

高等学校计算机专业教材

GAODENG XUEXIAO JISUANJI ZHUANYE JIAOCAI

数值计算方法

● 刘萍 编



GAODENG XUEXIAO JISUANJI ZHUANYE JIAOCAI
GAODENG XUEXIAO JISUANJI ZHUANYE JIAOCAI
GAODENG XUEXIAO JISUANJI ZHUANYE JIAOCAI
GAODENG XUEXIAO JISUANJI ZHUANYE JIAOCAI

人民邮电出版社
www.pptph.com.cn

高等学校计算机专业教材

数值计算方法

刘 萍 编

人民邮电出版社

图书在版编目(CIP)数据

数值计算方法/刘萍编. - 北京:人民邮电出版社,2002.2

高等学校计算机专业教材

ISBN 7-115-09373-3

I.数... II.刘... III.数值计算-计算方法-高等学校-教材 IV.0241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 000934 号

内 容 提 要

本书是高等学校计算机专业教材。全书共分六章,内容包括:插值方法、贝齐尔曲线和 B 样条曲线、数值积分、线性代数方程组的解法、线性规划、常微分方程数值解法。本书在叙述基础理论的同时注重现实应用,给出了大量应用实例。为了更好地理解抽象理论,本书设计了数值实验。

本书也可作为普通高等学校计算机专业的教学参考书,也可供计算机应用人员阅读参考。

高等学校计算机专业教材

数值计算方法

◆ 编 刘 萍
责任编辑 滑 玉

◆ 人民邮电出版社出版发行 北京市崇文区夕照寺街 14 号

邮编 100061 电子函件 315@pptph.com.cn

网址 <http://www.pptph.com.cn>

读者热线:010-67180876

北京汉魂图文设计有限公司制作

北京朝阳隆昌印刷厂印刷

新华书店总店北京发行所经销

◆ 开本:787×1092 1/16

印张:10.75

字数:259 千字

2002 年 2 月第 1 版

印数:1-5 000 册

2002 年 2 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-115-09373-3/TP·2264

定价:15.00 元

本书如有印装质量问题,请与本社联系 电话:(010)67129223

出版者的话

为了适应我国大学本科计算机专业教育发展对教材的需要,我社特邀请教育部所属的中国人民大学、中国地质大学、中国农业大学、北京科技大学、北京林业大学、北京语言文化大学(排名不分先后)6所高等学校的“计算机科学与技术系”系主任及资深教授组成专家组,规划、编写、审订了本套教材。

读者对象 本套教材的主要读者对象是普通高等院校计算机科学与技术专业的学生,兼顾信息、自动化及机电类专业学生学习计算机课程的需要。由于这些专业对学生的培养目标是:掌握计算机软件与硬件的基本理论和方法,能从事计算机应用、软件研制、技术开发和管理工作的高级技术人才,因此,本套教材的内容既注意计算机高级技术人才所应具有完整知识结构,又适当侧重主要专业知识。

教材特点 本套教材参考了美国 IEEE/CS 和 ACM 技术委员会 2001 年推荐的课程: CC2001(Computing Curricula 2001, 参见 <http://www.csab.org/~csab>, <http://cs.nju.edu.cn/~gchen/teaching/cc2001/overview-bok.html> 2001) 及我国几十所高等院校计算机专业的 2001 年教学计划进行规划。教材内容在选择国际上先进的计算机理论、技术的同时,务求符合我国目前教学环境的实际情况,既不追求高深,也不迁就实用。

根据大学教学的特点,本套教材主要包括:必修课程、选修课程和辅助课程三类教材。除了每本教材内容自成体系外,还考虑了它在整个教学计划中的安排顺序,适当增加了承上启下的内容。

写作风格 本套教材根据内容需要,沿着“这是什么、有什么用、怎样用、怎样用得更好”的思路编写教材,通过讲解具体知识,传授学习方法,使学生达到掌握理论和技术的目的;同时力求文笔流畅,言简意赅。

教材每一章除基本知识外,还有本章要点、小结、思考与练习题。有些教材还在最后附加讲课大纲(包括教学重点、难点,讲授知识点的参考学时数)、考试大纲,操作性较强的课程还配有实验教材(包括上机应具备的软硬件环境和实验内容及方法)。为了方便教师教学,在人民邮电出版社的网站(<http://www.ptpress.com.cn>)上有各教材讲课提纲的电子文档,供下载使用。

本套教材的作者都具有多年教学经验,教材的草稿也都在各自的讲课中多次使用。这套教材的出版,为计算机专业的师生提供了新的成套教材选择。我们希望本套以易教、易学,朴实、实用为特色的教材在培养信息化建设专业人才方面做出应有的贡献。

欢迎广大读者对本套教材的不足之处提出批评和建议。

2002 年 1 月

编者的话

按照计算机处理信息的特点,计算机应用可以分成两类。一类是非数值应用,比如科技文献检索、银行自动提款和结算、飞机客票联网预售、派出所户籍管理等。另一类是数值计算,比如天气预报、钢铁厂轧钢控制离线仿真、人造地球卫星的姿态控制、企业投资方案的确定,以及飞机、汽车和船舶的外形设计等。

用数值计算解决实际问题的第一步是建立数学模型。比如,要作数值天气预报,需分析大气中的辐射加热、水汽的相变、近地面层的湍流、地形的强迫力、陆气和海气的耦合作用等等,得到一组多变量偏微分方程的数学模型。通过这组偏微分方程的求解,即可进行天气预报。

建立数学模型之后,还不能用计算机直接求解。因为,高级程序设计语言仅提供了算术四则运算和逻辑运算的功能。在数学模型和实际计算之间,还需设计各类不同的算法作为桥梁。这些算法需将求解过程表示成算术四则运算和逻辑运算的有限序列,这就构成了数值计算方法的研究内容。

从以上粗略的介绍,我们可以归纳出应用数值计算解决问题的步骤是:(1)建立一个描述现实问题的数学模型;(2)选择或构造一个从数学模型到数值计算的有效算法;(3)在计算机上进行数值计算,并将结果以数值方式或图形方式输出。

限于学时,本书只能介绍数值计算方法的主要内容。在取材上,兼顾到传统方法和现代方法,并侧重现实应用中的计算方法。本教材由三部分组成:第一部分是插值理论,包括第1章的古典理论与第2章的近代理论。这部分内容是计算机辅助设计的数学基础。第二部分是线性方程组求解与线性规划,包括第4章的古典理论与第5章的近代理论。这部分内容在经济管理和社会生活中有广泛的应用。第三部分是数值积分和微分方程数值求解,由第3章与第6章构成。这些内容属于古典理论,其中微分方程数值求解在自动控制中有广泛的应用。全书讲授时数为36学时,上机78学时。

为使读者更好地掌握本书内容,本书的习题中含有证明题、几何作图题和数值计算题三类,并对稍微复杂的题目,设计了数值实验。

编者
2001年12月

目 录

第 1 章 插值方法	(1)
1.1 拉格朗日插值公式	(2)
1.2 牛顿插值公式	(5)
1.3 埃特金插值公式	(13)
1.4 存在惟一性定理	(17)
1.5 插值余项	(17)
1.6 分段三次埃尔米特插值	(21)
1.7 三次样条插值	(24)
1.8 应用实例	(27)
1.9 小结	(32)
习 题	(32)
第 2 章 贝齐尔曲线和 B 样条曲线	(36)
2.1 贝齐尔曲线	(36)
2.2 B 样条函数	(41)
2.3 B 样条曲线	(42)
2.4 自由曲线设计	(44)
2.5 应用实例	(46)
2.6 小结	(47)
习 题	(47)
第 3 章 数值积分	(49)
3.1 基本概念	(49)
3.2 牛顿 - 柯特斯公式	(53)
3.3 龙贝格算法	(57)
3.4 高斯公式	(64)
3.5 应用实例	(69)
3.6 小结	(71)
习 题	(71)
第 4 章 线性代数方程组的解法	(73)
4.1 高斯消元法	(73)
4.2 矩阵的 LU 分解	(79)

4.3 雅可比迭代	(83)
4.4 高斯 - 塞德尔迭代	(86)
4.5 收敛性定理	(87)
4.6 应用实例	(88)
4.7 小结	(90)
习 题	(90)
第 5 章 线性规划	(92)
5.1 线性规划问题的标准形式	(92)
5.2 线性规划问题的几何解释	(95)
5.3 定义和定理	(98)
5.4 单纯形算法	(100)
5.5 应用实例	(112)
5.6 小结	(114)
习 题	(115)
第 6 章 常微分方程数值解法	(117)
6.1 欧拉方法	(118)
6.2 龙格 - 库塔方法	(123)
6.3 一阶方程组	(127)
6.4 应用实例	(128)
6.5 小结	(129)
习 题	(130)
附录 数值实验	(132)
参考文献	(164)

第 1 章 插值方法

在生产和科学实验中,函数表达了现实世界物质运动规律的数量关系。对于实际问题中遇到的函数 $y = f(x)$,虽然从原则上说,它在某个区间 $[a, b]$ 上是存在的,但通常是通过实验观测得到的,所以只知道 $[a, b]$ 区间一系列点上的函数值 $y_i = f(x_i)$ 。对于 x 的其他值, $y = f(x)$ 的变化情况是不知道的。这就表明,我们只知道关于 $y = f(x)$ 的一张表 (x_i, y_i) ($i = 0, 1, \dots, n$),这对于研究物质变化规律很不方便,更不能用它计算未给出点的函数值。

若函数能用一个公式来表示,那么我们研究和分析函数的性质、计算函数值就变得很简单了。由于代数多项式既简单又便于计算,因此人们在实践中早就用代数多项式近似表达复杂的函数或用表格给出的函数,这就是插值法的课题。例如,在观测行星的运动时,得到某时刻 t_i 所对应的行星位置,我们用 s_i 表示(用经度和纬度表示)。要想知道任何时刻 t 的行星位置 s ,必须用插值法。

又如程序控制铣床加工精密工件时,常常是给出工件外形若干点的坐标,要求加工后的外形是光滑的曲线。加工时走刀方向是直线。要得到光滑曲线,必须计算出外形曲线足够密的点的坐标,用它来控制走刀的方向,以便加工出达到精度要求的工件。这也是插值问题。

再比如,我们在查对数表时,要查的数据在表中找不到,于是就先找出它相邻的数,再从表的旁边找出其修正值,按一定关系把此相邻的数加以修正,就可求出要找的数。这个关系是如何得到的呢?实际上就是一种插值。

插值法是一种古老的数学方法。早在 1000 多年前,我国历法上已经记载了应用一次插值和二次插值的实例。但由于我国长期处于封建统治下,生产落后,科学也就没有得到重大发展。在欧洲,从 17 世纪末到 18 世纪初,天文学、物理学和力学的发展,使插值法的基本理论逐步完善,其应用也日益增多。特别是 20 世纪 60 年代以后,由于电子计算机的普遍使用,插值法的应用范围随之扩大。在航空、造船和精密机械加工等部门需求的推动下发展起来的“样条”插值,在实践中得到了广泛应用。

插值法解决的实际问题虽然各式各样,但抽象为数学问题却有它的共同性。最简单的插值方法是一元代数插值。它所研究的问题是:已知列表函数 $f(x_i) = y_i$ ($i = 0, 1, \dots, n$),求次数不超过 n 的多项式 $p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$,满足 $p_n(x_i) = y_i$ 。这里, $f(x)$ 称为被插函数; x_i 称为插值节点; $p_n(x)$ 称为函数 $f(x)$ 的 n 次插值多项式。在几何上,这就意味着要找一条代数曲线,该曲线通过给定的一组点 $M_i(x_i, y_i)$ ($i = 0, 1, \dots, n$),如图 1-1 所示。对于这个问题,拉格朗日(Lagrange)、牛顿(Newton)、埃特金(Aitken)分别给出了不同的解决方法。

1.1 拉格朗日插值公式

拉格朗日(Lagrange)插值公式(以下统称为Lagrange插值公式)的基本思想是,把 $p_n(x)$ 的构造问题转化为 $n+1$ 个插值基函数 $l_i(x)(i=0,1,\dots,n)$ 的构造。

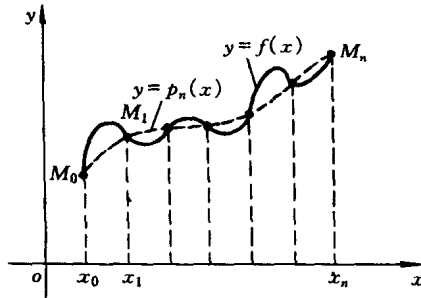


图 1-1 插值多项式

1. $n=1$ 的情况

已知函数 $y=f(x)$ 在点 x_0, x_1 上的值为 y_0, y_1 ,要求多项式 $y=p_1(x)$,使 $p_1(x_0)=y_0$, $p_1(x_1)=y_1$ 。其几何意义,就是通过两点 $A(x_0, y_0), B(x_1, y_1)$ 的一条直线,如图 1-2 所示。

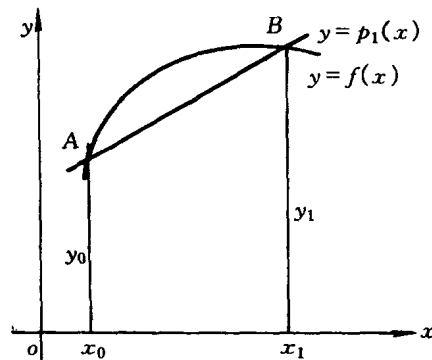


图 1-2 一次插值多项式

由直线两点式可知,通过 A, B 的直线方程为

$$y = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) = p_1(x) \quad (1.1)$$

它也可变形为 $p_1(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1$

其中 $l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$

显然有: $l_0(x_0) = l_1(x_1) = 1, l_0(x_1) = l_1(x_0) = 0, p_1(x_0) = y_0, p_1(x_1) = y_1$

我们称 $l_0(x)$ 为点 x_0 的一次插值基函数, $l_1(x)$ 为点 x_1 的一次插值基函数。它们在对应的插值点上取值为 1, 而在另外的插值点上取值为 0。插值函数 $p_1(x)$ 是这两个插值基函数的线性组合, 其组合系数就是对应点上的函数值。这种形式的插值称作为拉格朗日 (Lagrange) 插值。它的方法是把 $p_1(x)$ 的构造问题转化为两个插值基函数 $l_i(x) (i = 0, 1)$ 的构造。这种方法对于 n 较大时, 会带来很大的方便。 $p_1(x)$ 是 x 的一次 (线性) 函数, 称为一次插值多项式。

当 $|x_0 - x_1|$ 很小时, 线性插值是经常使用的。如前面提到的程控铣床加工曲线, 就是把曲线分成很多小段, 在每小段上走刀方向是直线, 即用弦代替曲线, 实际上就是线性插值。又如我们用函数表计算函数值时, 也常用线性插值。

[例 1] 用三位平方根表求平方根 $\sqrt{17.52}$ 。

解: 平方根表如表 1-1 所示。

表 1-1

平方根表

n	\sqrt{n}
17.5	4.183
17.6	4.195

这里, $x_0 = 17.5, y_0 = 4.183, x_1 = 17.6, y_1 = 4.195$ 。我们求 $x = 17.52$ 时 $f(x) = \sqrt{x}$ 的值。由线性插值公式 (1.1), 得到

$$p_1(17.52) = 4.183 + \frac{4.195 - 4.183}{17.6 - 17.5}(17.52 - 17.5) = 4.185$$

即 $\sqrt{17.52} \approx 4.185$

2. $n = 2$ 的情况

线性插值只利用两对值 (x_0, y_0) 及 (x_1, y_1) 求得 $y = f(x)$ 的近似值, 误差较大。我们设想再利用一对值来求 $y = f(x)$ 的近似值, 结果比线性插值可能好些。设已知函数 $y = f(x)$ 在点 x_0, x_1, x_2 上的值 y_0, y_1, y_2 要求一个多项式 $y = p_2(x)$, 使 $p_2(x_i) = y_i (i = 0, 1, 2)$ 。其几何意义就是通过三点 $A(x_0, y_0), B(x_1, y_1), C(x_2, y_2)$ 作一曲线。若三点不在一直线上, 通过三点的曲线就是抛物线。它是一个二次方程, 其一般形式为

$$p_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 \quad (1.2)$$

这里 a_0, a_1, a_2 为待定系数, 可由曲线 $y = p_2(x)$ 通过 A, B, C 三点的三元一次联立方程求得。这就需求联立方程的解, 计算较复杂。事实上, 二次多项式 $p_2(x)$ 并不一定要写成式 (1.2) 的形式, 它可根据给定条件写成更便于计算的形式。比如拉格朗日形式

$$p_2(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2$$

其中:

$$l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

则:

$$p_2(x_0) = y_0, p_2(x_1) = y_1, p_2(x_2) = y_2$$

$p_2(x)$ 是 x 的二次函数, 称为二次插值多项式。通过三点的插值问题称为二次插值或抛物插值。

3. 一般情况

我们看到, 两个插值点可求出一一次插值多项式 $p_1(x)$, 而三个插值点可求出二次插值多项式 $p_2(x)$ 。当插值点增加到 $n + 1$ 个时, 我们可以利用 Lagrange 插值方法写出 n 次插值多项式 $p_n(x)$, 如下所示:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n y_k l_k(x) = \sum_{k=0}^n \left(\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right) y_k$$

n 次插值多项式 $p_n(x)$ 是 $n + 1$ 个插值基函数的线性组合, 其组合系数就是对应点上的函数值。插值基函数 $l_i(x) (i = 0, 1, \dots, n)$, 只在 x_i 点取值为 1, 在其他插值节点取值为 0, 这使得它易于构造。根据它有 n 个零点, 可知它为 n 个一次因式的乘积 $A \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x - x_j)$, 根据它在 x_i 点

取值为 1, 确定它的常数 $A = \frac{1}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)}$, 最后得到插值基函数 $l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$ 。

利用 Lagrange 次插值多项式 $p_n(x)$, 在计算机上很容易计算给定点 x 的函数值 y 。

Lagrange 插值算法如下:

```

input  $x, (x_i, y_i), i = 0, 1, \dots, n$ .
 $0 \Rightarrow y, 0 \Rightarrow k$ 
L:  $1 \Rightarrow t$ 
 $\frac{x - x_j}{x_k - x_j} t \Rightarrow t, j = 0, \dots, n, j \neq k$ 
 $y + ty_k \Rightarrow y$ 
if  $k \neq n$  then  $k + 1 \Rightarrow k, \text{goto L}$ 
output  $y$ .
```

[例 2] 已知 $f(-1) = 2, f(1) = 1, f(2) = 1$, 求 $f(x)$ 的 Lagrange 插值多项式。

解: 设 $x_0 = -1, x_1 = 1, x_2 = 2$

$$l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 1)(x - 2)}{(-1 - 1)(-1 - 2)} = \frac{1}{6}(x^2 - 3x + 2)$$

$$l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x + 1)(x - 2)}{(1 + 1)(1 - 2)} = -\frac{1}{2}(x^2 - x - 2)$$

$$l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x + 1)(x - 1)}{(2 + 1)(2 - 1)} = \frac{1}{3}(x^2 - 1)$$

$$\begin{aligned} p_2(x) &= l_0(x)2 + l_1(x) + l_2(x) \\ &= \frac{2}{6}(x^2 - 3x + 2) - \frac{1}{2}(x^2 - x - 2) + \frac{1}{3}(x^2 - 1) \\ &= \frac{1}{6}(x^2 - 3x + 8) \end{aligned}$$

1.2 牛顿插值公式

Lagrange 插值公式结构紧凑, 思路清晰。但当插值节点个数有所变动时, Lagrange 插值基函数 $l_i(x) (i = 0, 1, \dots, n)$ 就要随之发生变化, 这在计算实践中是不方便的。Newton 与 Lagrange 不同, 他将插值公式设计为递推形式。即

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + a_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})$$

由于 $p_n(x_i) = p_{n-1}(x_i) = f(x_i) (i = 0, 1, \dots, n-1)$, 再由 $p_n(x_n) = f(x_n) \Rightarrow a_n$, 从而得到满足插值条件的多项式 $p_n(x)$ 。

考虑 $n = 1$ 的情况下: 根据插值条件, 插值函数 $p_1(x)$ 应满足 $p_1(x_1) = f(x_1) = y_1$, 所以

$$y_1 = y_0 + a_1(x_1 - x_0)$$

$$a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

$$\begin{aligned} p_1(x) &= p_0(x) + a_1(x - x_0) \\ &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) \end{aligned}$$

考虑 $n = 2$ 的情况:

$$p_2(x) = p_1(x) + a_2(x - x_0)(x - x_1)$$

利用 $p_2(x_2) = y_2$ 的条件, 可推出

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{y_2 - p_1(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \left(y_2 - \left(y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0) \right) \right) \frac{1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{\frac{y_2 - y_0}{x_2 - x_0} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1} \end{aligned}$$

以上我们分别给出了 $a_i (i = 1, 2)$ 的计算公式, 但并没有建立两者的联系。下面对 $a_i (i = 1, 2)$ 进一步分析, 从中找出规律性的东西。公式中出现的分式 $\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}, \frac{y_2 - y_0}{x_2 - x_0}$, 实际上是函数增量与自变量增量之比, 也就是函数 $y = f(x)$ 在相应区间 $(x_0, x_1), (x_0, x_2)$ 的平均变化率, 我们称它为 $f(x)$ 的一阶差商。用

$$f(x_0, x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$

$$f(x_0, x_2) = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} = \frac{y_2 - y_0}{x_2 - x_0}$$

表示。其一般形式为

$$f(x_i, x_j) = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j} \quad (i \neq j)$$

这样, $a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = f(x_0, x_1)$, 就可以用差商的形式表示了。

由于 $a_2 = \frac{\frac{y_2 - y_0}{x_2 - x_0} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1}$, 实际上就是一阶差商的差商, 用

$$f(x_0, x_1, x_2) = \frac{f(x_0, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_1}$$

表示, 其一般形式为

$$f(x_i, x_j, x_k) = \frac{f(x_i, x_j) - f(x_j, x_k)}{x_i - x_k} \quad (i \neq k)$$

称为 $f(x)$ 的二阶差商。

差商具有对称性, 即各阶差商与点的排列次序无关, 这一性质从差商定义即可推出。

$$f(x_i, x_j) = f(x_j, x_i)$$

$$\begin{aligned} f(x_i, x_j, x_k) &= \frac{f(x_i, x_j) - f(x_j, x_k)}{x_i - x_k} \\ &= \frac{1}{x_i - x_k} \left[\frac{f(x_i)}{x_i - x_j} + \frac{f(x_j)}{x_j - x_i} - \frac{f(x_j)}{x_j - x_k} - \frac{f(x_k)}{x_k - x_j} \right] \\ &= \frac{f(x_i)}{(x_i - x_k)(x_i - x_j)} + \frac{f(x_j)}{(x_j - x_i)(x_j - x_k)} + \frac{f(x_k)}{(x_k - x_i)(x_k - x_j)} \\ &= f(x_j, x_k, x_i) = f(x_k, x_i, x_j) \end{aligned}$$

我们定义 $(n-1)$ 阶差商的差商为 $f(x)$ 的 n 阶差商:

$$f(x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{f(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) - f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{x_0 - x_n}$$

对于差商的对称性质,证明如下:

$k=1$ 时,由一阶差商定义,

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

故 $k=1$ 是对的;假定 $k=n-1$ 成立,则 $k=n$ 时,有

$$\begin{aligned} f(x_0, x_1, \dots, x_n) &= \frac{f(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}) - f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{x_0 - x_n} \\ &= \frac{1}{x_n - x_0} \left[\sum_{k=1}^n \frac{f(x_k)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{f(x_k)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n-1} (x_k - x_j)} \right] \\ &= \frac{1}{x_n - x_0} \left[\sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{f(x_k)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)} - \frac{f(x_k)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n-1} (x_k - x_j)} \right) + \frac{f(x_n)}{\prod_{j=1}^{n-1} (x_n - x_j)} - \frac{f(x_0)}{\prod_{j=1}^{n-1} (x_0 - x_j)} \right] \\ &= \frac{1}{x_n - x_0} \left[\sum_{k=1}^{n-1} \frac{(x_k - x_0) - (x_k - x_n)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)} f(x_k) \right] + \frac{f(x_n)}{\prod_{j=0}^{n-1} (x_n - x_j)} + \frac{f(x_0)}{\prod_{j=1}^n (x_0 - x_j)} \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \frac{f(x_k)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)} + \frac{f(x_n)}{\prod_{j=0}^{n-1} (x_n - x_j)} + \frac{f(x_0)}{\prod_{j=1}^n (x_0 - x_j)} = \sum_{k=0}^n \frac{f(x_k)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)} \quad \text{证明完毕。} \end{aligned}$$

由于 $a_1 = f(x_0, x_1)$, $a_2 = f(x_0, x_1, x_2)$, 我们很容易猜想到 $a_3 = f(x_0, \dots, x_3)$ 。那么,猜想是否正确呢?根据 $P_3(x_3) = y_3$ 的条件,我们有

$$y_3 = p_2(x_3) + a_3(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)$$

$$a_3 = \frac{y_3 - p_2(x_3)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{y_3 - p_1(x_3) - a_2(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} \\
 &= \frac{y_3 - y_0 - f(x_1, x_0)(x_3 - x_0) - f(x_0, x_1, x_2)(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} \\
 &= \frac{f(x_0, x_3)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} - \frac{f(x_1, x_0)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} - \frac{f(x_0, x_1, x_2)}{(x_3 - x_2)} \\
 &= \frac{\frac{f(x_1, x_0)}{(x_1 - x_3)} - \frac{f(x_0, x_3)}{(x_1 - x_3)} - f(x_0, x_1, x_2)}{x_3 - x_2} \\
 &= \frac{f(x_1, x_0, x_3) - f(x_0, x_1, x_2)}{x_3 - x_2} \\
 &= \frac{f(x_2, x_1, x_0) - f(x_1, x_0, x_3)}{x_2 - x_3} \\
 &= f(x_2, x_1, x_0, x_3) \\
 &= f(x_0, x_1, x_2, x_3)
 \end{aligned}$$

我们的猜想得到了证实。

一般地, $a_n = f(x_0, x_1, \dots, x_n)$ 。

证明: $k = 2$ 时, $a_k = f(x_0, x_1, x_2)$ 成立。

假定 $k = n - 1$ 时成立, 对于插值节点 $x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_n$, 有插值多项式 $p'_{n-1}(x)$ 。注意, $p'_{n-1}(x)$ 的插值节点中没有 x_{n-1} , 而是换成了 x_n , 因此, 它与 $p_{n-1}(x)$ 是不同的插值多项式:

$$p'_{n-1}(x) = p_{n-2}(x) + f(x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_n)(x - x_0) \cdots (x - x_{n-2})$$

代入 $x = x_n$,

$$y_n = p'_{n-1}(x_n)$$

$$= p_{n-2}(x_n) + f(x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_n)(x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-2})$$

$$f(x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_n) = \frac{y_n - p_{n-2}(x_n)}{(x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-2})}$$

则 $k = n$ 时,

$$\begin{aligned}
 a_n &= \frac{y_n - p_{n-1}(x_n)}{(x_n - x_0)(x_n - x_1)\cdots(x_n - x_{n-1})} \\
 &= \frac{\frac{y_n - p_{n-2}(x_n)}{(x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-2})} - a_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} \\
 &= \frac{f(x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_n) - f(x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} \\
 &= \frac{f(x_{n-1}, x_0, x_1, \dots, x_{n-2}) - f(x_0, x_1, \dots, x_{n-2}, x_n)}{x_{n-1} - x_n} \\
 &= f(x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n)
 \end{aligned}$$

证明完毕。

在 $k = n$ 的证明中,我们首先利用了 Newton 插值公式的递推定义,然后根据归纳法假定,将 a_{n-1} 写成了差商的形式,再利用差商的对称性和定义完成了证明。

现在,我们已得到了 $a_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 的内在联系。它们就是 $f(x)$ 的各阶差商,从而 Newton 插值公式可以表示为

$$\begin{aligned}
 p_n(x) &= f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + \cdots \\
 &\quad + f(x_0, x_1, \dots, x_n)(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})
 \end{aligned}$$

Newton 插值公式计算非常方便。增加一个插值点,只要多计算一项,而 $p_n(x)$ 的各项系数恰好又是各阶差商值,很有规律。

为了做数值计算,常利用形式如表 1-2 所示的差商表。