计算方法

令 丹

数学与统计学院

邮箱：danling@xjtu.edu.cn

第六章
数值积分与数值微分

积分的计算

$$\int_a^b f(x)dx = \quad ?$$

- $f(x) = x^n, \ \ \sin x, \ \ \cos x, \ \ \mathrm{e}^x, \ \ \ln x, \cdots$
- $f(x) = \frac{1}{1+x^4}, \ \ (1+x)\sqrt{x^2-2x+5}$
- $f(x) = \sqrt{1+x^3}, \ \ \frac{\sin}{x}, \ \ \sin x^2, \ \ \mathrm{e}^{-x^2} \cdots$
- $f(x)$ 为列表函数

主要内容

1. 数值积分的基本概念
2. 牛顿-科茨求积公式
3. 高斯型求积公式
4. 数值微分

1. 数值积分的基本概念

数值积分

特点: 将被积函数在某些节点上的函数值的加权求和作为积分值的近似, 即

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \quad a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$$

数值积分

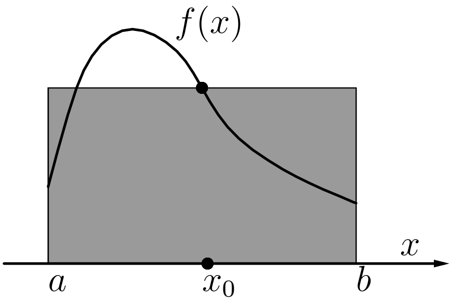
若 $f(x)$ 连续, 根据积分中值定理, 存在 $\xi \in [a,b]$ 使得

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

数值积分

若 $f(x)$ 连续, 根据积分中值定理, 存在 $\xi \in [a,b]$ 使得

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



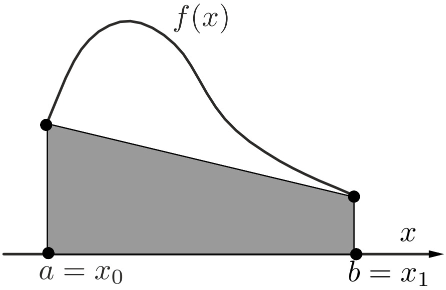
$$f(\xi) \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

中矩形公式

数值积分

若 $f(x)$ 连续, 根据积分中值定理, 存在 $\xi \in [a,b]$ 使得

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



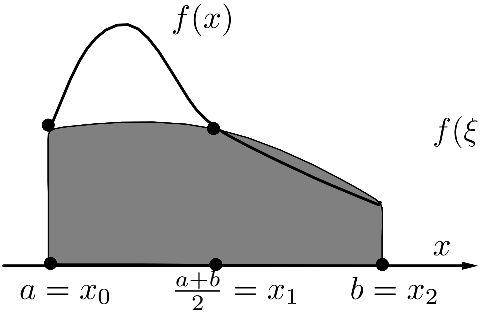
$$f(\xi) \approx \frac{1}{2}\big(f(a) + f(b)\big)$$

梯形公式

数值积分

若 $f(x)$ 连续, 根据积分中值定理, 存在 $\xi \in [a,b]$ 使得

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



$$f(\xi) \approx \frac{1}{6}\Big(f(a)+4f\big(\frac{a+b}{2}\big)+f(b)\Big)$$

辛普森 (Simpson) 公式

数值积分

一般地, 当取 $[a,b]$ 内某些节点 x_i 处的函数值 $f(x_i)$ 通过加权平均以作为平均高度 $f(\xi)$ 的近似时, 便可得到求积公式的一般形式

$$\boxed{I[f] = \int_a^b f(x)dx = (b-a)f(\xi) \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = Q[f]}$$

- x_i: 求积节点
- A_i: 求积系数
- $R[f] = I[f] - Q[f]$: 截断误差

代数精度

如果求积公式

$$Q[f] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

对所有不超过 m 次的多项式精确成立, 但对 $m+1$ 次多项式不精确, 则称求积公式具有 m 次代数精度.

代数精度

欲使求积公式具有 m 次代数精度, 只要令它对于 $f(x) = 1, x, \cdots,$ x^m 都能精确成立, 即

多项式函数

$$
\begin{cases}
\sum_{i=0}^{n} A_i = b - a, \\
\sum_{i=0}^{n} A_i x_i = \frac{1}{2}(b^2 - a^2), \\
\qquad \cdots\cdots \\
\sum_{i=0}^{n} A_i x_i^m = \frac{1}{m+1}(b^{m+1} - a^{m+1}).
\end{cases}
$$

代数精度

构造的存在性β

定理

对任意给定的 $n+1$ 个互异节点

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

总存在 $n+1$ 个相应的求积系数 $\{A_i\}$, 使得求积公式至少具有 n 次代数精度.

代数精度

例 1：确定求积系数

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(a) + A_1 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + A_2 f(b)$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解　取 $f(x) = 1, x, x^2$ 代入求积公式, 得到

$$\begin{cases} A_0 + A_1 + A_2 = b - a, \\ A_0 a + \dfrac{A_1}{2}(a+b) + A_2 b = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2), \\ A_0 a^2 + \dfrac{A_1}{4}(a+b)^2 + A_2 b^2 = \dfrac{1}{3}(b^3 - a^3) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A_0 = \dfrac{1}{6}(b-a), \\ A_1 = \dfrac{2}{3}(b-a), \\ A_2 = \dfrac{1}{6}(b-a). \end{cases}$$

代数精度

于是求积公式为

$$Q[f] = \frac{1}{6}(b-a)\Big(f(a) + 4f\big(\frac{a+b}{2}\big) + f(b)\Big).$$

令 $f(x) = x^3$, 则

$$I[f] = \int_a^b x^3 dx = \frac{1}{4}(b^4 - a^4),$$
$$Q[f] = \frac{b-a}{6}\Big(a^3 + \frac{1}{2}(a+b)^3 + b^3\Big),$$
$$R[f] = I[f] - Q[f] = 0.$$

再令 $f(x)=x^4$, 则

$$I[f]=\int_a^b x^4 dx=\frac{1}{5}(b^5-a^5),$$

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

$$R[f]=I[f]-Q[f]=-\frac{1}{120}(b-a)^5\neq 0.$$

故 $m=3$.

代数精度

例 2：确定求积系数

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(a) + A_1 f(b) + A_2 f'(a)$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 取 $f(x) = 1, x, x^2$ 代入求积公式, 得到

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a, \\ A_0 a + A_1 b + A_2 = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2), \\ A_0 a^2 + A_1 b^2 + 2A_2 a = \dfrac{1}{3}(b^3 - a^3) \end{cases}$$

代数精度

例 2：确定求积系数

$$\int_a^b f(x)dx \approx A_0 f(a) + A_1 f(b) + A_2 f'(a)$$

使其具有尽可能高的代数精度.

解 取 $f(x) = 1, x, x^2$ 代入求积公式, 得到

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a, \\ A_0 a + A_1 b + A_2 = \dfrac{1}{2}(b^2 - a^2), \\ A_0 a^2 + A_1 b^2 + 2A_2 a = \dfrac{1}{3}(b^3 - a^3) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A_0 = \dfrac{2}{3}(b-a), \\ A_1 = \dfrac{1}{3}(b-a), \\ A_2 = \dfrac{1}{6}(b-a)^2. \end{cases}$$

代数精度

于是求积公式为

$$Q[f] = \frac{2}{3}(b-a)f(a) + \frac{1}{3}(b-a)f(b) + \frac{1}{6}(b-a)^2 f'(a).$$

令 $f(x) = x^3$, 则

$$I[f] = \int_a^b x^3 dx = \frac{1}{4}(b^4 - a^4),$$

$$Q[f] = \frac{b-a}{6}\left(a^3 + 3a^2 b + 2b^3\right),$$

$$R[f] = I[f] - Q[f] = -\frac{1}{12}(b-a)^4 \neq 0.$$

故 $m = 2$.

插值型求积公式

取拉格朗日插值多项式, 作为 $f(x)$ 的近似

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) f(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x),$$

其中

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

两边积分得

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \int_a^b L_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b l_i(x)dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)dx.\end{aligned}$$

插值型求积公式

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

$$\begin{aligned}
A_i &= \int_a^b l_i(x)dx \\
&= \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}dx,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R[f] = I[f] - Q[f] &= \int_a^b f(x)dx - \int_a^b L_n(x)dx \\
&= \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\pi_{n+1}(x)dx.
\end{aligned}$$

截断误差分析

可以验证　插值是线性的

$$R[f] = I[f] - Q[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

$$R[\alpha f] = I[\alpha f] - Q[\alpha f] = \int_a^b \alpha f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} \alpha A_i f(x_i) = \alpha R[f],$$

$$\begin{aligned} R[f+g] &= I[f+g] - Q[f+g] \\ &= \int_a^b \big(f(x)+g(x)\big)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i\big(f(x_i)+g(x_i)\big) \\ &= R[f] + R[g] \end{aligned}$$

$R[f]$ 是 f 的线性泛函

广义佩亚诺定理

General Peano Theorem

定理

设 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上 $m+1$ 阶导数连续, 若插值型求积公式的代数精度为 m, 记

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

其中 $\widetilde{x}_0,\widetilde{x}_1,\cdots,\widetilde{x}_m$ 为区间 $[a,b]$ 上的任意点, ξ 与 $x,\widetilde{x}_0,\widetilde{x}_1,\cdots,\widetilde{x}_m$ 有关且位于 $\widetilde{x}_0,\widetilde{x}_1,\cdots,\widetilde{x}_m$ 之间, 则

$$R[f]=R[e].$$

证　设 $p_m(x)$ 是 $f(x)$ 的以 $\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_m$ 为插值节点的插值多项式, 则

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

由于求积公式具有 m 次代数精度, 即 $R[p_m] = 0$. 因此有

$R[f]$ 是 f 的线性泛函

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

广义佩亚诺定理

- $\widetilde{x}_0, \widetilde{x}_1, \cdots, \widetilde{x}_m$ 选取灵活
  - 选取 $\widetilde{x}_0, \widetilde{x}_1, \cdots, \widetilde{x}_m$ 使得 $(x-\widetilde{x}_0)(x-\widetilde{x}_1)\cdots(x-\widetilde{x}_m)$ 在 $[a,b]$ 上保持定号
  - 选取 $\widetilde{x}_0, \widetilde{x}_1, \cdots, \widetilde{x}_m$ 使得 $Q[e]$ 计算简单, 最好有 $Q[e]=0$
- $\widetilde{x}_0, \widetilde{x}_1, \cdots, \widetilde{x}_m$ 中某些点相同时, $p_m(x)$ 是 Hermite 插值多项式

2. 牛顿-科茨求积公式

牛顿-科茨求积公式

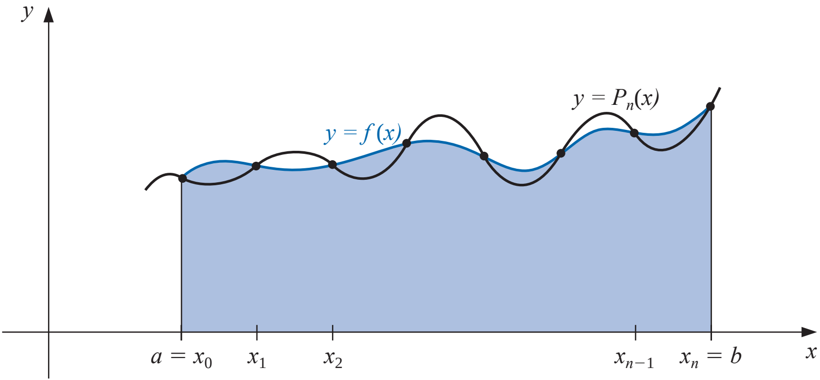
Newton–Cotes Integration Rules

对区间 $[a,b]$ 的 n 等分点 $x_i = a + ih,\ h = \frac{b-a}{n},\ i = 0,1,\cdots,n$,
插值型求积公式

$$Q[f] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \quad A_i = \int_a^b l_i(x)dx = (b-a)c_i^{(n)}$$

称为 n 阶牛顿-科茨 (Newton-Cotes) 求积公式, $c_i^{(n)}$ 称为牛顿-科茨系数.

牛顿-科茨求积公式



牛顿-科茨求积公式

令 $x = x_0 + th$, 则

$$
\begin{aligned}
x - x_i &= x_0 + th - (x_0 + ih) = (t - i)h, \\
x_i - x_j &= x_0 + ih - (x_0 + jh) = (i - j)h,
\end{aligned}
$$

从而

$$
\begin{aligned}
&(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\cdots(x - x_n) \\
=&t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)h^n,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&(x_i - x_0)(x_i - x_1)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_n) \\
=&i(i-1)\cdots 1\cdot(-1)\cdots[-(n-i)]h^n \\
=&(-1)^{n-i} i!(n-i)!h^n.
\end{aligned}
$$

牛顿-科茨求积公式

于是得

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

$$= \frac{(-1)^{n-i}h}{i!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt,$$

因此

$$\boxed{c_i^{(n)} = \frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot i!(n-i)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-i+1)(t-i-1)\cdots(t-n)dt}$$

与函数 $f(x)$ 以及区间 $[a,b]$ 均无关, 且

$$(1)\ c_k^{(n)} = c_{n-k}^{(n)},\quad k=0,1,\cdots,\left[\frac{n}{2}\right]; \qquad (2)\ \sum_{k=0}^{n} c_k^{(n)} = 1.$$

证：令 f=1

梯形求积公式

令 $n = 1$, 则有

$$h = b - a, \quad x_0 = a, \quad x_1 = b,$$

则求积系数为

$$A_0 = -h\int_0^1 (t-1)dt = \frac{h}{2} = \frac{b-a}{2},$$
$$A_1 = h\int_0^1 t dt = \frac{h}{2} = \frac{b-a}{2}.$$

$$\boldsymbol{Q[f] = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) = \frac{b-a}{2}\big(f(a) + f(b)\big)}$$

梯形求积公式

由于 $n=1$, 所以梯形求积公式的代数精度 $m \geqslant 1$. 对 x^2 应用求积公式, 则有

$$
\begin{aligned}
I[x^2] &= \int_a^b x^2 dx = \frac{1}{3}(b^3 - a^3), \\
Q[x^2] &= \frac{b-a}{2}(a^2 + b^2), \\
R[x^2] &= -\frac{1}{6}(b-a)^3 \neq 0,
\end{aligned}
$$

故 $m=1$.

梯形求积公式

由于 $m=1$, 取 $\widetilde{x}_0=a, \widetilde{x}_1=b$,

$$e(x)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x-a)(x-b)$$

则 $Q[e]=0$. 于是得到梯形求积公式的截断误差为

$$\begin{aligned} R[f]=R[e] &= \int_a^b e(x)dx \\ &= \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)dx \\ &= \frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta) = -\frac{h^3}{12}f''(\eta). \end{aligned}$$

辛普森求积公式

令 $n=2$, 则有

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

则求积系数为

$$\begin{aligned}
A_0 &= \frac{h}{2}\int_0^2 (t-1)(t-2)dt = \frac{h}{3} = \frac{b-a}{6},\\
A_1 &= h\int_0^2 t(t-2)dt = \frac{4h}{3} = \frac{2(b-a)}{3},\\
A_2 &= \frac{h}{2}\int_0^2 t(t-1)dt = \frac{h}{3} = \frac{b-a}{6}.
\end{aligned}$$

辛普森求积公式

$$
\begin{aligned}
Q[f] &= A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) \\
&= \frac{b-a}{6}\Big(f(a) + 4f\big(\frac{a+b}{2}\big) + f(b)\Big)
\end{aligned}
$$

由于 $m = 3$, 取

$$
\widetilde{x}_0 = a,\ \widetilde{x}_1 = \widetilde{x}_2 = \frac{a+b}{2} = a + h,\ \widetilde{x}_3 = b = a + 2h,
$$

$$
e(x) = \frac{1}{24} f^{(4)}(\xi)(x-a)\big(x - \frac{a+b}{2}\big)^2 (x-b)
$$

则 $Q[e] = 0$.

辛普森求积公式

于是得到辛普森求积公式的截断误差为

$$\begin{aligned}
R[f] = R[e] &= \int_a^b e(x)dx \\
&= \frac{1}{24}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)\Big(x-\frac{a+b}{2}\Big)^2(x-b)dx \\
&= \frac{1}{24}f^{(4)}(\eta)\int_a^{a+2h}(x-a)(x-a-h)^2(x-a-2h)dx \\
&= -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta) = -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta).
\end{aligned}$$

科茨求积公式

令 $n=4$, 则有 $h=(b-a)/4$,

$$x_0=a,\ x_1=a+h,\ x_2=a+2h,\ x_3=a+3h,\ x_4=b,$$

于是得到求积系数

$$\begin{aligned}
A_0&=\frac{h}{4!}\int_0^4 (t-1)(t-2)(t-3)(t-4)dt=\frac{7(b-a)}{90},\\
A_1&=-\frac{h}{3!}\int_0^4 t(t-2)(t-3)(t-4)dt=\frac{32(b-a)}{90},\\
A_2&=\frac{h}{(2!)^2}\int_0^4 t(t-1)(t-3)(t-4)dt=\frac{12(b-a)}{90},\\
A_3&=A_1=\frac{32(b-a)}{90},\qquad A_4=A_0=\frac{7(b-a)}{90}.
\end{aligned}$$

科茨求积公式

$$Q[f] = \frac{b-a}{90}\left(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)\right)$$

由于 $m \geqslant 4$, 对 x^5 应用求积公式, 则有

$$I[x^5] = \int_a^b x^5 dx = \frac{1}{6}(b^6 - a^6),$$

$$Q[x^5] = \frac{b-a}{6}(a^5 + a^4 b + a^3 b^2 + a^2 b^3 + ab^4 + b^5) = I[x^5],$$

$$R[x^5] = 0.$$

科茨求积公式

再对 x^6 应用求积公式, 有

$$R[x^6] = I[x^6] - Q[x^6] = -\frac{(b-a)^7}{26880} \neq 0,$$

故 $m = 5$.

截断误差:

$$R[f] = -\frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\eta) = -\frac{(b-a)^7}{1935360} f^{(6)}(\eta)$$

牛顿-科茨求积公式

代数精度

$$m=\begin{cases} n+1, & n \text{ 为偶数}, \\ n, & n \text{ 为奇数}. \end{cases}$$

截断误差 记 $\rho_{n+1}(t)=t(t-1)\cdots(t-n)$

- n 为偶数

$$R[f]=\frac{M_n h^{n+3}}{(n+2)!}f^{(n+2)}(\eta),\quad a\leqslant\eta\leqslant b,\quad M_n=\int_0^n t\rho_{n+1}(t)dt$$

- n 为奇数

$$R[f]=\frac{K_n h^{n+2}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\tilde{\eta}),\quad a\leqslant\tilde{\eta}\leqslant b,\quad K_n=\int_0^n \rho_{n+1}(t)dt$$

数值稳定性

设 A_i 的计算无误差, 但计算 $f(x_i), i = 0, 1, \cdots, n$ 时有误差, 记为 $\widetilde{f}(x_i)$, 令

$$\varepsilon = \max_{0 \leqslant i \leqslant n} \left| f(x_i) - \widetilde{f}(x_i) \right|,$$

则

$$E = \left| \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) - \sum_{i=0}^{n} A_i \widetilde{f}(x_i) \right| \leqslant \varepsilon \sum_{i=0}^{n} |A_i|.$$

数值稳定性

$$E = \left| \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) - \sum_{i=0}^{n} A_i \widetilde{f}(x_i) \right| \leqslant \varepsilon \sum_{i=0}^{n} |A_i|.$$

当 $A_i > 0,\ i = 0, 1 \cdots, n$ 时,

$$E \leqslant \varepsilon \sum_{i=0}^{n} |A_i| = \varepsilon \sum_{i=0}^{n} (b-a) c_i^{(n)} = \varepsilon (b-a),$$

此时舍入误差可控, 因此数值方法稳定.

数值稳定性

当 $A_i > 0,\ i = 0, 1 \cdots, n$ 时,

$$E \leqslant \varepsilon \sum_{i=0}^{n} |A_i| = \varepsilon \sum_{i=0}^{n} (b-a) c_i^{(n)} = \varepsilon (b-a),$$

此时舍入误差可控, 因此数值方法稳定.

$n \geqslant 8$ 时, A_i 有正有负. 尽管 $\sum\limits_{i=0}^{n} A_i = b - a$, 但 $\sum\limits_{i=0}^{n} |A_i|$ 可能很大, 故数值稳定性无法保证.

复化求积公式

如何提高数值积分的精度？

方案一：增加插值节点提高多项式次数？ ✕ 龙格现象

方案二：把积分区间分成若干个长度相等的子区间，即令

$$h=\frac{b-a}{n},\quad x_i=a+ih,\quad i=0,1,\cdots,n$$

在每个子区间上分别应用基本求积公式，最后将所得结果相加.

思想类似分段插值

复化梯形求积公式

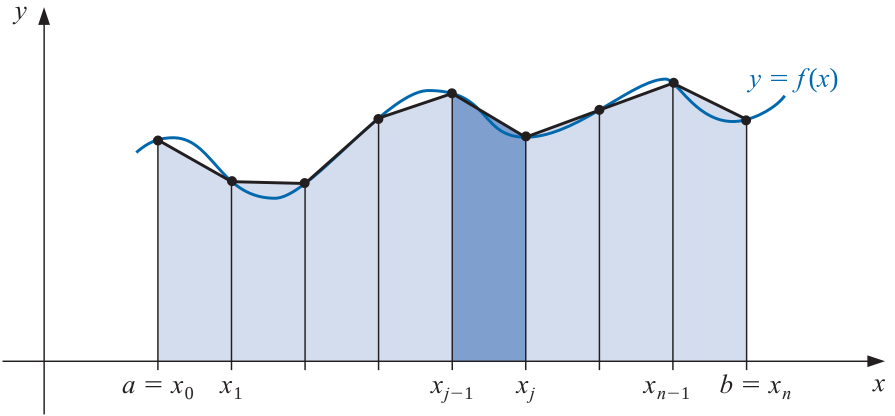
$$
\begin{aligned}
I[f] &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \\
&\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \big(f(x_i) + f(x_{i-1})\big) \\
&= \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right) \triangleq T_n.
\end{aligned}
$$

截断误差

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

其中 $\eta_i \in [x_{i-1}, x_i],\ i = 1, 2, \cdots, n.$

复化梯形求积公式



复化梯形求积公式

设 $f''(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续, 则存在常数 $m \leqslant M$, 使得 $m \leqslant f''(x) \leqslant M$. 于是有

$$nm \leqslant f''(\eta_1) + f''(\eta_2) + \cdots + f''(\eta_n) \leqslant nM.$$

由连续函数的介值定理, 存在 $\eta \in [a,b]$ 使得

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

代入得

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

复化辛普森求积公式

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

复化辛普森求积公式

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

截断误差　设 $f^{(4)}(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续, 则

$$
R_{S_n}[f] = -\frac{h^5}{2880} n f^{(4)}(\eta) = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta), \quad a \leqslant \eta \leqslant b.
$$

复化科茨求积公式

$$
\begin{aligned}
I[f] &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \\
&\approx \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i - x_{i-1}}{90} \Big[7f(x_{i-1}) + 32f\big(x_{i-1} + \frac{h}{4}\big) + 12f\big(x_{i-1} + \frac{h}{2}\big) \\
&\quad + 32f\big(x_{i-1} + \frac{3h}{4}\big) + f(x_i) \Big] \\
&= \frac{h}{90} \Big[7f(a) + 14\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 32\sum_{i=0}^{n-1} f\big(x_{i-1} + \frac{h}{4}\big) \\
&\quad + 12\sum_{i=0}^{n-1} f\big(x_{i-1} + \frac{h}{2}\big) + 32\sum_{i=0}^{n-1} f\big(x_{i-1} + \frac{3h}{4}\big)7 + f(b) \Big] \triangleq C_n.
\end{aligned}
$$

截断误差 设 $f^{(6)}(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续, 则

$$
\begin{aligned}
R_{C_n}[f] &= -\frac{h^7}{1935360} n f^{(6)}(\eta) \\
&= -\frac{b-a}{1935360} h^6 f^{(4)}(\eta), \quad a \leqslant \eta \leqslant b.
\end{aligned}
$$

复化求积公式

例 1：利用复化梯形求积公式计算积分

$$I[f] = \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$$

使得误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-3}$. 取相同步长 h, 用复化辛普森积分计算, 给出结果和截断误差限.

解　由题设有

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

由于

$$f(x) = \frac{\sin x}{x} = \int_0^1 \cos(tx)dt,$$

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

于是有

$$\boxed{\max_{0\leqslant x\leqslant 1} \left|f^{(k)}(x)\right| \leqslant \max_{0\leqslant x\leqslant 1} \int_0^1 t^k |\cos(tx + \frac{k\pi}{2})| dt \leqslant \int_0^1 t^k dt = \frac{1}{k+1}.}$$

因此

$$\left|R_{T_n}[f]\right| = \frac{1}{12} h^2 \left|f''(\eta)\right| \leqslant \frac{h^2}{12} \cdot \frac{1}{3} = \frac{h^2}{36},$$

$$\frac{h^2}{36} \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-3} \quad \Longrightarrow \quad h \leqslant \sqrt{18 \times 10^{-3}} = \frac{3\sqrt{5}}{50}.$$

复化求积公式

即需

$$h = \frac{1}{n} \leqslant \frac{3\sqrt{5}}{50} \quad \Longrightarrow \quad n \geqslant \frac{50}{3\sqrt{5}} \approx 7.4535599.$$

故取 $n = 8$,

$$h = \frac{1}{8}, \quad x_i = ih = \frac{i}{8}, \quad i = 0, 1, \cdots, 8.$$

$$\begin{aligned} I[f] \approx T_8 &= \frac{1}{16}\left[f(0) + 2\sum_{i=1}^{7} f\left(\frac{i}{8}\right) + f(1)\right] \\ &= \frac{1}{16}\left[1 + 2\sum_{i=1}^{7} \frac{8\sin\frac{i}{8}}{i} + \sin 1\right] \\ &\approx 0.94569086. \end{aligned}$$

复化求积公式

取同样步长 $h=\frac{1}{8}$, 用复化辛普森求积公式计算得

$$
\begin{aligned}
I[f] \approx S_8 &= \frac{1}{48}\left[f(0)+2\sum_{i=1}^{7} f\left(\frac{i}{8}\right)+4\sum_{i=1}^{7} f\left(\frac{i-\frac{1}{2}}{8}\right)+f(1)\right] \\
&= \frac{1}{48}\left[1+16\sum_{i=1}^{7}\frac{\sin\frac{i}{8}}{i}+64\sum_{i=1}^{8}\frac{\sin\left(\frac{2i-1}{16}\right)}{2i-1}+\sin 1\right] \\
&\approx 0.94608309.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left|R_{S_8}[f]\right| = \frac{h^4}{2880}\left|f^{(4)}(\eta)\right| &\leqslant \frac{1}{2880}\times\frac{1}{8^4}\times\frac{1}{5} \\
&\approx 1.6954210\times 10^{-8} \\
&\cancel{= \frac{1}{2}\times 10^{-7}.}
\end{aligned}
$$

变步长积分法 自适应

对于将 $[a,b]$ 分成 n 个等长子区间的复化梯形求积公式, 有

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

若将区间 $[a,b]$ 分成 $2n$ 等份, 则有

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

若 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续且变化不大, 则 $f''(\eta) \approx f''(\eta_1)$. 于是

$$\frac{I[f]-T_n}{I[f]-T_{2n}} = \frac{-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)}{-\frac{b-a}{12}\cdot\frac{h^2}{4}f''(\eta_1)} \approx 4.$$

由此得

$$I[f] \approx T_{2n} + \frac{1}{3}(T_{2n} - T_n) \quad \Longrightarrow \quad \left|I[f] - T_{2n}\right| \approx \frac{1}{3}\left|T_{2n} - T_n\right|.$$

若 $\frac{1}{3}\left|T_{2n} - T_n\right| \leqslant \varepsilon$, 取 $I[f] \approx T_{2n}$, 则大致满足精度要求.

变步长积分法

实际计算时常用

$$\left|T_{2n} - T_n\right| \leqslant \varepsilon$$

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.

变步长积分法

在计算 T_{2n} 时, 可以利用 T_n 的结果. 令

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \cdots, n$$

则

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

$$T_{2n} = \frac{h}{4}\Big[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=1}^{n} f\big(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\big) + f(b)\Big]$$

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

变步长积分法

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

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

于是

$$\begin{aligned}
T_{2^{k+1}}&=\frac{1}{2}T_{2^k}+\frac{h}{2}\sum_{i=1}^{2^k}f\Big(a+\frac{(2i-1)(b-a)}{2^{k+1}}\Big)\\
&=\frac{1}{2}T_{2^k}+\frac{b-a}{2^{k+1}}\sum_{i=1}^{2^k}f\Big(a+\frac{(2i-1)(b-a)}{2^{k+1}}\Big).
\end{aligned}$$

变步长积分法

(1) 取 $k=0$, 计算

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

(2) 根据递推公式

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

计算 $T_{2^{k+1}}$.

变步长积分法

(1) 取 $k=0$, 计算

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

(2) 根据递推公式

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

计算 $T_{2^{k+1}}$.

(3) 若 $|T_{2^{k+1}} - T_{2^k}| \leqslant \varepsilon$, 则取 $I[f] \approx T_{2^{k+1}}$;

否则, 令 $k=k+1$ 转 (2) 继续计算, 直至 $|T_{2^{k+1}} - T_{2^k}| \leqslant \varepsilon$.

变步长积分法

对于复化梯形求积公式, 有

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

$$I[f] - T_{2n} = -\frac{b-a}{12} \cdot \frac{h^2}{4} f''(\eta_1), \quad a \leqslant \eta_1 \leqslant b$$

若假定 $f''(\eta) \approx f''(\eta_1)$, 于是

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

$$\boldsymbol{I[f] \approx T_{2n} + \frac{1}{4-1}(T_{2n} - T_n)} \triangleq \overline{T}_{2n}$$

变步长积分法

对于复化辛普森求积公式有

$$I[f] - S_n = -\frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\eta), \quad a \leqslant \eta \leqslant b$$
$$I[f] - S_{2n} = -\frac{b-a}{2880} \cdot \frac{h^4}{2^4} f^{(4)}(\eta_1), \quad a \leqslant \eta_1 \leqslant b$$

若假定 $f^{(4)}(\eta) \approx f^{(4)}(\eta_1)$, 于是

$$\frac{I[f] - S_n}{I[f] - S_{2n}} \approx 16 = 4^2.$$

$$\boldsymbol{I[f] \approx S_{2n} + \frac{1}{4^2-1}(S_{2n} - S_n)} \triangleq \overline{S}_{2n}$$

变步长积分法

同理, 对于复化科茨求积公式有

$$
\begin{aligned}
I[f]-C_n &= -\frac{b-a}{1935360}h^6 f^{(6)}(\eta), \quad a \leqslant \eta \leqslant b \\
I[f]-C_{2n} &= -\frac{b-a}{1935360}\cdot\frac{h^6}{2^6}f^{(4)}(\eta_1), \quad a \leqslant \eta_1 \leqslant b
\end{aligned}
$$

若假定 $f^{(6)}(\eta) \approx f^{(6)}(\eta_1)$, 于是

$$
\frac{I[f]-C_n}{I[f]-C_{2n}} \approx 64 = 4^3.
$$

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

事实上

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

变步长积分法

即

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

同理可得

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

龙贝格积分公式

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

其截断误差为 $ch^8 f^{(8)}(\eta)$.

龙贝格积分法

(1) 对 $k=0$, 计算

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

(2) 对 $k=0,2,\cdots$, 计算

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

$$S_{2^k} = T_{2^{k+1}} + \frac{1}{4-1}\left(T_{2^{k+1}} - T_{2^k}\right),$$

$$C_{2^k} = S_{2^{k+1}} + \frac{1}{4^2-1}\left(S_{2^{k+1}} - S_{2^k}\right),$$

$$R_{2^k} = C_{2^{k+1}} + \frac{1}{4^3-1}\left(C_{2^{k+1}} - C_{2^k}\right).$$

(3) 若 $\left|R_{2^{k+1}} - R_{2^k}\right| \leqslant \varepsilon$, 则取 $I[f] \approx R_{2^{k+1}}$; 否则继续计算, 直至满足精度.

龙贝格积分法

计算步骤：

$$
\begin{array}{ccccccc}
T & & S & & C & & R \\
\\
T_1 & & & & & & \\
& \searrow & & & & & \\
T_2 & \longrightarrow & S_1 & & & & \\
& \searrow & & \searrow & & & \\
T_{2^2} & \longrightarrow & S_2 & \longrightarrow & C_1 & & \\
& \searrow & & \searrow & & \searrow & \\
T_{2^3} & \longrightarrow & S_{2^2} & \longrightarrow & C_2 & \longrightarrow & R_1 \\
& \searrow & & \searrow & & \searrow & \\
T_{2^4} & \longrightarrow & S_{2^4} & \longrightarrow & C_{2^2} & \longrightarrow & R_2 \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots
\end{array}
$$

例 2：用龙贝格积分公式计算

$$I[f] = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx,$$

使得误差不超过 $\frac{1}{2} \times 10^{-8}$.

龙贝格积分法

解 由题设知

$$f(x)=\frac{4}{1+x^2},\quad a=0,\quad b=1.$$

利用龙贝格积分公式计算, 得到结果如下

k	T_{2^k}	S_{2^k}	C_{2^k}	R_{2^k}
0	3.000000000			
1	3.100000000	3.133333333		
2	3.131176470	3.141568627	3.142117647	
3	3.138988494	3.141592502	3.141594094	3.141585783
4	3.140941612	3.141592651	3.141592661	3.141592638
5	3.141429893	3.141592653	3.141592653	3.141592653
6	3.141551963	3.141592653	3.141592653	3.141592653

3. 高斯型求积公式

插值型求积公式

考虑带权积分

$$I[f] = \int_a^b w(x)f(x)dx, \quad w(x) \geqslant 0 \text{ 且 } w(x) \not\equiv 0.$$

插值型求积公式

如果用拉格朗日插值多项式 $L_n(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似, 则可得插值型求积公式

$$\boxed{I[f] = \int_a^b w(x) f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = Q[f],}$$

其中求积系数和截断误差分别为

$$A_i = \int_a^b w(x) l_i(x) dx, \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

$$R[f] = \int_a^b w(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) dx.$$

插值型求积公式

已知插值型求积公式的代数精度 $m \geqslant n$. 若取

$$f(x) = (x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2,$$

则有

$$I[f] = \int_a^b w(x)(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_n)^2 dx > 0,$$

$$Q[f] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = 0, \quad R[f] \neq 0,$$

即代数精度 $n \leqslant m \leqslant 2n+1$.

插值型求积公式

高斯型求积公式　具有 $n+1$ 个节点且代数精度为 $2n+1$ 的求积公式.

参数　$A_i,\ x_i,\qquad i=0,1,\cdots,n+1$

方程

$$\int_a^b w(x)x^k dx = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^k, \qquad k=0,1,\cdots,2n+1$$

例 1：确定 $n=0$ 时关于权函数 $w(x)=1$ 的高斯型求积公式, 并分析截断误差.

解　由题设知 $m=1$, 得到关于求积系数和节点的方程组

$$\begin{cases} A_0=\displaystyle\int_a^b 1dx, \\ A_0x_0=\displaystyle\int_a^b xdx, \end{cases}$$

例 1：确定 $n=0$ 时关于权函数 $w(x)=1$ 的高斯型求积公式, 并分析截断误差.

解　由题设知 $m=1$, 得到关于求积系数和节点的方程组

$$\begin{cases} A_0 = \int_a^b 1dx, \\ A_0 x_0 = \int_a^b x dx, \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A_0 = b-a, \\ x_0 = \frac{1}{2}(a+b). \end{cases}$$

高斯型求积公式

例 1：确定 $n = 0$ 时关于权函数 $w(x) = 1$ 的高斯型求积公式, 并分析截断误差.

解　由题设知 $m = 1$, 得到关于求积系数和节点的方程组

k = 0，1

$$\begin{cases} A_0 = \int_a^b 1dx, \\ A_0 x_0 = \int_a^b xdx, \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A_0 = b - a, \\ x_0 = \frac{1}{2}(a + b). \end{cases}$$

于是

$$I[f] = \int_a^b f(x)dx \approx (b - a)f\Big(\frac{a+b}{2}\Big).$$

高斯型求积公式

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

根据广义佩亚诺定理，取 Taylor公式的尾项

$$e(x) = \frac{1}{2}f''(\xi)\big(x-\frac{a+b}{2}\big)^2$$

从而得到求积公式的截断误差

$$\begin{aligned} R[f] = R[e] &= \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)\big(x-\frac{a+b}{2}\big)^2 dx \\ &= \frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b \big(x-\frac{a+b}{2}\big)^2 dx \\ &= \frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta). \end{aligned}$$

高斯型求积公式

例 2：确定 $n=1$ 时关于权函数 $w(x)=1$ 的高斯型求积公式，并分析截断误差. 代数精度为 2n+1

解 由题设可知 $m=3$, 得到关于求积系数和节点的方程组

$$\begin{cases} A_0+A_1=\int_a^b 1dx, \\ A_0x_0+A_1x_1=\int_a^b xdx, \\ A_0x_0^2+A_1x_1^2=\int_a^b x^2dx, \\ A_0x_0^3+A_1x_1^3=\int_a^b x^3dx. \end{cases}$$

参数 $A_i,\ x_i,\quad i=0,1,\cdots,n+1$

方程

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

高斯型求积公式

例 2：确定 $n=1$ 时关于权函数 $w(x)=1$ 的高斯型求积公式, 并分析截断误差.

解 由题设可知 $m=3$, 得到关于求积系数和节点的方程组

$$\begin{cases} A_0+A_1=\int_a^b 1dx, \\ A_0x_0+A_1x_1=\int_a^b xdx, \\ A_0x_0^2+A_1x_1^2=\int_a^b x^2dx, \\ A_0x_0^3+A_1x_1^3=\int_a^b x^3dx. \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} x_0=-\frac{\sqrt{3}}{6}(b-a)+\frac{a+b}{2}, \\ x_1=\frac{\sqrt{3}}{6}(b-a)+\frac{a+b}{2}, \\ A_0=\frac{1}{2}(b-a), \\ A_1=\frac{1}{2}(b-a). \end{cases}$$

高斯型求积公式

因此

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

根据广义佩亚诺定理, 取

$$\boxed{e(x)=\frac{1}{24}f^{(4)}(\xi)(x-x_0)^2(x-x_1)^2,}$$

于是截断误差为

$$\begin{aligned}R[f]=R[e]&=\frac{1}{24}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-x_0)^2(x-x_1)^2dx\\&=\frac{1}{24}f^{(4)}(\eta)\int_a^b(x-x_0)^2(x-x_1)^2dx\\&=\frac{(b-a)^5}{4320}f^{(4)}(\eta).\end{aligned}$$

高斯型求积公式

定理

求积公式代数精度为 $m = 2n+1$ 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 $w(x)$ 正交的 $n+1$ 次正交多项式 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点，并且求积系数 A_i 满足方程

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

高斯型求积公式

证 *必要性*. 由于求积公式具有 $m = 2n+1$ 次代数精度, 于是求积公式对任意不超过 $2n+1$ 次的多项式精确成立, 即

$$\mathbf{0} = \int_a^b w(x)\varphi_{n+1}(x)q(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i\varphi_{n+1}(x_i)q(x_i),$$

其中 $q(x)$ 是不超过 n 次的多项式.

由 $q(x)$ 的任意性, 可知

$$\varphi_{n+1}(x_i) = 0, \qquad i = 0, 1, \cdots, n$$

即 x_i $(i = 0, 1, \cdots, n)$ 是 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点.

高斯型求积公式

充分性. 由已知条件可知求积公式的代数精度 $m \geqslant n$, 并且

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

对任意不超过 $2n+1$ 次的多项式 $p(x)$, 可设

$$p(x) = \varphi_{n+1}(x)\cdot q(x) + r(x),$$

其中 $q(x)$, $r(x)$ 均是不超过 n 次的多项式. 则

$$\begin{aligned} R[p] &= R[\varphi_{n+1}q + r] = R[\varphi_{n+1}q] \\ &= \int_a^b w(x)\varphi_{n+1}(x)q(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i\varphi_{n+1}x_i q(x_i) \\ &= 0 - 0 = 0, \end{aligned}$$

所以代数精度 $m \geqslant 2n+1$.

高斯型求积公式

充分性. 由已知条件可知求积公式的代数精度 $m \geqslant n$, 并且

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

对任意不超过 $2n+1$ 次的多项式 $p(x)$, 可设

$$p(x) = \varphi_{n+1}(x)\cdot q(x) + r(x),$$

其中 $q(x)$, $r(x)$ 均是不超过 n 次的多项式. 则

$$\begin{aligned} R[p] &= R[\varphi_{n+1}q + r] = R[\varphi_{n+1}q] \\ &= \int_a^b w(x)\varphi_{n+1}(x)q(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i\varphi_{n+1}x_i q(x_i) \\ &= 0 - 0 = 0, \end{aligned}$$

所以代数精度 $m \geqslant 2n+1$. 又因为 $m \leqslant 2n+1$, 故 $m = 2n+1$.

A_i 的计算

已知

$$A_i = \int_a^b w(x) l_i(x) dx, \quad l_i(x) = \frac{\pi_{n+1}(x)}{(x - x_i)\pi'_{n+1}(x_i)}.$$

注意到 x_i 为 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点，可设

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

于是

$$l_i(x) = \frac{\varphi_{n+1}(x)}{(x - x_i)\varphi'_{n+1}(x_i)},$$

$$\boxed{A_i = \int_a^b \frac{w(x)\varphi_{n+1}(x)}{(x - x_i)\varphi'_{n+1}(x_i)} dx = \frac{1}{\varphi'_{n+1}(x_i)} \int_a^b w(x) \frac{\varphi_{n+1}(x)}{x - x_i} dx.}$$

求积系数的计算

由正交多项式的三项递推关系式

$$\boxed{\varphi_{k+1}(x)=\frac{a_{k+1}}{a_k}\Big(x-\frac{\beta_k}{\gamma_k}\Big)\varphi_k(x)-\frac{a_{k-1}a_{k+1}}{a_k^2}\cdot\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}\varphi_{k-1}(x),}$$

可知

$$\varphi_{k+1}(x_i)=\frac{a_{k+1}}{a_k}\Big(x_i-\frac{\beta_k}{\gamma_k}\Big)\varphi_k(x_i)-\frac{a_{k-1}a_{k+1}}{a_k^2}\cdot\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}\varphi_{k-1}(x_i),$$

因此

$$\varphi_{k+1}(x)\varphi_k(x_i)=\left(\frac{a_{k+1}}{a_k}\Big(x-\frac{\beta_k}{\gamma_k}\Big)\varphi_k(x)-\frac{a_{k-1}a_{k+1}}{a_k^2}\cdot\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}\varphi_{k-1}(x)\right)\varphi_k(x_i),$$

$$\varphi_{k+1}(x_i)\varphi_k(x)=\left(\frac{a_{k+1}}{a_k}\Big(x_i-\frac{\beta_k}{\gamma_k}\Big)\varphi_k(x_i)-\frac{a_{k-1}a_{k+1}}{a_k^2}\cdot\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}\varphi_{k-1}(x_i)\right)\varphi_k(x).$$

求积系数的计算

记 $\phi_{k+1}^{k}(x)=\varphi_{k+1}(x)\varphi_k(x_i)-\varphi_{k+1}(x_i)\varphi_k(x)$, 则

$$\phi_{k+1}^{k}(x)=\frac{a_{k+1}}{a_k}(x-x_i)\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)+\frac{a_{k-1}a_{k+1}}{a_k^2}\cdot\frac{\gamma_k}{\gamma_{k-1}}\phi_k^{k-1}(x).$$

于是对 $k=1,2,\cdots,n$, 有

$$\frac{x-x_i}{\gamma_k}\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)=\frac{1}{\gamma_k}\cdot\frac{a_k}{a_{k+1}}\phi_{k+1}^{k}(x)-\frac{1}{\gamma_{k-1}}\cdot\frac{a_{k-1}}{a_k}\phi_k^{k-1}(x).$$

因此

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{x-x_i}{\gamma_k}\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)=\frac{1}{\gamma_n}\cdot\frac{a_n}{a_{n+1}}\phi_{n+1}^{n}(x)-\frac{1}{\gamma_0}\cdot\frac{a_0}{a_1}\phi_1^0(x).$$

求积系数的计算

注意到

$$\varphi_0(x) = a_0, \quad \varphi_1(x) = a_1\Big(x - \frac{\beta_0}{\gamma_0}\Big), \quad \varphi_{n+1}(x_i) = 0,$$

由此得到

$$\phi_{n+1}^{n}(x) = \varphi_{n+1}(x)\varphi_n(x_i), \quad \phi_1^0(x) = a_0 a_1 (x - x_i),$$

$$(x - x_i)\sum_{k=1}^{n}\frac{\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)}{\gamma_k} = \frac{1}{\gamma_n}\cdot\frac{a_n}{a_{n+1}}\varphi_{n+1}(x)\varphi_n(x_i) - \frac{a_0^2}{\gamma_0}(x - x_i),$$

$$\begin{aligned}\frac{\varphi_{n+1}(x)}{x - x_i} &= \frac{\gamma_n}{\varphi_n(x_i)}\cdot\frac{a_{n+1}}{a_n}\left(\frac{a_0^2}{\gamma_0} + \sum_{k=1}^{n}\frac{\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)}{\gamma_k}\right)\\ &= \frac{\gamma_n}{\varphi_n(x_i)}\cdot\frac{a_{n+1}}{a_n}\sum_{k=0}^{n}\frac{\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)}{\gamma_k}.\end{aligned}$$

求积系数的计算

$$
\begin{aligned}
A_i &= \frac{1}{\varphi_{n+1}'(x_i)} \int_a^b w(x) \frac{\varphi_{n+1}(x)}{x - x_i} dx \\
&= \frac{\gamma_n}{\varphi_{n+1}'(x_i)\varphi_n(x_i)} \cdot \frac{a_{n+1}}{a_n} \int_a^b w(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(x_i)}{\gamma_k} dx \\
&= \frac{\gamma_n}{\varphi_{n+1}'(x_i)\varphi_n(x_i)} \cdot \frac{a_{n+1}}{a_n} \sum_{k=0}^{n} \frac{\varphi_k(x_i)}{\gamma_k} \int_a^b w(x)\varphi_k(x) dx \\
&= \frac{\gamma_n}{\varphi_{n+1}'(x_i)\varphi_n(x_i)} \cdot \frac{a_{n+1}}{a_n} \sum_{k=0}^{n} \frac{\varphi_k(x_i)}{\gamma_k a_0} \int_a^b w(x)\varphi_k(x)\varphi_0(x) dx \\
&= \frac{\gamma_n}{\varphi_{n+1}'(x_i)\varphi_n(x_i)} \cdot \frac{a_{n+1}}{a_n} \frac{a_0}{\gamma_0 a_0} \gamma_0 \\
&= \frac{\gamma_n}{\varphi_{n+1}'(x_i)\varphi_n(x_i)} \cdot \frac{a_{n+1}}{a_n}.
\end{aligned}
$$

高斯型求积公式

定理

高斯型求积公式的求积系数为

$$A_i = \frac{\gamma_n}{\varphi'_{n+1}(x_i)\varphi_n(x_i)} \cdot \frac{a_{n+1}}{a_n}, \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

其中 $\varphi_k(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上关于权函数 $w(x)$ 正交的最高次项系数为 a_k 的 k 次正交多项式, 且x_i 是 $\varphi_{n+1}(x)$ 的零点.

特别地, 若 $a_k = 1$ $(k = 0, 1, \cdots)$, 则

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

高斯型求积公式

由于

$$A_i = \int_a^b w(x) l_i(x) dx,$$

以及求积公式对 $2n$ 次多项式精确成立，可得

$$\int_a^b w(x) l_i^2(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k l_i(x_k^2) = A_i > 0,$$

即高斯型求积公式的求积系数都是正数.

截断误差估计

由于 $m = 2n+1$, 若 $f(x)$ 的 $m+1$ 阶导数在 $[a,b]$ 上连续, 取

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

根据广义佩亚诺定理可得

$$\begin{aligned}
R[f] = R[e] &= \int_a^b w(x)\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}(x-x_0)^2\cdots(x-x_n)^2 dx \\
&= \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}\int_a^b w(x)\frac{\varphi_{n+1}^2(x)}{a_{n+1}^2}dx \\
&= \frac{\gamma_{n+1}}{a_{n+1}^2(2n+2)!}f^{(2n+2)}(\eta), \qquad a \leqslant \eta \leqslant b.
\end{aligned}$$

截断误差估计

定理

设 $f(x) \in C^{2n+2}[a,b]$, 则高斯型求积公式的截断误差为

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

其中

$$\gamma_{n+1} = \int_a^b w(x)\varphi_{n+1}^2(x)dx,$$

$\varphi_k(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上关于权函数 $w(x)$ 正交的最高次项为 a_k 的正交多项式.

Gauss-Legendre 求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx Q[f] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

其中 x_i 是 $n+1$ 次 Legendre 多项式 $p_{n+1}(x)$ 的零点. 由于

$$a_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}, \qquad \gamma_n = (p_n, p_n) = \frac{2}{2n+1},$$

$$\boxed{\begin{aligned} A_i &= \frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot \frac{\gamma_n}{p'_{n+1}(x_i) p_n(x_i)} \\ &= \frac{2}{n+1} \cdot \frac{1}{p'_{n+1}(x_i) p_n(x_i)}, \end{aligned} \qquad i = 0, 1, \cdots, n.}$$

Gauss-Legendre 求积公式

因此

$$
\begin{aligned}
R[f] &= \frac{\gamma_{n+1}}{a_{n+1}^2(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta) \\
&= \frac{1}{2n+3} \cdot \frac{2^{2n+3}[(n+1)!]^4}{[(2n+2)!]^3} f^{(2n+2)}(\eta), \qquad -1 \leqslant \eta \leqslant 1.
\end{aligned}
$$

Gauss-Legendre 求积公式

- $n = 0$ 时, $p_0(x) = 1,\ p_1(x) = x$, 于是有

$$x_0 = 0, \quad A_0 = 2$$

$$Q[f] = A_0 f(x_0) = 2f(0).$$

Gauss-Legendre 求积公式

- $n=1$ 时, $p_1(x)=x,\ p_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$, 于是有

$$x_0=-\frac{\sqrt{3}}{3},\quad x_1=\frac{\sqrt{3}}{3},\quad A_0=A_1=1$$

$$Q[f]=A_0f(x_0)+A_1f(x_1)=f\Big(-\frac{\sqrt{3}}{3}\Big)+f\Big(\frac{\sqrt{3}}{3}\Big).$$

Gauss-Legendre 求积公式

- $n=2$ 时, $p_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),\ p_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$, 于是有

$$x_0=-\frac{\sqrt{15}}{5},\ x_1=0,\ x_2=\frac{\sqrt{15}}{5},\ A_0=A_2=\frac{5}{9},\ A_1=\frac{8}{9}$$

$$\begin{aligned}Q[f]&=A_0f(x_0)+A_1f(x_1)+A_2f(x_2)\\&=\frac{1}{9}\Big(5f\big(-\frac{\sqrt{15}}{5}\big)+8f(0)+5f\big(\frac{\sqrt{15}}{5}\big)\Big).\end{aligned}$$

Gauss-Legendre 求积公式

例 3：用 $n = 3$ 的Gauss-Legendre 求积公式计算积分 $\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx$.

Gauss-Laguerre 求积公式

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{e}^{-x} f(x) dx \approx Q[f] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

其中 x_i 是 $n+1$ 次 Laguerre 多项式 $L_{n+1}(x)$ 的零点. 由于

$$a_n = (-1)^n, \qquad \gamma_n = (L_n, L_n) = (n!)^2,$$

$$A_i = \frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot \frac{\gamma_n}{p'_{n+1}(x_i) p_n(x_i)} = \frac{-(n!)^2}{L'_{n+1}(x_i) L_n(x_i)}, \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

因此

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

Gauss-Laguerre 求积公式

- $n = 0$ 时, $L_0(x) = 1,\ L_1(x) = 1 - x$, 于是有

$$x_0 = 1, \quad A_0 = 1$$

$$Q[f] = A_0 f(x_0) = f(1).$$

Gauss-Laguerre 求积公式

- $n=1$ 时, $L_1(x)=1-x,\ L_2(x)=x^2-4x+2$, 于是有

$$x_0=2-\sqrt{2},\quad x_1=2+\sqrt{2},\quad A_0=\frac{2+\sqrt{2}}{4},\quad A_1=\frac{2-\sqrt{2}}{4},$$

$$\begin{aligned}Q[f]&=A_0f(x_0)+A_1f(x_1)\\&=\frac{2+\sqrt{2}}{4}f(2-\sqrt{2})+\frac{2-\sqrt{2}}{4}f(2+\sqrt{2}).\end{aligned}$$

Gauss-Hermite 求积公式

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

其中 x_i 是 $n+1$ 次 Hermite 多项式 $H_{n+1}(x)$ 的零点.

Gauss-Hermite 求积公式

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

其中 x_i 是 $n+1$ 次 Hermite 多项式 $H_{n+1}(x)$ 的零点. 由于

$$a_n = 2^n, \qquad \gamma_n = (H_n, H_n) = 2^n (n!)\sqrt{\pi},$$

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot \frac{\gamma_n}{H'_{n+1}(x_i) H_n(x_i)} \\ &= \frac{2^{n+1}}{2^n} \cdot \frac{2^n (n!)\sqrt{\pi}}{H'_{n+1}(x_i) H_n(x_i)}, \qquad i = 0, 1, \cdots, n. \\ &= \frac{2^{n+1} (n!)\sqrt{\pi}}{H'_{n+1}(x_i) H_n(x_i)} \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} R[f] &= \frac{\gamma_{n+1}}{a_{n+1}^2(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta) \\ &= \frac{2^{n+1}(n+1)!\sqrt{\pi}}{(2n+2)!} \cdot \frac{1}{2^{2n+2}} f^{(2n+2)}(\eta), \qquad -\infty < \eta < +\infty. \end{aligned}$$

- $n = 0$ 时, $H_0(x) = 1,\ H_1(x) = 2x$, 于是有

$$x_0 = 0, \quad A_0 = \sqrt{\pi}$$

$$Q[f] = A_0 f(x_0) = \sqrt{\pi} f(0).$$

Gauss-Hermite 求积公式

- $n=1$ 时, $H_1(x)=2x,\ H_2(x)=4x^2-2$, 于是有

$$x_0=-\frac{\sqrt{2}}{2},\quad x_1=\frac{\sqrt{2}}{2},\quad A_0=A_1=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$Q[f]=A_0f(x_0)+A_1f(x_1)=\frac{\sqrt{\pi}}{2}f\Big(-\frac{\sqrt{2}}{3}\Big)+f\Big(\frac{\sqrt{2}}{3}\Big).$$

Gauss-Hermite 求积公式

- $n=2$ 时, $p_2(x)=4x^2-2,\ p_3(x)=8x^3-12x$, 于是有

$$x_0=-\frac{\sqrt{6}}{2},\ x_1=0,\ x_2=\frac{\sqrt{6}}{2},\ A_0=A_2=\frac{\sqrt{\pi}}{6},\ A_1=\frac{2\sqrt{\pi}}{3}$$

$$\begin{aligned} Q[f] &= A_0 f(x_0)+A_1 f(x_1)+A_2 f(x_2) \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{6}\left(f\big(-\frac{\sqrt{6}}{2}\big)+4f(0)+f\big(\frac{\sqrt{6}}{2}\big)\right). \end{aligned}$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx Q[f] = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i),$$

其中 x_i 是 $n+1$ 次 Chebyshev 多项式 $T_{n+1}(x)$ 的零点. 由于

$$a_n = 2^{n-1}, \qquad \gamma_n = (T_n, T_n) = \begin{cases} \pi, & n = 0, \\ \pi/2, & n \geqslant 1. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} x_i &= \cos\left[\frac{2i+1}{2(n+1)}\pi\right], \\ A_i &= \frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot \frac{\gamma_n}{T'_{n+1}(x_i) T_n(x_i)}, \end{aligned} \qquad i = 0, 1, \cdots, n.$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

$$
\begin{aligned}
T_{n+1}(x) &= \cos\big((n+1)\arccos x\big), \\
T'_{n+1}(x) &= -(n+1)\sin\big((n+1)\arccos x\big)\cdot\frac{-1}{\sqrt{1-x^2}} \\
&= \frac{(n+1)\sin\big((n+1)\arccos x\big)}{\sqrt{1-x^2}}
\end{aligned}
$$

令 $\theta_i = \frac{2i+1}{2(n+1)}\pi \ (i=0,1,\cdots,n)$，则

$$
\begin{aligned}
T'_{n+1}(x_i) &= \frac{(n+1)\sin\big((n+1)\theta_i\big)}{\sin\theta_i} = \frac{(n+1)\sin\left(\frac{2i+1}{2}\pi\right)}{\sin\theta_i} \\
&= \frac{(n+1)\sin\big(i\pi+\pi/2\big)}{\sin\theta_i} = \frac{(-1)^i(n+1)}{\sin\theta_i}.
\end{aligned}
$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

$$\begin{aligned} T_n(x_i) &= \cos(n \arccos x_i) = \cos(n\theta_i) \\ &= \cos((n+1)\theta_i - \theta_i) = \cos(i\pi + \pi/2 - \theta_i) \\ &= (-1)^i \cos(\pi/2 - \theta_i) = (-1)^i \sin\theta_i. \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot \frac{\gamma_n}{T'_{n+1}(x_i) T_n(x_i)} \\ &= 2 \frac{\gamma_n}{\frac{(-1)^i (n+1)}{\sin\theta_i} \cdot (-1)^i \sin\theta_i} = \frac{2\gamma_n}{n+1}. \end{aligned}$$

截断误差

$$R[f] = \frac{\gamma_{n+1} f^{(2n+2)}(\eta)}{a_{n+1}^2 (2n+2)!} = \frac{\pi}{2^{2n+1}(2n+2)!} f^{(2n+2)}(\eta), \qquad -1 \leqslant \eta \leqslant 1.$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

- $n = 0$ 时, $T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x$, 于是有

$$x_0 = 0, \quad A_0 = \pi$$

$$Q[f] = A_0 f(x_0) = \pi f(0).$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

- $n = 1$ 时, $T_1(x) = x,\ T_2(x) = 2x^2 - 1$, 于是有

$$x_0 = \frac{\sqrt{2}}{2},\quad x_1 = -\frac{\sqrt{2}}{2},\quad A_0 = A_1 = \frac{\pi}{2}$$

$$Q[f] = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) = \frac{\pi}{2} f\Big(-\frac{\sqrt{2}}{2}\Big) + f\Big(\frac{\sqrt{2}}{2}\Big).$$

Gauss-Chebyshev 求积公式

- $n=2$ 时, $T_2(x)=2x^2-1,\ T_3(x)=4x^3-3x$, 于是有

$$x_0=\frac{\sqrt{3}}{2},\ x_1=0,\ x_2=-\frac{\sqrt{3}}{2},\ A_0=A_1=A_2=\frac{\pi}{3},$$

$$\begin{aligned} Q[f] &= A_0f(x_0)+A_1f(x_1)+A_2f(x_2) \\ &= \frac{\pi}{3}\left(f\big(-\frac{\sqrt{3}}{2}\big)+f(0)+f\big(\frac{\sqrt{3}}{2}\big)\right). \end{aligned}$$

4. 数值微分

插值型数值微分

设 $L_n(x)$ 是 $f(x)$ 的插值多项式, 则

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

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

取 $L_n(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似, 有

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

因此

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

其中 ξ 与 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 有关.

两点数值微分公式

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

$$R_1(x) = \frac{1}{2} f''(\xi)(x - x_0)(x - x_1),$$

则

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

$$R_1'(x) = \frac{1}{2} f''(\xi)(x - x_0 + x - x_1) + \frac{1}{6} f'''(\bar{\xi})(x - x_0)(x - x_1),$$

两点数值微分公式

记 $h = x_1 - x_0$, 由 $f'(x) = L_1'(x) + R_1'(x)$ 可知

$$\begin{cases} f'(x_0) = L_1'(x_0) + R_1'(x_0) = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{h} - \dfrac{h}{2} f''(\xi), \\ f'(x_1) = L_1'(x_1) + R_1'(x_1) = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{h} + \dfrac{h}{2} f''(\xi). \end{cases}$$

一阶向前差商： $f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h} - \dfrac{h}{2} f''(\xi)$

一阶向后差商： $f'(x) = \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h} + \dfrac{h}{2} f''(\xi)$

三点数值微分公式

$$
\begin{aligned}
L_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_2-x_1)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) \\
&\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \\
&= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{h_0(h_0+h_1)} f(x_0) - \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{h_0 h_1} f(x_1) \\
&\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{h_1(h_0+h_1)} f(x_2)
\end{aligned}
$$

其中 $h_0 = x_1 - x_0, h_1 = x_2 - x_1$.

$$
R_2(x) = \frac{1}{6} f'''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2),
$$

一阶导数 $k=1$

$$
\begin{aligned}
L_2'(x) = &\frac{(2x-x_1-x_2)}{h_0(h_0+h_1)}f(x_0) - \frac{(2x-x_0-x_2)}{h_0h_1}f(x_1) \\
&+ \frac{(2x-x_0-x_1)}{h_1(h_0+h_1)}f(x_2),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
R_2'(x) = &\frac{1}{6}f'''(\xi)\big(3x^2-2(x_0+x_1+x_2)x+x_0x_1+x_1x_2+x_0x_2\big) \\
&+ \frac{1}{24}f^{(4)}(\bar{\xi})(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2).
\end{aligned}
$$

三点数值微分公式

根据 $f'(x) = L_1'(x) + R_1'(x)$ 有

$$\begin{cases} f'(x_0) = L_1'(x_0) + R_1'(x_0) = -\dfrac{(2h_0+h_1)}{h_0(h_0+h_1)}f(x_0) + \dfrac{h_0+h_1}{h_0h_1}f(x_1) \\ \qquad -\dfrac{h_0}{h_1(h_0+h_1)}f(x_2) + \dfrac{1}{6}h_0(h_0+h_1)f'''(\xi), \\ f'(x_1) = L_1'(x_1) + R_1'(x_1) = -\dfrac{h_1}{h_0(h_0+h_1)}f(x_0) + \dfrac{h_1-h_0}{h_0h_1}f(x_1) \\ \qquad +\dfrac{h_0}{h_1(h_0+h_1)}f(x_2) - \dfrac{1}{6}h_0h_1f'''(\xi), \\ f'(x_2) = L_1'(x_2) + R_1'(x_2) = \dfrac{h_1}{h_0(h_0+h_1)}f(x_0) - \dfrac{h_0+h_1}{h_0h_1}f(x_1) \\ \qquad +\dfrac{h_0+2h_1}{h_1(h_0+h_1)}f(x_2) + \dfrac{1}{6}h_1(h_0+h_1)f'''(\xi), \end{cases}$$

三点数值微分公式

$$
\begin{aligned}
f'(x_1) = & -\frac{h_1}{h_0(h_0+h_1)} f(x_0) + \frac{h_1 - h_0}{h_0 h_1} f(x_1) \\
& + \frac{h_0}{h_1(h_0+h_1)} f(x_2) - \frac{1}{6} h_0 h_1 f'''(\xi),
\end{aligned}
$$

当 $h_0 = h_1 = h$ 时,

$$
\begin{aligned}
f'(x_1) &= \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\xi) \\
&= \frac{f(x_1+h) - f(x_1-h)}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\xi).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
f'(x_1) = & -\frac{h_1}{h_0(h_0+h_1)} f(x_0) + \frac{h_1 - h_0}{h_0 h_1} f(x_1) \\
& + \frac{h_0}{h_1(h_0+h_1)} f(x_2) - \frac{1}{6} h_0 h_1 f'''(\xi),
\end{aligned}
$$

当 $h_0 = h_1 = h$ 时,

$$
\begin{aligned}
f'(x_1) &= \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\xi) \\
&= \frac{f(x_1 + h) - f(x_1 - h)}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\xi).
\end{aligned}
$$

一阶中心差商公式:

$$
f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\xi)
$$

三点数值微分公式

二阶导数 $k=2$

$$L_2'(x)=\frac{(2x-x_1-x_2)}{h_0(h_0+h_1)}f(x_0)-\frac{(2x-x_0-x_2)}{h_0h_1}f(x_1)$$
$$+\frac{(2x-x_0-x_1)}{h_1(h_0+h_1)}f(x_2),$$

三点数值微分公式

二阶导数 $k=2$

$$L_2''(x)=\frac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)}-\frac{2f(x_1)}{h_0h_1}+\frac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)},$$

三点数值微分公式

二阶导数 $k=2$

$$L_2''(x) = \frac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \frac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \frac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)},$$

$$\begin{aligned} R_2'(x) = &\frac{1}{6}f'''(\xi)\big(3x^2 - 2(x_0+x_1+x_2)x + x_0x_1 + x_1x_2 + x_0x_2\big) \\ &+ \frac{1}{24}f^{(4)}(\bar{\xi})(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2). \end{aligned}$$

三点数值微分公式

二阶导数 $k=2$

$$L_2''(x) = \frac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \frac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \frac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)},$$

$$\begin{aligned}R_2''(x) = {} & \frac{1}{3}f'''(\xi)\big(3x - x_0 - x_1 - x_2\big) \\ & + \frac{1}{12}f^{(4)}(\bar{\xi})\big(3x^2 - 2(x_0+x_1+x_2)x + x_0x_1 + x_1x_2 + x_0x_2\big) \\ & + \frac{1}{120}f^{(5)}(\bar{\bar{\xi}})(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2).\end{aligned}$$

三点数值微分公式

$$
\begin{aligned}
R_2''(x_0) &= -\frac{1}{3}(2h_0+h_1)f'''(\xi) + \frac{1}{12}h_0(h_0+h_1)f^{(4)}(\bar{\xi}),\\
R_2''(x_1) &= \frac{1}{3}(h_0-h_1)f'''(\xi) - \frac{1}{12}h_0h_1f^{(4)}(\bar{\xi}),\\
R_2''(x_2) &= \frac{1}{3}(h_0+2h_1)f'''(\xi) + \frac{1}{12}h_1(h_0+h_1)f^{(4)}(\bar{\xi})
\end{aligned}
$$

三点数值微分公式

$$
\begin{cases}
f_2''(x_0) = L_2''(x_0) + R_2''(x_0) = \dfrac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \dfrac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \dfrac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)} \\
\qquad - \dfrac{1}{3}(2h_0+h_1)f'''(\xi) + \dfrac{1}{12}h_0(h_0+h_1)f^{(4)}(\bar{\xi}), \\
f_2''(x_1) = L_2''(x_1) + R_2''(x_1) = \dfrac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \dfrac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \dfrac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)} \\
\qquad + \dfrac{1}{3}(h_0-h_1)f'''(\xi) - \dfrac{1}{12}h_0h_1f^{(4)}(\bar{\xi}), \\
f_2''(x_2) = L_2''(x_2) + R_2''(x_2) = \dfrac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \dfrac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \dfrac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)} \\
\qquad + \dfrac{1}{3}(h_0+2h_1)f'''(\xi) + \dfrac{1}{12}h_1(h_0+h_1)f^{(4)}(\bar{\xi})
\end{cases}
$$

三点数值微分公式

$$f_2''(x_1) = L_2''(x_1) + R_2''(x_1) = \frac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \frac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \frac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)}$$
$$+ \frac{1}{3}(h_0 - h_1)f'''(\xi) - \frac{1}{12}h_0h_1f^{(4)}(\bar{\xi}),$$

当 $h_0 = h_1 = h$ 时,

$$\begin{aligned} f''(x_1) &= \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2 f^{(4)}(\bar{\xi}) \\ &= \frac{f(x_1+h) - 2f(x_1) + f(x_1-h)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2 f^{(4)}(\bar{\xi}). \end{aligned}$$

三点数值微分公式

$$f_2''(x_1) = L_2''(x_1) + R_2''(x_1) = \frac{2f(x_0)}{h_0(h_0+h_1)} - \frac{2f(x_1)}{h_0h_1} + \frac{2f(x_2)}{h_1(h_0+h_1)}$$
$$+ \frac{1}{3}(h_0-h_1)f'''(\xi) - \frac{1}{12}h_0h_1f^{(4)}(\bar{\xi}),$$

当 $h_0 = h_1 = h$ 时,

$$\begin{aligned} f''(x_1) &= \frac{f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2f^{(4)}(\bar{\xi}) \\ &= \frac{f(x_1+h)-2f(x_1)+f(x_1-h)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2f^{(4)}(\bar{\xi}). \end{aligned}$$

二阶中心差商公式：

$$\boldsymbol{f''(x) = \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2f^{(4)}(\bar{\xi})}$$

待定系数法

例 1：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，并给出误差表达式.

解　记 $x_1 = x_0 + h$，则

$$R[f] = f''(x_0) - c_0 f(x_0) - c_1 f'(x_0) - c_2 f(x_0 + h)$$

分别取 $f(x) = 1, x, x^2$，令 $R[f] = 0$，得

$$\begin{aligned} R[1] &= -c_0 - c_2 = 0, \\ R[x] &= -c_0 x_0 - c_1 - c_2(x_0 + h) = 0, \\ R[x^2] &= 2 - c_0 x_0^2 - 2c_1 x_0 - c_2(x_0 + h)^2 = 0, \end{aligned}$$

待定系数法

解得

$$c_0 = -\frac{2}{h^2}, \quad c_1 = -\frac{2}{h}, \quad c_2 = \frac{2}{h^2}.$$

于是

$$f''(x_0) \approx -\frac{2}{h^2} f(x_0) - \frac{2}{h} f'(x_0) + \frac{2}{h^2} f(x_1).$$

$$R[x^3] = 6x_0 + \frac{2}{h^2} x_0^3 + \frac{6}{h} x_0^2 - \frac{2}{h^2}(x_0 + h)^3 = -2h \neq 0,$$

故 $m = 2$.

根据广义佩亚诺定理, 取

$$e(x) = \frac{1}{6} f'''(\xi)(x - x_0)^2 (x - x_1)$$

则

$$\begin{aligned} R[f] = R[e] &= e''(x_0) + \frac{2}{h^2} e(x_0) + \frac{2}{h} e'(x_0) - \frac{2}{h^2} e(x_1) \\ &= e''(x_0) \\ &= \frac{1}{6} f'''(\xi)(-2h) \\ &= -\frac{1}{3} h f'''(\xi). \end{aligned}$$

以一阶导数为例

$$
\begin{aligned}
f(x+h) = f(x) &+ hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) \\
&+ \frac{h^5}{5!}f^{(5)}(x) + \frac{h^6}{6!}f^{(6)}(x) + \frac{h^7}{7!}f^{(7)}(x) + \cdots \,, \\
f(x-h) = f(x) &- hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) \\
&- \frac{h^5}{5!}f^{(5)}(x) + \frac{h^6}{6!}f^{(6)}(x) - \frac{h^7}{7!}f^{(7)}(x) + \cdots
\end{aligned}
$$

以一阶导数为例

$$
\begin{aligned}
f(x+h) = {} & f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) \\
& + \frac{h^5}{5!}f^{(5)}(x) + \frac{h^6}{6!}f^{(6)}(x) + \frac{h^7}{7!}f^{(7)}(x) + \cdots, \\
f(x-h) = {} & f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) \\
& - \frac{h^5}{5!}f^{(5)}(x) + \frac{h^6}{6!}f^{(6)}(x) - \frac{h^7}{7!}f^{(7)}(x) + \cdots
\end{aligned}
$$

$$
f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{3!}f'''(x) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x) - \frac{h^6}{7!}f^{(7)}(x) - \cdots
$$

外推求导法

若

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \triangleq T_h,$$

则有

$$R[f] = -\frac{h^2}{3!}f'''(x) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x) - \frac{h^6}{7!}f^{(7)}(x) - \cdots = O(h^2).$$

如果将 h 减小一半,

$$T_{h/2} \triangleq \frac{f\left(x+\frac{h}{2}\right)-f\left(x-\frac{h}{2}\right)}{2\cdot h/2},$$

则有

$$f'(x) = T_{h/2} - \frac{h^2}{4\cdot 3!}f'''(x) - \frac{h^4}{4^2\cdot 5!}f^{(5)}(x) - \frac{h^6}{4^3\cdot 7!}f^{(7)}(x) - \cdots$$

$$4f'(x) = 4T_{h/2} - \frac{h^2}{3!}f'''(x) - \frac{h^4}{4\cdot 5!}f^{(5)}(x) - \frac{h^6}{4^2\cdot 7!}f^{(7)}(x) - \cdots$$

外推求导法

$$f'(x) = T_h - \frac{h^2}{3!}f'''(x) - \frac{h^4}{5!}f^{(5)}(x) - \frac{h^6}{7!}f^{(7)}(x) - \cdots$$

$$4f'(x) = 4T_{h/2} - \frac{h^2}{3!}f'''(x) - \frac{h^4}{4\cdot 5!}f^{(5)}(x) - \frac{h^6}{4^2\cdot 7!}f^{(7)}(x) - \cdots$$

$$(4-1)f'(x) = 4T_{h/2} - T_h + \frac{3h^4}{4\cdot 5!}f^{(5)}(x) + \frac{15h^6}{16\cdot 7!}f^{(7)}(x) + \cdots$$

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{4T_{h/2} - T_h}{4-1} + \frac{h^4}{4\cdot 5!}f^{(5)}(x) + \frac{5h^6}{16\cdot 7!}f^{(7)}(x) + \cdots \\ &= T_{h/2} + \frac{T_{h/2} - T_h}{4-1} + O(h^4) \end{aligned}$$

再将 h 减小一半,

$$T_{h/4} \triangleq \frac{f\left(x+\frac{h}{4}\right)-f\left(x-\frac{h}{4}\right)}{2\cdot h/4},$$

则有

$$f'(x)=T_{h/4}+\frac{T_{h/4}-T_{h/2}}{4-1}+\frac{h^4}{4^2\cdot 4\cdot 5!}f^{(5)}(x)+\frac{5h^6}{4^3\cdot 16\cdot 7!}f^{(7)}(x)+\cdots$$

$$4^2f'(x)=4^2\left(T_{h/4}+\frac{T_{h/4}-T_{h/2}}{4-1}\right)+\frac{h^4}{4\cdot 5!}f^{(5)}(x)+\frac{5h^6}{4\cdot 16\cdot 7!}f^{(7)}(x)+\cdots$$

外推求导法

$$f'(x) = T_{h/2} + \frac{T_{h/2} - T_h}{4-1} + \frac{h^4}{4 \cdot 5!} f^{(5)}(x) + \frac{5h^6}{16 \cdot 7!} f^{(7)}(x) + \cdots$$

$$4^2 f'(x) = 4^2 \left(T_{h/4} + \frac{T_{h/4} - T_{h/2}}{4-1} \right) + \frac{h^4}{4 \cdot 5!} f^{(5)}(x) + \frac{5h^6}{4 \cdot 16 \cdot 7!} f^{(7)}(x) + \cdots$$

$$(4^2-1) f'(x) = 4^2 \left(T_{h/4} + \frac{T_{h/4} - T_{h/2}}{4-1} \right) - \left(T_{h/2} + \frac{T_{h/2} - T_h}{4-1} \right)$$
$$- \frac{5h^6}{16 \cdot 7!} (1 - \frac{1}{4}) f^{(7)}(x) - \cdots$$

外推求导法

$$
\begin{aligned}
f'(x) = {} & \frac{4^2}{4^2-1}\left(T_{h/4} + \frac{T_{h/4}-T_{h/2}}{4-1}\right) - \frac{1}{4^2-1}\left(T_{h/2} + \frac{T_{h/2}-T_h}{4-1}\right) \\
& - \frac{h^6}{64\cdot 7!} f^{(7)}(x) - \cdots \\
= {} & \frac{1}{4^2-1}\left[4^2\left(T_{h/4} + \frac{T_{h/4}-T_{h/2}}{4-1}\right) - \left(T_{h/2} + \frac{T_{h/2}-T_h}{4-1}\right)\right] \\
& + O(h^6)
\end{aligned}
$$

外推求导法

记

$$G_j(h) = T_{h/2^j} + \frac{T_{h/2^j} - T_{h/2^{j-1}}}{4-1}$$

则有

$$G_1(h) = T_{h/2} + \frac{T_{h/2} - T_h}{4-1},$$

$$G_{j+1}(h) = \frac{4^j G_j(h/2) - G_j(h)}{4^j - 1}, \qquad j = 1, 2, \cdots$$

于是

$$f'(x) = G_{j+1}(h) + O(h^{2(j+1)})$$

外推求导法

计算步骤：

$$
\begin{array}{cccccc}
T & G_1 & G_2 & G_3 & \cdots & G_{j+1} \\
 & & & & & \\
T_h & & & & & \\
T_{h/2} & G_1(h) & & & & \\
T_{h/4} & G_1(h/2) & G_2(h) & & & \\
T_{h/8} & G_1(h/4) & G_2(h/2) & G_3(h) & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\
T_{h/2^{j+1}} & G_1(h/2^j) & G_2(h/2^{j-1}) & G_3(h/2^{j-2}) & \cdots & G_{j+1}(h) \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots
\end{array}
$$

三次样条插值函数:

$$S(x)=\frac{(x_i-x)^3}{6h_i}M_{i-1}+\left(y_{i-1}-\frac{h_i^2}{6}M_{i-1}\right)\frac{x_i-x}{h_i}$$
$$+\frac{(x-x_{i-1})^3}{6h_i}M_i+\left(y_i-\frac{h_i^2}{6}M_i\right)\frac{x-x_{i-1}}{h_i},\quad x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i$$

三次样条插值函数求导

三次样条插值函数:

$$S(x) = \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} M_{i-1} + \left(y_{i-1} - \frac{h_i^2}{6} M_{i-1}\right) \frac{x_i - x}{h_i} + \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} M_i + \left(y_i - \frac{h_i^2}{6} M_i\right) \frac{x - x_{i-1}}{h_i}, \quad x_{i-1} \leqslant x \leqslant x_i$$

三次样条插值函数的误差估计:

$$\max_{a \leqslant x \leqslant b} \left| f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x) \right| \leqslant c_k M_4 h^{4-k}, \quad k = 0, 1, 2, 3$$

即当 $h \to 0$ 时, $S(x), S'(x), S''(x)$ 一致收敛于 $f(x), f'(x), f''(x)$.

三次样条插值函数求导

于是

$$
\begin{aligned}
f'(x) \approx S'(x) &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h_i} - \frac{h_i}{6}(M_i - M_{i-1}) \\
&\quad - \frac{M_{i-1}}{2h_i}(x_i - x)^2 + \frac{M_i}{2h_i}(x - x_{i-1})^2, \\
f''(x) \approx S''(x) &= \frac{M_{i-1}}{h_i}(x_i - x) + \frac{M_i}{h_i}(x - x_{i-1}), \\
f'''(x) \approx S'''(x) &= \frac{1}{h_i}(M_i - M_{i-1}).
\end{aligned}
$$

本章总结

- 数值积分
  - 基本概念
    - 一般形式 $Q[f]=\sum_{i=0}^{n}A_i f(x_i)$
    - 截断误差估计：广义佩亚诺定理
  - 牛顿-科茨求积公式 $(m\geqslant n)$ $\longrightarrow$ 复化求积公式 $\longrightarrow$ 变步长求积公式 龙贝格求积公式
  - 高斯型求积公式 $(m=2n+1)$
    - Gauss-Legendre　Gauss-Laguerre
    - Gauss-Hermite　Gauss-Chebyshev
- 数值微分
  - 插值型
    - 一阶向前、向后、中心差商
    - 二阶中心差商
  - 待定系数法、外推法
  - 三次样条插值函数法

6	理论课	Newton-Cotes 公式、复化求积公式	2
	理论课	自动变步长求积公式、Romberg 方法	2
7	理论课	待定系数法及误差分析	2
	理论课	Gauss 型求积公式与正交多项式：正交多项式的构造	2
8	理论课	Gauss 型求积公式与正交多项式：Gauss 型公式的概念、定理、构造方法	2
	理论课	数值微分：两点格式、三点格式的构造	2
9	理论课	数值微分：待定系数法	2

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，了解另外三种类型的数值微分法：待定系数法、外推求导法和利用三次样条插值函数的求导法