计祘方法简编

西安交通大學
计算数学教研室编

一九七五年七月

前　言

电子数字计算机在我国已越来越广泛地应用于社会主义革命和建设的各个领城。为了在我校的教学、科研、生产中推广电子数字计算机的应用，以推动教育革命的发展，我们曾编印过一些有关程序设计语言方面的材料。近几年来的实践，使我们感到除了需要继续介绍有关程序设计和软件方面的知识之外，还必须努力介绍有关计算方法方面的知识，才能更有效地达到推广计算机应用的目的。因为，当企图应用电子数字计算机介决一个实际问题的过程中，一俟实际问题的数学模型（数学方程、关系式及其他数学方面的要求等）建立以后，如何选择恰当的近似算法（数值介法）作为以后程序设计的依据就成为一个必须介决的课题。计算方法正是提供了介决这个问题的手段。以上就是我们编印本书的动机。

本书旨在介绍一些一般的计算方法。试图帮助读者了解几类典型的数学问题有哪些常用的求数值介的方法。对介绍的每一个方法我们尽可能作简明解释，给出了相应的计算公式，和使用的条件，但是对算法本身并未给出严格的数学证明。考虑到读者进一步了解计算方法的需要，在每节后面的“参考资料”中列出了一些有关文献。

由于我们实践经验少，水平低，编写时又比较仓促，所以本书一定会有不少缺点和错误，希望同志们批评指正。

编　者

一九七五年七月

计 算 方 法 简 编

目　　录

1　差分、差商

1.1　差分的定义……1
1.2　差分的性质……2
1.3　差商的定义及性质……3

2　函数插值法

2.1　线性插值（一次插值）……4
2.2　拉格朗日插值多项式……4
2.3　差商插值多项式……5
2.4　拉格朗日插值多项式的余项……5
2.5　三角插值多项式……6
2.6　埃尔米特插值多项式……7

3　数值方程的逐次逼近解法

3.1　二分法……7
3.2　一般迭代法……8
3.3　牛顿法……9
3.4　简化牛顿法……9
3.5　弦位法……9
3.6　其它迭代法……10

4　高次代数方程的数值解

4.1　秦九韶算法……11
4.2　劈二次因子的算法……12
4.3　贝努利法及其变形……13
4.4　根的隔离……15

5　消去法解线代数方程组

5.1　唯一除法程序……21

5.2 主元素法……23
5.3 对称情形的唯一除法程序……24

6 迭代法解线代数方程组

6.1 简单迭代法……24
6.2 塞德尔迭代法……26
6.3 化为便于迭代的形式……26

7 求逆矩阵

7.1 唯一除法程序求逆矩阵……28
7.2 分块法求逆矩阵……29
7.3 三角矩阵求逆……30
7.4 对称正定矩阵求逆（分解法）……31

8 求矩阵的特征值和特征向量

8.1 雅可比方法……32
8.2 化为三对角线形式……35
8.3 幂方法……37

9 样条插值

9.1 基本方程组……39
9.2 各种边界条件……40
9.3 三对角线方程组的解法……41

10 最小二乘法与曲线拟合

10.1 用最小二乘法求数据的曲线拟合……43
10.2 用广义多项式的最小二乘法……43
10.3 带权的最小二乘法，连续型的最小二乘法……44
10.4 用正交多项式的最小二乘法……45

11 一致逼近与函数值的计算

11.1 切比雪夫多项式……47
11.2 最优一致逼近多项式的判别条件和迭代解法……48
11.3 用接近于最优一致逼近的多项式近似计算函数值……49

12 数值微分法

12.1 等距节点的数值微分公式……53
12.2 用插值公式推出数值微分公式……54

13 数值积分法

13.1 等距节点的数值积分公式……55
13.2 求积公式的复化……56
13.3 线性求积公式……56
13.4 旁义积分的数值积分公式……58

14 常微分方程初值问题的数值解法

14.1 数值积分方法……59
14.2 龙格—库塔方法……62
14.3 一阶方程组的数值解法……64
14.4 高阶方程的数值解法……65

15 常微分方程边值问题的数值解法

15.1 线性边值问题化为初值问题求解……67
15.2 差分法……67
15.3 非线性常微分方程的数值解法……69

16 椭园型偏微分方程的差分解法

16.1 二阶椭园型偏微分方程及边界条件的差分逼近……70
16.2 各种迭代解法……72
16.3 高阶方程及非线性方程举例……73

17 抛物型偏微分方程的差分解法

17.1 几种简单的差分格式及其使用说明……75
17.2 其它差分格式举例……77

18 双曲型偏微分方程的差分解法

18.1 线性双曲型方程的差分解法……78
18.2 解拟线性双曲型方程的特征线法简介……81

19 积分方程的数值解法

19.1 弗雷德霍姆积分方程的数值解法……83
19.2 伏尔特拉积分方程的数值解法……85
19.3 奇异积分方程的数值解法……87
19.4 特征值问题，对称核……89

20 有限元方法

20.1 弹性力学中的某些基本方程……91

20.2 平面应力问题解法……95
20.3 轴对称问题解法……98

21 线性规划问题的单纯形法

21.1 标准形式及一些基本概念……100
21.2 单纯形法……102
21.3 对偶问题……105

22 多元回归分析

22.1 多元线性回归……106
22.2 正交化回归……108
22.3 逐步回归……111

23 快速富里叶变换

23.1 快速富里叶变换算法……113
23.2 实序列的变换、卷积……116

24 托布里兹矩阵求逆

24.1 托布里兹矩阵求逆的算法……118
24.2 解托布里兹型线代数方程组……120

25 非线性代数方程组的近似解法

25.1 一般迭代法……121
25.2 牛顿法……122
25.3 不计算偏导数$\frac{\partial F_i}{\partial x_j}$的迭代法……124

26 非线性最优化问题的解法

26.1 无约束极小化问题及解法……125
26.2 一维极小化问题……127
26.3 序列无约束极小化技术……128
26.4 可行方向法……130

27 外推法

27.1 多项式外推……131
27.2 数值积分……133
27.3 常微分方程数值解……135
27.4 一种有理式外推法……137

1 差分、差商

1.1 差分的定义 把函数 $f(x)$ 在一串点

$$a,\ a+h,\ a+2h,\ \cdots,\ a+nh$$

上的函数值

$$f(a),\ f(a+h),\ f(a+2h),\ \cdots,\ f(a+nh)$$

简记为

$$f_0,\ f_1,\ f_2,\ \cdots,\ f_n;$$

把相邻两数相减，得

$$f_1-f_0,\ f_2-f_1,\ f_3-f_2,\ \cdots,\ f_n-f_{n-1},$$

简记为

$$\triangle f_0,\ \triangle f_1,\ \triangle f_2,\ \cdots,\ \triangle f_{n-1},$$

称为一阶差分。类似地，称

$$\triangle^2 f_0=\triangle f_1-\triangle f_0,\ \triangle^2 f_1=\triangle f_2-\triangle f_1,\ \cdots,\ \triangle^2 f_{n-2}=\triangle f_{n-1}-\triangle f_{n-2}$$

为二阶差分，称

$$\triangle^3 f_0=\triangle^2 f_1-\triangle^2 f_0,\ \triangle^3 f_1=\triangle^2 f_2-\triangle^2 f_1,\ \cdots$$

为三阶差分，等等。一般情形，如果

$$\triangle^i f_0,\ \triangle^i f_1,\ \triangle^i f_2,\ \cdots$$

是 i 阶差分，则

$$\triangle^{i+1} f_0=\triangle^i f_1-\triangle^i f_0,\ \triangle^{i+1} f_1=\triangle^i f_2-\triangle^i f_1,\ \cdots$$

为 $i+1$ 阶差分。又 h 称为差分的**步长**，步长可正可负。

上述的差分实际上是"向前差分"，是常用的一种差分；此外还有：

① **向后差分** 记

$$f_{-1}=f(a-h),\ f_{-2}=f(a-2h),\ \cdots;$$

则各阶向后差分定义如下：

一阶： $\nabla f_0=f_0-f_{-1},\ \nabla f_1=f_1-f_0,\ \nabla f_2=f_2-f_1,\ \cdots;$

二阶： $\nabla^2 f_0=\nabla f_0-\nabla f_{-1},\ \nabla^2 f_1=\nabla f_1-\nabla f_0,\ \nabla^2 f_2=\nabla f_2-\nabla f_1,\ \cdots;$

三阶： $\nabla^3 f_0=\nabla^2 f_0-\nabla^2 f_{-1},\ \nabla^3 f_1=\nabla^2 f_1-\nabla^2 f_0,\ \cdots$。

又 $\nabla f_{-1}=f_{-1}-f_{-2},\ \nabla f_{-2}=f_{-2}-f_{-3},\ \nabla^2 f_{-1}=\nabla f_{-1}-\nabla f_{-2}$ 等等。

② **中心差分** 记

$$f_{1/2}=f\left(a+\frac{1}{2}h\right),\ f_{3/2}=f\left(a+\frac{3}{2}h\right),\ f_{-1/2}=f\left(a-\frac{1}{2}h\right),$$

等等；则各阶中心差分定义如下：

一阶： $\delta f_0=f_{1/2}-f_{-1/2},\ \delta f_1=f_{3/2}-f_{1/2},\ \cdots$

二阶： $\delta^2 f_0=\delta f_{1/2}-\delta f_{-1/2},\ \delta^2 f_1=\delta f_{3/2}-\delta f_{1/2},\ \cdots$

又 $\delta f_{1/2}=f_1-f_0,\ \delta f_{-1/2}=f_0-f_{-1},\ \delta f_{3/2}=f_2-f_1$ 等等。

各种差分的一般定义式为：

$$\triangle^{i+1}f_k=\triangle^i f_{k+1}-\triangle^i f_k$$
$$\nabla^{i+1}f_k=\nabla^i f_k-\nabla^i f_{k-1},$$
$$\delta^{i+1}f_k=\delta^i f_{k+1/2}-\delta^i f_{k-1/2}。$$

1.2 差分的性质

① 设 $f(x)=\alpha u(x)+\beta v(x)$，其中 α，β 为常数；则

$$\triangle^i f_k=\alpha\triangle^i u_k+\beta\triangle^i v_k;$$

即在函数 $f(x)$ 可拆为两部分的和时，$f(x)$ 的任意阶差分等于这两部分的同阶差分的和，并且常数因子可以提到差分号的外面。这个性质称为**线性性质**，与下面的导数公式类似：

$$[\alpha u(x)+\beta v(x)]^{(i)}=\alpha u^{(i)}(x)+\beta v^{(i)}(x),$$

右上角的(i)表示求 i 阶导数。

② **计算各阶差分的公式** 已知函数值 f_0，f_1，…，求m阶差分的公式如下：

$$\triangle^m f_0=\sum_{j=0}^{m}(-1)^j\binom{m}{j}f_{m-j},$$

其中

$$\binom{m}{j}=\frac{m!}{j!(m-j)!}=\frac{m(m-1)(m-2)\cdots(m-j+1)}{1\cdot 2\cdot 3\cdots j}$$

是二项式定理

$$(a+b)^m=\sum_{j=0}^{m}\binom{m}{j}a^{m-j}b^j$$

的系数（$\binom{m}{j}$ 也记作C_m^j）。

[例] $\triangle^2 f_0=f_2-2f_1+f_0$,

$\triangle^3 f_0=f_3-3f_2+3f_1-f_0$,

$\triangle^4 f_0=f_4-4f_3+6f_2-4f_1+f_0$，等等。

如果要求 $\triangle^m f_k$，只要把 $\triangle^m f_0$ 的公式中 f 的下标全部加 k 即可，例如

$$\triangle^2 f_1=f_3-2f_2+f_1,\quad \triangle^3 f_k=f_{3+k}-3f_{2+k}+3f_{1+k}-f_k,$$

等等。

③ **用各阶差分计算函数值** 计算公式为：

$$\boxed{\begin{aligned}f_m&=\sum_{j=0}^{m}\binom{m}{j}\triangle^j f_0\\&=f_0+m\triangle f_0+\frac{m(m-1)}{1\cdot 2}\triangle^2 f_0+\frac{m(m-1)(m-2)}{1\cdot 2\cdot 3}\triangle^3 f_0+\cdots+\triangle^m f_0\end{aligned}}$$

[例] 求自然数的平方和

$$S_m=1^2+2^2+\cdots+m^2,$$

用上述公式：

$$S_m=S_0+m\triangle S_0+\frac{m(m-1)}{1\cdot 2}\triangle^2 S_0+\frac{m(m-1)(m-2)}{1\cdot 2\cdot 3}\triangle^3 S_0+\cdots$$

由计算得

$S_k=1^2+2^2+\cdots+k^2$，$S_0=0$，

$\triangle S_k=S_{k+1}-S_k=(k+1)^2$，$\triangle S_0=1$，

$\triangle^2 S_k=\triangle S_{k+1}-\triangle S_k=(k+2)^2-(k+1)^2=2k+3$，$\triangle^2 S_0=3$，

$\triangle^3 S_k=2(k+1)+3-(2k+3)=2$，$\triangle^3 S_0=2$，

$\triangle^4 S_k=2-2=0$，$\triangle^5 S_k=\triangle^6 S_k=\cdots=0$。

$$\therefore\quad S_m=0+m\cdot 1+\frac{m(m-1)}{1\cdot 2}\cdot 3+\frac{m(m-1)(m-2)}{1\cdot 2\cdot 3}\cdot 2+0+0+\cdots$$

$$=\frac{m(m+1)(2m+1)}{6}。$$

④ **各种差分之间的联系** 向后差分和中心差分都能化为向前差分：

$$\nabla^m f_k=\triangle^m f_{k-m},$$

$$\delta^m f_k=\triangle^m f_{k-m/2}。$$

[例] $\nabla^2 f_3=\nabla f_3-\nabla f_2=(f_3-f_2)-(f_2-f_1)=f_3-2f_2+f_1$

$\triangle^2 f_{3-2}=\triangle^2 f_1=f_3-2f_2+f_1$

$$\therefore\quad \nabla^2 f_3=\triangle^2 f_{3-2}\quad(m=2,\ k=3)。$$

1.3 差商的定义及性质 设有函数 $f(x)$ 以及自变量的一系列互不相等的值

$$x_0,\ x_1,\ x_2,\ \cdots\cdots,\ x_n$$

（即在 $i\neq j$ 时有 $x_i\neq x_j$）。称

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

为一阶差商（或一阶均差），并记作 $f(x_i,\ x_j)$。又称

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

为二阶差商，类似地可定义高阶差商。

各阶差商都有线性性质，并且有对称性，即

$$f(x_i,\ x_j)=\frac{f(x_i)-f(x_j)}{x_i-x_j}$$

$$=\frac{f(x_j)-f(x_i)}{x_j-x_i}=f(x_j,\ x_i),$$

$$f(x_i,\ x_j,\ x_k)=f(x_j,\ x_i,\ x_k)=f(x_i,\ x_k,\ x_j)=\cdots\cdots。$$

如果序列 x_0，x_1，x_2，$\cdots$，x_n 是等距的，并且步长为 h，即 $x_1=x_0+h$，$x_2=x_0+2h$，$\cdots$，$x_n=x_0+nh$，则 m 阶差商与 m 阶差分有如下的联系：

$$f(x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_m)=\frac{\triangle^m f_0}{m!h^m},$$

例如 $f(x_0,\ x_1)=\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=\dfrac{\Delta f_0}{h}$，$f(x_0,\ x_1,\ x_2)=\dfrac{\triangle^2 f_0}{2!h^2}$，等等。

设 $f(x)=x^m$（正整指数 m）；则 k 阶差商 $f(x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_k)$ 当 $k=m$ 时结果为 1，当 $k>m$ 时结果为 0。和 k 阶导数对比，k 阶差商相当于 k 阶导数除以 $k!$。当 $k=m$ 时，$f(x)=x^m$ 的 k 阶导数等于 $k!$，除以 $k!$ 得 1；当 $k>m$ 时，$f(x)=x^m$ 的 k 阶导数等于 0。事实上可以证明：

$$f(x_0, x_1, \cdots, x_k)=\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!},$$

其中 ξ 是 x_0，x_1，…，x_k 的最大值和最小值之间的某一个值。

如果 x_0，x_1，…，x_n 是等距的并且步长为 h；则 k 阶差分与 k 阶导数有如下的联系：

$$\frac{\triangle^k f_0}{h^k}=f^{(k)}(\xi), \quad (k\leqslant n)$$

其中 ξ 是 x_0 和 x_0+kh 之间的某一个值。

参 考 资 料

中国科学院计算技术研究所编，计算方法讲义，科学出版社，(1958)。

2 函数插值法

2.1 线性插值（一次插值） 已知函数 $y=f(x)$ 在 x_0，x_1 处的值分别为 y_0，y_1，则通过两点 (x_0, y_0) 与 (x_1, y_1) 的直线方程为

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

上式右边是 x 的一次多项式，记为 $p_1(x)$。利用一次式 $p_1(x)$ 来近似计算 $f(x)$ 的值称为**线性插值**，即

$$f(x)\approx y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0),$$

其中 x_0，x_1，y_0，y_1 为已知，把 x 的值代入上式右边便得函数 $f(x)$ 的近似值。

如果已知函数 $y=f(x)$ 在 $n+1$ 个点 x_0，x_1，…，x_n 处的值分别为 y_0，y_1，…，y_n，并假定 x_0，x_1，…，x_n 已从小到大排好次序，即 $x_0<x_1<\cdots<x_n$。设 x 在 x_0 与 x_n 之间，要近似计算 $f(x)$，可先检查这个 x 在下列区间

$$[x_0, x_1], [x_1, x_2], \cdots, [x_{n-1}, x_n]$$

的那个区间中，如果 x 在区间 $[x_{i-1}, x_i]$ 中，则用公式

$$f(x)\approx y_{i-1}+\frac{y_i-y_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}(x-x_{i-1})$$

这样处理在几何意义上就是把 $n+1$ 个点 (x_0, y_0)，(x_1, y_1)，…，(x_n, y_n) 顺次连接成的**折线**近似代替原来的曲线 $y=f(x)$。

上式可写成如下的对称形式：

$$\boxed{f(x)\approx\frac{x-x_i}{x_{i-1}-x_i}y_{i-1}+\frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}y_i}$$

2.2 拉格朗日插值多项式 已知函数 $y=f(x)$ 在 $n+1$ 个互不相同的点 x_0，x_1，…，x_n 处的值分别为 y_0，y_1，…，y_n，作次数不超过 n 的多项式 $L_n(x)$，使满足

$$L_n(x_0)=y_0, \ L_n(x_1)=y_1, \ \cdots, \ L_n(x)=y_n \qquad (A)$$

即 n 次抛物线 $y=L_n(x)$ 通过 $(n+1)$ 个点 $(x_0,\ y_0)$，…，$(x_n,\ y_n)$；则有

$$\boxed{L_n(x)=\sum_{j=0}^{n}\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}y_j}$$

［例］ $L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1$，

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2,$$

$$L_3(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}y_1$$
$$+\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}y_2+\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}y_3。$$

在次数不超过 n 的多项式的全体中，满足条件(A)的多项式只有一个，这个多项式可以写成上面的 $L_n(x)$的形式，但也可以写成别的形式（形式不同而彼此恒等）。

2.3 差商插值多项式 可以用差商来把拉格朗日插值多项式 $L_n(x)$ 改写成

$$\boxed{\begin{aligned}p_n(x)=f(x_0)+f(x_0,\ x_1)(x-x_0)+f(x_0,\ x_1,\ x_2)(x-x_0)(x-x_1)+\cdots\\ +f(x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\end{aligned}}$$

［例］ $p_1(x)=f(x_0)+f(x_0,\ x_1)(x-x_0)$

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

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

$$p_2(x)=f(x_0)+f(x_0,\ x_1)(x-x_0)+f(x_0,\ x_1,\ x_2)(x-x_0)(x-x_1)$$

$$=y_0+\frac{y_0-y_1}{x_0-x_1}(x-x_0)+\frac{\frac{y_0-y_1}{x_0-x_1}-\frac{y_1-y_2}{x_1-x_2}}{x_0-x_2}(x-x_0)(x-x_1)。$$

注意 $p_1(x)\equiv L_1(x)$，$p_2(x)\equiv L_2(x)$。

2.4 拉格朗日插值多项式的余项 称 $f(x)-L_n(x)$为拉格朗日插值多项式的余项，由于 $L_n(x)$与差商插值多项式 $p_n(x)$恒等，所以也是差商插值多项式的余项。首先有如下的公式：

$$f(x)-L_n(x)=f(x)-p_n(x)$$
$$=f(x,\ x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$

其中 $f(x,\ x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n)$是 $n+1$ 阶差商。

在实际计算中，因 $f(x)$正是要近似计算的值，故 $n+1$ 阶差商 $f(x,\ x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n)$ 是未知数，但如还有一点 x_{n+1}（不同于 x_0，x_1，…，x_n）为已知，即 $y_{n+1}=f(x_{n+1})$ 为已知，则可算出 $n+1$ 阶差商 $f(x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n,\ x_{n+1})$，由差商的对称性，这个值等于 $f(x_{n+1},\ x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n)$，并且用来近似替代 $f(x,\ x_0,\ x_1,\ \cdots,\ x_n)$，这样可以估计余项 $f(x)-L_n(x)$。

如果 $f(x)$ 有 $n+1$ 阶导数，则有余项

$$f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

其中ξ是区间$[x_0, x_n]$中的某一个值。

如果$f(x)$的$n+1$阶导数$f^{(n+1)}(x)$在区间$[x_0, x_n]$的绝对值的最大值或上界为M_{n+1}(常数)，即设

$$|f^{(n+1)}(x)|\leqslant M_{n+1}。$$

则有余项估计：

$$|f(x)-L_n(x)|\leqslant\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|。$$

[**例**] 设$f(x)=\sin x$，则$f'(x)=\cos x$，$f''(x)=-\sin x$，等等，对任意n，$|f^{(n+1)}(x)|\leqslant 1$，即$M_{n+1}=1$。

2.5 三角插值多项式 称

$$\boxed{\begin{aligned}T_n(x)=a_0+(a_1\cos x+b_1\sin x)+(a_2\cos 2x+b_2\sin 2x)\\+\cdots+(a_n\cos nx+b_n\sin nx)\end{aligned}}$$

为n阶三角多项式。

设有$2n+1$个互不相同的点x_0，x_1，x_2，…，x_{2n}，并且任意两点的相差不能是2π的整数倍数，已知函数$y=f(x)$的对应值为y_0，y_1，y_2，…，y_{2n}。则满足下列条件

$$T_n(x_0)=y_0,\ T_n(x_1)=y_1,\ \cdots,\ T_n(x_{2n})=y_{2n}$$

的n阶三角多项式$T_n(x)$为：

$$T_n(x)=\sum_{j=0}^{2n}\frac{\sin\frac{x-x_0}{2}\cdots\sin\frac{x-x_{j-1}}{2}\sin\frac{x-x_{j+1}}{2}\cdots\sin\frac{x-x_{2n}}{2}}{\sin\frac{x_j-x_0}{2}\cdots\sin\frac{x_j-x_{j-1}}{2}\sin\frac{x_j-x_{j+1}}{2}\cdots\sin\frac{x_j-x_{2n}}{2}}y_j$$

[**例**] $n=1$时得

$$T_1(x)=\frac{\sin\frac{x-x_1}{2}\sin\frac{x-x_2}{2}}{\sin\frac{x_0-x_1}{2}\sin\frac{x_0-x_2}{2}}y_0+\frac{\sin\frac{x-x_0}{2}\sin\frac{x-x_2}{2}}{\sin\frac{x_1-x_0}{2}\sin\frac{x_1-x_2}{2}}y_1+\frac{\sin\frac{x-x_0}{2}\sin\frac{x-x_1}{2}}{\sin\frac{x_2-x_0}{2}\sin\frac{x_2-x_1}{2}}y_2。$$

当$f(x)$为周期等于2π的周期函数时，可以考虑用上述的三角多项式插值。

如果$f(x)$为周期等于2π的周期函数，并且$f(x)$是偶函数，即函数$f(x)$满足关系式$f(-x)=f(x)$，也即曲线$y=f(x)$的图形对称于y轴，已知$n+1$个点x_0，x_1，…，x_n互不相等并且任意两点的和、差都不等于2π的整数倍数($x_i\pm x_j\neq 2k\pi$，$i\neq j$，k是整数)，又已知函数$f(x)$的对应值y_0，y_1，…，y_n。则满足下列条件

$$T_n(x_0)=y_0,\ T_n(x_1)=y_1,\ \cdots,\ T_n(x_n)=y_n$$

的n阶偶三角多项式为

$$T_n(x)=\sum_{j=0}^{n}\frac{(\cos x-\cos x_0)\cdots(\cos x-\cos x_{j-1})(\cos x-\cos x_{j+1})\cdots(\cos x-\cos x_n)}{(\cos x_j-\cos x_0)\cdots(\cos x_j-\cos x_{j-1})(\cos x_j-\cos x_{j+1})\cdots(\cos x_j-\cos x_n)}y_j。$$

类似地，如果$f(x)$是奇函数，即$f(-x)=-f(x)$，也即曲线$y=f(x)$对称于坐标原点，已知n个点x_1，x_2，…，x_n及其对应的函数值y_1，y_2，…，y_n。又除x_1，x_2，…，x_n满足上述偶函数情形的条件外，还要求各点x_i都不是π的整数倍数。则满足下列条件

$$T_n(x_1)=y_1,\ T_n(x_2)=y_2,\ \cdots,\ T_n(x_n)=y_n$$

的 n 阶奇三角多项式为

$$T_n(x)=\sum_{j=1}^{n}\frac{(\cos x-\cos x_1)\cdots(\cos x-\cos x_{j-1})(\cos x-\cos x_{j+1})\cdots(\cos x-\cos x_n)}{(\cos x_j-\cos x_1)\cdots(\cos x_j-\cos x_{j-1})(\cos x_j-\cos x_{j+1})\cdots(\cos x_j-\cos x_n)}\cdot\frac{\sin x}{\sin x_j}y_j\text{。}$$

2.6 埃尔米特插值多项式 已知函数 $y=f(x)$ 在 n 个互不相等的点 x_1，x_2，…，x_n 处的对应函数值 y_1，y_2，…，y_n 以及对应的导数值 y_1'，y_2'，…，y_n'；则次数不超 $2n-1$ 并且满足下列条件

$$f(x_1)=y_1,\ f(x_2)=y_2,\ \cdots,\ f(x_n)=y_n,$$
$$f'(x_1)=y_1',\ f'(x_2)=y_2',\ \cdots,\ f'(x_n)=y_n'$$

的多项式为

$$\boxed{p_{2n-1}(x)=\sum_{j=1}^{n}[1-2w_j'(x_j)(x-x_j)]w_j^2(x)y_j+\sum_{j=1}^{n}(x-x_j)w_j^2(x)y_j'}$$

其中

$$w_j(x)=\frac{(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)},\quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ n\text{。}$$

［**例**］ $n=2$ 时，满足下列条件

$$f(x_1)=y_1,\ f(x_2)=y_2,\ f'(x_1)=y_1,\ f'(x_2)=y_2$$

并且次数不超过 3 的多项式为

$$p_3(x)=\left[1-2\cdot\frac{x-x_1}{x_1-x_2}\right]\left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\right)^2y_1+\left[1-2\cdot\frac{x-x_2}{x_2-x_1}\right]\left(\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)^2y_2$$
$$+(x-x_1)\left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\right)^2y_1'+(x-x_2)\left(\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)^2y_2'\text{。}$$

如果 $f(x)$ 在点 x_1，x_2，…，x_n 的最小值与最大值之间有 $2n$ 阶导数，则余项有

$$f(x)-p_{2n-1}(x)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}[(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)]^2,$$

其中 ξ 是 x_1，…，x_n 的最小值与最大值之间的某一个值。

参 考 资 料

中国科学院计算数学研究所编，计算方法讲义，科学出版社，(1958)。

清华、北大编，计算方法，上册，科学出版社，(1974)。

3 数值方程的逐次逼近解法

3.1 二分法 求解数值方程

$$f(x)=0,$$

如果$f(x)$是x的连续函数，并且$f(x)$在区间$[a, b]$的两端的函数值$f(a)$和$f(b)$异号（一正一负），由连续函数的性质，方程$f(x)=0$在区间$[a, b]$中一定有实根。可以用下述的方法来逐次逼近一个实根，把区间$[a, b]$二等分，分点（即区间中点）为$\frac{1}{2}(a+b)$。计算函数值$f\left(\frac{a+b}{2}\right)$，如碰巧$f\left(\frac{a+b}{2}\right)=0$，就得到方程的一个实根$\frac{a+b}{2}$，否则，函数值$f\left(\frac{a+b}{2}\right)$或者与$f(a)$异号，或者与$f(b)$异号。前一种情形取$a_1=a, b_1=\frac{a+b}{2}$，后一种情形取$a_1=\frac{a+b}{2}$，$b_1=b$，于是得到一个长度只有原来的一半的区间$[a_1, b_1]$，而函数$f(x)$在这个区间的两端的函数值仍异号。再把区间$[a_1, b_1]$二等分，计算函数值$f\left(\frac{a_1+b_1}{2}\right)$，等等，重复上述过程，经过$n$步后得到区间$[a_n, b_n]$，方程在这个区间中一定有实根，取区间$[a_n, b_n]$的中点$\frac{1}{2}(a_n+b_n)$作为方程的一个根$x^*$的近似值，则误差不超过原区间长度的$\frac{1}{2^{n+1}}$，即

$$\left|x^*-\frac{1}{2}(a_n+b_n)\right|\leqslant\frac{1}{2^{n+1}}(b-a)。$$

这个方法称为二分法。

3.2 一般迭代法 求解数值方程

$$x=\varphi(x),$$

如果$\varphi(x)$满足下列条件：

① $\varphi(x)$在某一区间(a, b)中一阶导数的绝对值的最大值或上界为M_1，并且M_1是小于1的正常数，即设

$$|\varphi'(x)|\leqslant M_1<1;$$

② 自变量x在区间(a, b)中任意取值时计算所得的函数值$\varphi(x)$仍在区间(a, b)中；则方程$x=\varphi(x)$在区间(a, b)中有唯一的实根x^*，这个根可用如下的迭代法来逐次逼近：在区间(a, b)中任意选取一个初值x_0，顺次计算$x_1=\varphi(x_0)$，$x_2=\varphi(x_1)$，$x_3=\varphi(x_2)$，…，即

$$x_{i+1}=\varphi(x_i), \qquad i=0, 1, 2, \cdots。$$

当$i\to\infty$时有$x_i\to x^*$。这个方法称为一般迭代法，从初值x_0出发经n步迭代得近似解x_n，误差可用下述方法之一来估计：

① 用最新的两步迭代值x_n和x_{n-1}，得

$$|x^*-x_n|\leqslant\frac{M_1}{1-M_1}|x_n-x_{n-1}|;$$

② 用初值x_0和第一步迭代值x_1，得

$$|x^*-x_n|\leqslant\frac{M_1^n}{1-M_1}|x_1-x_0|;$$

③ $$|x^*-x_n|\leqslant M_1^n|x^*-x_0|\leqslant M_1^n(b-a)。$$

［注］ 如果能选到初值x_0，迭代一次得x_1，使左端点为$x_0-\frac{1}{1-M_1}|x_1-x_0|$与右端点为$x_0+\frac{1}{1-M_1}|x_1-x_0|$的区间$\left[x_0-\frac{1}{1-M_1}|x_1-x_0|, x_0+\frac{1}{1-M_1}|x_1-x_0|\right]$包含在区间$(a,b)$中，则条件②就能够成立。另一种情况，如果条件①的不等式对任意x都成立，即区间

(a, b)成为无限区间$(-\infty, \infty)$；则条件②自然成立。

3.3 牛顿法 求解数值方程 $f(x)=0$，如果 $f(x)$ 的一阶导数和二阶导数在某一区间 (a, b)中定号（即恒大于0或恒小于0），即有以下四种情形之一：

$$\begin{cases} f'(x)>0 \\ f''(x)>0 \end{cases} \quad \begin{cases} f'(x)>0 \\ f''(x)<0 \end{cases} \quad \begin{cases} f'(x)<0 \\ f''(x)>0 \end{cases} \quad \begin{cases} f'(x)<0 \\ f''(x)<0 \end{cases}$$

如果还有条件：$f(x)$在区间(a, b)的两端的函数值异号，则选取一个端点作为初值 x_0，所选的端点要使它的函数值与二阶导数 $f''(x)$ 同号，作迭代 $x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$，$x_2=x_1-\frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$等等，即

$$\boxed{x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i=0, 1, 2, \cdots;}$$

则当 $i\to\infty$时有 $x_i\to x^*$，x^* 是方程 $f(x)=0$ 在区间(a, b)中的唯一解。这个方法称为**牛顿法**或**切线法**。

[注] 上述迭代公式可以看做方程

$$x=\varphi(x) \qquad \left(\varphi(x)\equiv x-\frac{f(x)}{f'(x)}\right)$$

的一般迭代法公式，因此还可以用上段的判别迭代收敛的条件以及误差估计式，其中

$$\varphi'(x)=\frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}。$$

3.4 简化牛顿法 求解数值方程 $f(x)=0$，假定有上段一样的条件成立，并用同样的方法选取初值 x_0，但作迭代（与上段不同）$x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$，$x_2=x_1-\frac{f(x_1)}{f'(x_0)}$，等等，即

$$\boxed{x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_0)}, \quad i=0, 1, 2, \cdots;}$$

则所得的序列 x_i 也收敛于方程的唯一解 x^*。这个方法称为**简化牛顿法**，也可以看做方程

$$x=\varphi(x) \qquad \left(\varphi(x)\equiv x-\frac{f(x)}{f'(x_0)}\right)$$

的一般迭代法。

[注] 如果 $f(x)$ 的一、二阶导数不满足前一段的条件(即不能在所考虑的区间中定号)，则判别收敛的条件较复杂。条件为：

① 设 $f(x)$ 在某一区间(a, b)中二阶导数的绝对值的最大值或上界为 M_2，即 $|f''(x)|\leqslant M_2$，并且选取初值 x_0 使满足

$$M_2\cdot\left|\frac{f(x_0)}{[f'(x_0)]^2}\right|\leqslant\frac{1}{2};$$

② 迭代序列 x_0，x_1，x_2，…，都在区间(a, b)中，则牛顿法和简化牛顿法都收敛于方程 $f(x)=0$ 的解。

这时也不要求 $f(x)$在区间(a, b)的两端函数值异号。

3.5 弦位法 从第 i 步迭代值 x_i 计算第$i+1$步迭代值 x_{i+1}，牛顿法是通过点$(x_i, f(x_i))$

作曲线 $y=f(x)$ 的切线，求切线和 x 轴（即 $y=0$）的交点，得 x_{i+1}，简化牛顿法的第一步迭代和牛顿法相同，即过 $(x_0, f(x_0))$ 作切线，但以后各步不是作切线而是作第一步的切线的平行线。弦位法的特点是通过曲线 $y=f(x)$ 的两点作弦（两点的连线），求弦与 x 轴的交点。弦位法分两种，一种是普通弦位迭代，另一种是快速弦位迭代。

设 $f(x)$ 的一、二阶导数在某一区间 (a, b) 中定号，又 $f(x)$ 在区间 (a, b) 的两端函数值异号，选取一个端点使它的函数值与二阶导数 $f''(x)$ 同号，这个端点作为 x_0，另一端点作为 x_1，顺次计算 $x_2=x_1-\dfrac{f(x_1)(x_1-x_0)}{f(x_1)-f(x_0)}$，$x_3=x_2-\dfrac{f(x_2)(x_2-x_0)}{f(x_2)-f(x_0)}$，等等，即

$$\boxed{x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)(x_i-x_0)}{f(x_i)-f(x_0)},\qquad i=1,\ 2,\ 3,\ \cdots;}$$

则当 $i\to\infty$ 时有 $x_i\to x^*$（x^* 是方程 $f(x)=0$ 在区间 (a, b) 中的唯一解）。这是普通弦位迭代，也可看作方程

$$x=\varphi(x)\qquad\left(\varphi(x)\equiv x-\frac{f(x)(x-x_0)}{f(x)-f(x_0)}\right)$$

的一般迭代法公式。

在上述的同样条件下，同样方法选取初值 x_0，但 x_1 按牛顿法计算，以后顺次计算

$$x_2=x_1-\frac{f(x_1)(x_1-x_0)}{f(x_1)-f(x_0)},\quad x_3=x_2-\frac{f(x_2)(x_2-x_1)}{f(x_2)-f(x_1)},$$

等等，即

$$\begin{cases} x_1=x_0-\dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)} \\ x_{i+1}=x_i-\dfrac{f(x_i)(x_i-x_{i-1})}{f(x_i)-f(x_{i-1})},\qquad i=1,\ 2,\ 3,\ \cdots; \end{cases}$$

则这个迭代同样收敛于 x^*，称为快速弦位迭代法。

快速弦位迭代法比普通弦位迭代法和简化牛顿法都快得多，只比牛顿法慢些，但它有不用计算导数值的优点。

3.6 其他迭代法 列举求解数值方程 $f(x)=0$ 的若干迭代法公式如下，以便选用。

① $$x_{i+1}=x_i-\lambda f(x_i),\qquad i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,$$

其中 λ 是某一个常数，在一些情况下，适当选取 λ 可使上述迭代收敛于方程的解。设对 $f(x)$ 的一阶导数有如下的估计式：

$$m\leqslant f'(x)\leqslant M,$$

如果 m 与 M 同号，选取 $\lambda=\dfrac{2}{m+M}$，把这里的迭代看做

$$x=\varphi(x)\qquad(\varphi(x)\equiv x-\lambda f(x))$$

的一般迭代法，则有

$$|\varphi'(x)|\leqslant\left|\frac{M-m}{M+m}\right|<1,$$

即一般迭代法收敛条件①能满足。

② $$x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}-\frac{1}{2}\cdot\frac{[f(x_i)]^2f''(x_i)}{[f'(x_i)]^3},\qquad i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,$$

这个迭代公式比牛顿法多一项，计算较复杂，如果初值 x_0 选得好（一般要求是尽量靠近方程的解 x^*），则迭代收敛并且比牛顿法快。

③ **抛物线法** 取初值 x_0 后，用牛顿法或弦位法或其他方法算得 x_1，x_2，然后过三点 $(x_0,\ f(x_0))$，$(x_1,\ f(x_1))$，$(x_2,\ f(x_2))$ 作抛物线，一般情形这抛物线和 x 轴有两个交点，取靠近 x_2 的一个交点为 x_3，以后再用 x_1，x_2，x_3 同样地计算 x_4，等等，即从二次方程

$$\left[\frac{f(x_{i-2})-f(x_i)}{x_{i-2}-x_i}-\frac{f(x_{i-1})-f(x_i)}{x_{i-1}-x_i}\right](\Delta x_i)^2$$
$$+\left[(x_{i-2}-x_i)\frac{f(x_{i-1})-f(x_i)}{x_{i-1}-x_i}-(x_{i-1}-x_i)\frac{f(x_{i-2})-f(x_i)}{x_{i-2}-x_i}\right]\Delta x_i$$
$$+f(x_i)(x_{i-2}-x_{i-1})=0$$

解出 Δx_i，取绝对值较小的根，作

$$x_{i+1}=x_i+\Delta x_i;$$

这个过程从 $i=2$ 开始做，$i=2$，3，4，…。

参 考 资 料

西安交大计算数学教研室编，计算方法（一），(1973)。

4 高次代数方程的数值解

求系数 a_j 为实数的高次代数方程（即多项式方程）

$$f(x)\equiv a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0=0 \qquad (a_n\neq 0)$$

的解，除了用上述的数值方程逐次逼近解法外，还有很多利用多项式性质的其它解法。

4.1 **秦九韶算法** 这是把 n 次多项式 $f(x)$ 展开成为 $x-x_0$（x_0 为已知数值）的多项式的方法：

$$f(x)=b_n(x-x_0)^n+b_{n-1}(x-x_0)^{n-1}+\cdots+b_1(x-x_0)+b_0,$$

即从原来的系数 a_i ($i=0\sim n$) 求新系数 b_i ($i=0\sim n$)，后者实际上就是多项式 $f(x)$ 在 x_0 处的泰勒展开式的系数：

$$b_i=\frac{f^{(i)}(x_0)}{i!},\qquad i=0\sim n$$

算法如下：首先用公式

$$a_n^{(1)}=a_n,\ a_j^{(1)}=a_j+a_{j+1}^{(1)}x_0,\qquad (j=n-1,\ n-2,\ \cdots,\ 0)$$

顺次算出 $a_n^{(1)}$，$a_{n-1}^{(1)}$，…，$a_1^{(1)}$，$a_0^{(1)}$，这样实际上完成了 $f(x)$ 除以 $x-x_0$ 的运算。其中，商式为 $a_n^{(1)}x^{n-1}+a_{n-1}^{(1)}x^{n-2}+\cdots+a_1^{(1)}$，余数为 $a_0^{(1)}$，故得 $b_0=a_0^{(1)}$。

第二步再把 $a_n^{(1)}x^{n-1}+a_{n-1}^{(1)}x^{n-2}+\cdots+a_1^{(1)}$ 除以 $x-x_0$，具体用公式

$$a_n^{(2)}=a_n^{(1)},\ a_j^{(2)}=a_j^{(1)}+a_{j+1}^{(2)}x_0,\qquad (j=n-1,\ n-2,\ \cdots,\ 1)$$

顺次算出 $a_n^{(2)}$，$a_{n-1}^{(2)}$，…，$a_1^{(2)}$，得 $b_1=a_1^{(2)}$。

第 i 步是用公式