$
$$(g_2, f) = \int_0^1 ((x-\frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12})e^x \,\mathrm{d}x = \frac{1}{6}(7e-19).$$

$$\begin{aligned} p(t) &= \frac{(g_0, f)}{(g_0, g_0)} g_0(x) + \frac{(g_1, f)}{(g_1, g_1)} g_1(x) + \frac{(g_2, f)}{(g_2, g_2)} g_2(x) \\ &= e - 1 + (18-6e)(x-\frac{1}{2}) + 30(7e-19)((x-\frac{1}{2})^2 - \frac{1}{12}) \\ &\approx 1.0129\,913\,1 + 0.851\,125\,07x + 0.839\,183\,97x^2. \end{aligned}$$

解法3 取勒让德正交多项式作为基函数，先做变换$x=\frac{t+1}{2}$，$-1\le t\le 1$，则$f(t)=e^{\frac{t+1}{2}}$.

解法3 取勒让德正交多项式作为基函数，先做变换$x=\frac{t+1}{2}$, $-1\le t\le 1$, 则$f(t)=e^{\frac{t+1}{2}}$.前三个勒让德正交多项式为

$$p_0(t)=1,\quad p_1(t)=t,\quad p_2(t)=\frac{1}{2}(3t^2-1).$$

则$f(t)$的最优平方逼近函数 $p(x)=c_0p_0(t)+c_1p_1(t)+c_2p_2(t)$.

解法3 取勒让德正交多项式作为基函数，先做变换$x=\frac{t+1}{2}$, $-1\le t\le 1$, 则$f(t)=e^{\frac{t+1}{2}}$.前三个勒让德正交多项式为

$$p_0(t)=1,\quad p_1(t)=t,\quad p_2(t)=\frac{1}{2}(3t^2-1).$$

则$f(t)$的最优平方逼近函数 $p(x)=c_0p_0(t)+c_1p_1(t)+c_2p_2(t)$.对于勒让德正交多项式 $(p_k,p_k)=2/(2k+1),\quad k=0,1,2.$ 而

$$(p_0,f)=\int_{-1}^{1}e^{\frac{t+1}{2}}\,\mathrm{d}t=2(e-1),\quad (p_1,f)=\int_{-1}^{1}te^{\frac{t+1}{2}}\,\mathrm{d}t=6-2e,$$

$$(p_2,f)=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}(3t^2-1)e^{\frac{t+1}{2}}\,\mathrm{d}t=14e-38.$$

从而得

$$c_0 = \frac{(p_0, f)}{(p_0, p_0)} \approx 1.718\,282, \;\; c_1 = \frac{(p_1, f)}{(p_1, p_1)} \approx 0.845\,155,$$

$$c_2 = \frac{(p_2, f)}{(p_2, p_2)} \approx 0.139\,864.$$

故 $\quad p(t) = 1.718\,282 + 0.845\,155t + 0.069\,932(3t^2 - 1).$

再将$t = 2x - 1$代入上式，则得$f(x)$的最优平方逼近函数

$$p(x) = 1.012\,991 + 0.851\,126x + 0.839\,184x^2.$$

例5.1 给定数据如下表:

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	1.000 0	1.284 0	1.648 7	2.117 0	2.718 3

求最小二乘拟合二次多项式.

解 **解法1** 设所求的最小二乘拟合多项式$p_2(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2$, 则根据法方程组有

$$\begin{pmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.562\,5 \\ 1.875 & 1.562\,5 & 1.382\,8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.768\,0 \\ 5.451\,4 \\ 4.401\,5 \end{pmatrix}.$$

从该方程组解得$c_0 = 1.005\,1$, $c_1 = 0.864\,7$, $c_2 = 0.843\,2$. 所以, 最小二乘二次拟合多项式 $p_2(x) = 1.005\,1 + 0.864\,7x + 0.843\,2x^2$.

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$$g_0(x) = 1, \quad g_1(x) = x - \beta_0/\gamma_0, \quad g_2(x) = (x - b_1)g_1(x) - c_1 g_0(x).$$

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$g_0(x)=1,\quad g_1(x)=x-\beta_0/\gamma_0,\quad g_2(x)=(x-b_1)g_1(x)-c_1g_0(x).$

$$\gamma_0=(g_0,g_0)=(1,1)=\sum_{i=1}^{5}1=5,$$

$$\beta_0=(xg_0,g_0)=(x,1)=\sum_{i=1}^{5}x_i=2.5,$$

$\beta_0/\gamma_0=1/2.$

故 $g_1(x)=x-\frac{1}{2}.$

解法2 利用三项递推关系构造正交多项式. 取

$g_0(x) = 1, \quad g_1(x) = x - \beta_0/\gamma_0, \quad g_2(x) = (x - b_1)g_1(x) - c_1 g_0(x).$

$$\gamma_0 = (g_0, g_0) = (1, 1) = \sum_{i=1}^{5} 1 = 5,$$

$$\beta_0 = (xg_0, g_0) = (x, 1) = \sum_{i=1}^{5} x_i = 2.5,$$

$\beta_0/\gamma_0 = 1/2.$

故 $g_1(x) = x - \frac{1}{2}$. 又 $\gamma_1 = (g_1, g_1) = \sum_{i=1}^{5} (x_i - \frac{1}{2})^2 = \frac{5}{8}$,

$\beta_1 = (xg_1, g_1) = \sum_{i=1}^{5} x_i (x_i - \frac{1}{2})^2 = \frac{5}{16}$, $b_1 = \beta_1/\gamma_1 = 1/2$,

$c_1 = \gamma_1/\gamma_0 = 1/8$. 所以, $g_2(x) = (x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}$.

最优平方逼近函数

$$p_2(x) = \frac{(g_0, f)}{(g_0, g_0)} g_0(x) + \frac{(g_1, f)}{(g_1, g_1)} g_1(x) + \frac{(g_2, f)}{(g_2, g_2)} g_2(x)$$

$$p_2(x) = \frac{(g_0, f)}{(g_0, g_0)} g_0(x) + \frac{(g_1, f)}{(g_1, g_1)} g_1(x) + \frac{(g_2, f)}{(g_2, g_2)} g_2(x)$$

$$(g_2, g_2) = \sum_{i=1}^{5} \left((x_i - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}\right)^2 = \frac{7}{128},$$

$$(g_0, f) = \sum_{i=1}^{5} y_i = 8.768\,0,$$

$$(g_1, f) = \sum_{i=1}^{5} (x_i - \frac{1}{2}) y_i = 1.067\,4,$$

$$(g_2, f) = \sum_{i=1}^{5} \left((x_i - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}\right) y_i = 0.046\,137\,5$$

$$p_2(x) = 1.753\,6 + 1.707\,84(x - \frac{1}{2}) + 0.843\,657\,142((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}).$$

例5.2 给定数据如下表:

x_i	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
y_i	2.000 00	2.202 54	2.407 15	2.615 92	2.830 96	3.054 48	3.2

求形如$p(x) = c_0 + c_1 e^x + c_2 e^{-x}$的最小二乘拟合函数.

解 取$\phi_0(x) = 1$, $\phi_1(x) = e^x$, $\phi_2(x) = e^{-x}$. 则正规方程组(5.2.9′) 为

$$\begin{pmatrix} 7 & 9.639\,10 & 5.290\,05 \\ 9.639\,10 & 13.799\,29 & 7 \\ 5.290\,05 & 7 & 4.156\,27 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18.399\,81 \\ 26.157\,20 \\ 13.456\,86 \end{pmatrix}.$$

解之, 得

$$c_0 = 1.986\,14, \; c_1 = 1.017\,57, \; c_2 = -1.002\,06.$$

在求最小二乘拟合函数时, 函数类（或基函数）的选取十分重要.

选取函数类通常有以下三个原则:

（1）直观性原则: 将数据点$(x_i, y_i)(i = 1, 2, \cdots, m)$描绘在坐标纸上, 根据点的分布情况与已知各类函数曲线进行比较, 从中选出一个或几个函数类.

最小二乘拟合函数

在求最小二乘拟合函数时，函数类（或基函数）的选取十分重要.

选取函数类通常有以下三个原则：

（1）直观性原则：　将数据点$(x_i, y_i)(i = 1, 2, \cdots, m)$描绘在坐标纸上，根据点的分布情况与已知各类函数曲线进行比较，从中选出一个或几个函数类.

（2）比较性原则：　在几个不同的函数类中，分别求出拟合函数的均方差

$$\|p - f\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \omega_i \big(p(x_i) - y_i\big)^2},$$

比较其优劣，决定取舍.

（3）根据实际问题的背景选择函数类.

有时给定的数据具有指数特征或者幂函数特征, 则取指数函数$y = be^{ax}$ 或幂函数$y = bx^a$ 作为最小二乘拟合函数较为合适. 此时对参数进行变换, 对函数分别取对数得

$$lny = lnb + ax,$$

或

$$lny = lnb + alnx.$$

例如, 对指数型$y = be^{ax}$的拟合函数, 通过求

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^{m} (lnb + ax_i - lny_i)^2$$

的极小, 就可以确定a, lnb, 最终确定参数a, b. 对幂函数情形方法类似.

要求

1. 熟练掌握基本的数值积分公式-梯形求积公式、辛普生求积公式和柯特斯求积公式.
2. 掌握三种复化求积公式、变步长积分法、龙贝格积分法
3. 学会待定系数法, 了解高斯型求积公式
4. 熟练掌握插值型数值微分公式

在科学研究和工程技术中常常需要计算函数$f(x)$的积分或导数.

$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 的近似计算问题。

- 牛顿-莱布尼茨
- 被积函数$f(x)$是列表函数
- $f(x)$形式简单，但$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 不能用有限形式表示

$$f(x)=\sqrt{1+x^3},\quad \frac{\sin x}{x},\quad \sin x^2,\quad \frac{1}{\ln x},\quad e^{-x^2}\dots$$

- $I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ 有有限形式表示，但大量数值计算

$$\int_{\sqrt{3}}^{x}\frac{dx}{1+x^4}=\frac{1}{4\sqrt{2}}\ln\frac{x^2+\sqrt{2}+1}{x^2-\sqrt{2}+1}+\frac{1}{2\sqrt{2}}[\arctan(\sqrt{2}+1)$$

$$+\arctan(\sqrt{2}-1)]|_{\sqrt{3}}^{x}$$

数值积分的基本思想

设$p(x)$是被积函数$f(x)$的比较简单、易于积分的近似表达式,

$f(x) = p(x) + R(x)$, 则

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b R(x)\,\mathrm{d}x,$$

取积分 $\int_a^b f(x) \approx \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x$. 则截断误差

$$R[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b R(x)\,\mathrm{d}x.$$

若记$I[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x, \quad Q[f] = \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x$,则

$$I[f] = Q[f] + R[f].$$

矩形公式

对于积分$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$, 由积分中值定理：$\exists\xi\in(a,b)$使得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x=(b-a)f(\xi)$$

- 左矩形公式$I[f]=(b-a)f(a)$
- 中矩形公式$I[f]=(b-a)f(\frac{a+b}{2})$
- 右矩形公式$I[f]=(b-a)f(b)$

被积函数$f(x)$的近似表达式取为拉格朗日插值多项式，积分

$$I[f]=\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n}\Big(\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x\Big)f(x_i)=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)=Q[f],$$

其中$A_i=\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x$

$$=\int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\,\mathrm{d}x.$$

$$R[f]=I[f]-Q[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\,\mathrm{d}x.$$

x_i称为**求积节点**，A_i称为**求积系数**，$R[f]$称为**截断误差或积分余项**．求积公式称为**插值型求积公式**．当求积节点在区间$[a,b]$上等距分布时，求积公式称为**牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式**

牛顿-柯特斯求积公式

令$h=\frac{b-a}{n}$, 取$x_i=a+ih\,(i=0,1,\cdots,n)$.

令$x=x_0+th$, 则

$$x-x_i=x_0+th-(x_0+ih)=(t-i)h,$$
$$x_i-x_j=x_0+ih-(x_0+jh)=(i-j)h.$$

得

$$A_i=\int_a^b\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\,\mathrm{d}x$$

$$\overset{x=x_0+th}{=\!=}\frac{(-1)^{n-i}h}{i!\times(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt.$$

1) 梯形求积公式$(n = 1)$

1) 梯形求积公式($n=1$)

令 $\quad x_0 = a, \quad x_1 = b, \quad h = b-a.$ 则

$$A_0 = -h\int_0^1 (t-1)\,\mathrm{d}t = \frac{h}{2} = \frac{b-a}{2},$$

$$A_1 = h\int_0^1 t\,\mathrm{d}t = \frac{h}{2} = \frac{b-a}{2}.$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q(f) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)].$$

1) 梯形求积公式($n=1$)

令 $x_0=a,\quad x_1=b,\quad h=b-a.$ 则

$$A_0=-h\int_0^1(t-1)\,\mathrm{d}t=\frac{h}{2}=\frac{b-a}{2},$$

$$A_1=h\int_0^1 t\,\mathrm{d}t=\frac{h}{2}=\frac{b-a}{2}.$$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\approx Q(f)=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)].$$

利用广义积分中值定理, 可得梯形求积公式的截断误差:

$$R_1[f]=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2!}(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

2) 辛普生(Simpson)求积公式$(n=2)$

2) 辛普生(Simpson)求积公式$(n=2)$

令 $h=\dfrac{b-a}{2},\quad x_0=a,\quad x_1=a+h=\dfrac{a+b}{2},\quad x_2=b.$

得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f]=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right]$$

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

2) 辛普生(Simpson)求积公式$(n=2)$

$$令\quad h=\frac{b-a}{2},\quad x_0=a,\quad x_1=a+h=\frac{a+b}{2},\quad x_2=b.$$

得

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f]=\tfrac{h}{3}\big[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\big]$$

$$=\tfrac{b-a}{6}\big[f(a)+4f(\tfrac{a+b}{2})+f(b)\big].$$

辛普生求积公式的截断误差为

$$R_2[f]=-\frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\eta)=-\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

3) 柯特斯(Cotes)求积公式$(n=4)$

3) 柯特斯(Cotes)求积公式$(n=4)$

令 $h=\dfrac{b-a}{4},\quad x_i=a+ih,\ i=0,1,\cdots,4,\quad x_0=a,\quad x_4=b.$

得 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx$

$$Q[f]=\tfrac{b-a}{90}\left[7f(a)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(b)\right].$$

3) 柯特斯(Cotes)求积公式($n=4$)

令 $h=\dfrac{b-a}{4}$, $x_i=a+ih,\ i=0,1,\cdots,4,\quad x_0=a,\quad x_4=b.$

得 $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx$

$$Q[f]=\tfrac{b-a}{90}\left[7f(a)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(b)\right].$$

辛普生求积公式的截断误差为

$$R_4[f]=-\frac{8}{945}h^7f^{(6)}(\eta)=-\frac{(b-a)^7}{1\,935\,360}f^{(6)}(\eta),\quad a\le\eta\le b.$$

复化求积公式

把积分区间分成若干个（如n个）长度相等的子区间，即令

$$h=(b-a)/n,\quad x_i=a+ih,\quad i=0,1,\cdots,n.$$

在每个子区间$[x_i,x_{i+1}]$上分别利用前述的三个基本求积公式，将所得结果相加，得到的求积公式称为**复化求积公式.**

把积分区间分成若干个（如n个）长度相等的子区间，即令

$$h=(b-a)/n, \quad x_i=a+ih, \quad i=0,1,\cdots,n.$$

在每个子区间$[x_i,x_{i+1}]$上分别利用前述的三个基本求积公式，将所得结果相加，得到的求积公式称为**复化求积公式.**

1) 复化梯形求积公式

复化求积公式

把积分区间分成若干个（如n个）长度相等的子区间，即令

$$h = (b-a)/n, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

在每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上分别利用前述的三个基本求积公式，将所得结果相加，得到的求积公式称为**复化求积公式.**

1) 复化梯形求积公式

$$I[f] = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{2}\left[f(x_{i-1}) + f(x_i)\right]$$

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

复化求积公式

复化梯形求积公式的截断误差

$$R_{T_n}[f] = I[f] - T_n = -\frac{h^3}{12}\left[f''(\eta_1) + f''(\eta_2) + \cdots + f''(\eta_n)\right],$$

其中$\eta_i \in [x_{i-1}, x_i]$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$.
由连续函数的介质定理知存在一点$\eta \in [a, b]$, 使

$$f''(\eta) = \frac{f''(\eta_1) + f''(\eta_2) + \cdots + f''(\eta_n)}{n}.$$

注意到 $nh = b - a$, 则得复化梯形求积公式的截断误差

$$R_{T_n}[f] = -\frac{h^3}{12} n f''(\eta) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\eta), \quad \eta \in [a, b].$$

2) 复化辛普生求积公式

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,\mathrm{d}x \\
&\approx \sum_{i=1}^{n} \tfrac{x_i - x_{i-1}}{6} \left[f(x_{i-1}) + 4f(\tfrac{x_{i-1}+x_i}{2}) + f(x_i) \right] \\
&= \tfrac{h}{6} \left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=1}^{n} f(\tfrac{x_{i-1}+x_i}{2}) + f(b) \right] = S_n.
\end{aligned}$$

设$f^{(4)}(x)$在区间$[a,b]$上连续，得复化辛普生求积公式的截断误差

$$R_{S_n}[f] = -\frac{h^5}{2\,880} n f^{(4)}(\eta) = -\frac{b-a}{2\,880} h^4 f^{(4)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

3) 复化柯特斯求积公式

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx & \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{90}\Big[7f(x_{i-1}) + 32f(x_{i-1}+h/4) \\
& +12f(x_{i-1}+h/2) + 32f(x_{i-1}+3h/4) + 7f(x_i)\Big] \\
= & \frac{h}{90}\Big[7f(a) + 14\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 12\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i+h/2) \\
& +32\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i+h/4) + 32\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i+3h/4) + 7f(b)\Big].
\end{aligned}
$$

设$f^{(6)}(x)$在区间$[a,b]$上连续，得复化柯特斯求积公式的截断误差

$$
R_{C_n}[f] = -\frac{h^7}{1\,935\,360} n f^{(6)}(\eta) = -\frac{b-a}{1\,935\,360} h^6 f^{(6)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.
$$

例 6.1 利用复化梯形求积公式计算积分

$$I[f] = \int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x$$

使误差不超过$\frac{1}{2} \times 10^{-3}$. 取相同的步长$h$, 用复化辛普生计算, 给出结果和截断误差限.

例 6.1 利用复化梯形求积公式计算积分

$$I[f]=\int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x$$

使误差不超过$\frac{1}{2}\times 10^{-3}$. 取相同的步长$h$, 用复化辛普生计算, 给出结果和截断误差限.

解 由$f(x)=\frac{sinx}{x}=\int_0^1 costx\,\mathrm{d}t$ 知

$$f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{d^k(costx)}{\mathrm{d}x^k}\,\mathrm{d}t=\int_0^1 t^k cos(tx+\frac{k\pi}{2})\,\mathrm{d}t.$$

$$\max_{0\le x\le 1}|f^{(k)}(x)|\le \int_0^1 t^k|cos(tx+\frac{k\pi}{2})|\,\mathrm{d}t\le \int_0^1 t^k\,\mathrm{d}t=\frac{1}{k+1}.$$

由复化梯形求积公式的截断误差知, 要求选取h满足

$$|R_{T_n}[f]|=\frac{1}{12}h^2|f''(\eta)|\le \frac{h^2}{12}\times\frac{1}{3}\le\frac{1}{2}\times 10^{-3}\Rightarrow h^2\le 18\times 10^{-3}.$$

复化求积公式

取$h = \frac{1}{8} = 0.125$ 即满足要求. 而
$n = \frac{b-a}{n} = \frac{1}{h} = 8$. $x_i = 0.125 \times i$, $i = 0, 1, 2, \cdots, 8$.

$$I[f] \approx T_8 = \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{i=1}^{7} f(\frac{i}{8}) + f(1)\right] = 0.945\,690\,9.$$

其中定义$f(0) = 1$.

取$h=\frac{1}{8}=0.125$即满足要求．而
$n=\frac{b-a}{n}=\frac{1}{h}=8$. $x_i=0.125\times i,\ \ i=0,1,2,\cdots,8$.

$$I[f]\approx T_8=\frac{1}{16}\Big[f(0)+2\sum_{i=1}^{7}f(\frac{i}{8})+f(1)\Big]=0.945\,690\,9.$$

其中定义$f(0)=1$.

取同样步长$h=0.125$, 则$\frac{x_{i-1}+x_i}{2}=(i-\frac{1}{2})h=0.125(i-0.5)$,

$$I[f]\approx S_8=\frac{1}{48}\Big[f(0)+2\sum_{i=1}^{7}f(\frac{i}{8})+4\sum_{i=1}^{8}f(\frac{i}{8}-\frac{1}{16})+f(1)\Big]=0.946\,083\,3.$$

截断误差限

$$\big|R_{S_8}[f]\big|\leq\frac{1}{2\,880}\times\big(\frac{1}{8}\big)^4\times\frac{1}{5}\approx 0.17\times 10^{-7}.$$

变步长积分法

采用复化求积公式计算时，为使截断误差不超过ϵ，**需要估计被积函数高阶导数的最大值，从而确定把积分区间$[a,b]$分成等长子区间的个数n.** 但高阶导数最大值很难求得. 不过，由误差表达式可见，只要被积函数的高阶导数有界，则当$h \to 0$ 时，误差趋于零. 这说明可以采用逐步缩小步长h 的方法，以使积分的近似值满足精度要求，这就是变步长积分法.

变步长积分法

采用复化求积公式计算时，为使截断误差不超过ϵ，**需要估计被积函数高阶导数的最大值，从而确定把积分区间$[a,b]$分成等长子区间的个数n.** 但高阶导数最大值很难求得. 不过，由误差表达式可见，只要被积函数的高阶导数有界，则当$h \to 0$时，误差趋于零. 这说明可以采用逐步缩小步长h的方法，以使积分的近似值满足精度要求，这就是变步长积分法.

对于区间$[a,b]$分成n个等长子区间的复化梯形求积公式，有

$$I[f] - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

将区间$[a,b]$分为$2n$等分，则有

$$I[f] - T_{2n} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta_1), \quad a \le \eta_1 \le b.$$

假定$f''(\eta) \approx f''(\eta_1)$. 将以上两式相除, 得

$$\frac{I[f] - T_n}{I[f] - T_{2n}} \approx 4.$$

$$\text{由此可得} \quad I[f] \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n).$$

$$\text{故有} \quad |I[f] - T_{2n}| \approx \frac{1}{3}|T_{2n} - T_n|.$$

若$\frac{1}{3}|T_{2n} - T_n| \leq \epsilon$, 取$I[f] \approx T_{2n}$ 则大致满足精度要求. 实际计算时常用

$$|T_{2n} - T_n| \leq \epsilon$$

作为判别计算终止的条件. 若满足, 则取$I[f] \approx T_{2n}$. 否则, 将区间再分半进行计算, 直至满足精度要求.

为减少计算量, 在计算T_{2n}时可以利用T_n的结果.

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

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

在实际计算时, 取$n = 2^k$, 则 $h = \frac{b-a}{2^k}$,

$$\frac{x_{i-1}+x_i}{2} = \frac{a+(i-1)h+a+ih}{2} = a+(2i-1)\frac{h}{2} = a+(2i-1)\frac{b-a}{2^{k+1}}.$$

为减少计算量，在计算T_{2n}时可以利用T_n的结果.

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

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

在实际计算时，取$n = 2^k$，则 $h = \frac{b-a}{2^k}$，

$$\frac{x_{i-1}+x_i}{2} = \frac{a+(i-1)h+a+ih}{2} = a+(2i-1)\frac{h}{2} = a+(2i-1)\frac{b-a}{2^{k+1}}.$$

开始计算时取 $T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a) + f(b)]$，迭代计算.

$$T_{2^{k+1}} = \frac{1}{2}T_{2^k} + \frac{b-a}{2^{k+1}}\sum_{i=1}^{2^k} f\left(a + (2i-1)\frac{b-a}{2^{k+1}}\right).$$

若$|T_{2^{k+1}} - T_{2^k}| < \epsilon$，则取$I[f] \approx T_{2^{k+1}}$. 否则，继续计算直到满足$|T_{2^{k+1}} - T_{2^k}| \leq \epsilon$为止.

龙贝格积分法

对于复化梯形求积公式

$$I[f] \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n) = \bar{T}_{2n}.$$

对于复化辛普生求积公式有

$$I[f] - S_n = -\frac{b-a}{2880}h^4 f^{(4)}(\eta), \quad a \le \eta \le b,$$

$$I[f] - S_{2n} = -\frac{b-a}{2880}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta_1), \quad a \le \eta_1 \le b.$$

假定$f^{(4)}(x)$在区间$[a,b]$上连续且变化不大，解得

$$I[f] \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n) = \bar{S}_{2n}.$$

同理对复化柯特斯求积公式有

$$I[f] \approx C_{2n} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2n} - C_n) = \bar{C}_{2n}.$$

龙贝格积分法

$$\bar{T}_{2n} \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{1}{3}(4T_{2n} - T_n)$$

龙贝格积分法

$$\bar{T}_{2n} \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{1}{3}(4T_{2n} - T_n)$$
$$= \frac{1}{3}\Big\{4\Big[\frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n} f\Big(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\Big)\Big] - T_n\Big\}$$

$$
\begin{aligned}
\bar{T}_{2n} &\approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{1}{3}(4T_{2n} - T_n) \\
&= \frac{1}{3}\Big\{4\big[\frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2})\big] - T_n\Big\} \\
&= \frac{1}{3}\Big\{\frac{h}{2}\big[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\big] + 2h\sum_{i=1}^{n} f(\frac{x_{i-1}+x_i}{2})\Big\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\bar{T}_{2n} &\approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) = \frac{1}{3}(4T_{2n} - T_n) \\
&= \frac{1}{3}\left\{4\left[\frac{1}{2}T_n + \frac{h}{2}\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)\right] - T_n\right\} \\
&= \frac{1}{3}\left\{\frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right] + 2h\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)\right\} \\
&= \frac{h}{6}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=1}^{n} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + f(b)\right] = S_n.
\end{aligned}
$$

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

同理可得

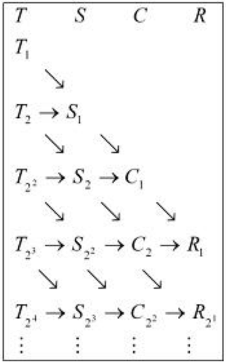
$$
C_n = S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n).
$$

龙贝格积分法

令

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

称为**龙贝格积分公式**. 其截断误差应是$ch^{10}f^{(10)}(\eta)$.



计算过程按图6.1所示的顺序进行.

若$|R_{2^{k+1}} - R_{2^k}| < \epsilon$,则取$I[f] \approx R_{2^{k+1}}$. 否则, 继续计算, 直到满足精度要求为止.

龙贝格积分法的计算公式如下：

$$T_1 = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)],$$

$$T_{2^{k+1}} = \frac{1}{2}T_{2^k} + \frac{b-a}{2^{k+1}}\sum_{i=1}^{2^k} f\left(a+(2i-1)\frac{b-a}{2^{k+1}}\right), \quad k=0,1,2,\cdots$$

$$\begin{cases} S_{2^k} = T_{2^{k+1}} + \frac{1}{4-1}(T_{2^{k+1}} - T_{2^k}), \\ C_{2^k} = S_{2^{k+1}} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2^{k+1}} - S_{2^k}), \qquad k=0,1,2,\cdots \\ R_{2^k} = C_{2^{k+1}} + \frac{1}{4^3-1}(C_{2^{k+1}} - C_{2^k}). \end{cases}$$

例 6.2 上机

数值积分的稳定性

设函数值$f(x_i)$的计算值为$\tilde{f}(x_i)$, 舍入误差限为ε, 即

$$|f(x_i) - \tilde{f}(x_i)| \leq \varepsilon_i \leq \varepsilon.$$

则数值积分的舍入误差

$$E = |\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) - \sum_{i=0}^{n} A_i \tilde{f}(x_i)| \leq |\sum_{i=0}^{n} A_i|\varepsilon \ .$$

设函数值$f(x_i)$的计算值为$\tilde{f}(x_i)$, 舍入误差限为ε, 即

$$|f(x_i)-\tilde{f}(x_i)|\le\varepsilon_i\le\varepsilon.$$

则数值积分的舍入误差

$$E=|\sum_{i=0}^{n}A_if(x_i)-\sum_{i=0}^{n}A_i\tilde{f}(x_i)|\le|\sum_{i=0}^{n}A_i|\varepsilon\ .$$

而

$$\sum_{i=0}^{n}A_i=\int_a^b\omega(x)\,\mathrm{d}x=\gamma_0.$$

若求积系数A_i全为正时, $|\sum_{i=0}^{n}A_i|=\sum_{i=0}^{n}A_i=\gamma_0$, 这时$E\le\gamma_0\,\varepsilon$.

这说明此时, **积分计算值的舍入误差限不会超过计算函数值舍入误差限的γ_0 倍**, 即舍入误差是可以控制的, 故数值积分方法是稳定的.

$n = 1, 2, 4$ 的牛顿-柯特斯公式和高斯型求积公式的求积系数全大于零. 所以, 梯形、辛普生、柯特斯和高斯型求积公式都是稳定的数值求积方法.

$n=1,2,4$ 的牛顿-柯特斯公式和高斯型求积公式的求积系数全大于零. 所以, 梯形、辛普生、柯特斯和高斯型求积公式都是稳定的数值求积方法.

$n\geq 8$的牛顿-柯特斯求积公式中求积系数有正有负. 这时, 若每个$|\varepsilon_i|$都达到ε且与相应的A_i正好都同号（或异号）, 则

$$|\sum_{i=0}^{n} A_i\varepsilon_i| = \varepsilon\sum_{i=0}^{n}|A_i|$$

尽管$\sum_{i=0}^{n} A_i = \gamma_0$,但$\sum_{i=0}^{n}|A_i|$有可能很大,故不能保证数值稳定性.

这从另一个角度说明了不宜采用高次插值多项式的原因.

待定系数法

用数值积分法计算积分$I[f] = \int_a^b \omega(x) f(x)\,\mathrm{d}x$, 有近似式$I[f] \approx Q[f]$, 我们希望求积公式对尽可能多的被积函数$f(x)$准确成立. 由插值型求积公式的误差估计式知, 对于次数不超过n的多项式$f(x)$, $f^{(n+1)}(x) = 0$, 则误差项$R[f] = 0$, $I[f] = Q[f]$.

用数值积分法计算积分$I[f]=\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x$, 有近似式$I[f]\approx Q[f]$, 我们希望求积公式对尽可能多的被积函数$f(x)$准确成立. 由插值型求积公式的误差估计式知, 对于次数不超过n的多项式$f(x)$, $f^{(n+1)}(x)=0$, 则误差项$R[f]=0$, $I[f]=Q[f]$.

Definition

(**代数精度**)设某一近似式(例如数值积分公式$I[f]\approx Q[f]$)的截断误差为$R[f]$, 如果对任意不超过m次的多项式$f(x)$, 都有$R[f]=0$; 而当$f(x)$是$m+1$次多项式时$R[f]\neq 0$, 则称该近似式的代数精度为m.

待定系数法

用数值积分法计算积分$I[f]=\int_a^b \omega(x)f(x)\,\mathrm{d}x$, 有近似式$I[f]\approx Q[f]$, 我们希望求积公式对尽可能多的被积函数$f(x)$准确成立. 由插值型求积公式的误差估计式知, 对于次数不超过n的多项式$f(x)$, $f^{(n+1)}(x)=0$, 则误差项$R[f]=0$, $I[f]=Q[f]$.

Definition

（**代数精度**）设某一近似式(例如数值积分公式$I[f]\approx Q[f]$) 的截断误差为$R[f]$, 如果对任意不超过m次的多项式$f(x)$, 都有$R[f]=0$; 而当$f(x)$是$m+1$次多项式时$R[f]\neq 0$, 则称该近似式的代数精度为m.

梯形求积公式的代数精度$m=1$, 辛普生求积公式的代数精度$m=3$, 柯特斯求积公式的代数精度$m=5$. 具有$n+1$个插值节点的插值型求积公式, 其代数精度$m\geq n$.

近似式代数精度为m的充要条件是

$$R[x^k]=0 \quad (k=0,1,2,\cdots,m), \quad R[x^{m+1}]\neq 0.$$

Definition

当节点x_i给定后，通过解方程组

$$R[x^k]=0, \quad k=0,1,\cdots,m.$$

（注意：方程的个数应等于未知量A_i的个数）求出求积系数A_i，由此得到求积公式的方法称为**待定系数法**.

例6.3 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(-h) + A_1 f(0) + A_2 f(h),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

例6.3 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(-h) + A_1 f(0) + A_2 f(h),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 取 $f(x) = 1, x, x^2$, 令$R[x^k] = 0$ $(k = 0, 1, 2)$, 得方程组

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 4h, \\ -A_0 h + A_2 h = 0, \\ A_0 h^2 + A_2 h^2 = \frac{16}{3} h^3. \end{cases}$$

解之, 得 $A_0 = A_2 = 8h/3, \quad A_1 = -4h/3.$

例6.3 确定求积公式

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(-h) + A_1 f(0) + A_2 f(h),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 取 $f(x) = 1, x, x^2$, 令$R[x^k] = 0$ $(k = 0, 1, 2)$, 得方程组

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = 4h, \\ -A_0 h + A_2 h = 0, \\ A_0 h^2 + A_2 h^2 = \frac{16}{3} h^3. \end{cases}$$

解之, 得 $A_0 = A_2 = 8h/3, \quad A_1 = -4h/3.$

令 $f(x) = x^3$, 显然, $R[x^3] = 0$. 再令$f(x) = x^4$, 则

$$I[x^4] = \int_{-2h}^{2h} x^4\,\mathrm{d}x = \frac{64h^5}{5}, \quad Q[x^4] = \frac{4h}{3}[2(-h)^4 + 2(h)^4] = \frac{16h^5}{3}.$$

$R[x^4] = I[x^4] - Q[x^4] = \frac{112}{15} h^5 \neq 0$, 故其代数精度$m = 3$.

例6.4 确定求积公式

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

例6.4 确定求积公式

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 令 $R[x^k] = 0\ (k = 0, 1, 2)$，得方程组

$$A_0 + A_1 = h, \quad A_1 h + A_2 = h^2/2, \quad A_1 h^2 = h^3/3.$$

解之, 得$A_0 = 2h/3, \quad A_1 = h/3, \quad A_2 = h^2/6.$

例6.4 确定求积公式

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(0) + A_1 f(h) + A_2 f'(0),$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 令 $R[x^k]=0$ $(k=0,1,2)$，得方程组

$$A_0 + A_1 = h, \quad A_1 h + A_2 = h^2/2, \quad A_1 h^2 = h^3/3.$$

解之, 得$A_0 = 2h/3, \quad A_1 = h/3, \quad A_2 = h^2/6.$
令 $f(x)=x^3$, 则 $I[x^3] = \int_0^h x^3\,\mathrm{d}x = h^4/4$，
$Q[x^3] = \frac{h}{6}[4f(0)+2f(h)+hf'(0)] = \frac{h^4}{3}$, $R[x^3] = -\frac{h^3}{12} \neq 0$. 故该求积公式的代数精度$m=2$.

一般地，近似公式的误差项$R[f]$是函数f的线性泛函，即

$$R[c_1 f_1 + c_2 f_2] = c_1 R[f_1] + c_2 R[f_2]. \quad \forall c_1, c_2 \in R.$$

Theorem

（广义佩亚诺定理）设近似式的误差项$R[f]$是区间$[a,b]$上$m+1$阶导数连续的函数$f(x)$ 的线性泛函，且近似式的代数精度为m，则

$$R[f(x)] = R[e(x)],$$

$$\text{其中} \quad e(x) = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}(x-\tilde{x}_0)(x-\tilde{x}_1)\cdots(x-\tilde{x}_m),$$

$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$是区间$[a,b]$上的任意点，$\xi$与$x, \tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$有关且位于$x, \tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$ 之间.

证明 设$p_m(x)$是以$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$为插值节点构成的插值多项式，则

$$f(x) = p_m(x) + e(x).$$

所以，$R[f] = R[p_m + e] = R[p_m] + R[e] = R[e]$.

广义佩亚诺定理

证明　设$p_m(x)$是以$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$为插值节点构成的插值多项式，则

$$f(x) = p_m(x) + e(x).$$

所以，$R[f] = R[p_m + e] = R[p_m] + R[e] = R[e]$.

定理中的插值节点$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$的取法比较灵活，可以不同，也可以相同. 当$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$ 中某些点相同时，$p_m(x)$ 是埃尔米特插值多项式. 点$\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$ 的灵活选取是该定理的最大优点，若选择适当，可以简化$R[f]$的表达式.

例6.5 利用广义佩亚诺定理确定例6.3、例6.4中数值积分公式的截断误差.

解 例6.3中$m=3$,

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{8h}{3}f(-h)-\frac{4h}{3}f(0)+\frac{8h}{3}f(h),$$

例6.5 利用广义佩亚诺定理确定例6.3、例6.4中数值积分公式的截断误差.

解 例6.3中 $m = 3$,

$$\int_{-2h}^{2h} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{8h}{3} f(-h) - \frac{4h}{3} f(0) + \frac{8h}{3} f(h),$$

取 $e(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-h)^2(x+h)^2$, 则

$$\begin{aligned} R[f] &= R[e] = I[e] - Q[e] \\ &= \int_{-2h}^{2h} \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-h)^2(x+h)^2\,\mathrm{d}x - \frac{4h}{3}[2e(-h) - e(0) + 2e(h)] \\ &= \frac{23h^5 f^{(4)}(\eta_1)}{90} + \frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{18} = \frac{14}{45} h^5 f^{(4)}(\eta), \quad -2h \le \eta \le 2h. \end{aligned}$$

可用广义佩亚诺定理确定近似式的截断误差.

由广义佩亚诺定理知, 数值积分公式的截断误差$R[f]=R[e]$
$=I[e]-Q[e]$.

故选取插值节点$\tilde{x}_0,\tilde{x}_1,\cdots,\tilde{x}_m$有两个原则:

1）为对$I[e]$应用广义积分中值定理, 选取$\tilde{x}_0,\tilde{x}_1,\cdots,\tilde{x}_m$应使

$$(x-\tilde{x}_0)(x-\tilde{x}_1)\cdots(x-\tilde{x}_m)$$

在积分区间$[a,b]$上不变号.

2）选取$\tilde{x}_0,\tilde{x}_1,\cdots,\tilde{x}_m$使计算$Q[e]$尽可能简单, 最好使$Q[e]=0$.

广义佩亚诺定理

例6.4中 $m=2$,

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2h/3f(0)+h/3f(h)+h^2/6f'(0),$$

选取 $\tilde{x}_0=\tilde{x}_1=0,\ \tilde{x}_2=h,$ 则

例6.4中 $m=2$,

$$\int_0^h f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2h/3f(0)+h/3f(h)+h^2/6f'(0),$$

选取 $\tilde{x}_0=\tilde{x}_1=0,\ \tilde{x}_2=h$, 则

$$e(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}x^2(x-h).$$

$$\begin{aligned}
R[f]=R[e]&=I[e]-Q[e]\\
&=\int_0^h \frac{f'''(\xi)}{3!}x^2(x-h)\,\mathrm{d}x-\frac{h}{6}[4e(0)+2e(h)+he'(0)]\\
&=\frac{1}{6}f'''(\eta)\int_0^h x^2(x-h)\,\mathrm{d}x=-\frac{(b-a)^4}{72}f'''(\eta),\ a\le\eta\le b.
\end{aligned}$$

例6.6 利用广义佩亚诺定理确定辛普生求积公式的截断误差.

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f] = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

例6.6 利用广义佩亚诺定理确定辛普生求积公式的截断误差.

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx Q[f] = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\tfrac{a+b}{2}) + f(b)\right].$$

解 可以验证辛普生求积公式的代数精度$m=3$, 取

$$e(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b).$$

则由广义佩亚诺定理

$$R[f] = R[e] = I[e] - Q[e] = \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-\frac{a+b}{2})^2(x-b)\,\mathrm{d}x$$

$$-\frac{b-a}{6}[e(a) + 4e(\frac{a+b}{2}) + e(b)] = -\frac{(b-a)^5}{2\,880}f^{(4)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

Definition

若适当的选择$n+1$个插值节点x_i, 求积公式$I[f] \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$的代数精度可以达到$2n+1$．我们将具有$n+1$个节点的且其代数精度达到$2n+1$ 的求积公式称为**高斯(Gauss)型求积公式（或最高代数精度求积公式）**，节点x_i称为**高斯点**.

Definition

若适当的选择$n+1$个插值节点x_i, 求积公式$I[f] \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$的代数精度可以达到$2n+1$．我们将具有$n+1$个节点的且其代数精度达到$2n+1$ 的求积公式称为**高斯(Gauss)型求积公式（或最高代数精度求积公式）**，节点x_i称为**高斯点**.

高斯型求积公式中含有$2n+2$个参数$x_i, A_i (i=0,1,\cdots,n)$, 这些参数必然满足$R[x^k]=0$ $(k=0,1,\cdots,2n+1)$, 即

$$\int_a^b \omega(x) x^k \,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^k, \quad k=0,1,\cdots,2n+1.$$

可以通过解方程组求出高斯型求积公式中的节点和求积系数x_i, A_i $(i=0,1,\cdots,n)$, 从而得到高斯型求积公式.

例6.7 确定以下高斯型求积公式及其误差项.

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

例6.7 确定以下高斯型求积公式及其误差项.

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

解 这是$n=1$的高斯型求积公式, 其代数精度$m=2n+1=3$. 所以求积公式对$f(x)=1,x,x^2,x^3$ 准确成立, 由此得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2, \\ x_0 A_0 + x_1 A_1 = 0, \\ x_0^2 A_0 + x_1^2 A_1 = 2/3, \\ x_0^3 A_0 + x_1^3 A_1 = 0. \end{cases}$$

解之, 得 $x_0 = -\sqrt{3}/3$, $x_1 = \sqrt{3}/3$, $A_0 = A_1 = 1$. 所求高斯型求积公式为

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

下面利用广义佩亚诺定理确定误差项. 由于代数精度$m=3$, 取

$$e(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x+\frac{\sqrt{3}}{3})^2(x-\frac{\sqrt{3}}{3})^2=\frac{f^{(4)}(\xi)}{24}(x^2-\frac{1}{3})^2.$$

则,

$$R[f]=R[e]=I[e]-Q[e]=I[e]=\int_{-1}^{1}\frac{f^{(4)}(\xi)}{24}(x^2-\frac{1}{3})^2\,\mathrm{d}x$$
$$=\frac{f^{(4)}(\eta)}{24}\int_{-1}^{1}(x^2-\frac{1}{3})^2\,\mathrm{d}x=\frac{1}{135}f^{(4)}(\eta),\quad -1\le\eta\le 1.$$

方程组是个非线性方程组, 不易求解.下述定理则给出了一个构造高斯型求积公式的方法.

Theorem

求积公式的代数精度$m = 2n + 1$的充分必要条件是节点x_i $(i = 0, 1, \cdots, n)$ 为区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$ 正交的$n + 1$次正交多项式$g_{n+1}(x)$的零点, 且求积系数

$$A_i = \int_a^b \omega(x) l_i(x) \, \mathrm{d}x, \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

证明　充分性　对任意次数不超过$2n+1$的多项式$p_{2n+1}(x)$，设$p_{2n+1}(x)$除以$g_{n+1}(x)$的商为$q_n(x)$，余式为$r_n(x)$，则

$$p_{2n+1}(x) = g_{n+1}(x)q_n(x) + r_n(x),$$

$$\begin{aligned} R[p_{2n+1}] &= R[g_{n+1}q_n] + R[r_n] \quad （m \geq n，则R[r_n] = 0.） \\ &= I[g_{n+1}q_n] - Q[g_{n+1}q_n] \\ &= \int_a^b \omega(x)g_{n+1}(x)q_n(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i)q_n(x_i). \end{aligned}$$

由于g_{n+1}与任意不超过n次的多项式正交，故上式第一项等于零；又由于$x_i(i=0,1,\cdots,n)$是$g_{n+1}(x)$ 的零点，故第二项等于零. 所以，

$$R[p_{2n+1}] = 0.$$

即代数精度$m \geq 2n+1$，结合前面的讨论结果$m \leq 2n+1$，所以其代数精度$m = 2n+1$.

必要性　设其代数精度为$m = 2n+1$，则$R[p_{2n+1}] = 0, R[r_n] = 0$. 于是

$$
\begin{aligned}
0 = R[p_{2n+1}] &= R[g_{n+1}q_n] + R[r_n] = I[g_{n+1}q_n] - Q[g_{n+1}q_n] \\
&= \int_a^b \omega(x) g_{n+1}(x) q_n(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i) q_n(x_i) \\
&= -\sum_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i) q_n(x_i).
\end{aligned}
$$

即$\sum\limits_{i=0}^{n} A_i g_{n+1}(x_i) q_n(x_i) = 0$，由$p_{2n+1}(x)$的任意性知$q_n(x_i)$也具有任意性. 因此，$g_{n+1}(x_i) = 0$，即$x_i$为$g_{n+1}(x)$的零点.

Lemma

设$\{g_k(x)\}$是区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为*1*的k次正交多项式，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点，则下式成立.

$$\frac{g_{n+1}(x)}{x-x_i}=\frac{\gamma_n}{g_n(x_i)}\sum_{k=0}^{n}\frac{g_k(x)g_k(x_i)}{\gamma_k}.$$

高斯型求积公式

Lemma

设$\{g_k(x)\}$是区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为1的k次正交多项式，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点，则下式成立.

$$\frac{g_{n+1}(x)}{x-x_i}=\frac{\gamma_n}{g_n(x_i)}\sum_{k=0}^{n}\frac{g_k(x)g_k(x_i)}{\gamma_k}.$$

Theorem

设$\{g_k(x)\}$是区间$[a,b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为1的k次正交多项式，$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点，则高斯型求积公式的求积系数可以表示为

$$A_i=\frac{\gamma_n}{g'_{n+1}(x_i)g_n(x_i)},\quad i=0,1,\cdots,n.$$

Theorem

设被积函数$f(x) \in C^{2n+2}$, 设$\{g_k(x)\}$是区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为1的k次正交多项式, $x_i(i = 0, 1, \cdots, n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点, 则高斯型求积公式的截断误差为

$$R[f] = \frac{\gamma_{n+1}}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

Theorem

设被积函数$f(x) \in C^{2n+2}$, 设$\{g_k(x)\}$是区间$[a, b]$上关于权函数$\omega(x)$正交的、最高次项系数为1的k次正交多项式, $x_i(i = 0, 1, \cdots, n)$ 是$g_{n+1}(x)$的零点, 则高斯型求积公式的截断误差为

$$R[f] = \frac{\gamma_{n+1}}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

证明 由于高斯型求积公式的代数精度$m = 2n + 1$

$$e(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2,$$

则 $$R[f] = R[e] = I[e] = \frac{\gamma_{n+1}}{(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

Theorem

高斯型求积公式的求积系数大于零.

高斯型求积公式

Theorem

高斯型求积公式的求积系数大于零.

证明　由于高斯型求积公式对不超过$2n+1$次的多项式准确成立. 分别取$f(x)=l_k^2(x)$ $(k=0,1,\cdots,n)$ 有

$$0<\int_a^b \omega(x) l_k^2(x)\,\mathrm{d}x=\sum_{i=0}^n A_i l_k^2(x_i)=A_k,\quad k=0,1,\cdots,n.$$

Theorem

高斯型求积公式的求积系数大于零.

证明 由于高斯型求积公式对不超过$2n+1$次的多项式准确成立. 分别取$f(x) = l_k^2(x)$ $(k = 0, 1, \cdots, n)$ 有

$$0 < \int_a^b \omega(x) l_k^2(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} A_i l_k^2(x_i) = A_k, \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$

对于最高次项系数为a_k的正交多项式$\{g_k(x)\}$，高斯型求积公式的求积系数和则截断误差分别为

$$A_i = \frac{a_{n+1}}{a_n} \frac{\gamma_n}{g'_{n+1}(x_i) g_n(x_i)}, \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

$$R[f] = \frac{\gamma_{n+1}}{a_{n+1}^2 (2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad a \le \eta \le b.$$

1. 高斯-勒让德(Gauss-Legendre)求积公式

勒让德多项式$p_n(x)$ 是在区间$[-1,1]$上关于权函数$\omega(x)\equiv 1$正交的正交多项式. $p_n(x)$最高次项x^n的系数$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$, 内积$\gamma_n=(p_n,p_n)=\frac{2}{2n+1}$. 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为勒让德多项式$p_{n+1}(x)$ 的零点, 则得高斯-勒让德求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

1. 高斯-勒让德(Gauss-Legendre)求积公式

勒让德多项式$p_n(x)$ 是在区间$[-1,1]$上关于权函数$\omega(x)\equiv 1$正交的正交多项式. $p_n(x)$最高次项x^n的系数$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$, 内积$\gamma_n=(p_n,p_n)=\frac{2}{2n+1}$. 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为勒让德多项式$p_{n+1}(x)$ 的零点, 则得高斯-勒让德求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$A_i=\frac{2}{(2n+1)p'_{n+1}(x_i)p_n(x_i)},$$

$$R[f]=\frac{2^{(2n+3)}[(n+1)!]^4}{(2n+3)[(2n+2)!]^3}f^{(2n+2)}(\eta),\quad -1\le\eta\le 1.$$

常用的四种高斯型求积公式

对于一般区间$[a,b]$上的积分$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$，通过变量代换$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$，化为区间$[-1,1]$上的积分

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

对于一般区间$[a,b]$上的积分$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$, 通过变量代换$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$, 化为区间$[-1,1]$上的积分

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

例6.8 用$n=3$的高斯-勒让德求积公式计算积分

$$\int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x.$$

解 令$x=(t+1)/2$, 则$I[f]=\int_0^1 \frac{sinx}{x}\,\mathrm{d}x=\int_{-1}^1 \frac{sin\frac{t+1}{2}}{t+1}\,\mathrm{d}t$,
记$f(t)=\frac{sin\frac{t+1}{2}}{t+1}$, $n=3$. 由表6.2知

$$I[f]\approx Q[f]=\sum_{i=0}^{3} A_i f(t_i)=0.946\,083\,070\,2.$$

2. 高斯-拉盖尔(Gauss-Laguerre)求积公式

拉盖尔多项式$\{L_n(x)\}$是区间$[0,+\infty)$上关于权函数$\omega(x)=e^{-x}$正交的正交多项式. $L_n(x)$最高次项x^n 的系数$a_n=(-1)^n$, 内积$\gamma_n=(n!)^2$, 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$为拉盖尔多项式$L_{n+1}(x)$的零点. 则得高斯-拉盖尔求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$A_i=-\frac{(n!)^2}{L'_{n+1}(x_i)L_n(x_i)},$$

$$R[f]=\frac{[(n+1)!]^2}{(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta),\quad 0\le\eta<+\infty.$$

3. 高斯-埃尔米特(Gauss-Hermite)求积公式

埃尔米特多项式$\{H_n(x)\}$ 是在区间$(-\infty, +\infty)$上关于权函数$\omega(x) = e^{-x^2}$正交的正交多项式. $H_n(x)$最高次项x^n 的系数$a_n = 2^n$, 内积$\gamma_n = 2^n(n!)\sqrt{\pi}$, 取节点$x_i(i = 0, 1, \cdots, n)$为埃尔米特多项式$H_{n+1}(x)$ 的零点. 则得高斯-埃尔米特求积公式和求积系数及截断误差:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$A_i = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{H'_{n+1}(x_i) H_n(x_i)},$$

$$R[f] = \frac{(n+1)!\sqrt{\pi}}{2^{n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \quad -\infty < \eta < +\infty.$$

4. 高斯-切比雪夫(Gauss-Chebyshev)求积公式

切比雪夫多项式$\{T_n(x)\}$是在区间$[-1,1]$上关于权函数$\omega(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交的正交多项式. $T_n(x)$最高次项x^n的系数$a_n=2^{n-1}$, 内积$\gamma_n=\pi/2$ $(n\geq 1)$. 取节点$x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 为切比雪夫多项式多项式$T_{n+1}(x)$的零点

$$x_i=cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi,\quad i=0,1,\cdots,n.$$

得高斯-切比雪夫求积公式和截断误差:

$$\int_{-1}^{1}\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x\approx\frac{\pi}{n+1}\sum_{i=0}^{n}f\left(cos\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right).$$

$$R[f]=\frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta),\quad -1\leq\eta\leq 1.$$

数值微分

计算列表函数近似导数的方法, 即数值微分法.

数值微分

计算列表函数近似导数的方法, 即数值微分法.

插值型数值微分公式是取$f(x)$的插值多项式（如$L_n(x)$）的k阶导数作为$f(x)$的k阶导数的近似表达式. 即取$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$, $f^{(k)}(x_i) \approx L_n^{(k)}(x_i)$.

计算列表函数近似导数的方法，即数值微分法.

插值型数值微分公式是取$f(x)$的插值多项式（如$L_n(x)$）的k阶导数作为$f(x)$的k阶导数的近似表达式. 即取$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$, $f^{(k)}(x_i) \approx L_n^{(k)}(x_i)$. 由插值法知

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x),$$

则$f^{(k)}(x) = L_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x)$.

截断误差

$$R[f] = f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) = R_n^{(k)}(x) = \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left\{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)\right\}.$$

其中ξ与$x, x_0, x_1, \cdots, x_n$有关.

1. 两点数值微分公式 $(n=1, k=1)$

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

$$R_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1).$$

则 $L_1'(x) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$，其中 $h = x_1 - x_0$.

$$R_1'(x_0) = -\frac{h}{2} f''(\xi), \quad R_1'(x_1) = \frac{h}{2} f''(\xi).$$

1. 两点数值微分公式 $(n=1, k=1)$

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

$$R_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1).$$

则 $L_1'(x) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}$，其中 $h = x_1 - x_0$.

$$R_1'(x_0) = -\frac{h}{2} f''(\xi), \quad R_1'(x_1) = \frac{h}{2} f''(\xi).$$

所以，由 $f'(x) = L_1'(x) + R_1'(x)$ 得

$$\begin{cases} f'(x_0) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi), \\ f'(x_1) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi). \end{cases}$$

2. 三点数值微分公式$(n=2),(k=1)$

设插值节点等距分布，即$x_i=x_0+ih,\quad i=0,1,2.$

$$L_2(x)=\sum_{i=0}^{2}l_i(x)f(x_i),\qquad R_2(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2).$$

$$L_2'(x)=\frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2$$

2. 三点数值微分公式$(n=2),(k=1)$

设插值节点等距分布，即$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, 2.$

$$L_2(x) = \sum_{i=0}^{2} l_i(x) f(x_i), \quad R_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2).$$

$$L_2'(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} y_0 + \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} y_1 + \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} y_2$$

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

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi).$$

插值型数值微分公式

（2）求二阶导数$(k=2)$

$$
\begin{aligned}
L_2''(x) &= \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2}, \\
R_2''(x) &= \frac{1}{3}(x-x_0+x-x_1+x-x_2)f'''(\xi) \\
&\quad + \frac{2}{4!}[(x-x_1)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_1)]f^{(4)}(\bar{\xi} \\
&\quad + \frac{1}{6}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\frac{d^2 f'''(\xi)}{dx^2}.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{cases}
f''(x_0) = \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2} - hf'''(\xi) + \frac{h^2}{6}f^{(4)}(\bar{\xi}), \\
f''(x_1) = \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2} - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\bar{\xi}), \\
f''(x_2) = \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2} + hf'''(\xi) + \frac{h^2}{6}f^{(4)}(\bar{\xi}).
\end{cases}
$$

一个常用的二阶数值微分公式

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi).$$

一个常用的二阶数值微分公式

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi).$$

由数值微分公式可见，其截断误差都随步长h的减小而减小，

但所有公式都是以h作除数，因而随步长h的减小，式中函数值的

误差将给导数计算带来越大的误差.

所以，h的选取要合适，不宜太大，也不宜太小，原则上不能让舍入误差超过截断误差.

待定系数法

与数值积分法中的待定系数法类似，也可用待定系数法导出数值微分公式

与数值积分法中的待定系数法类似, 也可用待定系数法导出数值微分公式

例6.9 确定如下数值微分公式

$$f''(x_0) \approx c_0 f(x_0) + c_1 f'(x_0) + c_2 f(x_1),$$

使其具有尽可能高的代数精度, 并给出截断误差表示式.

与数值积分法中的待定系数法类似，也可用待定系数法导出数值微分公式

例6.9 确定如下数值微分公式

$$f''(x_0) \approx c_0 f(x_0) + c_1 f'(x_0) + c_2 f(x_1),$$

使其具有尽可能高的代数精度，并给出截断误差表示式.

解 为了便于计算，令$x_0 = 0$, $x_1 = h$, 则截断误差

$$R[f] = f''(0) - c_0 f(0) - c_1 f'(0) - c_2 f(h).$$

与数值积分法中的待定系数法类似，也可用待定系数法导出数值微分公式

例6.9 确定如下数值微分公式

$$f''(x_0) \approx c_0 f(x_0) + c_1 f'(x_0) + c_2 f(x_1),$$

使其具有尽可能高的代数精度，并给出截断误差表示式.

解 为了便于计算，令$x_0 = 0$, $x_1 = h$, 则截断误差

$$R[f] = f''(0) - c_0 f(0) - c_1 f'(0) - c_2 f(h).$$

分别取$f = 1, x, x^2$, 令$R[f] = 0$, 则得方程组

$$-c_0 - c_2 = 0,$$

$$-c_1 - c_2 h = 0,$$

$$2 - c_2 h^2 = 0.$$

解之，得 $c_0 = -2/h^2, c_1 = -2/h, c_2 = 2/h^2$. 从而，

$$f''(x_0) \approx \frac{2}{h^2}[-f(x_0) - hf'(x_0) + f(x_1)],$$

其中$h = x_1 - x_0$.

由于$R[x^3] = -c_2 h^3 = -2h \neq 0$. 所以，代数精度$m = 2$.

待定系数法

解之，得 $c_0 = -2/h^2, c_1 = -2/h, c_2 = 2/h^2$. 从而，

$$f''(x_0) \approx \frac{2}{h^2}[-f(x_0) - hf'(x_0) + f(x_1)],$$

其中 $h = x_1 - x_0$.

由于 $R[x^3] = -c_2 h^3 = -2h \neq 0$. 所以，代数精度 $m = 2$. 根据广义佩亚诺定理取

$$e(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x - x_0)^2(x - x_1),$$

则 $R[f] = R[e] = e''(x_0) - \frac{2}{h^2}[-e(x_0) - he'(x_0) + e(x_1)] = e''(x_0) = -\frac{h}{3}f'''(\xi)$.