第 5 章

插值函数的应用

5.1 基于插值公式的数值积分

5.1.1　数值求积公式及其代数精度

5.1.2　复化求积公式

5.1.3　数值微分公式

5.2 Gauss型求积公式

5.2.1 基于Hermite插值的Gauss型求积公式

5.2.2 常见的Gauss型求积公式和数值稳定性

5.3 外推加速原理和Romber算法

5.3.1 逐次分半算法

5.2.2 外推加速公式和Romber算法

5.1.1 数值求积公式及其代数精度

由 **Newton-Leibniz**公式，连续函数 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的定积分

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

其中 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的原函数。但是大多数实际问题，**N-L**公式已经无能为力。常常遇到的困难是：

- $F(x)$ 不能用初等函数表示，即 $f(x)$ 找不到的原函数；

$$f(x) = \frac{1}{\ln x},\quad f(x) = \frac{\sin x}{x},\quad f(x) = e^{-x^2},\quad f(x) = \frac{1}{1-k^2\sin^2 x},$$

- $f(x)$没有解析表达式，用表格方式给出时；
- 大多数的无穷积分，除特殊的无穷积分外。
- 虽然找到 $f(x)$的原函数，但是它比被积函数复杂的多

$$\int \frac{x^2}{(1-x^4)\sqrt{1+x^4}}\,dx = \frac{1}{4\sqrt{2}}\ln\frac{x\sqrt{2}+\sqrt{1+x^4}}{1-x^2} + \frac{1}{2\sqrt{2}}\arcsin\frac{x\sqrt{2}}{1+x^2} + c$$

上述的积分就只能利用数值积分公式进行近似计算。

设 $f(x)$ 是定义在$[a, b]$上的可积函数，考虑带权积分

$$I(f)=\int_a^b \rho(x)\, f(x)\, dx \tag{5-1}$$

其中权函数 $\rho(x)$ 在$[a, b]$上非负可积，且至多有有限个零点。

本节只讨论$\rho(x)\equiv 1$的情形。 所谓**数值求积**就是用

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{5-2}$$

近似计算 $I(f)$ 的值。

求积系数

公式（5-2）称为**数值求积公式**，

数值求积公式

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k\, f(x_k)$$

其中 A_k $(k=0,1,\cdots,n)$ 是与 $f(x)$无关的常数，称为**求积系数**，

$[a,b]$ 上的点 x_k $(k=0,1,\cdots,n)$ 称为**求积节点**。

求积节点

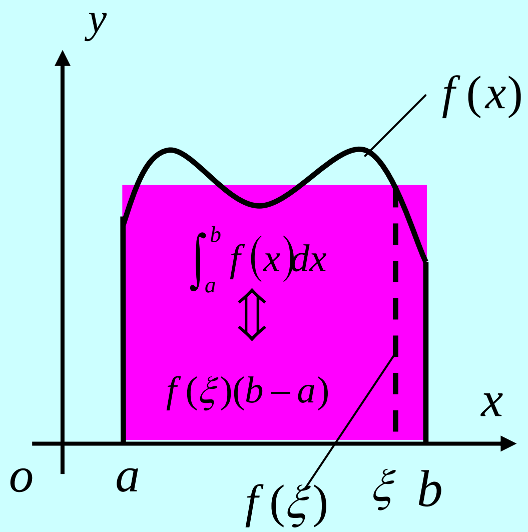
数值积分公式产生的背景

大家熟知第一积分中值定理：

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

其几何意义为：

曲边梯形的面积 $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ = 矩形 **$f(\xi)(b\text{-}a)$** 的面积



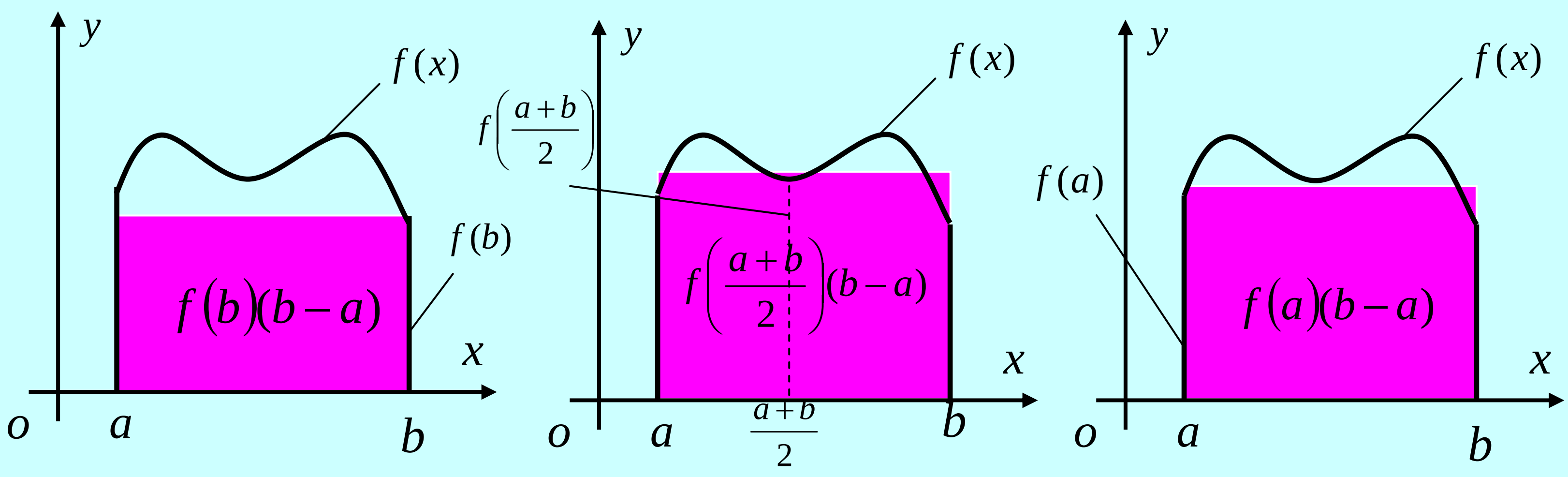
我们可以采用不同的的近似值的方法得到下述数值求积公式：

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx f(a)(b-a),$$ 称为**左矩形**数值求积公式；

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx f(b)(b-a),$$ 称为**右矩形**数值求积公式；

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a),$$ 称为**中矩形**数值求积公式；

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$$ ，称为**梯形**数值求积公式。



本节采用的逼近函数是 $f(x)$在等距节点上的插值多项式，得到的数值求积公式称为**插值型求积公式**。

将$[a,b]$进行n等分， 令 $h=\dfrac{b-a}{n}$ （称为步长），将分点

$$x_k = a + k\,h \qquad (k = 0, 1, \cdots, n)。$$

取为插值节点（也是求积节点），则 $f(x)$可表示成它们确定的 **Lagrange**插值多项式及其余项之和，即

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)\cdot l_k(x) + r_n(x) \qquad （5\text{-}3）$$

进一步

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \left[\sum_{k=0}^{n} f(x_k)\cdot l_k(x)\right] dx + \int_a^b r_n(x)\,dx$$

$$= \sum_{k=0}^{n}\left[\int_a^b l_k(x)\,dx\right] f(x_k) + \int_a^b r_n(x)\,dx$$

$$= \sum_{k=0}^{n} A_k\cdot f(x_k) + \int_a^b r_n(x)\,dx \qquad （5\text{-}4）$$

这样得到的插值型求积公式

$$I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} A_k\cdot f(x_k) \qquad (5\text{-}5)$$

称为$n+1$点的**Newton-Cotes公式**，其中求积系数

$$\boxed{A_k=\int_a^b l_k(x)\,dx} \qquad k=0,1,\cdots,n \qquad \textbf{（5-6）}$$

求积余项为

$$E_n(f)=\int_a^b r_n(x)\,dx=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)\,!}\,\omega_{n+1}(x)dx \qquad (5\text{-}7)$$

$$=\int_a^b f[x,x_0,\cdots,x_n]\,\omega_{n+1}(x)\,dx$$

其中

$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)\cdots(x-x_n)$。**En(*f*)**标志着求积公式的误差大小。

在**Newton-Cotes**公式中，最常用的是 n**=1, 2, 4**时的三个公式，当 n=1时，求积公式为：

$$I_1(f) = A_0 f(a) + A_1 f(b) \qquad n = 1, 2, 4$$

此时，应有

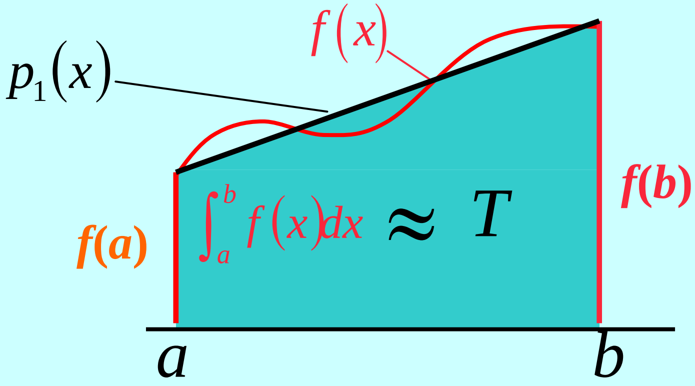
$$A_0 = \int_a^b l_0(x)\, dx = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\, dx = \frac{b-a}{2}$$

$$A_1 = \int_a^b l_1(x)\, dx = \int_a^b \frac{x-a}{b-a}\, dx = \frac{b-a}{2}$$

这就是**梯形求积公式**：

梯形求积公式

$$I_1(f) = T = \frac{b-a}{2}\left[f(a) + f(b) \right] \qquad \textbf{(5-8)}$$



当 n=2时，求积公式为：

$$I_2(f) = A_0\ f(a) + A_1\ f\left(\frac{a+b}{2}\right) + A_2\ f(b)$$

此时

$$A_0 = \int_a^b l_0(x)\,dx = \int_a^b \frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)}dx = \frac{b-a}{6}$$

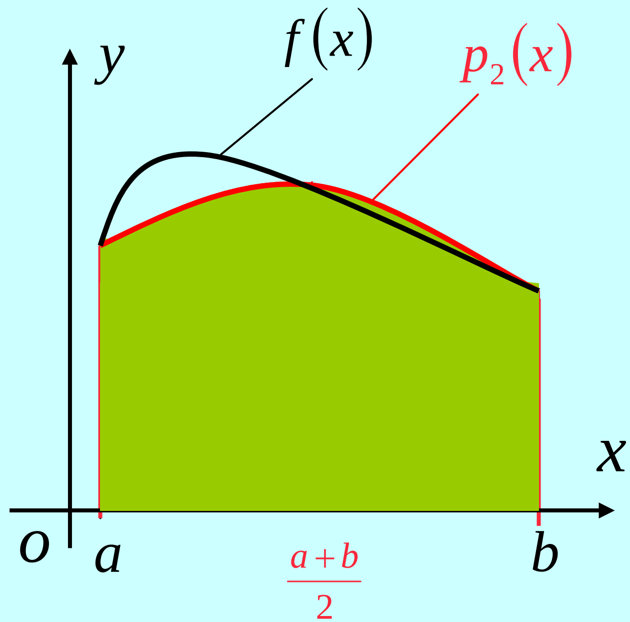
$$A_1 = \int_a^b l_1(x)\ dx = \int_a^b \frac{(x-a)\ (x-b)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}\ dx = \frac{2(b-a)}{3}$$

$$A_2 = \int_a^b l_2(x)\ dx = \int_a^b \frac{(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)}{(b-a)\left(b-\frac{a+b}{2}\right)}dx = \frac{b-a}{6}$$

这称为**Simpson求积公式**：

$$I_2(f)=S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4\times f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad \textbf{(5-9)}$$

Simpson求积公式



进一步可得， n=4时的 **Cotes公式**

Cotes求积公式

$$I_4(f)=C=\frac{b-a}{90}\left[7f(a)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(b)\right] \qquad \textbf{(5-10)}$$

练习题 用梯形求积公式和**Simpson**求积公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$$

解： 由梯形求积公式：

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

由**Simpson**求积公式：

$$S=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4\times f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]=\frac{1}{6}\left[1+\frac{8}{3}+\frac{1}{2}\right]=\frac{25}{36}$$

练习题 用梯形求积公式和**Simpson**求积公式计算积分

$$I=\int_0^1 e^{-x^2}\,dx$$

解： 由梯形求积公式：

$$T=\frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]=\frac{1}{2}\left(1+e^{-1}\right)$$

由**Simpson**求积公式：

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

如果某个数值求积公式对比较多的函数能够准确成立，即 $I(f)=I_n(f)$，那么这个公式的使用价值就较大，可以说这个公式的精度较高。为衡量数值求积公式的精度，引进代数精度的概念。

定义5.1 如果某个数值求积公式，对于任何次数不超过m次的代数多项式都是精确成立的

$$I\left(p_m(x)\right)=\int_a^b p_m(x)\,dx \equiv \sum_{k=0}^{n} A_k\cdot p_m\left(x_k\right)=I_n\left(p_m(x)\right)$$

但对于$m+1$次代数多项式不一定能准确成立，即

$$I\left(p_{m+1}(x)\right)=\int_a^b p_{m+1}(x)\,dx \neq \sum_{k=0}^{n} A_k\cdot p_{m+1}\left(x_k\right)=I_n\left(p_{m+1}(x)\right)$$

则称该求积公式具有m次代数精度。

显然，一个数值求积公式具有m次代数精度的充要条件是它对$f(x)=1, x, \cdots, x^m$ 都能准确成立，但对x^{m+1}不能准确成立。

这是确定代数精度的最常用方法。

下面求梯形数值求积公式和**Simpson**数值求积公式的代数精度。

对于 $f(x)=1, x, x^2$，我们可得

$$I(1)=\int_a^b 1\,dx = b-a = \frac{b-a}{2}(1+1)=I_1(1)=T$$

$$I(x)=\int_a^b x\,dx = \frac{b^2-a^2}{2} = \frac{b-a}{2}(a+b)=I_1(x)=T$$

$$I(x^2)=\int_a^b x^2\,dx = \frac{b^3-a^3}{3} \neq \frac{b-a}{2}(a^2+b^2)=I_1(x^2)=T$$

故梯形数值求积公式具有**1次代数精度**。

对于 $f(x)=1, x, x^2, x^3$，我们可得

$$I(1)=\int_a^b 1\,dx = b-a = \frac{b-a}{6}(1+4+1) = I_2(1)=S$$

$$I(x)=\int_a^b x\,dx = \frac{b^2-a^2}{2} = \frac{b-a}{6}\left(a+4\left(\frac{a+b}{2}\right)+b\right) = I_2(x)=S$$

$$I(x^2)=\int_a^b x^2\,dx = \frac{b^3-a^3}{3} = \frac{b-a}{6}\left(a^2+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^2+b^2\right) = I_2(x^2)=S$$

$$I(x^3)=\int_a^b x^3\,dx = \frac{b^4-a^4}{4} = \frac{b-a}{6}\left(a^3+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^3+b^3\right) = I_2(x^3)=S$$

而 $$I(x^4)=\int_a^b x^4\,dx = \frac{b^5-a^5}{5} \neq \frac{b-a}{6}\left(a^4+4\left(\frac{a+b}{2}\right)^4+b^4\right) = I_2(x^4)=S$$

故**Simposon**数值求积公式具有**3次代数精度**。

当然也可以通过求积余项估计，得到代数精度。以下先推导几个求积余项，进而指出n+1点**Newton-Cotes**公式的代数精度。

利用插值余项公式**(5-7)**，可知梯形公式的求积余项

$$E_1(f)=\frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi)(x-a)(x-b)\mathrm{d}x\,,\ \xi=\xi(x)\in[a,b]$$

$$=\frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b(x-a)(x-b)\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\quad \eta\in(a,b) \qquad \textbf{(5-11)}$$

Simpson公式的求积余项

$$E_2(f)=\int_a^b f[a,x_1,b,x](x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)\mathrm{d}x$$

注：$\left(x-\dfrac{a+b}{2}\right)dx=\dfrac{1}{2}d\left(x^2-(a+b)x+ab\right)=\dfrac{1}{2}d\left[(x-a)(x-b)\right]$

$$E_2(f)=\int_a^b f[a,x_1,b,x](x-a)(x-b)\frac{1}{2}\mathrm{d}(x-a)(x-b)$$

$$=\int_a^b f[a,x_1,b,x]\,\mathrm{d}\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}$$ 由分部积分得

$$=\left\{\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}f[a,x_1,b,x]\right\}\Bigg|_a^b-\int_a^b\frac{(x-a)^2(x-b)^2}{4}\mathrm{d}f[a,x_1,b,x]$$

注意，插值节点相同的均差：

$$f[x,x]=\lim_{x_0\to x}f[x,x_0]=\lim_{x_0\to x}\frac{f(x_0)-f(x)}{x_0-x}=f'(x)=\frac{df(x)}{dx}$$

$$f[x,x,x_0]=\frac{f[x,x_0]-f[x,x]}{x_0-x}=\frac{\left(\dfrac{f(x_0)-f(x)}{x_0-x}\right)}{x_0-x}-\frac{f'(x)}{x_0-x}$$

又

$$\frac{d\ f[x,x_0]}{dx}=\left(\frac{f(x_0)-f(x)}{x_0-x}\right)'=\frac{-f'(x)(x_0-x)+(f(x_0)-f(x))}{(x_0-x)^2}$$

$$=\frac{\left(\dfrac{f(x_0)-f(x)}{x_0-x}\right)}{x_0-x}-\frac{f'(x)}{x_0-x}$$

故有 $\dfrac{d\,f[x,x_0]}{dx}=f[x,x,x_0]\Rightarrow$ $=$

一般的有，$\boxed{d\,f[x,x_0,\cdots,x_n]=f[x,x,x_0,\cdots,x_n]dx}$

$$E_2(f) = -\frac{1}{4}\int_a^b (x-a)^2(x-b)^2 f[a, x_1, b, x, x]\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{1}{4} f[a, x_1, b, \xi, \xi]\int_a^b (x-a)^2(x-b)^2\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{1}{4}\cdot\frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)^2(x-b)^2\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{1}{90}\cdot f^{(4)}(\eta)\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \quad \eta\in(a,b) \tag{5-12}$$

一般的n+1点Newton-Cotes公式的求积余项，有如下定理：

定理5.1 n是偶数，且$f(x) \in \mathbf{C}^{n+2}[a,b]$，则

$$E_n(f) = C_n h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)\,,\quad \eta \in (a,b)$$

其中
$$C_n = \frac{1}{(n+2)!}\int_0^n t^2(t-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t$$

n是奇数，且$f(x) \in \mathbf{C}^{n+1}[a,b]$，则

$$E_n(f) = C_n h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)\,,\quad \eta \in (a,b)$$

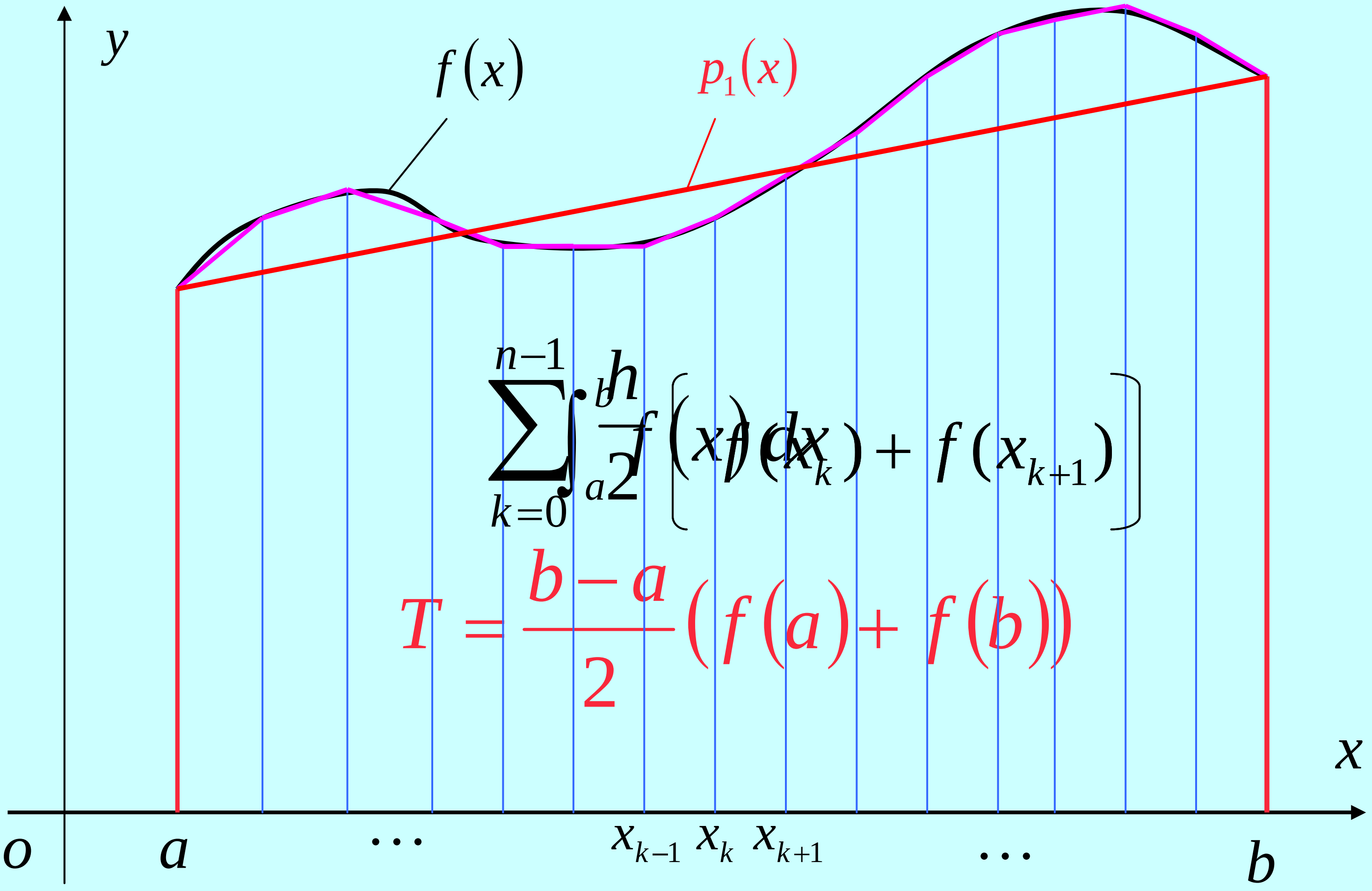
其中
$$C_n = \frac{1}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t$$

由于对n次多项式 $f(x)$，$f^{(n+1)}(x) \equiv 0$ 所以由上述定理可知：

当 n 为偶数时，n+1点的Newton-Cotes公式的代数精度为n+1,

当 n 为奇数时，n+1点的Newton-Cotes公式的代数精度为n。

梯形公式、Simpson公式及Cotes公式的代数精度分别为1，3，5。



$$\int_a^b f(x)\,dx$$

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

$$T=\frac{b-a}{2}\left(f(a)+f(b)\right)$$

$$x_k=a+k\,h \qquad h=\frac{b-a}{n} \qquad k=0,1,\cdots,n$$

5.1.2 复化求积公式

本节讨论在大区间上，对于数值积分使用低阶**Newton-Cotes**公式的**分段**解决办法。

将[a, b] 等分成若干个小区间，在每个小区间上用点数少的**Newton-Cotes**公式，然后再对所有子区间求和。这样得到的数值求积公式称为复化Newton-Cotes公式。

将区间[a,b]进行n等分，每个子区间的长度 $h=\dfrac{b-a}{n}$，如果在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ (k=0,1, ⋯,n-1)上用梯形求积公式，即

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

则

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

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

$$=\frac{h}{2}\left[f(x_0)+f(x_1)+f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_k)+f(x_{k+1})+\cdots+f(x_{n-1})+f(x_n)\right]$$

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

由此可得复化梯形公式：

$$T_n=\frac{b-a}{2n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+f(b)\right] \qquad (5\text{-}14)$$

若在每个子区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上用**Simpson**求积公式，即

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

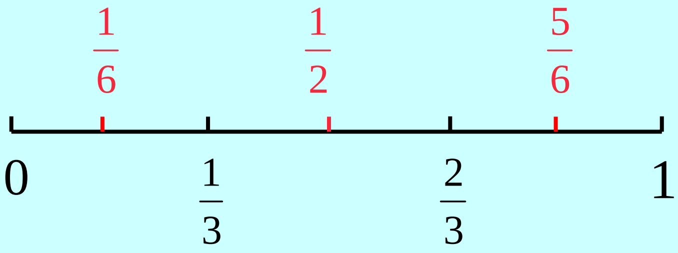
则 $$\int_a^b f(x)\,dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)\,dx\approx\sum_{k=0}^{n-1}\frac{h}{6}\left[f(x_k)+4f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)+f(x_{k+1})\right]$$

可得复化**Simpson**公式：

$$S_n=\frac{b-a}{6n}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)+\boxed{4\sum_{k=0}^{n-1}f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right)}+f(b)\right] \qquad (5\text{-}13)$$

练习题 用n=3复化梯形、复化**Simpson**求积公式计算积分

$$I=\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$$



解： 由复化梯形求积公式：

$$T_3=\frac{b-a}{2\times 3}\left[f(a)+2\times\big(f(x_1)+f(x_2)\big)+f(b)\right]$$

$$=\frac{1}{6}\left[1+2\times\left(\frac{3}{4}+\frac{3}{5}\right)+\frac{1}{2}\right]=\frac{21}{30}$$

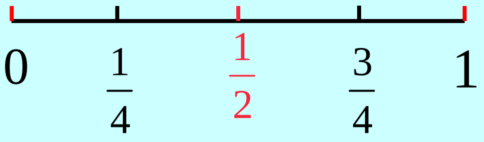
由复化**Simpson**求积公式：

$$S_3=\frac{b-a}{6\times 3}\left[f(a)+2\times\big(f(x_1)+f(x_2)\big)+4\times\left(f\left(x_{\frac{1}{2}}\right)+f\left(x_{\frac{3}{2}}\right)+f\left(x_{\frac{5}{2}}\right)\right)+f(b)\right]$$

$$=\frac{1}{18}\left[1+2\times\left(\frac{3}{4}+\frac{3}{5}\right)+4\times\left(\frac{6}{7}+\frac{2}{3}+\frac{6}{11}\right)+\frac{1}{2}\right]=0.6931670$$

练习题 限定5个求积节点，用复化的梯形求积公式和复化的**Simpson**求积公式计算积分

$$I=\int_0^1 e^{-x^2}dx$$



解： 复化的梯形求积公式为：

$$T_4=\frac{1}{2\times 4}\left(1+2\times\left(e^{-\frac{1}{16}}+e^{-\frac{1}{4}}+e^{-\frac{9}{16}}\right)+e^{-1}\right)$$

复化的**Simpson**求积公式为：

$$S_2=\frac{1}{6\times 2}\left(1+2\times e^{-\frac{1}{4}}+4\times\left(e^{-\frac{1}{16}}+e^{-\frac{9}{16}}\right)+e^{-1}\right)$$

下面推导这三种复化求积公式的余项估计。

设 $f(x)\in\mathbf{C}^2[a,b]$，由（5-11）得复化梯形公式的余项

$$I-T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\left(-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right)=-\frac{nh^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{f''(\eta_k)}{n}$$

$$=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\eta),\quad \eta\in(a,b) \qquad \textbf{(5-16)}$$

又由于

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-T_n}{h^2}=\lim_{h\to 0}\left(-\frac{1}{12}\sum_{k=0}^{n-1}hf''(\eta_k)\right)=-\frac{1}{12}\int_a^b f''(x)\,dx=-\frac{1}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right]$$

可知复化梯形公式T_n是2阶收敛的。

当n充分大时，其余项：$I-T_n\approx-\dfrac{h^2}{12}\left[f'(b)-f'(a)\right]$ **(5-17)**

对于复化**Simpson**公式进行同样的分析，得

$$I-S_n=-\frac{b-a}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4 f^{(4)}(\eta)\quad \eta\in(a,b) \qquad \textbf{(5-18)}$$

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-S_n}{h^4}=-\frac{1}{180}\left(\frac{1}{2}\right)^4\left[f'''(b)-f'''(a)\right]$$

当n充分大时，

$$I-S_n\approx-\frac{1}{180}\left(\frac{h}{2}\right)^4\left[f'''(b)-f'''(a)\right] \qquad \textbf{(5-19)}$$

对于复化**Cotes**公式，

$$I-C_n=-\frac{2(b-a)}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6 f^{(6)}(\eta), \qquad \eta\in(a,b) \qquad \textbf{(5-20)}$$

$$\lim_{h\to 0}\frac{I-C_n}{h^6}=-\frac{2}{945}\left(\frac{1}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right]$$

当n充分大时，

$$I-C_n\approx-\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right] \qquad \textbf{(5-21)}$$

在以上的讨论中，均假定了$f(x)$有一定的连续可微性。

但可以证明：只要$f(x)$在$[a, b]$上可积，则T_n, S_n, C_n均收敛到$I(f)$。

5.1.3 数值微分公式

（1）**Taylor**展开型数值微分公式。假设已知函数$f(x)$在节点$x-h$, x和$x+h$上的函数值。将 $f(x-h)$ 和 $f(x+h)$ 在x点**Taylor**展开：

$$f(x+h)=f(x)+f'(x)h+\frac{1}{2!}f''(x)h^2+\frac{1}{3!}f'''(x)h^3+\frac{1}{4!}f^{(4)}(x)h^4+O(h^5)$$

$$f(x-h)=f(x)-f'(x)h+\frac{1}{2!}f''(x)h^2-\frac{1}{3!}f'''(x)h^3+\frac{1}{4!}f^{(4)}(x)h^4+O(h^5)$$

由此可得

$$=\frac{\qquad - \qquad}{\qquad\qquad}-\frac{1}{2!}f''(x)h+O(h^2)$$

$$=\frac{\qquad - \qquad}{\qquad\qquad}+\frac{1}{2!}f''(x)h+O(h^2)$$

则得两个一阶导数的近似公式：

一阶向前差商

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

一阶向后差商

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

两式相减，除以2h得

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{1}{6}f'''(x)h^2+O(h^3)$$ 一阶中心微商

则一阶导数的近似公式：

一阶中心差商

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

两式相加，除以h^2，得

$$f''(x)=\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}-\frac{1}{12}f^{(4)}(x)h^2+O(h^4)$$ 二阶中心微商

则二阶导数的近似公式：

二阶中心差商

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

这样我们就利用**Taylor**公式得到了如下四个数值微分公式：

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

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

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

例 已知 $\sin 0.32 = 0.314567,\ \sin 0.33 = 0.324043,\ \sin 0.34 = 0.333478$ 试用一、二阶中心微商公式，求出 $\dfrac{d(\sin x)}{dx}$，$\dfrac{d^2(\sin x)}{dx^2}$ 在x=0. 33处的近似值。

解:

$$\left.\frac{d(\sin x)}{dx}\right|_{x=0.33} \approx \frac{\sin 0.34 - \sin 0.32}{0.02} = \frac{0.333478 - 0.314567}{0.02} = 0.94555$$

$$\left.\frac{d^2(\sin x)}{dx^2}\right|_{x=0.33} \approx \frac{\sin 0.34 - 2\sin 0.33 + \sin 0.32}{0.0001}$$

$$= \frac{0.333478 - 2\times 0.324043 + 0.314567}{0.0001} = -0.41$$

（2）下面介绍插值型数值微分公式。 假设已知函数 $f(x)$

在$n+1$个互异的节点

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

上的函数值 $f_i=f(x_i)$ ($i=0, 1, \cdots, n$)，则

$$f(x) = p_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j), \qquad \xi_x \in [a,b] \quad \textbf{(5-22)}$$

其中$p_n(x)$是$f(x)$的以$x_0, x_1, \cdots, x_n$为插值节点的n次插值多项式。

对公式（**5-22**）的两端求一阶导数，得

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

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

(5−23)

若对任意$x\in[a,b]$，取 $f'(x)$ 的近似值为 $p_n'(x)$，则上式右端的后两项即为截断误差，但其中的

$$\left[f^{(n+1)}(\xi_x)\right]' = f^{(n+2)}(\xi_x)\cdot\frac{d\,\xi(x)}{dx}$$

难以确定。只有当$x=x_k$(k=0, 1, ⋯，n)时，才有

$$f'(x) = p_n'(x) + \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_x)\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(x-x_j) \qquad \textbf{(5-24)}$$

上式表明，在插值节点x_k处，$f'(x_k)$的数值导数取为$p_n'(x_k)$时，其截断误差为

$$E_n(x_k) = \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_x)\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}(x_k-x_j)$$

由于高次多项式插值的不稳定性，实际应用当中多采用n=1, 2, 4的二点、三点和五点插值型求导公式。

一、两点公式

当n=1时， 假设 $f'(x)$连续，$f''(x)$ 存在，且已知 $f(x)$在x_0, x_1处的函数值，则

$$p_1'(x)=\sum_{k=0}^{1} f_k\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{1}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)'=\frac{f_0}{x_0-x_1}+\frac{f_1}{x_1-x_0} \qquad \text{(5-25)}$$

记 $h=x_1-x_0$

$$\begin{cases} f'(x_0)=\dfrac{f_1-f_0}{h}-\dfrac{h}{2}f''(\xi) \\ f'(x_1)=\dfrac{f_1-f_0}{h}+\dfrac{h}{2}f''(\xi) \end{cases} \qquad \text{(5-26)}$$

二、三点公式

当n=2时，取等距节点$x_k=x_0+kh\ (k=0, 1, 2)$　$f''(x)$ 连续，$f'''(x)$ 存在，则

$$p_2'(x)=\sum_{k=0}^{2} f_k\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{2}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right)'=\sum_{k=0}^{2} f_k\left(\frac{2x-\sum\limits_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{2}x_j}{h^2\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{2}(k-j)}\right) \qquad (5\text{–}27)$$

或

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_1)(x-x_0)}{(x_2-x_1)(x_2-x_0)}f(x_2)$$

令$x=x_0+th$，上式可表为

$$p_2(x_0+th)=\frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_0)-t(t-2)f(x_1)+\frac{1}{2}t(t-2)f(x_2)$$

两端对t求导数，有

$$p_2'(x)=L_2'(x_0+th)=\frac{1}{2h}\left[(2t-3)f(x_0)-4(t-1)f(x_1)+(2t-1)f(x_2)\right]$$

分别取t=0, 1, 2，由此得一阶数值微分三点公式：

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) \\ f'(x_1) \approx \dfrac{1}{2h}(-f_0 + f_2) \\ f'(x_2) \approx \dfrac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) \end{cases}$$

而带余项的三点公式：

$$\begin{cases} f'(x_0) = \dfrac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) + \dfrac{h^2}{3} f'''(\xi) \\ f'(x_1) = \dfrac{1}{2h}(-f_0 + f_2) - \dfrac{h^2}{6} f'''(\xi) \\ f'(x_2) = \dfrac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \dfrac{h^2}{3} f'''(\xi) \end{cases} \tag{5-28}$$

在求一次导数，得一阶数值微分三点公式：

$$p_2''(x) = p_2''(x_0 + th) = \frac{1}{h^2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2) \right]$$

三、五点公式

设节点$x_k=x_0+kh$ (k=0, 1, 2, 3, 4)，$f^{(4)}(x)$连续，$f^{(5)}(x)$存在，则带余项的五点公式为

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

利用**Lagrange**插值多项式导出的数值微分公式只能求节点上的导数的近似值，为了求非节点处的数值导数，可利用三次样条插值建立数值微分公式。