

科学版

大学工科数学学习指导系列

计算方法 学习指导

陈延梅 吴勃英 金承日 编

- 精心辅导课程学习
- 训练数学思想与技能
- 展示数学方法与技巧

大学工科数学学习指导系列

计算方法学习指导

陈延梅 吴勃英 金承日 编
高广宏 审

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书包括误差理论、插值与逼近、数值积分、非线性方程的数值解法、常微分方程初值问题数值解法、线性方程组的直接解法、线性方程组的迭代解法共七章。每章分为四部分:第一部分是内容要点,对“计算方法”的基本理论进行了系统的归纳;第二部分是题型分析与解题方法,对各类典型问题及其求解技巧做了详细分析,并给出了详尽的求解过程;第三部分是具有代表性的综合复习题;第四部分给出了部分复习题的参考答案。

本书可作为理工科本科生“计算方法”课程的学习指导书,也可供工科硕士生及工程技术人员学习“数值分析”参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法学习指导/陈延梅,吴勃英,金承日编. —北京:科学出版社,2003
(大学工科数学学习指导系列)

ISBN 7-03-011199-0

I. 计… II. ①陈… ②吴… ③金… III. 计算方法-高等学校-解题
IV. O241-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 013253 号

责任编辑:钟 谊/责任校对:曹锐军

责任印制:刘秀平/封面设计:黄华斌 陈 敬

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双 青 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2003年6月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2003年6月第一次印刷 印张:13 1/2

印数:1—5 000 字数:262 000

定价:20.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈双青〉)

前 言

本书根据全国高等院校理工科本科生“计算方法”课程教学大纲系统地归纳了“计算方法”的基本理论,对解题技巧与方法进行了详细的阐述.

“计算方法”这门课程内容丰富,理论完整,具有广泛的实际意义.该课程处理问题的方法不同于其他数学课程,学生很难从原有的连续型数学框架步入数值方法.为了帮助学习“计算方法”的读者更好地掌握这门课程的基本理论,灵活运用它的思想方法,做到触类旁通,提高分析、解决问题的能力,我们结合多年的教学经验,编写了这部学习指导书.

本书每章内容都由四部分组成.第一部分归纳了“计算方法”的基本内容.第二部分选编了大量的典型例题,并对每道题进行了详细的分析与解答,力图介绍分析方法的方法与解题技巧,提高读者分析问题和解决问题的能力,使读者更有效地掌握“计算方法”的基本原理.第三部分配备了一定数量的复习题,供读者自测使用和参考.第四部分给出了复习题的参考答案.

由于编者水平有限,难免出现某些疏漏,甚至错误,恳请广大读者批评指正.

编 者

2002 年 12 月于哈尔滨工业大学

目 录

第一章 误差理论	(1)
一、内容要点	(1)
二、题型分析与解题方法	(2)
三、综合复习题	(7)
四、复习题答案	(7)
第二章 插值与逼近	(8)
一、内容要点	(8)
二、题型分析与解题方法	(15)
三、综合复习题	(50)
四、复习题答案	(53)
第三章 数值积分	(56)
一、内容要点	(56)
二、题型分析与解题方法	(59)
三、综合复习题	(86)
四、复习题答案	(87)
第四章 非线性方程的数值解法	(88)
一、内容要点	(88)
二、题型分析与解题方法	(93)
三、综合复习题	(111)
四、复习题答案	(112)
第五章 常微分方程初值问题数值解法	(114)
一、内容要点	(114)
二、题型分析与解题方法	(117)
三、综合复习题	(143)
四、复习题答案	(145)
第六章 线性方程组的直接解法	(147)
一、内容要点	(147)
二、题型分析与解题方法	(152)
三、综合复习题	(176)
四、复习题答案	(178)

第七章 线性方程组的迭代解法	(180)
一、内容要点	(180)
二、题型分析与解题方法	(182)
三、综合复习题	(206)
四、复习题答案	(207)
参考文献	(208)

第一章 误差理论

在研究算法的同时,必须注重误差分析,使建立起来的算法科学有效.

一、内容要点

1. 误差

(1)误差的来源

(2)绝对误差、相对误差和有效数字

① 绝对误差

假设某一量的准确值为 x , 其近似值为 x^* , 则称 $\epsilon(x) = x - x^*$ 为近似数 x^* 的绝对误差.

② 绝对误差限

如果 $|\epsilon(x)| = |x - x^*| \leq \eta$, 则称 η 为近似值 x^* 的绝对误差限.

③ 相对误差

称 $\epsilon_r(x) = \frac{\epsilon(x)}{x} = \frac{x - x^*}{x}$ 为近似值 x^* 的相对误差.

在实际问题中常取 $\epsilon_r^*(x) = \frac{\epsilon(x)}{x^*} = \frac{x - x^*}{x^*}$ 为近似值 x^* 的相对误差.

④ 相对误差限

如果 $|\epsilon_r(x)| \leq \delta$, 则称 δ 为近似值 x^* 的相对误差限.

⑤ 有效数字

设准确值 x 的近似值 x^* 可表示为

$$x^* = \pm (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + a_3 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n+1}) \times 10^m$$

其中 m 是整数, $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 是 0 到 9 之间的一个数字, 且 $a_1 \neq 0$, 如果

$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$, 则称近似值 x^* 具有 n 位有效数字.

⑥ 有效数字与相对误差的联系

定理 1 若近似数 $x^* = \pm (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + a_3 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n+1}) \times 10^m$ 具有 n 位有效数字, 则其相对误差满足

$$|\epsilon_r^*(x)| \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

定理 2 若近似数 $x^* = \pm (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + a_3 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n+1}) \times 10^m$ 的相对误差满足

$$|\epsilon_r^*(x)| \leq \frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1}$$

则 x^* 具有 n 位有效数字.

2. 数值计算中应注意的一些问题

- (1) 要使用数值稳定的算法.
- (2) 要避免两个相近的数相减.
- (3) 要避免除数的绝对值远小于被除数的绝对值.
- (4) 要防止大数“吃掉”小数的现象.
- (5) 注意简化运算步骤, 减少运算次数.

二、题型分析与解题方法

例 1 问 3.142, 3.141, $\frac{22}{7}$ 分别作为 π 的近似值各具有几位有效数字?

分析 利用有效数字的概念可直接得出.

解 $\pi = 3.141\ 592\ 65\cdots$

记 $x_1 = 3.142$, $x_2 = 3.141$, $x_3 = \frac{22}{7}$.

由 $\pi - x_1 = 3.141\ 59\cdots - 3.142 = -0.000\ 40\cdots$ 知

$$\frac{1}{2} \times 10^{-4} < |\pi - x_1| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

因而 x_1 具有 4 位有效数字.

由 $\pi - x_2 = 3.141\ 59\cdots - 3.141 = 0.000\ 59\cdots$ 知

$$\frac{1}{2} \times 10^{-3} < |\pi - x_2| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

因而 x_2 具有 3 位有效数字.

由 $\pi - \frac{22}{7} = 3.141\ 59\cdots - 3.142\ 85\cdots = -0.001\ 26\cdots$ 知

$$\frac{1}{2} \times 10^{-3} < \left| \pi - \frac{22}{7} \right| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

因而 x_3 具有 3 位有效数字.

例 2 已知近似数 x^* 有两位有效数字, 试求其相对误差限.

分析 本题显然应利用有效数字与相对误差的关系.

解 利用有效数字与相对误差的关系. 这里 $n=2$, a_1 是 1 到 9 之间的数字.

$$|\epsilon_r^*(x)| = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \leq \frac{1}{2 \times 1} \times 10^{-2+1} = 5\%$$

例 3 已知近似数的相对误差限为 0.3%, 问 x^* 至少几位有效数字?

分析 本题利用有效数字与相对误差的关系.

解 a_1 是 1 到 9 间的数字.

$$\varepsilon_r^*(x) = 0.3\% = \frac{3}{1000} < \frac{1}{2 \times 10^2} = \frac{1}{2 \times (9+1)} \times 10^{-1} \leq \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-1}$$

设 x^* 具有 n 位有效数字, 令 $-n+1 = -1$, 则 $n=2$, 从而 x^* 至少具有 2 位有效数字.

例 4 计算 $\sin 1.2$, 问要取几位有效数字才能保证相对误差限不大于 0.01%.

分析 本题应利用有效数字与相对误差的关系.

解 设取 n 位有效数字. 由 $\sin 1.2 = 0.93\cdots$, 故 $a_1 = 9$.

$$\varepsilon_r^*(x) = \frac{|x - x^*|}{|x^*|} \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \leq 0.01\% = 10^{-4}$$

解不等式 $\frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1} \leq 10^{-4}$ 知取 $n=4$ 即可满足要求.

例 5 计算 $\frac{1}{759} - \frac{1}{760}$, 视已知数为精确值, 用 4 位浮点数计算.

$$\text{解 } \frac{1}{759} - \frac{1}{760} = 0.1318 \times 10^{-2} - 0.1316 \times 10^{-2} = 0.2 \times 10^{-5}$$

结果只有一位有效数字, 有效数字大量损失, 造成相对误差的扩大, 若通分后再计算:

$$\frac{1}{759} - \frac{1}{760} = \frac{1}{759 \times 760} = \frac{1}{0.5768 \times 10^6} = 0.1734 \times 10^{-5}$$

就得到 4 位有效数字的结果.

此例说明, 在数值计算中, 要特别注意两相近数作减法运算时, 有效数字常会严重损失, 遇到这种情况, 一般采取两种办法: 第一, 应多保留几位有效数字; 第二, 将算式恒等变形, 然后再进行计算. 例如, 当 x 接近于 0, 计算 $\frac{1 - \cos x}{\sin x}$ 时, 应先把算式变形为

$$\frac{1 - \cos x}{\sin x} = \frac{1 - \cos^2 x}{\sin x (1 + \cos x)} = \frac{\sin x}{1 + \cos x}$$

再计算. 又例如, 当 x 充分大时, 应作变换

$$\sqrt{1+x} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{1+x} + \sqrt{x}}$$

$$\frac{1}{x} - \frac{1}{x+1} = \frac{1}{x(x+1)}$$

例 6 计算 $a = (\sqrt{2} - 1)^6$, 取 $\sqrt{2} \approx 1.4$, 采用下列算式计算:

$$(1) \frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6};$$

$$(2) 99 - 70\sqrt{2};$$

$$(3) (3 - 2\sqrt{2})^3;$$

$$(4) \frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}.$$

问哪一个得到的结果最好?

解 显然

$$\begin{aligned} a &= (\sqrt{2}-1)^6 = \frac{(\sqrt{2}-1)^6(\sqrt{2}+1)^6}{(\sqrt{2}+1)^6} = \frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6} \\ (\sqrt{2}-1)^6 &= [(\sqrt{2}-1)^2]^3 = (3-2\sqrt{2})^3 = 99-70\sqrt{2} \\ (\sqrt{2}-1)^6 &= \frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6} = \frac{1}{[(\sqrt{2}+1)^2]^3} = \frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3} \end{aligned}$$

所以(1)≡(2)≡(3)≡(4),这4个算式是恒等的,但当取 $\sqrt{2} \approx 1.4$ 计算时,因为(2),(3)都涉及到两个相近数相减,使有效数字损失,而(1)在分母算式上的乘幂数比算式(4)大,所以算式(4)最好,事实上,当取 $\sqrt{2} \approx 1.4$ 时,有 $|\Delta x| < 0.015$,再由 $f(x)$ 的误差 $|f(x+\Delta x) - f(x)| \approx |f'(1.4)| |\Delta x|$ 也可直接估计出每个算式的误差,显然,算式(4)误差最小.

具体计算可得:

$$\begin{aligned} (1) \frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6} &\approx 5.2 \times 10^{-3}; \\ (2) 99-70\sqrt{2} &\approx 1.0; \\ (3) (3-2\sqrt{2})^3 &\approx 8.0 \times 10^{-3}; \\ (4) \frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3} &\approx 5.1 \times 10^{-3}. \end{aligned}$$

比较可得用第(4)个算式所得的结果更接近于 a .

例7 求二次方程 $x^2 - (10^9+1)x + 10^9 = 0$ 的根.

解 由于 $x^2 - (10^9+1)x + 10^9 = (x-10^9)(x-1)$,所以方程的两个根分别为

$$x_1 = 10^9, \quad x_2 = 1$$

但如果应用一般二次方程 $ax^2 + bx + c = 0$ 的求根公式:

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

由于当遇到 $b^2 \gg 4|ac|$ 的情形时,有 $|b| \approx \sqrt{b^2 - 4ac}$,则用上述公式求出的两个根中,总有一个因用了两个相近的近似数相减而严重不可靠.如本例若在能将规格化的数表示到小数点后8位的计算机上进行计算,则 $-b = 10^9 + 1 = 0.1 \times 10^{10} + 0.000\,000\,0001 \times 10^{10}$,由于第二项最后两位数“01”在机器上表示不出来,故它在上式的计算中不起作用,即在计算机运算时, $-b = 10^9$.

通过类似的分析可得

$$\sqrt{b^2 - 4ac} \approx |b| = 10^9$$

所以,求得两个根分别为

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \approx \frac{10^9 + 10^9}{2} = 10^9$$

$$x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \approx \frac{10^9 - 10^9}{2} = 0$$

显然,根 x_2 是严重失真的.

为了求得可靠的结果,可以利用根与系数的关系式: $x_1 x_2 = \frac{c}{a}$, 在计算机上采用如下公式:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{-b - \operatorname{sgn}(b) \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \\ x_2 = \frac{c}{ax_1} \end{cases}$$

其中, $\operatorname{sgn}(b)$ 是 b 的符号函数, 当 $b \geq 0$ 时 $\operatorname{sgn}(b) = 1$; 当 $b < 0$ 时, $\operatorname{sgn}(b) = -1$. 显然, 上述求根公式避免了相近数相减的可能性.

例 8 当 N 充分大时, 如何计算

$$I = \int_N^{N+1} \frac{1}{1+x^2} dx$$

分析 函数 $\frac{1}{1+x^2}$ 的原函数已知, 我们自然考虑用 Newton-Leibniz 公式求这个定积分的值. 由于 N 很大, 这样会遇到两个相近的数相减, 因此, 应采用一些变换公式来避免这种情况.

解 若用定积分的 Newton-Leibniz 公式计算此题, 有 $\int_N^{N+1} \frac{dx}{1+x^2} = \arctan(N+1) - \arctan N$, 则当 N 充分大时, 因为 $\arctan(N+1)$ 和 $\arctan N$ 非常接近, 两者相减会使有效数字严重损失, 从而影响计算结果的精度, 这在数值计算中是要尽量避免的, 但是通过变换计算公式, 例如: 令 $\tan \theta_1 = N+1$, $\tan \theta_2 = N$, 则由

$$\tan(\theta_1 - \theta_2) = \frac{\tan \theta_1 - \tan \theta_2}{1 + \tan \theta_1 \tan \theta_2} = \frac{N+1 - N}{1 + (N+1)N} = \frac{1}{1 + (N+1)N}, \text{ 得}$$

$$\theta_1 - \theta_2 = \arctan(N+1) - \arctan N = \arctan \frac{1}{1 + (N+1)N}$$

就可以避免两相近数相减引起的有效数字损失, 从而得到较精确的结果. 所以, 当

N 充分大时, 用 $\int_N^{N+1} \frac{dx}{1+x^2} = \arctan \frac{1}{1+N+N^2}$ 计算积分的值较好.

例 9 计算积分 $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx \quad (n = 1, 2, \dots)$.

分析 数值计算中应采用数值稳定的算法,因此在建立算法时,应首先考虑它的稳定性.

解 利用分部积分法,有

$$\int_0^1 x^n e^{x-1} dx = \int_0^1 x^n d e^{x-1} = x^n e^{x-1} \Big|_0^1 - \int_0^1 e^{x-1} n x^{n-1} dx = 1 - n \int_0^1 x^{n-1} e^{x-1} dx$$

得递推公式:

$$I_n = 1 - n I_{n-1} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1)$$

$$I_0 = \int_0^1 x^0 e^{x-1} dx = 1 - \frac{1}{e}$$

利用公式(1)计算 I_n , 由于初值 I_0 有误差,不妨设求 I_0 的近似值 I_0^* 时有大小为 ϵ 的误差,即

$$I_0^* = I_0 + \epsilon$$

则由递推公式(1)得

$$I_1^* = 1 - I_0^* = 1 - I_0 - \epsilon = I_1 - \epsilon$$

$$I_2^* = 1 - 2I_1^* = 1 - 2I_1 + 2\epsilon = I_2 + 2!\epsilon$$

$$I_3^* = 1 - 3I_2^* = 1 - 3I_2 + 3 \times 2!\epsilon = I_3 - 3!\epsilon$$

$$I_4^* = 1 - 4I_3^* = 1 - 4I_3 + 4 \times 3!\epsilon = I_4 + 4!\epsilon$$

⋮

$$I_n^* = I_n + (-1)^n n! \epsilon$$

显然初始数据的误差 ϵ 是按 $n!$ 的倍数增长的,误差传播得很快,例如当 $n = 10$ 时, $10! \approx 3.629 \times 10^6$, $|I_{10}^* - I_{10}| = 10! \epsilon$, 这表明 I_{10} 时已把初始误差 ϵ 扩大了很多倍,从而 I_{10}^* 的误差已把 I_{10} 的真值淹没掉了,计算结果完全失真.

但如果递推公式(1)改成

$$I_{n-1} = \frac{1}{n} (I - I_n) \quad (n = k, k-1, \dots, 3, 2)$$

于是,在从后往前计算时, I_n 的误差减少为原来的 $\frac{1}{n}$, 所以,若取 n 足够大,误差逐步减小,显然,计算的结果是可靠的. 所以,在构造或选择一种算法时,必须考虑到它的数值稳定性问题,数值不稳定的算法是不能使用的.

例 10 为了使计算

$$y = 10 + \frac{3}{x-1} + \frac{4}{(x-1)^2} - \frac{6}{(x-1)^3}$$

的乘除法运算次数尽量地少,应将表达式改写为怎样的形式?

解 设 $t = \frac{1}{x-1}$, $y = 10 + (3 + (4-6t)t)t$.

在数值计算中,应注意简化运算步骤,减少运算次数,使计算量尽可能小.

三、综合复习题

1. 若 $x^* = 3587.64$ 是 x 的具有六位有效数字的近似值, 求 x 的绝对误差限.
2. 为使 $\sqrt{70}$ 的近似值的相对误差小于 0.1, 问查开方表时, 要取几位有效数字?
3. 利用四位数学用表求 $x = 1 - \cos 2^\circ$ 的近似值, 采用下面等式计算:
 - (1) $1 - \cos 2^\circ$
 - (2) $2\sin^2 1^\circ$

问哪一个结果较好?

4. 求方程 $x^2 - 56x + 1 = 0$ 的两个根, 使它至少具有四位有效数字 (已知 $\sqrt{783} \approx 27.982$).

5. 数列 $\{x_n\}_{n=0}^\infty$ 满足递推公式

$$x_n = 10x_{n-1} - 1 \quad (n = 1, 2, \dots)$$

若取 $x_0 = \sqrt{2} \approx 1.41$ (三位有效数字), 问按上述递推公式, 从 x_0 计算到 x_{10} 时误差有多大? 这个计算过程稳定吗?

6. 如果近似值 $x^* = \pm(a_1 + a_2 \times 10^{-1} + a_3 \times 10^{-2} + \dots + a_n \times 10^{-n+1}) \times 10^m$ 的相对误差限小于 $\frac{1}{2(a_1 + 1)} \times 10^{-n+1}$, 证明: 这个数具有 n 位有效数字.

四、复习题答案

1. 0.005
2. 取 3 位有效数字
3. (1) 有一位有效数字, (2) 有二位有效数字, 显然 (2) 式较好.
4. 用解二次代数方程 $ax^2 + bx + c = 0$ 的两个求根公式, 有

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{-b - \operatorname{sgn}(b) \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{56 + \sqrt{56^2 - 4}}{2} \\ &= 28 + \sqrt{783} \approx 55.983 \end{aligned}$$

$$x_2 = \frac{c}{ax_1} = \frac{1}{28 + \sqrt{783}} \approx \frac{1}{55.983} \approx 0.017863$$

$$5. 10^{10} \epsilon < 10^{10} \times \frac{1}{2} \times 10^{-2} = \frac{1}{2} \times 10^8.$$

显然, 误差积累很大, 按递推公式 $x_n = 10x_{n-1} - 1$, 求 x_{10} 时, 会把初始误差 ϵ 扩大 10^{10} 倍, 使计算精度受到严重影响, 因此, 这个计算过程不稳定.

第二章 插值与逼近

为了计算函数值或分析函数的性态,必须首先由实验或观测数据找出函数关系的一个近似表达式.插值与逼近就是用简单函数为各种离散数据建立连续的数学模型,使其既能达到精度要求,又使计算量尽可能小.插值与逼近理论是数值计算的最基本内容.

一、内容要点

(一)插值方法

1. 代数插值的概念

设函数 $y=f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上有定义,且已知它在 $[a, b]$ 上 $n+1$ 个互异点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 上的函数值为 $\{y_i\}_{i=0}^n$, 求一个次数 $\leq n$ 的多项式 $P_n(x)$, 满足条件

$$P_n(x_i) = y_i \quad (i = 0, 1, \cdots, n) \quad (2.1)$$

称这类问题为 n 次代数插值问题,称 $P_n(x)$ 为函数 $f(x)$ 的 n 次代数插值多项式,称点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为插值节点,称(2.1)为插值条件.

定理 2.1 满足条件(2.1)的 n 次代数插值多项式 $P_n(x)$ 是存在且惟一的.

Lagrange 插值多项式 $L_n(x)$ 和 Newton 插值多项式 $N_n(x)$ 是 n 次代数插值问题的解 $P_n(x)$ 的两种表示形式.

2. Lagrange 插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

其中 $l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$ 称为以 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为插值节点的 n 次 Lagrange 插值基函数.

定理 2.2 设 $L_n(x)$ 是过点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的 n 次 Lagrange 插值多项式,若 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上存在 $n+1$ 阶导数,则对任意给定的 $x \in [a, b]$, 总存在一点 $\xi \in (a, b)$ (依赖于 x), 使

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

3. Newton 插值多项式

(1) 差商的概念

称 $f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$ 为函数 $f(x)$ 在点 x_i, x_j 处的一阶差商.

称 $f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$ 为函数 $f(x)$ 在点 x_i, x_j, x_k 处的二阶差商.

一般地, 称 $f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}] - f[x_1, x_2, \dots, x_k]}{x_0 - x_k}$ 为函数 $f(x)$ 在点 $x_0, x_1, \dots, x_k$ 处的 k 阶差商.

规定 $f[x_i] = f(x_i)$ 为 $f(x)$ 在点 x_i 处的零阶差商.

(2) 差商的性质

1° n 次多项式 $P(x)$ 的 k 阶差商 $P[x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x]$, 当 $k \leq n$ 时是一个 $n - k$ 次多项式; 而当 $k > n$ 时恒等于 0.

2° 差商可表示为函数值的线性组合:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \sum_{i=0}^n \frac{1}{w'_{n+1}(x_i)} f(x_i)$$

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

3° 差商关于所含节点是对称的.

4° 设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有 n 阶导数, 则至少存在一点 $\xi \in (a, b)$, 使

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

(3) 差商表

(4) Newton 插值多项式

$$N_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$$

其余项为

$$R_n(x) = f(x) - N_n(x) = f[x_0, x_1, \dots, x_n, x](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

(5) 差分与等距节点插值公式

1° 差分记号

设与等距节点 $x_i = x_0 + ih (i = 0, 1, 2, \dots, n)$ 相应的函数值为 $f_i = f(x_i)$, 称 $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$ 为 $f(x)$ 在点 x_i 处的一阶向前差分.

称 $\Delta^2 f_i = \Delta(\Delta f_i) = \Delta f_{i+1} - \Delta f_i$ 为函数在点 x_i 处的二阶向前差分.

一般地, 称 $\Delta^m f_i = \Delta(\Delta^{m-1} f_i) = \Delta^{m-1} f_{i+1} - \Delta^{m-1} f_i (m = 2, 3, \dots)$ 为函数 $f(x)$ 在点 x_i 处的 m 阶向前差分.

规定 $\Delta^0 f_i = f_i$ 为 $f(x)$ 在点 x_i 处的零阶差分.

称 $\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$ 为 $f(x)$ 在点 x_i 处的一阶向后差分.

称 $\nabla^2 f_i = \nabla(\nabla f_i) = \nabla f_i - \nabla f_{i-1}$ 为 $f(x)$ 在点 x_i 处的二阶向后差分.

称 $\nabla^m f_i = \nabla(\nabla^{m-1} f_i) = \nabla^{m-1} f_i - \nabla^{m-1} f_{i-1}$ ($m = 2, 3, \dots$) 为 $f(x)$ 在点 x_i 处的 m 阶向后差分.

2° 等距节点的插值公式

Newton 向前插值公式

$$\begin{aligned} N_n(x) &= N_n(x_0 + th) \\ &= f_0 + \frac{t}{1!} \Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \dots + \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!} \Delta^n f_0 \end{aligned}$$

其余项为

$$R_n(x) = R_n(x_0 + th) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} t(t-1)\cdots(t-n) \cdot f^{(n+1)}(\xi)$$

Newton 向后插值公式

$$\begin{aligned} N_n(x) &= N_n(x_n + th) \\ &= f_n + \frac{t}{1!} \nabla f_n + \frac{t(t+1)}{2!} \nabla^2 f_n + \dots + \frac{t(t+1)\cdots(t+n-1)}{n!} \nabla^n f_n \end{aligned}$$

余项为

$$R_n(x) = R_n(x_n + th) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} t(t+1)\cdots(t+n) f^{(n+1)}(\xi)$$

4. 分段线性插值

设在区间 $[a, b]$ 上给定 $n+1$ 个插值节点

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$$

和相应的函数值 $y_0, y_1, \dots, y_n$, 求作一个插值函数 $\varphi(x)$, 具有性质

$$1^\circ \varphi(x_i) = y_i \quad (i=0, 1, \dots, n).$$

$$2^\circ \varphi(x) \text{ 在每个小区间 } [x_i, x_{i+1}] \quad (i=0, 1, \dots, n-1) \text{ 上是线性函数.}$$

5. Hermite 插值

设已知函数 $f(x)$ 在插值区间 $[a, b]$ 上 $n+1$ 个互异的节点 $x_0, x_1, \dots, x_n$ 上的函数值 $y_i = f(x_i)$ 及一阶导数值 $m_i = f'(x_i)$ ($i=0, 1, \dots, n$), 构造一个插值函数 $H_{2n+1}(x)$, 使满足条件

$$1^\circ H_{2n+1}(x) \text{ 是次数 } \leq 2n+1 \text{ 的多项式.}$$

$$2^\circ H(x_i) = y_i, \quad H'(x_i) = m_i \quad (i=0, 1, \dots, n) \quad (2.2)$$

称这类插值问题为 Hermite 插值问题.

定理 2.3 满足条件(2.2)的 Hermite 插值问题的解 H_{2n+1} 是存在且惟一的, 其表达式为

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^n [1 - 2l'_i(x_i)(x - x_i)] l_i^2(x) y_i + \sum_{i=0}^n (x - x_i) l_i^2(x) m_i$$

定理 2.4 若 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有 $2n+2$ 阶导数, 则对任意 $x \in [a, b]$, 总存在一点 $\xi \in (a, b)$, 使

$$f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} (x - x_0)^2 (x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2$$

6. 分段三次 Hermite 插值

设在区间 $[a, b]$ 上给定 $n+1$ 个插值节点

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$$

和相应的函数值 $y_i = f(x_i)$ 及导数值 $m_i = f'(x_i)$ ($i=0, 1, 2, \cdots, n$), 构造一个插值函数 $H(x)$, 满足条件

$$1^\circ H(x_i) = y_i, H'(x_i) = m_i \quad (i=0, 1, \cdots, n).$$

$$2^\circ \text{ 在每个子区间 } [x_i, x_{i+1}] \quad (i=0, 1, \cdots, n-1) \text{ 上是三次多项式.}$$

7. 三次样条插值

(1) 三次样条插值函数的概念

设在区间 $[a, b]$ 上取 $n+1$ 个节点

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$$

给定这些点上的函数值 $y_i = f(x_i)$.

若函数 $S(x)$ 满足条件:

$$1^\circ S(x_i) = y_i \quad (i=0, 1, 2, \cdots, n.)$$

$$2^\circ \text{ 在每个小区间 } [x_i, x_{i+1}] \quad (i=0, 1, \cdots, n-1) \text{ 上是一个三次多项式.}$$

$$3^\circ S(x) \in C^2[a, b].$$

则称 $S(x)$ 为三次样条插值函数.

(2) 常见的边界条件

$$1^\circ S'(a), S'(b) \text{ 取给定值.}$$

$$2^\circ S''(a), S''(b) \text{ 取给定值.}$$

$$3^\circ S^{(p)}(a+0) = S^{(p)}(b-0) \quad (p=0, 1, 2)$$

(二) 函数的平方逼近

1. 预备知识

(1) 内积

设 $f(x), g(x) \in C[a, b]$, 定义

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$$

称为函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的内积.