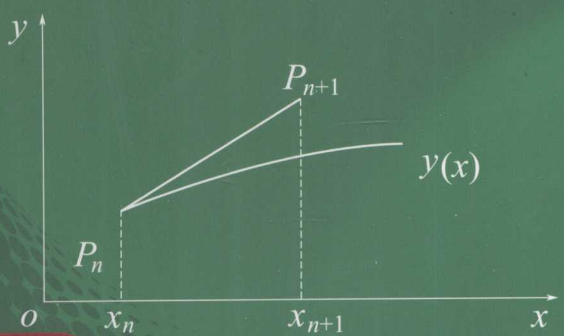
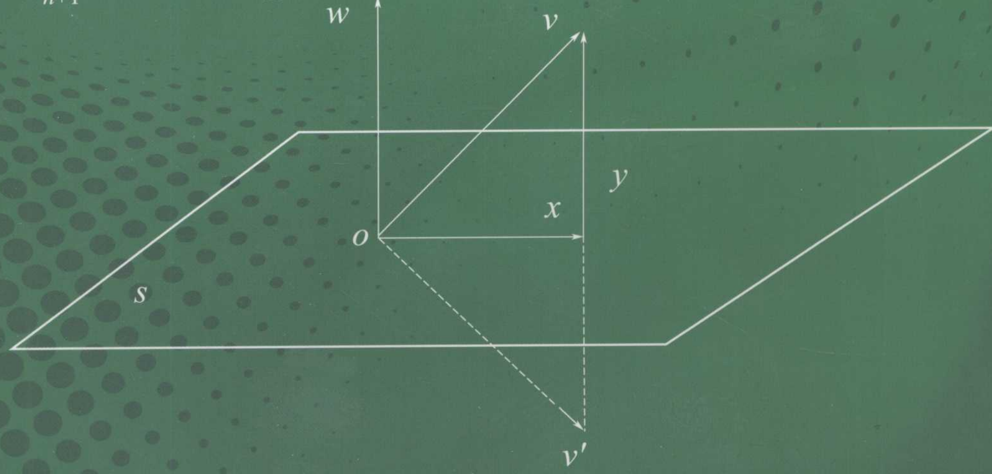
21世纪高等学校理工科数学规划教材

数值计算方法

◎ 宋岱才 黄 玮 潘 斌 赵晓颖 编著



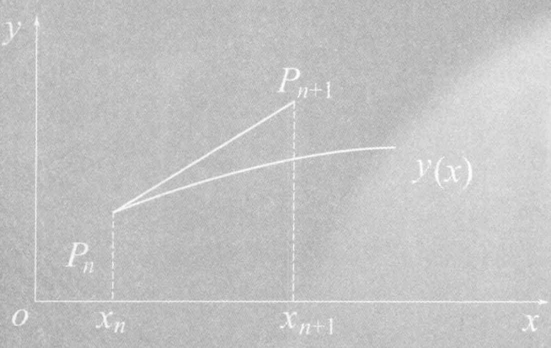


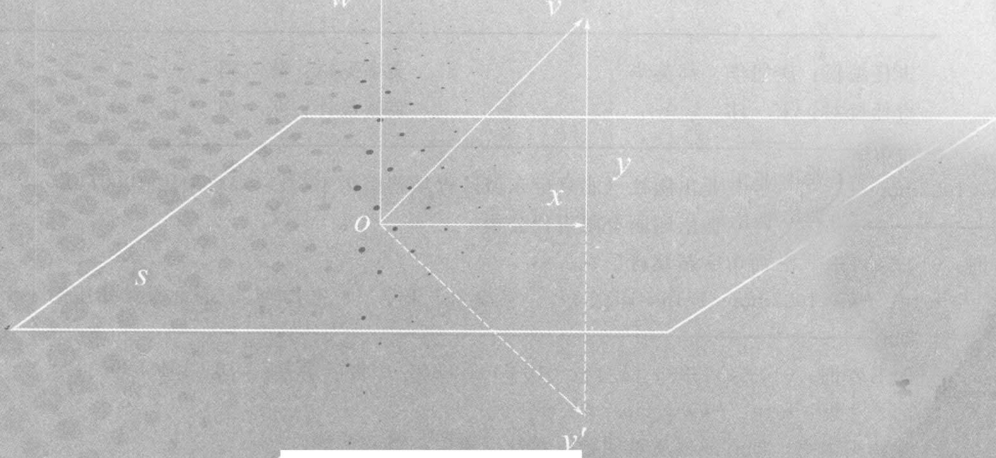
化学工业出版社

21世纪高等学校理工科数学规划教材

数值计算方法

宋岱才　黄玮　潘斌　赵晓颖　编著





化学工业出版社

·北京·

本书为大学教材，着重介绍了与实际应用有关的数值计算基本方法，强调基本概念、理论和应用，特别是数值计算方法在计算机上的实现. 以期学生在学完本书之后能够充分掌握这些方法，并能在计算机上进行有关的科学与工程计算.

全书共分 9 章，主要内容包括插值和逼近，数值积分和微分，解线性代数方程组的直接方法和迭代方法，解非线性方程的数值方法，代数特征值问题和常微分方程初值问题的计算方法. 各章配有一定数量的习题，书后附有习题答案和提示.

本书可作为理工科专业研究生和应用数学、物理、计算机等专业大学生数值分析课程的教材或教学参考书，也可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考.

图书在版编目（CIP）数据

数值计算方法/宋岱才等编著. —北京：化学工业出版社，2013.8

21 世纪高等学校理工科数学规划教材

ISBN 978-7-122-17805-3

Ⅰ. ①数… Ⅱ. ①宋… Ⅲ. ①数值计算-计算方法-高等学校-教材 Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2013）第 143389 号

责任编辑：唐旭华　郝英华　　文字编辑：陈　雨

责任校对：宋　玮　　装帧设计：张　辉

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街 13 号　邮政编码 100011）

印　　刷：北京市振南印刷有限责任公司

装　　订：三河市宇新装订厂

787mm×1092mm　1/16　印张 8¾　字数 225 千字　2013 年 10 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686）　售后服务：010-64518899

网　　址：http://www.cip.com.cn

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定　　价：19.00 元

前　言

随着计算机的迅速发展，开设数值分析课程的院校越来越普遍. 本书是在作者编写的《数值分析讲义》的基础上修订出版的. 该讲义在辽宁石油化工大学使用多年. 结合师生们反馈的意见，作者进行了多次的整理、订正，在此基础上形成了现在的《数值计算方法》.

学习本书必需的数学基础是微积分、线性代数和常微分方程等知识，这是一般理工科大学生都具备的. 全书设计讲授学时数为 64 学时左右. 如学时少于 64 学时，对目录中带 * 的章节可以少讲或不讲. 本书编写时已注意到各章节的独立性，删掉带 * 的章节不至于影响后面章节的学习.

本书共分 9 章. 内容包括：插值法和曲线拟合、数值积分和数值微分、常微分方程的数值解法、非线性方程的数值解法、线性方程组的直接解法和迭代解法、矩阵特征值问题的数值解法. 各章后均配有习题，书后还有习题答案和提示. 教师可配合布置习题，安排上机实习的教学环节.

全书由宋岱才教授统稿；黄玮教授提供了部分具体例题和习题；潘斌老师提供了全部绘图和部分习题；赵晓颖老师提供了大部分习题答案，并对书稿进行了审校. 刘晶老师、张钟元老师也为本书的编写做了很多工作. 李丽君老师使用了本书初稿，并提供了许多宝贵的建议和意见. 另外，辽宁石油化工大学教务处的老师对本书的出版做了许多积极的工作，这里一并表示感谢.

本书可作为理工科专业研究生和应用数学、物理、计算机等专业大学生数值分析课程的教材或教学参考书，也可供从事科学与工程计算的科技人员学习参考.

由于编者水平有限，书中的不当之处，恳请读者批评指正，以期修订时改进完善.

编　者

2013 年 6 月

目　录

第 1 章　绪论

1.1　数值分析的研究对象与特点

在计算机成为数值计算主要工具的今天，人们对适合于计算机的数值计算方法的需要就显得越来越重要．对于同一个计算问题，选择的计算方法不同所得结果就会有很大差别，当然人力，物力，财力等消耗也不尽相同．《数值分析》课程的主要内容就是研究如何较好的利用计算机求解数学问题的数值方法和理论．简称数值计算方法或数值分析．它是数学的一个重要分支，其内容不像纯数学那样只研究理论，而是着重研究求解的数值方法及相关理论．这些理论包括方法的收敛性，稳定性及误差分析．

数值分析课程所包含的内容：函数的数值逼近、数值积分和数值微分、数值线性代数、微分方程的数值解法等．本课程的特点是既有纯数学高度抽象性与严密科学性的特点，又有应用的广泛性与实际实验的高度技术性的特点，是一门与使用计算机密切结合的实用性很强的数学课程．

1.2　误差及误差分析的重要性

我们先来考察一下用计算机解决实际问题的主要过程：

实际问题 → 数学模型 → 数值计算方法 → 程序设计 → 计算机计算 → 结果

在以上的过程中可以产生下列误差．

模型误差：由实际问题转化为数学模型时产生的误差．

观测误差：通过对数据的观测所产生的误差．

截断误差（方法误差）：近似解与精确解之间的误差．

例如：$e^x = 1 + x + \dfrac{x^2}{2!} + \dfrac{x^3}{3!} + \cdots = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \dfrac{x^n}{n!}$．

若求 e^2，则有　$e^2 = 1 + 2 + \dfrac{2^2}{2!} + \dfrac{2^3}{3!} + \cdots$，由于不可能得到精确值，若取 $n = 4$，则 $e^2 \approx 1 + 2 + \dfrac{2^2}{2!} + \dfrac{2^3}{3!} + \dfrac{2^4}{4!}$，此时的截断误差为 $\dfrac{2^5}{5!} + \dfrac{2^6}{6!} + \cdots$．

另外，由于计算机在计算过程中并非是精确运算，它只是对有限位数进行运算，对于超过位数的数字便自动施行四舍五入，这样在计算过程中又会产生一定的误差，这种误差称为舍入误差．

本课程主要研究截断误差和舍入误差．

以下举例说明误差分析的重要性．

【例 1】　求 $I_n = \int_0^1 \dfrac{x^n}{x+5} dx \quad (n = 0, 1, \cdots, 20)$．

解　容易求得，$I_n + 5I_{n-1} = \int_0^1 \dfrac{x^n}{x+5} dx + \int_0^1 \dfrac{5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \dfrac{1}{n} \quad (n = 1, \cdots, 20)$

又 $I_0=\int_0^1 \frac{1}{x+5}\mathrm{d}x=\ln\frac{6}{5}=\ln 1.2$，而 ln1.2 是个无理数，不可能取到精确值，若取 $I_0\approx 0.18232155$，得到一个递推公式：

$$\text{(A)}\begin{cases} I_n=-5I_{n-1}+\dfrac{1}{n} \\ I_0=0.18232155 \end{cases}\qquad (n=1,\cdots,20)$$

计算结果见表 1-1.

表 1-1

n	$I_n(A)$	n	$I_n(B)$
0	0.18232155↓	0	0.18232155↑
1	0.088392216	1	0.088392216
2	0.058038918	2	0.058038919
3	0.043138742	3	0.043138734
4	0.03430208	4	0.03430633
5	0.02848958	5	0.02846835
6	0.02421875	6	0.02432491
7	0.02176339↓	7	0.02123260↑
8	0.01618305↓	8	0.01883699↑
9	0.03019588	9	0.01692617
10	−0.05097941	10	0.01536914
11	0.017324710	11	0.014071338
12	−0.003290219	12	0.012976641
13	−0.093374172	13	0.012039867
14	−0.39544229	14	0.0112229233
15	2.0438787↓	15	0.010520499↑
16	−10.156890	16	0.009897504
17	50.843276	17	0.009336007
18	−254.16082	18	0.008875522
19	1270.8567	19	0.0082539682
20	−6354.2338↓	20	0.0087301587↑

注：前两列是由公式（A）计算所得值，后两列是由以下的公式（B）计算所得值.

我们分析一下 I_n 的特性：

① $I_n>0$；　② $I_n<I_{n-1}$；　③ $I_n\xrightarrow{n\to\infty}0$；　④ $I_n<I_{n-1}<I_{n-2}$.

由此可知，用公式（A）计算的值是不可应用的．那么怎样计算才能使结果可靠呢？由公式（A）的递推公式及 $I_n<I_{n-1}<I_{n-2}$ 可知，$\frac{1}{6n}<I_{n-1}<\frac{1}{5n}$，所以 $\frac{1}{6\times 21}<I_{20}<\frac{1}{5\times 21}$，今取 $I_{20}\approx\frac{1}{2}\left(\frac{1}{6\times 21}+\frac{1}{5\times 21}\right)$，建立以下递推公式：

$$\text{(B)}\begin{cases} I_{n-1}=\dfrac{-1}{5}I_n+\dfrac{1}{5n} \\ I_{20}=0.0087301587 \end{cases}\qquad (n=20,19,\cdots,2,1)$$

由式（B）重新计算 $I_1\sim I_{20}$ 的值（表 1-1 的后两列）．可见尽管 I_{20} 的初值取得比较粗糙，但计算到 I_1 及 I_0 时还是比较精确的．以下我们就来分析（A）、（B）两式的区别.

由于计算机只能对有限位数进行计算，因此，当取 I_0 用式（A）计算时，I_0 带有的误差会一直传下去．具体传播过程为：设 I_n 为理论值；$\bar{I}_n$ 为实际计算值，则有

$$|I_n-\overline{I}_n|=5|I_{n-1}-\overline{I}_{n-1}|=\cdots=5^n|I_0-\overline{I}_0| \tag{1-1}$$

尽管 I_0 误差很小，但是 5^n 却是很大的．而用式 (B) 计算时，有

$$|I_0-\overline{I}_0|=\frac{1}{5}|I_1-\overline{I}_1|=\cdots=\frac{1}{5^n}|I_n-\overline{I}_n| \tag{1-2}$$

尽管 I_{20} 误差很大，但是 $\frac{1}{5^n}$ 却是很小的．由以上两式知，一个是舍入误差在积累，另一个舍入误差在缩小．我们称舍入误差积累的递推公式［比如 (A)］为不稳定的公式，而称舍入误差缩小（至少不增）的递推公式［比如 (B)］为稳定的计算公式．

1.3　误差的基本概念

1.3.1　误差与误差限

定义 1　设 x 为精确值，x^* 为 x 的一个近似值，称 $e^*=x^*-x$ 为近似值的绝对误差（简称误差）．

由于精确值是未知的，所以误差是不可计算的．通常只能估计，常用 $|x^*-x|=|e^*|\leqslant\varepsilon^*$ 来估计，我们称 ε^* 为 x 的误差限．

定义 2　称 $e_r^*=\frac{x^*-x}{x}$ 为 x^* 的相对误差（x 与 x^* 的定义同上）．

同样由于 x 是未知的，所以通常取 $e_r^*=\frac{x^*-x}{x^*}=\frac{e^*}{x^*}$ 作为 x 的相对误差．这时产生的误差可忽略不计．我们把其绝对值的上界称为相对误差限，记为 $\varepsilon_r^*=\frac{\varepsilon^*}{|x^*|}$．

1.3.2　有效数字

我们知道，当精确值 x 有很多位数时，常按四舍五入的原则取其前几位数字作为其近似值．

例如：$\pi=3.1415926\cdots$，若取 $\pi^*=3.14$，或取 $\pi^*=3.1416$，则它们分别具有误差为 $|\pi-\pi^*|=0.0015926\cdots<0.005$ 及 $|\pi-\pi^*|=0.0000074\cdots<0.00005$．其误差限分别为 $\varepsilon^*\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-2}$ 及 $\varepsilon^*\leqslant\frac{1}{2}\times10^{-4}$．由此我们给出以下定义：

定义 3　若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位，且该位到 x^* 的左边第一位非零数字共有 n 位，则称 x^* 有 n 位有效数字．

由此可知，以上的 3.14 和 3.1416 作为 π 的近似值，分别具有 3 位和 5 位有效数字．有 n 位有效数字的近似数 x^* 可以写成标准形式：

$$x^*=\pm10^m\times0.a_1a_2\cdots a_n \tag{1-3}$$

式中，a_i 是 0～9 中的数（$i=1,2,\cdots,n$），$a_1\neq0$．且 $|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}$．

例如，用 $x^*=1.41421$ 作为 $\sqrt{2}$ 的近似值，可以写成 $x^*=10^1\times0.141421$．且 $|x-x^*|=|\sqrt{2}-1.41421|=0.0000036\leqslant0.000005=\frac{1}{2}\times10^{1-6}=\frac{1}{2}\times10^{-5}$．

所以 $x^*=1.41421$ 作为 $\sqrt{2}$ 的近似值，它有 6 位有效数字．

【例 2】　以下数字都是经过四舍五入得到的数字，问它们各有几位有效数字？

$x_1^*=0.0123$，　$x_2^*=7\times10^4$，　$x_3^*=0.12130$

解 对于 x_1^*，最后一位数 3 是经过四舍五入得到的数字，所以其误差限不超过 3 所在位 10^{-4} 的一半，即误差限小于等于 $\frac{1}{2}\times10^{-4}$，故有 3 位有效数字. 而对于 x_2^* 要考虑 7 是经过四舍五入得到的数字，故有 1 位有效数字. 同理 x_3^* 有 5 位有效数字（最右边的 0 是经过四舍五入得到的数字）.

有效数字与相对误差限的关系有以下定理.

定理 1 设 x^* 是由式（1-3）表示的近似数，若 x^* 有 n 位有效数字，则其相对误差限为

$$\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)} \tag{1-4}$$

反之，若 x^* 的相对误差限为

$$\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-(n-1)} \tag{1-5}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

定理说明，有效数字的位数越多，相对误差限越小.

【例 3】 为使 $\sqrt{70}$ 的近似数的相对误差限小于 0.1%，问查开方表时，要取几位有效数字？

解 设查开方表时取 n 位有效数字，那么由式（1-4）并注意到 $8\leqslant\sqrt{70}\leqslant9$，得 $a_1=8$，因此要使 $\sqrt{70}$ 的近似数的相对误差限小于 0.1%，只需取 n 满足

$$\frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)}=\frac{1}{2\times8}\times10^{-(n-1)}<0.1\,\%$$

解得 $n=3$. 即取 $\sqrt{70}\approx8.37$.

【例 4】 已知近似数 x^* 的相对误差限为 0.3%，问 x^* 至少有几位有效数字？

解 设 x^* 有 n 位有效数字，由式（1-4）知，$\frac{3}{1000}\leqslant\frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)}$，而 x^* 的第一位数字 a_1 没给出，但显然有 $\frac{3}{1000}\leqslant\frac{1}{200}=\frac{1}{2\times(9+1)}\times10^{-1}$，即 x^* 的相对误差限满足式（1-5），所以 $n-1=1$，知 x^* 至少有 2 位有效数字.

1.3.3 数值运算中的误差估计

数值运算中的误差估计一般是很复杂的. 通常我们利用多元函数中全微分代替全增量的方法来估计误差.

以二元函数 $z=f(x,y)$ 为例，我们知道 $f(x,y)$ 在 (x,y) 点的全增量 $\Delta z=f(x+\Delta x,y+\Delta y)-f(x,y)$，$f(x,y)$ 在 (x,y) 点的全微分 $\mathrm{d}z=\frac{\partial f}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y$，又 $\Delta z-\mathrm{d}z=o(\rho)$，其中，$\rho=\sqrt{(\Delta x)^2+(\Delta y)^2}$，所以 $|\Delta z|\approx|\mathrm{d}z|$. 若令 $x^*=x+\Delta x$，$y^*=y+\Delta y$，则得

$$\Delta z=f(x^*,y^*)-f(x,y)\approx\left(\frac{\partial f}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y\right)_{(x^*,y^*)}.$$

由上面的讨论知，假设要计算 $A=f(x_1,\cdots,x_n)$ 的值，已知 $x_1^*,\cdots,x_n^*$ 是 $x_1,\cdots,x_n$ 的近似值. 此时 A 的近似值为 $A^*=f(x_1^*,\cdots,x_n^*)$，那么 A^* 作为 A 的近似值时的误差限为

$$\varepsilon(A^*)=|e(A^*)|\approx\left|\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*(x_k^*-x_k)\right|$$

由此得到 A 的误差限满足：

$$\varepsilon(A^*) = |e(A^*)| \leqslant \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| |x_k^* - x_k|$$

或

$$\varepsilon(A^*) = |e(A^*)| \leqslant \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \varepsilon(x_k^*) \tag{1-6}$$

而 A 的相对误差限为

$$\varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|} \leqslant \sum_{k=1}^{n} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* \right| \frac{\varepsilon(x_k^*)}{|A^*|} \tag{1-7}$$

其中，$\left(\frac{\partial f}{\partial x_k} \right)^* = \frac{\partial}{\partial x_k} f(x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*)$ 为 $f(x_1, \cdots, x_n)$ 在 $(x_1^*, \cdots, x_n^*)$ 点关于 x_k 的偏导数.

【例 5】 要计算 $f = (\sqrt{2} - 1)^6$，取 $\sqrt{2} \approx 1.41$. 求 $\varepsilon(f)$.

解 由式 (1-6) 知，$\varepsilon(f) \leqslant 6(1.41 - 1)^5 \left|\sqrt{2} - 1.41\right| \leqslant 6 \times 0.41^5 \times \frac{1}{2} \times 10^{-2}$.

【例 6】 设 $f(x,y) = \frac{\cos y}{x}$，$x = 1.30 \pm 0.005$，$y = 0.871 \pm 0.0005$，若用 $f(1.30, 0.871)$ 作为 $f(x,y)$ 的近似值，那么误差约为多少?

解 由式 (1-6) 知，$\varepsilon(f) \leqslant \left| \frac{\cos 0.871}{1.30^2} \right| \times 0.005 + \left| \frac{\sin 0.871}{1.30} \right| \times 0.0005 \approx 0.0022$.

1.4 数值运算中应注意的几个问题

一个工程技术问题的解决往往要经过若干次运算. 若每一步都要分析误差的话，那当然是最好的，但这是不可能的. 为鉴别计算结果的可靠性，我们提出数值运算中应注意的几个问题.

要使用稳定的计算公式

由例 1 自然得到.

要避免两相近数相减

出现这种情况时，应先对公式进行等价变换，然后再计算.

比如：计算 $1 - \cos 2^\circ$，若保留四位小数直接计算得 $1 - \cos 2^\circ \approx 1 - 0.9994 = 0.0006$，只有一位有效数字. 而用 $1 - \cos 2^\circ = \frac{\sin^2 2^\circ}{1 + \cos 2^\circ} \approx \frac{(0.0349)^2}{1.9994} = 6.092 \times 10^{-4}$，具有四位有效数字.

以下是几个常用的等价变换公式.

$x_1 \approx x_2$ 时，变换 $\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2}$；

$x \approx 0$ 时，变换 $\frac{1 - \cos x}{\sin x} = \frac{\sin x}{1 + \cos x}$；

x 充分大时，变换 $\arctan(x+1) - \arctan x = \arctan \frac{1}{1 + x(x+1)}$；

x 充分大时，变换 $\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$.

防止大数"吃掉"小数

在计算机运算过程中，若两个数的数量级相差很大，那么数量级较小的数往往会被忽

略．这就是所说的大数“吃掉”小数．

例如：要计算 $53480+\sum_{i=1}^{1000}a_i$，$a_i=0.001$，$i=1,\cdots,1000$．就需要先计算 a_i 之和，然后再加上 53480．

注意简化计算步骤，减少运算次数

对于同一个问题，若能减少运算次数，不但能减少计算机的运行时间，还可以减小舍入误差．

绝对值较小的数不宜做除数

绝对值近似于零的数做除数时会导致算法数值不稳定，设计算法时应尽量避免．

习题 1

1．下列各数都是经过四舍五入得到的近似值．

（1）试指出它们有几位有效数字；

（2）分别估计 $A_1=x_1^*x_2^*x_3^*$ 及 $A_2=\dfrac{x_2^*}{x_4^*}$ 的误差限．

$$x_1^*=1.1021,\quad x_2^*=0.031,\quad x_3^*=385.6,\quad x_4^*=56.430$$

2．正方形的边长大约为 100cm，怎样测量才能使其面积误差不超过 1cm^2？

3．测得某房间长约为 $l^*=4.32\text{ m}$，宽约为 $d^*=3.12\text{ m}$，且长与宽的误差限均为 0.01m，试问房间面积 $S=ld$ 的误差限和相对误差限分别是多少？

4．下列公式如何计算才比较准确：

（1）当 x 的绝对值充分小时，计算 $\dfrac{\mathrm{e}^{2x}-1}{2}$；

（2）当 N 的绝对值充分大时，计算 $\displaystyle\int_N^{N+1}\frac{1}{1+x^2}\mathrm{d}x$；

（3）当 x 的绝对值充分大时，计算 $\sqrt{x+\dfrac{1}{x}}-\sqrt{x-\dfrac{1}{x}}$．

5．数列 $\{y_n\}$ 满足递推关系 $y_n=10y_{n-1}-1$，$n=1,2,\cdots$，若 $y_0=\sqrt{2}\approx1.41$，计算到 y_{10} 时误差有多大？这个计算数值稳定吗？

6．计算 $f=(\sqrt{2}-1)^6$，取 $\sqrt{2}\approx1.4$，直接计算和用 $\dfrac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}$ 来计算，哪一个较好？

7．求二次方程 $x^2-16x+1=0$ 的较小正根，要求有三位有效数字．

8．如果利用四位函数表计算 $1-\cos 2^\circ$，试用不同方法计算并比较结果的误差．

9．设 x 的相对误差限为 δ，求 x^{100} 的相对误差限．

10．已知三角形面积 $S=\dfrac{1}{2}ab\sin c$，其中 c 为弧度，满足 $0<c<\dfrac{\pi}{2}$，且 a,b,c 的误差分别为 $\Delta a,\Delta b,\Delta c$．证明面积的误差 ΔS 满足 $\left|\dfrac{\Delta S}{S}\right|\leqslant\left|\dfrac{\Delta a}{a}\right|+\left|\dfrac{\Delta b}{b}\right|+\left|\dfrac{\Delta c}{c}\right|$．

第 2 章　插值法

2.1　引言

插值法是广泛应用于理论研究和工程实际中的重要数值方法．众所周知，反映自然规律数量关系的函数通常有三种表示法：解析法、图像法和表格法．大量实际问题中的函数关系是用表格形式给出的，如测量或通过实验而得到的函数数据表格．从提供的部分离散的函数值去进行理论分析和设计都是极不方便甚至是不可能的，因此需要设法寻找与已知函数值相符而且形式简单的函数．另外一种情况是，函数表达式虽已给定，但计算复杂，因此也需要根据一些函数值找出既反映原函数特征，又便于计算的简单函数去近似原函数．求这个简单函数的方法即称为插值法，一般的提法是：

设函数 $y=f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上有定义，且已知在点 $a\leqslant x_0<x_1<\cdots<x_n\leqslant b$ 上的函数值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$，若存在一个简单的函数 $P(x)$ 使

$$P(x_i)=y_i\quad(i=0,1,2,\cdots,n)\tag{2-1}$$

成立，就称 $P(x)$ 为 $f(x)$ 的插值函数．点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 称为插值节点，$[a,b]$ 称为插值区间，式（2-1）称为插值条件，求 $P(x)$ 的方法称为插值法．若 $P(x)$ 是次数不超过 n 的多项式时，即

$$P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n\tag{2-2}$$

其中 a_i（$i=0,1,2,\cdots,n$）为实数，就称 $P(x)$ 为插值多项式，求 $P(x)$ 的方法称为多项式插值法．本章就是讨论多项式插值法．由以上可知，我们需要解决以下几个问题：

① $P(x)$ 的存在性；② $P(x)$ 的唯一性；③ 如何求 $P(x)$？④ $P(x)$ 与 $f(x)$ 的误差如何？

2.2　拉格朗日(Lagrange)插值多项式

2.2.1　插值多项式的存在性和唯一性

定理 1　满足插值条件 $P(x_i)=y_i$（$i=0,1,2,\cdots,n$）的插值多项式 $P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots a_nx^n$ 是存在且唯一的．

证明　由条件知，$P(x)$ 的系数 a_i 满足以下方程组

$$\begin{cases}a_0+a_1x_0+\cdots+a_nx_0^n=y_0\\ a_0+a_1x_1+\cdots+a_nx_1^n=y_1\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ a_0+a_1x_n+\cdots+a_nx_n^n=y_n\end{cases}$$

这是一个关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的 $n+1$ 元线性方程组，并注意到其系数行列式为一个范德蒙行列式，又由于 $i\neq j$ 时 $x_i\neq x_j$，所以其系数行列式不等于零，于是由克拉默（Cramer）法则知方程组有唯一解．

2.2.2　Lagrange 插值多项式

以上定理的证明过程为我们提供了一个求多项式 $P(x)$ 的方法，这就是要解一个线性方程组. 但当 n 较大时，这是很困难的. 为便于得到一个求插值多项式 $P(x)$ 的简单方法，我们先从特殊情况开始研究.

假设 $n=1$，即已知区间 $[x_0, x_1]$ 的端点处的函数值 $y_0=f(x_0)$ 及 $y_1=f(x_1)$，欲求一个一次插值多项式（线性函数）$L_1(x)$，满足：

$$L_1(x_0)=f(x_0)=y_0, \quad L_1(x_1)=f(x_1)=y_1 \tag{2-3}$$

显然，$y=L_1(x)$ 的几何意义就是过两点 (x_0, y_0) 和 (x_1, y_1) 的一条直线. 由直线方程的两点式及点斜式容易得到：

$$L_1(x)=\frac{x_1-x}{x_1-x_0}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \tag{2-4}$$

$$L_1(x)=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0) \tag{2-5}$$

为便于推广到一般情况下，我们改写式（2-4）及式（2-5）为

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1 \tag{2-6}$$

由式（2-6）知，所求一次多项式 $L_1(x)$ 是两个线性函数

$$l_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}, \quad l_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0} \tag{2-7}$$

的线性组合，其系数为 y_0，y_1. 即

$$L_1(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1 \tag{2-8}$$

显然 $l_0(x)$，$l_1(x)$ 满足：
$$\begin{cases} l_0(x_0)=1, l_0(x_1)=0 \\ l_1(x_0)=0, l_1(x_1)=1 \end{cases} \tag{2-9}$$

将式（2-9）写成一个式子为

$$l_i(x_j)=\begin{cases} 1, i=j \\ 0, i\neq j \end{cases} \quad (i,j=0,1) \tag{2-10}$$

我们称 $l_0(x)$，$l_1(x)$ 为一次插值基函数（其图形见图 2-1），并称以上这种用插值基函数表示插值多项式的方法为基函数法.

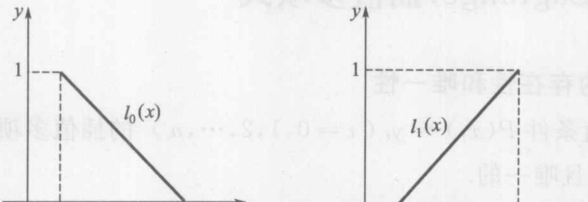


图 2-1

当 $n=2$ 时，由于二次函数的图形是一条抛物线，所以此时称为抛物插值. 设节点为 x_0, x_1, x_2，且已知函数在节点上的函数值为 y_0, y_1, y_2. 求一个二次插值多项式 $L_2(x)$ 满足：

$$L_2(x_j)=y_j \quad (j=0,1,2)$$

其几何意义为过三点 (x_0, y_0)，(x_1, y_1) 和 (x_2, y_2) 的抛物线，我们仍采用以上基函数方法，为此可设所求二次插值多项式 $L_2(x)$ 为

$$L_2(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2 \tag{2-11}$$

这里的基函数 $l_0(x)$，$l_1(x)$，$l_2(x)$ 为二次函数［注意：这里 $l_0(x)$，$l_1(x)$ 的记号与一次插值多项式时形式相同，但意义是不同的］，它们满足形如式（2-9）或式（2-10）的条件，即满足：

$$l_i(x_j)=\begin{cases}1,\ i=j\\0,\ i\neq j\end{cases}\quad(i,j=0,1,2) \tag{2-12}$$

显然，求出 $l_0(x)$，$l_1(x)$，$l_2(x)$ 后，二次插值多项式 $L_2(x)$ 即可得到．下面我们来求这三个插值基函数．考虑其中一个，比如 $l_1(x)$，由式（2-12）知，$l_1(x)$ 满足 $l_1(x_0)=0$，$l_1(x_2)=0$，$l_1(x_1)=1$，即 x_0，x_2 为其两个零点，又知 $l_1(x)$ 为二次函数，所以可设

$$l_1(x)=A(x-x_0)(x-x_2)$$

其中 A 为待定常数，再由 $l_1(x_1)=1$ 知，$1=A(x_1-x_0)(x_1-x_2)$，所以得

$$A=\frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \tag{2-13}$$

从而得

$$l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \tag{2-14}$$

同理有

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \tag{2-15}$$

$$l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \tag{2-16}$$

这三个二次插值基函数的图形如图 2-2 所示．

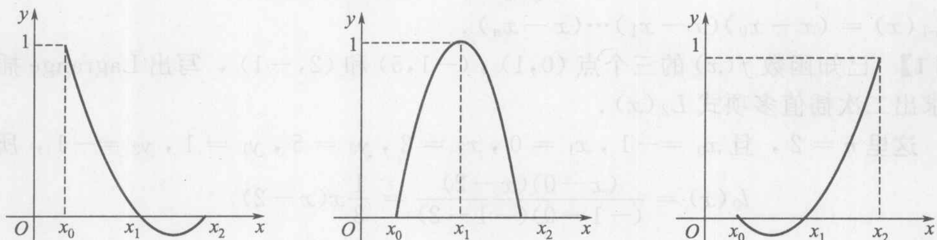


图 2-2

于是得二次插值多项式为

$$L_2(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2=\sum_{k=0}^{2}l_k(x)y_k \tag{2-17}$$

其中 $l_k(x)(k=0,1,2)$ 由式（2-14）～式（2-16）所确定．

以上我们就 $n=1$，$n=2$ 时的特殊情况进行了讨论，得到了一次及二次插值多项式 $L_1(x)$ 和 $L_2(x)$．现就这种用插值基函数表示插值多项式的方法推广到具有 $n+1$ 个节点的情况中去．

假设给定 $n+1$ 个插值节点 $a\leqslant x_0<x_1<\cdots<x_n\leqslant b$，以及节点上的函数值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$，求一个 n 次多项式 $L_n(x)$ 满足：

$$L_n(x_j)=y_j\quad(j=0,1,2,\cdots,n) \tag{2-18}$$

为构造 $L_n(x)$，首先给出 n 次插值基函数的定义．

定义 1　若 n 次多项式 $l_j(x)(j=0,1,2,\cdots,n)$ 在 $n+1$ 个节点 $a\leqslant x_0<x_1<\cdots<x_n\leqslant b$ 上满足：

$$l_i(x_j)=\begin{cases}1, & i=j \\ 0, & i\neq j\end{cases} \qquad (i,j=0,1,2,\cdots,n) \tag{2-19}$$

则称这 $n+1$ 个 n 次多项式 $l_0(x), l_1(x), \cdots, l_n(x)$ 为节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的 n 次插值基函数.

仿照 $n=1$, $n=2$ 的情况，可得到 n 次插值基函数

$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} \quad (k=0,1,2,\cdots,n) \tag{2-20}$$

显然满足式（2-19），于是得到满足插值条件式（2-18）的插值多项式 $L_n(x)$ 为

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} l_k(x) y_k \tag{2-21}$$

此即称为 n 次 Lagrange 插值多项式.

为便于应用，改写式（2-20）及式（2-21）分别为

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

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\left\{\prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j}\right\} y_k \tag{2-22}$$

用式（2-22）编制程序就方便多了. 有时还可写成

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)} y_k \tag{2-23}$$

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

【例 1】 已知函数 $f(x)$ 的三个点 $(0,1)$，$(-1,5)$ 和 $(2,-1)$，写出 Lagrange 插值基函数，并求出二次插值多项式 $L_2(x)$.

解 这里 $n=2$，且 $x_0=-1$，$x_1=0$，$x_2=2$，$y_0=5$，$y_1=1$，$y_2=-1$，所以

$$l_0(x)=\frac{(x-0)(x-2)}{(-1-0)(-1-2)}=\frac{1}{3}x(x-2)$$

同理

$$l_1(x)=\frac{(x+1)(x-2)}{(0+1)(0-2)}=\frac{-1}{2}(x+1)(x-2)$$

$$l_2(x)=\frac{1}{6}x(x+1)$$

代入式（2-21）得 $L_2(x)=x^2-3x+1$.

2.2.3 插值余项

本节的最后一个问题是讨论用 $L_n(x)$ 逼近 $f(x)$ 时其误差多大？这由下列定理给出.

定理 2 设 $f^{(n)}(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，$f^{(n+1)}(x)$ 在 (a,b) 内存在，插值节点为 $a\leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$，$L_n(x)$ 为满足插值条件 $L_n(x_j)=y_j$（$j=0,1,2,\cdots,n$）的插值多项式，则对任意 $x\in[a,b]$，插值余项为

$$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \tag{2-24}$$

其中，$\xi\in(a,b)$，且与 x 有关，$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$.

证明 由于 $L_n(x_j)=y_j=f(x_j)$，所以

$$R_n(x_j)=0 \qquad (j=0,1,2,\cdots,n)$$

从而 $R_n(x)$ 具有下列形式

$$R_n(x)=k(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

其中 $k(x)$ 是与 x 有关的待定函数．我们暂时将 x 看成一个固定点，做辅助函数：

$$\varphi(t)=f(t)-L_n(t)-k(x)(t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_n)$$

则 $\varphi(t)$ 满足 $\qquad \varphi(x_j)=0 \quad (j=0,1,2,\cdots,n)$

并且有 $\qquad \varphi(x)=f(x)-L_n(x)-k(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=0$

这就是说 $\varphi(t)$ 在 $[a,b]$ 区间内有 $n+2$ 个零点 $x,x_0,x_1,\cdots,x_n$，根据 Rolle 定理知，$\varphi'(t)$ 在 $\varphi(t)$ 的两个零点之间至少有一个零点，所以 $\varphi'(t)$ 在 (a,b) 内至少有 $n+1$ 个零点，对 $\varphi'(t)$ 再用一次 Rolle 定理知，$\varphi''(t)$ 在 (a,b) 内至少有 n 个零点，…，依此类推知，$\varphi^{(n+1)}(t)$ 在 (a,b) 内至少有一个零点，设为 ξ，即 $\varphi^{(n+1)}(\xi)=0$．由 $\varphi(t)$ 得

$$\varphi^{(n+1)}(\xi)=f^{(n+1)}(\xi)-(n+1)!k(x)=0$$

所以 $$k(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},\qquad \xi\in(a,b)\text{ 与 }x\text{ 有关}$$

注释 ① 只有当 $f(x)$ 的高阶导数 $f^{(n+1)}(x)$ 存在时才能应用此定理.

② 若 $f(x)$ 是小于等于 n 的多项式时，$f^{(n+1)}(x)=0$，此时有 $R_n(x)=0$，即 $f(x)=L_n(x)$.

③ 若 $f(x)=1$，则 $y(x_k)=1$（$k=0,1,2,\cdots,n$），且 $R_n(x)=0$，$f(x)=L_n(x)=1$，从而得知，$\sum\limits_{k=1}^{n}l_k(x)=1$．说明 $n+1$ 个 n 次插值基函数的和等于1.

④ 由于 $\xi\in(a,b)$ 一般不可能具体求出，不过这并不影响对 $|R_n(x)|$ 的估计．因为可设 $M_{n+1}=\max\limits_{a\leqslant x\leqslant b}|f^{(n+1)}(x)|$，则得 $|R_n(x)|\leqslant\dfrac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|$.

⑤ 由上知，$|R_n(x)|$ 的大小除与 M_{n+1} 以及节点有关外，还与点 x 有关. x 越靠近节点 $|\omega_{n+1}(x)|$ 越小，进而误差越小．因此，取节点时应使要计算的点尽可能含在所取节点之间.

【例 2】 已知函数表

x	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
$f(x)$	1.000	1.005	1.019	1.043	1.076	1.117	1.164	1.216	1.270

若要用5次插值多项式 $L_5(x)$ 计算 $f(0.24)$ 的近似值，问如何选择节点才能使误差最小?

解 显然只需取6个节点即可．由于无法估计 $f^{(6)}(x)$ 的值，故应选择节点使 $|\omega_{n+1}(x)|$ 最小，由于0.24在0.2与0.3之间，故0.24前面取三个点及后面取三个点即可．所取点为0.0，0.1，0.2，0.3，0.4，0.5为最好.

注：若所考虑的点前面或后面点的个数不够应取的个数时，可以从另一侧来补.

【例 3】 设 $f(x)=\mathrm{e}^x$，在 $[0,1]$ 上给出 $f(x)$ 的 $n+1$ 个等距节点 x_i 处的函数值表，这时 $0=x_0<x_1<\cdots<x_n=1$，$x_i-x_{i-1}=\dfrac{1}{n}\quad(i=1,2,\cdots,n)$.

(1) 若想用所给函数表的函数值用线性插值求 e^x（$0\leqslant x\leqslant1$）的近似值，使误差不超过 $\dfrac{1}{2}\times10^{-6}$，问 n 应取多大?

(2) 每个数值 $f(x_i)$ 应取几位有效数字?

解 (1) 对任意 $x\in[0,1]$，必存在一个 i，使得 $x\in[x_{i-1},x_i]$，假设 $L_1(x)$ 为 $f(x)$ 在 $[x_{i-1},x_i]$ 上满足插值条件 $L_1(x_{i-1})=f(x_{i-1})$，$L_1(x_i)=f(x_i)$ 的线性插值多项式，且用 $L_1(x)$ 的值作为 $f(x)$ 的近似值．则知其误差满足

$$|R_1(x)|\leqslant\frac{1}{2!}\max_{0\leqslant x\leqslant1}|f''(x)||(x-x_{i-1})(x-x_i)|$$

又有 $\max\limits_{0\leqslant x\leqslant 1}|f''(x)| = \max\limits_{0\leqslant x\leqslant 1} e^x \leqslant e$，而

$$|(x-x_{i-1})(x-x_i)| \leqslant \max_{x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i}|(x-x_{i-1})(x-x_i)| = \frac{1}{4}(x_i-x_{i-1})^2 = \frac{1}{4n^2}$$

$|R_1(x)| \leqslant \dfrac{1}{2}\cdot e\cdot \dfrac{1}{4n^2} = \dfrac{e}{8n^2} \leqslant \dfrac{1}{2}\times 10^{-6}$，解得 $n \geqslant 825$. 所以可取区间间隔

$$h = \frac{1}{1000} = 0.001$$

(2) 对任意 $x\in[0,1]$，有 $1\leqslant e^x \leqslant e$，要误差不超过 $\dfrac{1}{2}\times 10^{-6}$，应取7位有效数字.

2.3 均差与Newton插值多项式

2.3.1 均差的定义及其性质

本节仍然讨论给定 $n+1$ 个插值节点 $a\leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$ 及节点上的函数值 $f(x_j)$（或记为 f_j）$j=0,1,\cdots,n$，求一个 n 次插值多项式 $P_n(x)$［这里将 $L_n(x)$ 记为 $P_n(x)$，以后还将记为 $N_n(x)$］，满足插值条件

$$P_n(x_j) = f(x_j) \quad (j=0,1,2,\cdots,n) \tag{2-25}$$

这里设 $P_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$

其中，$a_0, a_1, \cdots, a_n$ 为待定参数，可由插值条件式（2-25）来确定.

$x = x_0$ 时　$P_n(x_0) = a_0 = f_0$

$x = x_1$ 时　$P_n(x_1) = a_0 + a_1(x_1-x_0) = f_1$

得

$$a_1 = \frac{f_1-f_0}{x_1-x_0}$$

$x = x_2$ 时　$P_n(x_2) = a_0 + a_1(x_2-x_0) + a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1) = f_2$

得

$$a_2 = \frac{\dfrac{f_2-f_0}{x_2-x_0} - \dfrac{f_1-f_0}{x_1-x_0}}{x_2-x_1}$$

依此类推，可得 $a_3,\cdots,a_n$. 为了写出系数 a_k 的一般表达式，引进均差的定义.

定义2　称 $f[x_0,x_k] = \dfrac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0}$ 为函数 $f(x)$ 关于点 x_0, x_k 的一阶均差. $f[x_0,x_1,x_k] = \dfrac{f[x_0,x_k]-f[x_0,x_1]}{x_k-x_1}$ 称为函数 $f(x)$ 关于点 x_0,x_1,x_k 的二阶均差. 一般，称 $f[x_0,x_1,\cdots,x_k] = \dfrac{f[x_0,\cdots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}$ 为函数 $f(x)$ 关于点 $x_0,x_1,\cdots,x_k$ 的 k 阶均差（或称为 k 阶差商）.

根据以上定义知，$a_0 = f(x_0)$，$a_1 = f[x_0,x_1]$，一般

$$a_k = f[x_0,x_1,\cdots,x_k] \quad (k=1,2,\cdots,n) \tag{2-26}$$

均差有以下基本性质.

① k 阶均差可表示为函数值 $f(x_0),\cdots,f(x_k)$ 的线性组合，即

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k] = \sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_k)} \tag{2-27}$$

此性质说明均差与节点的排列次序无关.

② 由性质①知，k 阶均差也可由下式给出

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k] = \frac{f[x_1,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0} \tag{2-28}$$