

科学计算笔记

任云玮

目录

1	绪论	2
1.1	计算机数值计算基本原理	2
1.1.1	实数的存贮方法	2
1.1.2	实数的基本运算原理	3
1.2	误差的来源与估计	4
1.2.1	误差的来源	4
1.2.2	误差与有效数字	4
1.2.3	数值运算的误差估计	5
1.2.4	数字求和的舍入误差分析	6
1.3	避免算法失效的基本原则	7
2	函数的多项式插值与逼近	9
2.1	问题的提出	9
2.2	Lagrange 插值法	10
2.3	Runge 现象	11
2.4	Newton 插值法	11
2.5	Hermite 插值	13
2.6	分段低次多项式插值	14
2.7	三次样条插值	15
3	附录	16
3.1	不等式	16

1 绪论

1.1 计算机数值计算基本原理

1.1.1 实数的存贮方法

1 定义 (二进制浮点数系)¹ 实数在计算机内部为近似存贮, 采用二进制浮点数系

$$F(2, n, L, U) = \{\pm 0.a_1a_2 \dots a_n \times 10^m\} \cup \{0\}$$

其中 $a_1 = 1$, $a_i \in \{0, 1\}$. 指数 m 满足 $L \leq m \leq U$. 称 n 为其字长, 2 表示采用二进制.

2 标准 (IEEE)

1. 单精度: $t = 24, L = -126, U = 127$

2. 双精度: $t = 53, L = -1022, U = 1023$

3. Underflow Limit: $UFL = 0.1 \times 2^L$. 若 $0 < x < UFL$, 则 $fl(x) = 0$.

4. Overflow Limit: $OFL = 0.11 \dots 1 * 2^U$. 若 $x > OFL$, 则 $fl(x) = \infty$.

5. 舍入: 若 $UFL \leq x \leq OFL$, 则 $fl(x)$ 为舍入所得浮点数. 舍入规则如下: 设 $x = 0.a_1a_2 \dots a_n \dots \times 2^m$. 若 $a_{n+1} = 1$, 则 $d_t + 1$ 并舍弃其后项; 否则直接舍弃其后项.

3 定义 (机器精度) 下仅考虑舍去的情况.

$$\begin{aligned} x - fl(x) &= 2^m \times 0.0 \dots 0a_{n+2} \dots \\ &= 2^m \times [2^{-(t+2)} + 2^{-(t+3)} + \dots] \\ &= 2^m \times 2^{-(t+1)} \end{aligned}$$

其相对误差满足

$$\frac{x - fl(x)}{x} < \frac{x - fl(x)}{0.5 \times 2^m} = 2^{-t}$$

记为 ε , 称之为机器精度.

4 命题

$$fl(x) = x(1 + \delta), \text{ 其中 } |\delta| \leq \varepsilon$$

¹floating Number System

1.1.2 实数的基本运算原理

加法 + 硬件实现 \Rightarrow 四则运算.

5 实现 $(x + y)$ 设 x, y 为浮点数, 则 $x + y$ 的实现方式如下:

1. 对阶: 将指数 m 化为两者中较大者;
2. 尾数相加;
3. 舍入;
4. 溢出分析等……
5. 结果输出.

评注 由 $fl(x) + fl(y) = x(1 + \delta_x) + y(1 + \delta_y)$ 可知, 当一个大数与一个小数相加时, 小数有可能被忽略, 所以应当避免大数小数间的相加.

1.2 误差的来源与估计

1.2.1 误差的来源

1. 模型问题. 例: 近似地球为球体来计算.
2. 测量误差. 例: 测量地球半径时的误差.
3. 方法误差 (截断误差). 例: 对于 $y = f(x)$, 求 $f(x^*)$ 时使用 Taylor 展开.
4. 舍入误差 (rounding-off). 例: 计算机计算时的误差.

1.2.2 误差与有效数字

6 定义 (绝对误差) 设 x 为给定实数, x^* 为其近似值. 定义绝对误差为

$$e(x^*) = x^* - x.$$

称 ε^* 为其误差上界, 若

$$|e(x^*)| \leq \varepsilon^*$$

7 定义 (相对误差) 对于同上的 x 和 x^* , 定义其相对误差

$$e_r(x^*) = \frac{x^* - x}{x}$$

称 ε_r^* 为其相对误差界, 若

$$|e_r(x^*)| \leq \varepsilon_r^*$$

评注 在实际应用中, x 通常是未知的, 所以会采用

$$\bar{e}_r(x^*) = \frac{x^* - x}{x^*}$$

来代替相对误差. 对于分子, 使用绝对误差界来替代, 有如下不等式

$$|\bar{e}_r(x^*)| \leq \frac{\varepsilon^*}{|x^*|}.$$

这两种相对误差界间的差别, 当 $\varepsilon^* \ll 1$ 时, 满足

$$|e_r - \bar{e}_r| = O((\varepsilon_r^*)^2)$$

8 定义 (有效数字) 设 $x \in R$, $x^* = 0.a_1a_2 \cdots a_k \times 10^m$ 为其近似值. 称 x^* 相对于 x 有 n ($n \leq k$) 位有效数字, 若 n 是满足下式的 n 的最大值.

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

评注 在实践中, 一般可以采用更加简便的方法, 对于归一化以后的 x^* , 在尾数部分有 n 位, 则称其有 n 位有效数字. 注意, 此方法对于错误的舍入结果是不适用的, 对于错误的情况, 需要再减去一位有效数字.

9 定理 (误差与有效数字) 若 $x = 0.a_1a_2 \dots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字, 则

$$\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

反之, 若

$$\varepsilon_r^* \leq \frac{1}{2(1+a_1)} \times 10^{1-n},$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

证明 对于前者, 只需利用有效数字的定义, 以及利用 $x \geq 0.a_1$ (仅考虑 $a_1 \neq 0$ 的情况). 对于后者, 证明是类似的.

1.2.3 数值运算的误差估计

以下内容都假设运算无误差.

10 定理 (四则运算误差估计)

1. 加/减法: $\varepsilon(x^* \pm y^*) \leq \varepsilon_x^* + \varepsilon_y^*$
2. 乘法: $\varepsilon(x^* y^*) \leq |x^*| \varepsilon_y^* + |y^*| \varepsilon_x^*$
3. 除法: $\varepsilon\left(\frac{x^*}{y^*}\right) \leq \frac{|x^*| \varepsilon_y^* + |y^*| \varepsilon_x^*}{|y^*|^2}$

证明 考虑加法的误差估计. 对于 x, y 及其近似值 x^*, y^* , 计算 $x^* \pm y^*$ 和 $x \pm y$ 间的误差.

$$\begin{aligned} |x^* \pm y^* - (x \pm y)| &\leq |x^* - x| + |y^* - y| \leq \varepsilon_x^* + \varepsilon_y^* \\ \Rightarrow \varepsilon(x^* \pm y^*) &\leq \varepsilon_x^* + \varepsilon_y^* \end{aligned}$$

对于其他的运算, 证明是类似的. (证明中可用 $+1-1$ 技巧)

11 定理 (运算的误差估计) 设 $A = f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, \mathbf{x}^* 是 \mathbf{x} 的估计值. 利用带 Peano 余项的 Taylor 展开, 可知 A 的绝对误差满足

$$\begin{aligned} e(A^*) &= f(\mathbf{x}^*) - f(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{p=1}^q d^p f(\mathbf{x}^*) + o(\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|^q) \\ \text{取 } q=1, \text{ 则} \\ &= \sum_{k=1}^n \partial_k f(\mathbf{x}^*)(x_k^* - x_k) + o(\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|) \end{aligned}$$

利用上式, 可知

$$\begin{aligned}\varepsilon(A^*) &\approx \sum_{k=1}^n |\partial_k f(\mathbf{x}^*)| \varepsilon(x^*) \\ \varepsilon_r(A^*) &= \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|}\end{aligned}$$

评注 对于定义在 \mathbf{R} 上的函数, 即为

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)| \varepsilon(x^*)$$

1.2.4 数字求和的舍入误差分析

12 命题 n 个浮点数相加, 若将它们从小到大排列后相加, 则可以减小舍入误差.

证明 考虑浮点数的求和 $S_n = \sum_i^n a_i$, 在计算机中的过程表现为

$$\begin{aligned}S_2^* &= fl(a_1 + a_2) = (a_1 + a_2)(1 + \varepsilon_2), \quad |\varepsilon_2| \leq \varepsilon = 2^{-t} \\ &\dots\dots \\ S_n^* &= fl(S_{n-1}^* + a_n)(1 + \varepsilon_n), \quad |\varepsilon_n| \leq \varepsilon\end{aligned}$$

对于 S_n^* 的误差, 若定义 $\varepsilon_1 = 0$, 则

$$S_n^* = \sum_{k=1}^n a_k \prod_{p=k}^n (1 + \varepsilon_p)$$

对误差进行估计, 舍去高阶无穷小, 有

$$\prod_{i=k}^n (1 + \varepsilon_k) \approx 1 + \sum_{i=k}^n \varepsilon_k$$

综合上两式, 有

$$\begin{aligned}S_n^* &\approx \sum_{k=1}^n a_k (1 + \sum_{p=k}^n \varepsilon_p) \\ &= S_n + \sum_{k=1}^n a_k \sum_{p=k}^n \varepsilon_p\end{aligned}$$

进行移项, 并取绝对值, 再利用三角不等式, 以及 $|\varepsilon_i| \leq \varepsilon$, 得

$$|S_n^* - S_n| \leq \sum_{k=1}^n |a_k| \sum_{p=k}^n |\varepsilon_p| \leq \varepsilon \sum_{k=1}^n |a_k| (n - k + 1)$$

其中 $n - k + 1$ 关于 k 单调减少, 所以根据排序不等式 [引理41], 即可知命题成立. ■

1.3 避免算法失效的基本原则

13 定理 (原则)

1. 避免两数相除/相减, 否则会严重损失有效数字.
2. 避免两相近数相减.
3. 避免绝对值很小的数做除数.
4. 避免大数与小数相加;
5. 简化计算步骤.

14 算法 (高效计算 e^A) 高效计算 e^A , 其中 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$. 首先有

$$e^A = e^{(A/2^n)2^n} = B^{2^n}$$

只需要得到 B , 即可以利用倍乘的方法快速得到 B^{2^n} . 下对于 B 进行估计. 当 $x \rightarrow 0$ 时, e^x 有 Taylor 展开

$$e^x = 1 + x + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

而取足够大的 n , 即可以使得 $A/2^n \approx 0$, 则可以对它展开得

$$B \approx I + C + \frac{1}{2}C^2, \text{ 其中 } C = A/2^n$$

而对于倍乘, 考虑 B^2 , 展开平方得

$$B^2 \approx I + 2(C + \frac{1}{2}C^2) + (C + \frac{1}{2}C^2)^2$$

从右至左相加即可.

15 算法 (秦九韶, 多项式估值) 设有多项式 (1), 计算 $p(z), z \in \mathbf{R}$ 的值.

$$p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n \quad (1)$$

定义 b_n 满足

$$b_0 = a_0, \quad b_k = a_k + b_{k-1}z$$

则 b_n 即为所要求的值. 并且成立

$$p'(z) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k z^{n-1-k}$$

证明 用 $x - z$ 去除 $p(x)$, 记所得余数为 $b_n(x)$, 即

$$p(x) = (x - z)q(x) + b_n(x),$$

代入 $x = z$, 则左侧第一项为 0, 可知 $p(z) = b_n(z)$. 将两边的式子展开, 利用对应系数相等, 即可得算法中 b_n 的递推式.

16 定理 (外推法) 设 x_0, x_1 是 x 的两个估计值, 且 x_1 相较于 x_0 更接近 x , 则可以通过恰当的权值 ω , 使得它们的加权平均

$$\bar{x} = x_1 + \omega(x_1 - x_0)$$

更加接近精确值 x .

17 算法 (π 的估计) 考虑单位圆, 其面积为 π , 设 π_n 为单位圆的内接正 $2n$ 边形的面积, 以及

$$\tilde{\pi}_n = \frac{1}{3}(4\pi_{2n} - \pi_n)$$

则 π_n 与 $\tilde{\pi}_n$ 与 π 的误差满足

$$|\pi_n - \pi| = O\left(\frac{1}{n^2}\right), \quad |\tilde{\pi}_n - \pi| = O\left(\frac{1}{n^4}\right)$$

证明 对于 π_n .

$$\pi_n = n \sin \frac{\pi}{n} = \pi - \frac{\pi^3}{3!} \frac{1}{n^2} + \frac{\pi^5}{5!} \frac{1}{n^4} - \cdots \Rightarrow |\pi_n - \pi| = O\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

对于 $\tilde{\pi}_n$.

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}_n &= \pi_{2n} + k(\pi_{2n} - \pi_n) = (1+k)\pi_{2n} - k\pi_n \\ &= (1+k)\left(\pi - \frac{\pi^3}{3!} \frac{1}{4n^2} + \cdots\right) - k\left(\pi - \frac{\pi^3}{3!} \frac{1}{n^2} + \cdots\right) \\ &= \pi - \left(\frac{k+1}{4} - k\right) \frac{\pi^3}{3!} \frac{1}{n^2} + O\left(\frac{1}{n^4}\right) \end{aligned}$$

为使式子的第二项为零, 取 $k = \frac{1}{3}$, 则成立

$$|\tilde{\pi}_n - \pi| = O\left(\frac{1}{n^4}\right) \quad \blacksquare$$

评注 在实际中, π_n 也是没有办法直接计算而得的, 但是对于 $n = 3$, 即 6 边形的情况, 可以知道 $\pi_3 = 3\sqrt{3}/2$. 同时有递推公式

$$\pi_{2n} = \sqrt{2n(n - \sqrt{n^2 - \pi_n^2})},$$

而开平方可以通过迭代的方式实现, 从而即计算得到足够精确的 π_{2n} 和 π_n .

2 函数的多项式插值与逼近

2.1 问题的提出

18 定义 (插值) 设函数 $y = f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有定义, 且已知在点 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ 处的函数值 $y_i = f(x_i)$, 若存在一简单函数 $P(x)$, 成立

$$P(x_i) = y_i,$$

则称 $P(x)$ 为 $f(x)$ 的插值函数, 点 x_1, x_2, \dots, x_n 称为插值节点, $[a, b]$ 称为插值区间, 求 $P(x)$ 的方法被称为插值法.

若 $P(x) \in P_n$ 为次数不超过 n 的多项式, 则称为多项式插值.

19 定理 (唯一性) 给定满足定义18的 $n+1$ 个点上的函数值, 则次数不超过 n 的插值多项式 $P_n(x)$ 存在且唯一.

证明 利用待定系数法, 设多项式的系数为 a_0, \dots, a_n , 则有线性方程组

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

其系数矩阵为 Vandermonde 矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix}$$

根据定义18中对于 x_i 的要求, 矩阵行列式成立

$$\det A = \prod_{i,j=0, i>j}^n (x_i - x_j) \neq 0.$$

所以该方程组有唯一解.

评注 虽然插值多项式是唯一的, 但是根据基函数的选取的不同, 系数是不相同的, 所以才需要不同的插值方法.

2.2 Lagrange 插值法

20 定理 (Lagrange 插值法) 定义

$$l_i(x) = \frac{\prod_{j \neq i}(x - x_j)}{\prod_{j \neq i}(x_i - x_j)}$$
$$(L_n f)(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x),$$

则 $L_n f$ 即为 f 的插值多项式.

证明 考虑构造 $l_i \in P_n$, 满足条件 $l_i(x_j) = \delta_{ij}$, 这样 $L_n f = \sum y_i l_i$ 满足要求. 改写条件为 (以 l_0 为例)

$$l_0(x) = \alpha(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$
$$l_0(x_0) = 1$$

解得

$$\alpha = \frac{1}{(x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_n)} \quad \blacksquare$$

评注 这样构造插值多项式的动机在于在取定插值节点后, 插值实际上相当于构造一个从 $\mathbf{y} = (y_0, \dots, y_n) \in \mathbf{R}^{n+1}$ 到 $y^*(x) \in P_n$ 的一个映射 \mathcal{F} , 并且可以证明, \mathcal{F} 是线性的. 因此成立

$$\mathcal{F}(\mathbf{y}) = \mathcal{F}\left(\sum_{i=0}^n y_i \mathbf{e}_i\right) = \sum_{i=0}^n y_i \mathcal{F}(\mathbf{e}_i) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x).$$

21 定理 (Lagrange 余项公式) 设符号含义同定理20且 f 充分光滑, 则对于每一个固定的 x 成立

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

其中 $\xi \in (a, b)$ 且

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

证明 固定 $x \neq x_i$, 定义 $R(x)$ 满足

$$f(x) - (L_n f)(x) = R(x) \omega_{n+1}(x).$$

构造辅助函数 $g(t)$

$$g(t) = f(t) - (L_n f)(t) - R(x) \omega_{n+1}(t).$$

根据插值法与 $R(x)$ 的定义, 成立

$$g(x_i) = 0, \quad g(x) = 0,$$

即函数 $g(t)$ 有 $n+2$ 个零点. 反复应用 Rolle 定理, 可知存在 $\xi \in (a, b)$, 成立 $g^{(n+1)} = 0$, 即

$$\begin{aligned} g^{(n+1)}(\xi) &= f^{(n+1)}(\xi) - R(x)(n+1)! = 0 \\ \Rightarrow R(x) &= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \end{aligned}$$

结合 $R(x)$ 的定义式即可知命题成立. ■

评注 当已知 $f^{(n+1)}$ 有界时, 可以使用此公式进行估计.

2.3 Runge 现象

22 定理 对于复函数 $f(z)$, 如果存在 $r_0 > \frac{3}{2}(b-a)$, 使得 $f(z)$ 在 $B_{r_0}(\frac{a+b}{2})$ 内解析, 则 $P_n(x) = L_n(x)$ 在 $[a, b]$ 上一致收敛与 $f(z)$. 这里 $B_{r_0}(\frac{a+b}{2})$ 为以 $\frac{a+b}{2}$ 为圆心, r_0 为半径的圆.

2.4 Newton 插值法

23 例 $n=2$ 时问题的求解.

设 $y^*(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1)$, 根据 $y^*(x_0) = y_0$, $y^*(x_1) = y_0$, 得 $a_0 = f(x_0)$, $a_0 + a_1(x_1-x_0) = f(x_1)$, 即

$$a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

可以发现 a_1 为割线的斜率. 同理可知

$$a_2 = \frac{f(x_2) - f(x_0) - a_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1}$$

为斜率的斜率.

24 定义 (差商) 递归 $f(x)$ 在 x_i, \dots, x_{i+n} 的各阶差商为: $f[x_i] = f(x_i)$, 第 k 阶差商为

$$f[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

25 定理 (n 次 Newton 插值法) x_0, \dots, x_n 为互异插值点, 则函数 $f(x)$ 满足

$$\begin{aligned} f(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1](x-x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x-x_0)(x-x_1) + \dots \\ &\quad + f[x_0, \dots, x_n](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1}) + R_n(x). \end{aligned}$$

其中 $R_n(x)$ 为其 Newton 插值多项式的余项, 为

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

证明 根据差商的定义, 有

$$\begin{aligned} f(x) &= f[x_0] + f[x_0, x](x - x_0) \\ f[x_0, x] &= f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x](x - x_1) \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

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

将上述式子反复代入它上面的式子, 即得 Newton 插值公式.

评注 Newton 插值法的优点在于, 当插值点的个数增加时, 无需重新计算原有的系数, 即 Newton 插值多项式是可以递归计算的.

26 定理 根据 Newton 插值公式, 可以得到如下差商的性质.

1.

$$f[x_0, \dots, x_m] = \sum_{i=0}^m \frac{f(x_i)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}$$

2. 设 i_0, \dots, i_m 为 $0, \dots, m$ 的任意一个排列, 则

$$f[x_0, \dots, x_m] = f[x_{i_0}, \dots, x_{i_m}].$$

3. 广义 Lagrange 中值定理

$$f[x_0, \dots, x_m] = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!}, \quad \xi \in (\min\{x_i\}, \max\{x_i\})$$

证明 交换插值节点的顺序后, n 次 Newton 插值多项式的 n 次项系数不变, 所以 [2.] 成立. 同 $m-1$ 次的 Lagrange 插值多项式比较第 $m-1$ 次项系数及其余项, 即可得到 [1.] 和 [3.]

评注 根据 [3.] 可知, 对于一个 n 次多项式, n 阶差商即为其 n 次项系数, $k(k > n)$ 阶差商为零.

27 定义 给定序列 $\{f_k\}$, f_k 表示 f 在 $x = x_k$ 处的值, 定义

1. 前向差分算符 $\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$,

2. 移位算符 $E f_k = f_{k+1}$,

3. 恒等算符 $I f_k = f_k$.

28 定理 (算符二项式定理) 对于算符 A, B , 若它们可交换, 则成立二项式定理

$$(A + B)^m = \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} A^k B^{m-k}$$

29 命题 根据定义27和定理28可知

$$\begin{aligned}\Delta &= E - I \\ \Delta^n &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-I)^{n-k} E^k \\ E^n &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \Delta^k\end{aligned}$$

30 定理 (均匀插值) 设 x_0, x_1, \dots, x_n 满足 $x_k = x_0 + kh$, 则有

$$\begin{aligned}f[x_k, x_{k+1}] &= \frac{\Delta f_k}{h} \\ f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}] &= \frac{\Delta^2 f_k}{2h^2} \\ &\dots\dots\dots \\ f[x_k, \dots, x_{k+m}] &= \frac{\Delta^m f_k}{m!h^m}\end{aligned}$$

31 定理 (Newton 前插公式) 设记号同定理30, 另 $x = x_0 + th$, $t \in \mathbf{R}$, 代入定理25, 则成立

$$N_n(x) = f_0 + t\Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \dots + \frac{t(t-1)\dots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0.$$

其余项为

$$R_n(x) = \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{(n+1)!}h^{n+1}f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

评注 利用广义二项式定理, 有

$$\begin{aligned}f(x) &= f(x_0 + th) = E^t f(x_0) = (I + \Delta)^t f(x_0) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{t}{k} \Delta^k f_0\end{aligned}$$

2.5 Hermite 插值

32 定理 设 $f \in C^n[a, b]$, x_0, x_1, \dots, x_n 为 $[a, b]$ 上的互异节点, 则 $f[x_0, \dots, x_n, x]$ 在 $[a, b]$ 上连续.

33 定理 (Hermite 插值) 若给出 $m+1$ 个插值条件 (含函数值和导数值) 可构造出次数不超过 m 次的多项式.

评注 可以利用待定系数法或者基函数法求的 Hermite 插值多项式.

2.6 分段低次多项式插值

思路 局部入手，整体分析². 化整为零，以直代曲³.

34 引理 (ω_n 的估计) 任给节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$, 记 $h = \max x_{i+1} - x_i : i = 0, 1, \dots, n$, 则对于任意 $x \in [x_0, x_n]$, 成立

$$|(x - x_0) \cdots (x - x_n)| \leq \frac{n!h^{n+1}}{4}.$$

35 定理 (分段线性插值) 记 $a = x_0 < \cdots < x_n = b$, $e_k = (x_k, x_{k+1})$, $h_k = x_{k+1} - x_k$, $h = \max h_k$. 找函数 $y = f_h(x)$, 逼近原有函数, 使得

1. 满足插值条件, $f_h(x_k) = f(x_k)$,
2. $f_h(x)$ 连续,
3. $f_h(x) \in P_1$, $x \in e_k$.

则 f_h 的结果为

$$f_h(x) = f_h(x_k) + f_h[x_k, x_{k+1}](x - x_k), \quad (x \in e_k).$$

设 M_2 表示二阶导数的上界, 则误差 $R(x)$ 满足,

$$R(x) = \left| \frac{f^{(2)}(\xi)}{2} (x - x_k)(x - x_{k+1}) \right| \leq \frac{1}{8} M_2 h^2.$$

评注 若作整体的 Lagrange 插值, 则余项 $R_L(x)$ 满足

$$\left| \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1} \right| \leq \frac{M_{n+1} h^{n+1}}{n+1}.$$

而求高阶导数后容易出现 Runge 现象.

36 定理 (分段三次 Hermite 插值) 节点同上, 构造 $f_h(x)$ 使得

1. $f_h(x_k) = f(x_k)$, $f'_h(x_k) = f'(x_k)$
2. $f \in \mathcal{C}^1[a, b]$
3. $f_h(x) \in P_3$, $x \in e_k$

对于两插值点的情况, f 的结果为

$$f_h(x) = f(x_k)\alpha_k + f(x_{k+1})\alpha_{k+1} + f'(x_k)\beta_k + f'(x_{k+1})\beta_{k+1}.$$

其余项 $R(x)$ 满足

$$R(x) = \left| \frac{f^{(4)}(\xi)}{4} (x - x_k)^2 (x - x_{k+1})^2 \right| \leq \frac{M_4}{4!} \times \left(\frac{h}{4} \right)^4 = \frac{1}{384} M_4 h^4.$$

²例: 微分流形

³例: Riemann 积分

2.7 三次样条插值

37 定义 给定控制点 $a = x_0 < x_n = b$, 设函数 $y = y^*(x)$ 满足

1. $y^*(x) = y_k$,
2. $(y^*)^{(4)} = 0, x \in e_k \Leftrightarrow y^* \in P_3, x \in e_k$,
3. $y^* \in \mathcal{C}^2[a, b]$.

称满足后两个条件的函数为**三次样条函数**, 称满足上述三个条件的函数为**三次样条插值函数**.

38 定义 (边界条件)

1. 转角条件: $S'(x_0) = f'_0, S'(x_n) = f'_n$,
2. 弯矩条件: $S''(x_0) = f''_0, S''(x_n) = f''_n$,
3. 周期条件: $S(x_0+0) = S(x_n-0), S'(x_0+0) = S'(x_n-0), S''(x_0+0) = S''(x_n-0)$,

评注 根据定义37, 在每个小区间上有 4 个待定系数, 所以总共有 $4n$ 个待定系数。而所给条件仅有 $n+1$ 个插值条件, 以及在中间 $n-1$ 个插值节点处二阶导数连续 (从而原函数与一阶导数也连续), 有 $3n-3$ 个光滑性条件, 共 $4n-2$ 个条件, 因此需要额外的边界条件来确定剩余两个系数。

39 定理 (样条插值求解) 只需利用分段三次 Hermite 插值即可求解。

40 定理 设 $f(x) \in \mathcal{C}^4[a, b]$, 则三次样条插值函数 $S_3(x)$,

$$\max_{a \leq x \leq b} |f^{(m)}(x) - S^{(m)}(x)| \leq C_m \max_{a \leq x \leq b} |f^{(4)}(x)| h^{4-m}, \quad m = 0, 1, 2,$$

其中 $C_0 = 5/384, C_1 = 1/24, C_2 = 3/8$.

3 附录

3.1 不等式

41 引理 (排序不等式) 对于满足下述条件的 $\{a_n\}, \{b_n\}$,

$$0 \leq a_1 \leq a_2 \leq \cdots \leq a_n$$

$$0 \leq b_1 \leq b_2 \leq \cdots \leq b_n$$

则同序相乘求和值最大, 逆序最小, 即

$$\sum_{i=1}^n a_i b_i \geq \sum_{i=1}^n a_i b_{k_i} \geq \sum_{i=1}^n a_i b_{n-i+1}$$

42 引理 (算数-几何均值不等式)

$$(a_1 a_2 \cdots a_n)^{1/n} \leq \frac{a_1 + a_2 + \cdots + a_n}{n}$$

当且仅当 $a_1 = a_2 = \cdots = a_n$ 时等号成立.

证明 因为有齐次性, 所以不妨设 $\prod a_i = 1$, 并令

$$a_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2}, \quad \dots, \quad a_{n-1} = \frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n}, \quad a_n = \frac{\alpha_n}{\alpha_1}$$

则只需证明下式即可.

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + \cdots + \frac{\alpha_n}{\alpha_1} \geq n$$

不妨设 $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \cdots \leq \alpha_n$, 则根据排序不等式

$$\text{L.H.S} \geq \alpha_1 \frac{1}{\alpha_1} + \cdots + \alpha_n \frac{1}{\alpha_n} = n \quad \blacksquare$$