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

5.1.2 复化求积公式

5.2 Gauss型求积公式

5.2.1 Gauss型求积公式

5.1.1 数值求积公式及其代数精

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

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

其中 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的原函　　　但是大多数实际问题，**N-L**公式已无能为力。 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;

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

- $f(x)$ 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

设 $f(x)$ 是定义在$[a, b]$上的可积函数，考虑带权积分

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

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 所谓**数值求积**就是

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

近似计算 $I(f)$ 的值。

求积系数

公式（5-2）称为**数值求积公**

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

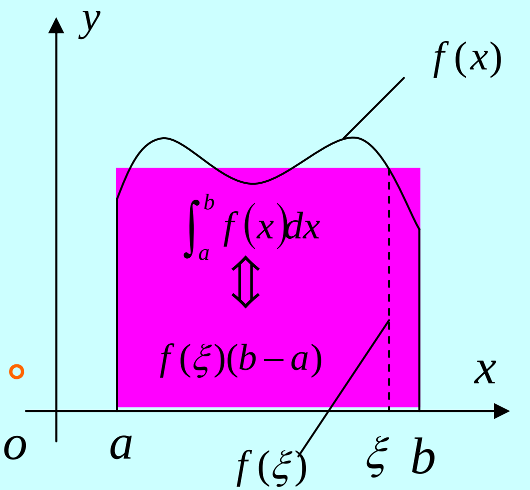
数值积分公式产生的背景

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：

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



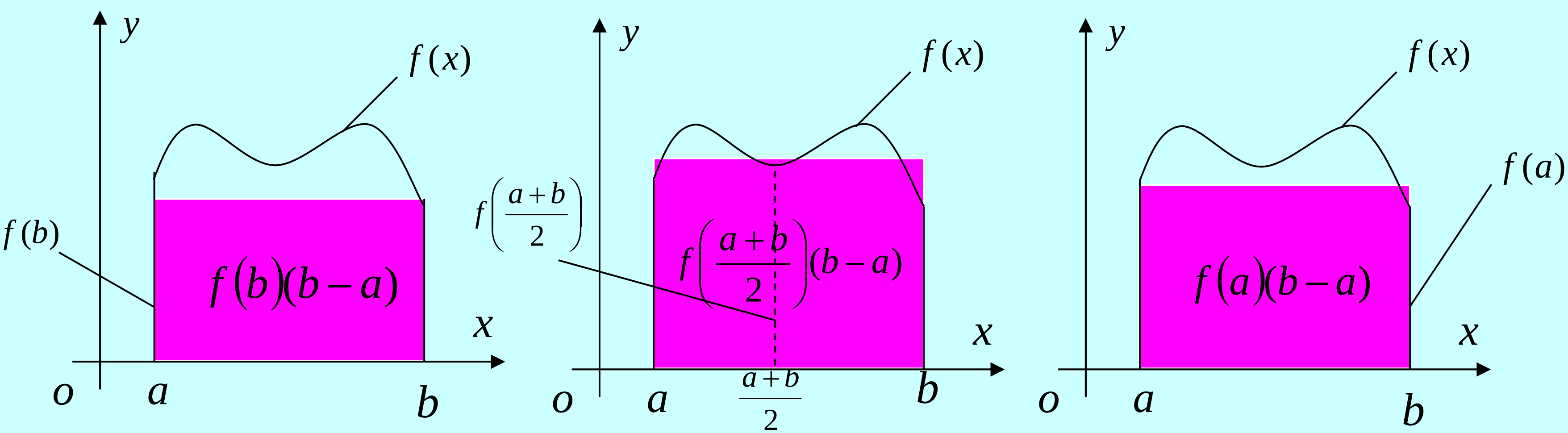
我们可以采用不同的的近似值的方法得到下述数值求积公

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

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx f(b)\,(b-a)$$ 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

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$$ 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 $x_k=a+k\,h\;(k=0,1,\cdots,n)$。取为插值节点（也是求积节

则 $f(x)$可表示为它的**Lagrange**插值多项式及其余项之和，即

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

所以

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

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

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

这样得到的插值型求积公

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

称为n+1点的**Newton-Cotes公式**，其中求积系数

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

求积余

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

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

标志着求积公式的误差大

在**Newton-Cotes**公式中，最常用的是 n**=1, 2, 4**时的三个公式，即

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

此时

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

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

这就是**梯形求积公式**:

梯形求积公式

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

$n=2$

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

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**：

Simpson求积公式

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

进一步可得 n=4 **Cotes公**

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

Cotes求积公式

练习 用梯形求积公式和**Simpson**求积公式计算积

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

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 用梯形求积公式和**Simpson**求积公式计算积

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

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，$I_n(f)=I(f)$ 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

定义 如果某个数值求积公式，对于任何次数不超过m次代数多项式都是精确成立

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

但对于 $m+1$次代数多项式不一定能准确成立，即

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

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

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

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

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

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

Simpson公式的求积余项

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

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

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

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

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

注意，插值节点相同的均差：

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

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

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 $$f[x,x,x_0]=\frac{d\ f[x,x_0]}{dx}$$

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

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

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

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

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

一般的**n+1**点**Newton-Cotes**公式的求积余项，有如下定理：

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

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

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 $f(x)\in \mathbf{C}^{n+1}[a,b]$，

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

其

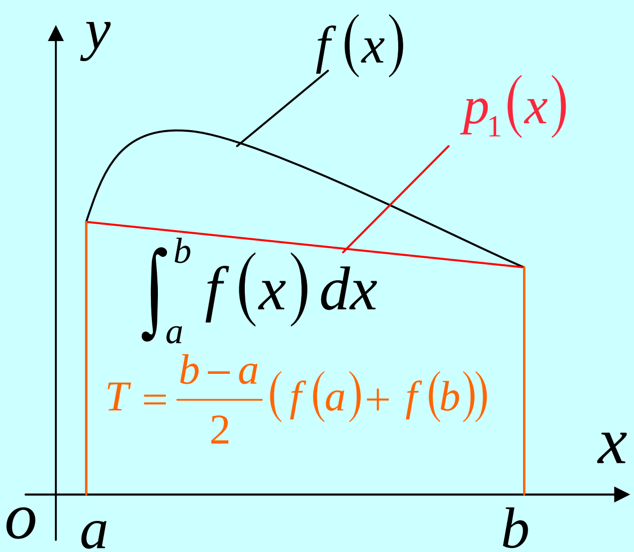
$$C_n=\frac{1}{(n+1)!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-n)\mathrm{d}t$$

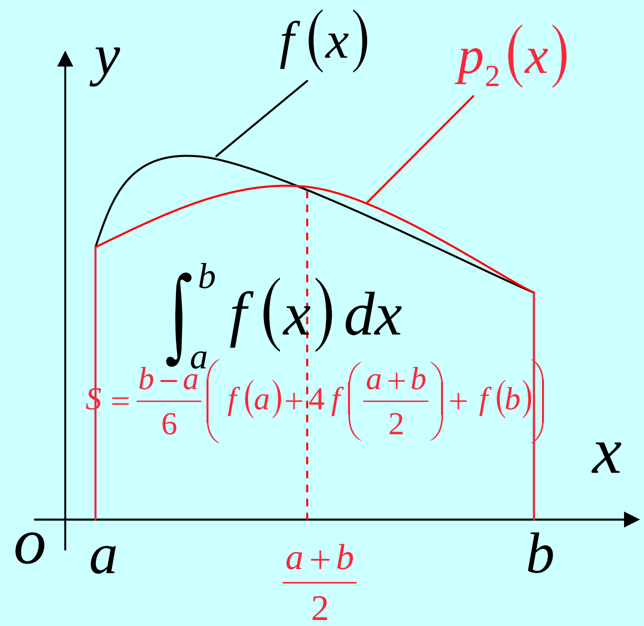
由于对n次多项式 $f(x)$，$f^{(n+1)}(x)\equiv 0$ 所以由上述定理可

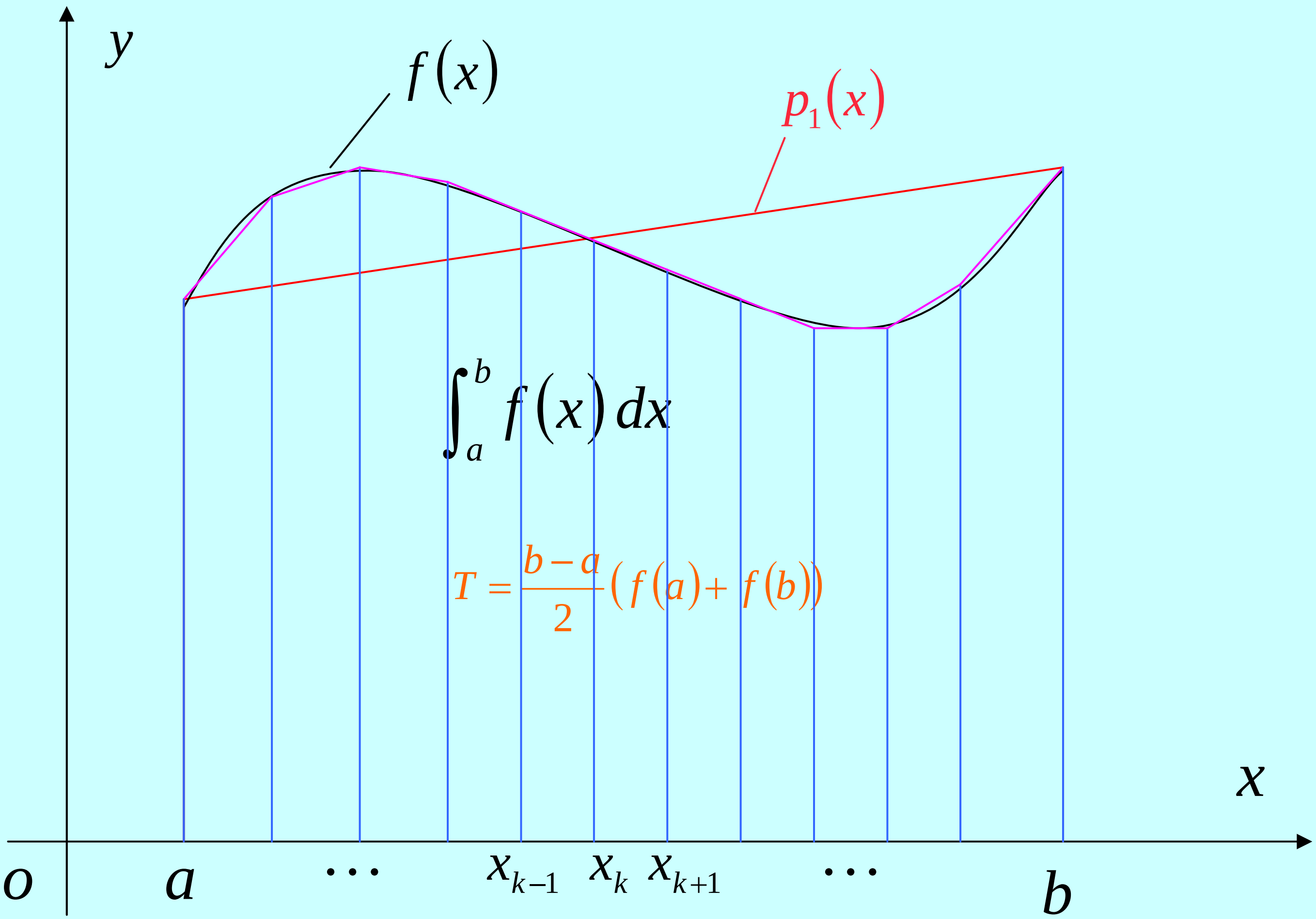
当 n 为偶数时，$n+1$ 点的**Newton-Cotes**公式的代数精度为$n+1$;

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，







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

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

将区间$[a,b]$进行n等分，每个子区间的长 $h=\dfrac{b-a}{n}$。

求积公式称为复化**Newton-Cotes**公

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

如果在每个子区间$[x_k, x_{k+1}]$($k=0,1,\cdots,n-1$)上用梯形求积公式，

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：

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

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

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

可得复化Simpson公式：

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

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

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

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

又由

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

可知复化梯形公式T_n是2阶收敛

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

对于复化**Simpson**公式进行同样的分析，得

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

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

当n充分大时，

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

对于复化**Cotes**公式，

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

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

当n充分大时，

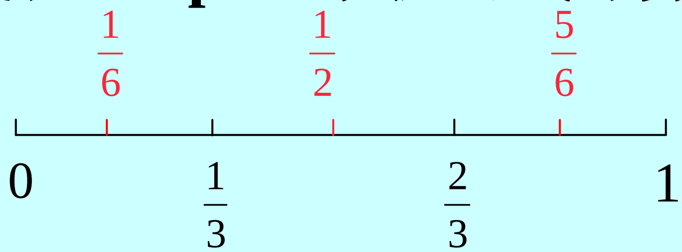
$$I-C_n\approx-\frac{2}{945}\left(\frac{h}{4}\right)^6\left[f^{(5)}(b)-f^{(5)}(a)\right] \tag{5-21}$$

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$I(f)$。

练习 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：

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

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

由复化Simpson求积公式：

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

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

5.1.3 数值微分公

（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

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}-\frac{1}{2!}f''(x)h+O(h^2)$$　　一阶向前微商

$$f'(x)=\frac{f(x)-f(x-h)}{h}+\frac{1}{2!}f''(x)h+O(h^2)$$　　一阶向后微商

则一阶导数的近似公式：

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

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：

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

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

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

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

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

$$\left.\frac{d^2(\sin x)}{dx^2}\right|_{x=0.33} \approx \frac{\sin 0.36 - 2\sin 0.33 + \sin 0.32}{0.001}$$

$$= \frac{0.333478 - 2 \times 0.324043 + 0.314567}{0.001} = -0.041$$

（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 $f_i = f(x_i)$ $(i=0, 1, \cdots, n)$，

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

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 $p_n'(x)$，则上式右的后两项即为截断误差，但其中

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

难以确定。 只有当$x=x_k\,(k=0, 1, \cdots, n)$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

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

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，

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

记 $h=x_1-x_0$

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

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

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

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，

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

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

则带余项的五点公式

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

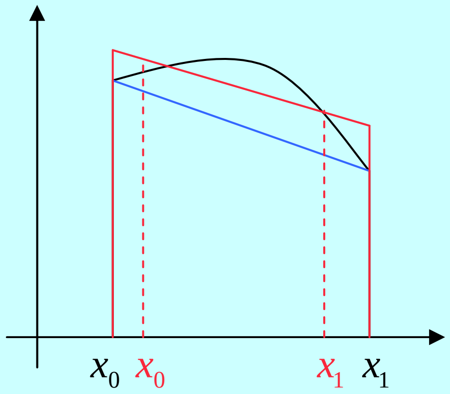
利用Lagrange插值多项式导出的数值微分公式只能求节点上的导数的近似值，为了求非节点处的数值导数，可利用三次样条插值建立数值微分公式。

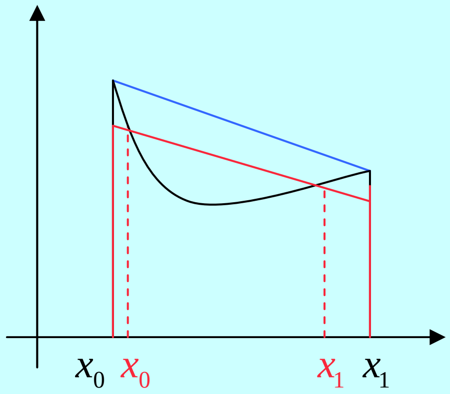
5.2 Gauss型求积公式

本节介绍具有最高代数精度的数值求积公式，即Gauss型求公式。 形如

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

插值型求积公式（并未要求取等距节点）的代数精度至少为n





两点的求积公式

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

两点的**Newton-Cotes**求积公式是等距节点的梯形公

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx f(-1) + f(1)$$

其代数精度为**1**。

若不限制等距节点，我们特意的去选 x_0, x_1, A_0, A_1 ，则由代数精度的的定义，分别 $f(x) = 1,\ x,\ x^2,\ x^3$,令

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

可得到如下非线性方程

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 \cdot x_0 + A_1 \cdot x_1 = 0 \\ A_0 \cdot x_0^2 + A_1 \cdot x_1^2 = \dfrac{2}{3} \\ A_0 \cdot x_0^3 + A_1 \cdot x_1^3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = A_1 = 1 \\ x_0 = \dfrac{-1}{\sqrt{3}},\ x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \end{cases}$$

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

至少具有3次代数精度，又取 $f(x) = x^4$ 时，

$$\int_{-1}^{1} x^4 dx = \frac{2}{5} \neq \frac{2}{9} = \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^4 + \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^4$$

故具有3次代数精

这样如果我们用代数精度最高原则，通过求解 $2n+2$ 阶非线性方程组来确定所有 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 和 $A_0, A_1, \cdots, A_n$ 共 $2n+2$ 个待定系数，就可以构造出具有 $2n+1$ 次代数精度的数值积分公式。

定义 5.2 如果形如（5-32）的求积公式具有代数精度 $2n+1$ 次，则称其为**Gauss型求积公式**，并称其中的求积节点 x_k $(k=0,1,\cdots,n)$ 为Gauss点。

5.2.1 Gauss型求积公式

定理 5. 2 要使插值型求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + E_n(f) \qquad (5\text{-}33)$$

具有 $2n+1$ 次代数精度，必须且只须以节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为零点的 $n+1$ 次多项式

$$\omega_{n+1}(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$$

与所有次数不超过 n 的多项式在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交。

定理 5.2 换句话

$x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是**Gauss** $\Leftrightarrow$ $\omega_{n+1}(x)$ 是正交多项式。

$x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是**Gauss点** $\Leftrightarrow$ $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是正交多项式的根。

证 必要性 假设（**5-33**）具有$2n+1$次代数精度，则对任 $q(x)\in\mathbf{P}_n$，$\omega_{n+1}(x)q(x)\in\mathbf{P}_{2n+1}$， 从而由假设，

$$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)q(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{n}A_k\omega_{n+1}(x_k)q(x_k)=0$$

即$\omega_{n+1}(x)$与$q(x)$在$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)$正交。

充分性，假设$\omega_{n+1}(x)$与任意一个次数不超过n的多项式在$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)$正交。

下面证明以$\omega_{n+1}(x)$的零点$x_0, x_1, \cdots, x_n$为节点的数值求积公式具有代数精度$2n+1$。

已知 $$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)q(x)\mathrm{d}x=0=\sum_{k=0}^{n}A_k\omega_{n+1}(x_k)q(x_k)$$

对任意 $f(x)\in\mathbf{P}_{2n+1}$，用$\omega_{n+1}(x)$除 $f(x)$, 其商为$q(x)\in\mathbf{P}_{2n+1}$，余项为$r(x)\in\mathbf{P}_n$。 即 $f(x)=\omega_{n+1}(x)q(x)+r(x)$

由于$\omega_{n+1}(x)$与所有次数不超过n的多项式正交，所以

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \left[\rho(x)\omega_{n+1}(x)q(x) + \rho(x)r(x)\right]\mathrm{d}x$$

$$= \int_a^b \rho(x)r(x)\mathrm{d}x$$

又由于n+1点插值型求积公式对次数不超过n的多项式是精确的，故

$$\int_a^b \rho(x)r(x)\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n} A_k r(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k \left[\omega_{n+1}(x_k)q(x_k) + r(x_k)\right] = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

从而

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

Gauss型求积公式其求积系数有如下性

（1） $A_k > 0\,,\quad k = 0, 1, \cdots, n$ 且 $\sum_{k=0}^{n} A_k = \int_a^b \rho(x)dx$

（2） $A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) dx = \int_a^b \rho(x) l_k^2(x) dx$

其中$l_k(x)$ **(**k=0,1,⋯,n**)**是以x_0, x_1, ⋯, x_n为插值节点的**Lagrange**插值基函

证：（1）由于是**Gauss**型求积公式，故对2n次多项 $l_k^2(x)$，（k=0, 1, ⋯, n）求积公式精确成立，

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

由$l_k(x)$的性质，

$$A_k = \int_a^b \rho(x) l_k^2(x) dx > 0\,, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

特别，取f(x)≡1更有求积公式精确成立， $\int_a^b \rho(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i$ 。

再证

Gauss型求积公式是以$x_0, x_1, \cdots, x_n$为插值节点的n+1次**Lagrange**正交多项式积分而得的，

$$\int_a^b \rho(x)L_n(x)dx = \int_a^b \rho(x)\left(\sum_{i=0}^{n} l_k(x)f(x_i)\right)dx$$

$$= \sum_{i=0}^{n}\left(\int_a^b \rho(x)l_i(x)dx\right)f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

故

$$A_k = \int_a^b \rho(x)l_k(x)dx = \int_a^b \rho(x)l_k^2(x)dx$$

例 求[−1,1]上关于的$\rho(x)\equiv 1$两点Gauss型求积式。

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

构造二次正交多项式

$$\phi_2(x) = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & x \\ \mu_2 & \mu_3 & x^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{2}{3} & x \\ \frac{2}{3} & 0 & x^2 \end{vmatrix} = \frac{4}{3}x^2 - \frac{4}{9} = \frac{4}{9}\left(3x^2 - 1\right)$$

令 $\phi_2(x) = \frac{4}{9}\left(3x^2 - 1\right) = 0 \Rightarrow x_0 = \frac{-1}{\sqrt{3}},\quad x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

此时，得

$$A_0 = \int_{-1}^{1} l_0(x)dx = \int_{-1}^{1} \frac{x - \frac{1}{\sqrt{3}}}{-\frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{\sqrt{3}}}dx = 1$$

$$A_1 = \int_{-1}^{1} l_1(x)dx = \int_{-1}^{1} \frac{x+\frac{1}{\sqrt{3}}}{\frac{1}{\sqrt{3}}+\frac{1}{\sqrt{3}}} dx \ = 1$$

或 取 $f(x) = 1, x$，由代数精度的定义，得线性方程

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \int_{-1}^{1} dx = 2 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} A_0 + \frac{1}{\sqrt{3}} A_1 = \int_{-1}^{1} x\, dx = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_1 - A_0 = 0 \end{cases} \Rightarrow \quad A_0 = A_1 = 1$$

则得具有**3**次代数精度的**Gauss-Legendre**公式：

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

对于任意区间[a,b]上关于的$\rho(x)\equiv 1$两点Gauss型求积式,只需作变量替换:

$$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}\cdot t$$

则有 $x\in[a,b]\leftrightarrow t\in[-1,1]$，这样

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b+a}{2}+\frac{b-a}{2}\cdot t\right)dt$$

$$\approx\frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^{n} A_k f\left(\frac{b+a}{2}+\frac{b-a}{2}t_k\right)$$

。

例，构造求解 $\int_1^5 f(x)dx$ 的具有**3**次代数精度的**Gauss**公式。

解： $2n+1=3 \Rightarrow n=1$，此求积公式具有**2**个**Gauss**节点。

作变量替换：3+2*t*，则取**Gauss**节点、求积系数

$$t_0=-\sqrt{\frac{1}{3}},\quad t_1=\sqrt{\frac{1}{3}} \qquad A_0=A_1=1$$

从而，得

$$\int_1^5 f(x)dx = 2\cdot\int_{-1}^1 f(3+2t)dt$$

$$\approx \sum_{k=0}^{1} A_k f(3+2t_k) = f\left(3-2\cdot\sqrt{\frac{1}{3}}\right)+f\left(3+2\cdot\sqrt{\frac{1}{3}}\right)$$

若取 $\int_1^5 e^{-x^2}dx$ 则具有3次代数精度**Gauss**公式为：

$$\int_1^5 e^{-x^2}dx = 2\cdot\int_{-1}^1 e^{-(3+2t)^2}dt \approx \sum_{k=0}^{1} A_k \cdot e^{-(3+2t_k)^2}$$

$$= e^{-\left(3-2\cdot\sqrt{\frac{1}{3}}\right)^2} + e^{-\left(3+2\cdot\sqrt{\frac{1}{3}}\right)^2}$$

例2，确定x_0, x_1, A_0, A_1使以下的求积公式为**Gauss**型求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{1-x}\, f(x)\, dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1)$$

解：首先构 $[0,1]$上关于$\rho(x)=\sqrt{1-x}$ 的首项系数为**1**的二次正交多项式，为此可设

$$\phi_0(x)=1 \quad \phi_1(x)=x+a \quad \phi_2(x)=x^2+bx+c$$ ，从而

$$\left.\begin{aligned}
(\phi_0,\phi_1) &= \int_0^1 \sqrt{1-x}(x+a)dx = 0 \\
(\phi_0,\phi_2) &= \int_0^1 \sqrt{1-x}(x^2+bx+c)dx = 0 \\
(\phi_1,\phi_2) &= \int_0^1 \sqrt{1-x}\cdot(x+a)\cdot(x^2+bx+c)dx = 0
\end{aligned}\right. \Rightarrow \begin{cases} a = -\dfrac{2}{5} \\ b = -\dfrac{8}{9} \\ c = \dfrac{8}{63} \end{cases}$$

则

$$\phi_2(x) = x^2 - \frac{8}{9}x + \frac{8}{63}$$

其零点为：x_0=0.7188,

令 $f(x)$=1, x，用代数精度定义

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = \int_0^1 \sqrt{1-x}\,dx = \frac{2}{3} \\ 0.7188\,A_0 + 0.7101\,A_1 = \int_0^1 \sqrt{1-x}\cdot x \cdot dx = \frac{5}{4} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_0 = 0.3891 \\ A_1 = 0.2776 \end{cases}$$

从而

$$\int_0^1 \sqrt{1-x}\,f(x)dx \approx 0.3891\cdot f(0.7188) + 0.2776\cdot f(0.7101)$$

。

The End