目录

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

Gauss公式

- 形如下式的机械求积公式

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

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

- Gauss公式
  - 适当选择x_k, A_k，使求积公式具有$2n+1$次代数精度

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

Gauss公式的构造

- 插值型求积公式
  - 求积系数A_k通过插值基函数$l_k(x)$积分得出

$$A_k = \int_a^b l_k(x)\,\mathrm{d}x$$

- **定理4.4** 对于插值型求积公式(4.4.1)，其节点$x_k\ (k = 0,1,\cdots,n)$是Gauss点的充分必要条件，是以这些点为零点的多项式$\omega(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$与任意次数不超过$n$的多项式$P(x)$均正交，即

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

定理4.4证明

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

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

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

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

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

定理4.4证明（续）

充分性

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

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

- 利用式(4.4.2)，可得

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

- 由于所给求积公式是插值型的，它对于$Q(x)$能准确成立（定理4.1）

定理4.4证明（续）

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

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

- 注意到$\omega(x_k) = 0$，因此

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

- 从而有

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

- 结合(4.4.3)，得到

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

- 知式(4.4.1)对次数不超过$2n+1$的多项式均成立

Gauss-Legendre公式

- $a=-1, b=1$，考察区间$[-1,1]$的Gauss公式

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

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

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

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

Gauss-Legendre公式（续）

- Legendre多项式$P_{n+1}(x)$的零点就是求积公式(4.4.4)的Gauss点
  - 被称为Gauss-Legendre公式
- 取$P_1(x) = x$的零点$x_0 = 0$作节点构造求积公式

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

  - 令上式对$f(x) = 1$准确成立，即可定出$A_0 = 2$
  - 得到中矩形公式

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

Gauss-Legendre公式（续）

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

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

  - 令上式对 $f(x) = 1, x$ 准确成立，有

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

  - 解出$A_0 = A_1 = 1$，得到两点Gauss-Legendre公式

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

Gauss-Legendre公式（续）

- 继续推导，得到三点Gauss-Legendre公式

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

- 四点、五点Gauss-Legendre公式见表4.5

- 拓展到任意求积区间$[a,b]$
  - 通过变换$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}$可以化到区间$[-1,1]$

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

Gauss公式的余项

- 定理**4.5** 对于Gauss公式 (4.4.1)，其余项

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

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

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

$$H(x_i)=f(x_i)\qquad H'(x_i)=f'(x_i)\qquad (i=0,1,\ldots)$$

这里的$H(x)$称为Hermite插值多项式

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

Gauss公式的余项（续）

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

- 因此余项

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

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

- Hermite插值余项

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

Gauss公式的余项（续）

- 因此

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

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

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

Gauss公式的稳定性

- Newton-Cotes公式不稳定
  - 当$n \geq 8$时，Cotes系数有正有负
- Gauss公式不但是高精度的，而且数值稳定
  - 求积系数具有非负性

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

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

定理4.6证明

- 考察

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

  - 它是n次多项式，因而$l_k^2(x)$是$2n$次多项式

- Gauss公式对于$l_k^2(x)$能准确成立，即有

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

Gauss公式稳定的原因

- 求积公式

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

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

$$I_n^* = \sum_{k=0}^{n} A_k f_k^*$$

- I_n和I_n^*之间的差异有多大？

Gauss公式稳定的原因（续）

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

- 由于Gauss公式的求积系数具有非负性

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

- 根据式(4.1.4)，可得

$$\sum_{k=0}^{n} A_k = b - a \quad \Rightarrow |I_n^* - I_n| \le (b-a) \max_{0\le k\le n} |f_k^* - f_k|$$

带权的Gauss公式

- 考察积分

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

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

- 仿照普通积分的处理方式，考察求积公式

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

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

带权Gauss公式的构造

- $x_k(k=0,1,\ldots,n)$是Gauss点的充要条件，下式是区间$[a,b]$上关于权函数$\rho(x)$的正交多项式

$$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)$$

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

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

  - 称为Gauss-Chebyshev公式

带权Gauss公式的构造（续）

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

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

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

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

- 运用正交多项式的零点构造Gauss求积公式，只是针对某些特殊的权函数才有效
  - 一般权函数的正交化很复杂

带权Gauss公式的构造（续）

- 一般方法，借鉴4.1.2节的待定系数法
  - 欲使求积公式(4.1.3)具有m次代数精度，只要令它对于$f(x)=1,x,x^2,\dots,x^m$都能成立

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

  - 是一个确定参数x_k和A_k的代数问题

举例

- 设要构造下列形式的Gauss公式

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

- 令它对于 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 准确成立，得

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

举例（续）

- 经过一系列解方程步骤，可得

$$x_0 = 0.821162 \qquad x_1 = 0.289949$$

$$A_0 = 0.389111 \qquad A_1 = 0.277556$$

- 因此

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\approx 0.389111 f(0.821162) + 0.277556 f(0.289949)$$

目录

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

中点方法

- 按照数学分析的定义，导数是差商的极限

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

- 如果精度要求不高，则可以取差商作为倒数的近似值，即

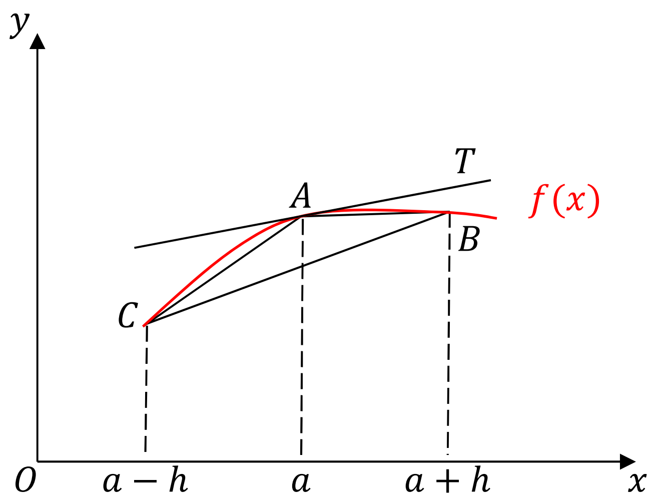
$$f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h} \quad 或 \quad f'(a) \approx \frac{f(a)-f(a-h)}{h}$$

- 中点方法（两者取平均）

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

中点方法（续）

- 三种导数的近似值对应于向前差商、向后差商、中心差商
  - 分别分表示弦AB、AC和BC的斜率
  - BC的斜率更接近切线AT的斜率
  - 中点方法更为可取



- 机械求导方法
  - 将导数的计算归结为计算f在若干节点上的函数值

误差分析

- 要利用中点公式

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

计算导数$f'(a)$的近似值，需要选择合适的步长，为此需要进行误差分析

- 分别将$f(a\pm h)$在$x=a$处作Taylor展开

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

误差分析（续）

- 代入中点公式，化简

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

  - 从截断误差的角度看，步长越小，计算结果越准确

- 再考察舍入误差，当h很小时，因$f(a+h)$与$f(a-h)$很接近，直接相减会造成有效数字的严重损失
  - 从舍入误差的角度看，步长不宜太小

举例

- 中点公式求$f(x)=\sqrt{x}$ 在$x=2$处的一阶导数

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

  - 取四位数字计算，结果如下表所示

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

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

插值型的求导公式

- 对于列表函数$y=f(x)$，运用插值原理，可以建立插值多项式$y=P_n(x)$作为它的近似
- 由于多项式的求导比较容易，取$P_n'(x)$的值作为$f'(x)$的近似值，即

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

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

误差分析

- 差值余项

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

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

- 求导公式(4.5.1)的余项

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

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

误差分析（续）

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

- 如果限定求某个节点x_k 的导数值，那么上面第二项因$\omega_{n+1}(x_k) = 0$而变为零，这时余项公式为

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

- 下面仅仅考察节点处的导数值
  - 为简化讨论，假定所给的节点是等距的

两点公式

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

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

- 上式两端求导，记$x_1 - x_0 = h$，有

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

- 于是有下列求导公式

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

两点公式（续）

- 利用余项公式

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

- 带余项的两点公式

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

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

三点公式

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

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

- 令$x = x_0 + th$，上式可表示为

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

三点公式（续）

- 两端对t求导，可以推导出

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

  - 这里撇号表示对变量x求导数

- 分别取$t=0,1,2$，得到以下三种三点公式

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

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

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

三点公式（续）

- 利用余项公式

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

- 带余项的三点求导公式

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

$$f'(x_1)=\frac{1}{2h}[-f(x_0)+f(x_2)]-\frac{h^2}{6}f'''(\xi) \qquad (4.5.4)$$

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

- 式(4.5.4)是中点公式，它少用了一个函数值

高阶数值微分公式

- 用插值多项式$P_n(x)$作为$f(x)$的近似函数

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

- 将式(4.5.3)再对t求导一次，可以推导出

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

得到

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

高阶数值微分公式（续）

- 二阶三点公式

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

- 带余项的二阶三点公式

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

五点公式

- 设已给出五个节点$x_i = x_0 + ih,\ i = 0,1,2,3,4$上的函数值，重复同样的手续，得到

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

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

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

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

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

- m_i代表一阶导数$f'(x_i)$的近似值

五点公式（续）

- 二阶五点公式如下

$$M_0 = \frac{1}{12h^2}[35f(x_0) - 104f(x_1) + 114f(x_2) - 56f(x_3) + 11f(x_4)]$$

$$M_1 = \frac{1}{12h^2}[11f(x_0) - 20f(x_1) + 6f(x_2) + 4f(x_3) - f(x_4)]$$

$$M_2 = \frac{1}{12h^2}[-f(x_0) + 16f(x_1) - 30f(x_2) + 16f(x_3) - f(x_4)]$$

$$M_3 = \frac{1}{12h^2}[-f(x_0) + 4f(x_1) + 6f(x_2) - 20f(x_3) + 11f(x_4)]$$

$$M_4 = \frac{1}{12h^2}[11f(x_0) - 56f(x_1) + 114f(x_2) - 104f(x_3) + 35f(x_4)]$$

- M_i表示二阶导数$f''(x_i)$的近似值

五点公式（续）

- 对于给定的一张数据表，用五点公式求节点上的导数值往往可以获得满意的结果
- 五个相邻节点的选择原则，一般是在所考察的节点的两侧各取两个邻近的节点
- 如果一侧的节点数不足两个（即一侧只有一个节点或没有节点），则用另一侧的节点补足

举例

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

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

样条求导

- 样条函数$S(x)$作为$f(x)$的近似函数，不但彼此的函数值很接近，导数值也很接近
  - 对于三次样条$S_3(x)$，有

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

  - 用样条函数建立数值微分公式是很自然的，即

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

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

$$\lambda_j m_{j-1} + 2m_j + \mu_j m_{j+1} = g_j \ (j = 1,2,\cdots,n-1) \quad (2.8.9)$$

样条求导（续）

- 对于等距划分

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b \qquad x_{k+1} - x_k = h$$

- 三次样条$S_3(x)$在节点上的导数值$S_3'(x_k) = m_k$满足下列连续性方程

$$m_{k-1} + 4m_k + m_{k+1} = 3(y_{k+1} - y_{k-1})/h \qquad (4.5.7)$$

$$(k = 0, 1, \ldots, n-1)$$

  - 与公式(2.8.9)一致
  - 设已给出端点处一阶导数值$m_0 = y_0', m_n = y_n'$，则求解方程组(4. 5. 7)得出的m_k即可作为导数$f'(x_k)$的近似值

总结

- 引言
  - 积分中值定理、梯形公式、矩形公式
  - 机械求积、代数精度、插值型求积公式
- Newton-Cotes公式
  - 定义、Cotes系数、Newton-Cotes公式的稳定性
  - 偶阶求积公式的代数精度、低阶求积公式的余项
  - 复化求积法、误差的渐近性
- Romberg算法
  - 梯形法的递推化、误差的事后估计法
  - Romberg公式、Richardson外推加速法

总结

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

- 数值微分
  - 中点方法、机械求导方法
  - 插值型的求导公式、误差分析、样条求导