数值计算方法：原理、算法和应用
Numerical Methods: Principles, Algorithms and Applications

授课教师：周铁

北京大学数学科学学院

2021 年 10 月 1 日

1. 多项式插值与数值微分
    - 插值问题的背景
    - 多项式插值
    - Lagrange 插值
    - Newton 插值
    - Neville 插值
    - 多项式插值的截断误差
    - 高次多项式插值的缺点
    - 分段线性插值
    - 分段三次 Hermite 插值
    - 三次样条插值
    - 数值微分

插值问题的背景

插值的背景–用简单函数近似未知或复杂函数

某个一元函数 $f(x)$，给定它在某些点上的函数值：

$$y_k = f(x_k),\ k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

现在想得到在其它点的函数值，怎么办？

一个朴素的想法：利用数据 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^{n}$ 在我们熟悉的函数类中找一个“替代品” $\varphi(x)$，使得 $f(x) \approx \varphi(x)$.

1. $\varphi(x)$ 尽量简单 (适合在计算机中运算).
2. $\varphi(x)$ 很好地逼近目标函数 $f(x)$(这点很难！).

Weierstrass 逼近定理（Karl Weierstrass, 1885)

设实值函数 $f(x) \in C[a, b]$，则对 $\forall\, \epsilon > 0$，存在多项式 $p(x)$ 使得

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p(x)| < \epsilon.$$

插值问题的提法

插值 (interpolation) 的定义:

给定数据

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$\cdots$	$f(x_n)$

确定函数 $f(x)$ 的一个“替代品”函数 $\varphi(x)$，使得

$$\varphi(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

的过程称为插值，$\varphi(x)$ 称为 $f(x)$ 的插值函数.

- 需要事先指定插值函数所在的函数类，常用函数类有：多项式，三角函数，有理函数.
- 插值数据 $(x_k, y_k), k = 0, 1, 2, \ldots, n$ 中的 x_k 称为插值节点，需要互异.

多项式插值

多项式插值

多项式插值的定义：

给定数据 $\{(x_k, y_k = f(x_k))\}_{k=0}^{n}$，其中 x_k 互异. 通过这些数据确定一个最高 n 次的一元多项式函数：

$$
\begin{aligned}
p(x) &= a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \\
&= \sum_{k=0}^{n} a_k x^k
\end{aligned}
$$

使得

$$
p(x_k) = y_k = f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n. \tag{1}
$$

的过程称为多项式插值，$p(x)$ 称为函数 $f(x)$ 的插值多项式，它需要满足的条件(1)称为插值条件.

- 数据点的个数 $n+1$ 就是插值多项式 $p(x)$ 系数的个数.

通过解线性方程组实现多项式插值

要找到 n 次插值多项式 $p(x)$ 满足插值条件(1)，只要解一个关于其系数 $a_0, a_1, \ldots, a_n$ 的线性方程组.
以 $n = 2$ 为例，线性方程组的矩阵形式为：

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \end{bmatrix}$$

系数矩阵是一个 Vandermonde 矩阵，由于插值节点 x_0, x_1, x_2 互异，这个矩阵必为可逆矩阵，所以方程组的解存在且惟一.

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \end{bmatrix}$$

这个方法完全可以推广到更多个节点的情形，它从理论上解决了多项式插值问题的存在惟一性，甚至给出了一种算法，但这不是一个实用的算法.

Lagrange 插值

Lagrange 插值

所有不高于 n 次的一元多项式构成一个数域 $\mathbb{K}$ 上的 $n+1$ 维线性空间:

$$\mathbb{P}_n = \{a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \mid \forall\, a_k \in \mathbb{K}\}$$

定义 $l_0(x), l_1(x), \cdots, l_n(x) \in \mathbb{P}_n$ 为:

$$l_i(x) = \prod_{k=0,k\neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \quad \text{显然满足 } l_i(x_k) = \delta_{i,k} = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}$$

关键是它们组成线性空间 $\mathbb{P}_n$ 的一组基 (basis). 于是有

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) = f(x_0) l_0(x) + f(x_1) l_1(x) + \cdots + f(x_n) l_n(x).$$

这组基函数 $\{l_i(x)\}_{i=0}^{n}$ 称为 Lagrange 插值基函数.

- 实现 Lagrange 插值的关键是利用 $f(x)$ 的插值数据

$$(x_i, f(x_i)), \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

计算 Lagrange 插值基函数

$$l_i(x) = \prod_{k=0, k\neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n$$

这需要 $O(n^2)$ 计算量.

- 当插值节点离得比较近的时候，会产生较大的计算误差.
- Lagrange 插值多项式的函数值的计算不能利用 Horner 算法.
- 当增加一个插值数据 $(x_{n+1}, f(x_{n+1}))$ 的时候，所有的 Lagrange 插值基函数 $l_i(x)$, $i = 0, 1, 2, \ldots, n, n+1$ 都要重新计算.

Newton 插值

Newton 插值

$n+1$ 个次数依次递增的多项式:

$$1, \quad x-x_0, \quad (x-x_0)(x-x_1), \quad \cdots, \quad \prod_{j=0}^{n-1}(x-x_j)$$

也构成线性空间 $\mathbb{P}_n$ 的基函数. 于是不高于 n 次的插值多项式必可写成:

$$p(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n \prod_{j=0}^{n-1}(x-x_j).$$

这个多项式称为函数 $f(x)$ 的 Newton 插值多项式，还可以写成紧凑形式

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k \prod_{j=0}^{k-1}(x-x_j), \quad \text{其中规定} \prod_{j=0}^{-1}(x-x_j) = 1. \tag{2}$$

只要把系数 a_k 计算出来，就可确定 Newton 插值多项式.

系数 $a_0, \cdots, a_n$ 需要通过插值条件确定，这只要解线性方程组：

$$\begin{cases} a_0 = f(x_0) \\ a_0 + a_1(x_1 - x_0) = f(x_1) \\ a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = f(x_2) \\ \vdots \\ a_0 + a_1(x_n - x_0) + \cdots + a_n \prod_{j=0}^{n-1}(x_n - x_j) = f(x_n) \end{cases} \tag{3}$$

这是下三角形线性方程组，系数矩阵对角线元素都非零，解存在惟一. 不难得到前几个系数为：

$$a_0 = f[x_0] := f(x_0), \qquad \text{在一点处的零阶差商}$$

$$a_1 = f[x_0, x_1] := \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}, \qquad \text{在两点处的一阶差商}$$

$$a_2 = f[x_0, x_1, x_2] := \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}, \qquad \text{在三点处的二阶差商}$$

etc.

下面介绍差商的一般概念.
给定 $y=f(x)$ 在互不相同的点 $x_0, x_1, x_2, \ldots$ 上的函数值 y_0, y_1, $y_2, \ldots$, 定义

$$f[x_i, x_j] = \frac{y_j - y_i}{x_j - x_i} = \frac{f(x_j) - f(x_i)}{x_j - x_i}$$

为 $f(x)$ 在节点 x_i, x_j 上的 **1 阶差商**; 定义

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_j, x_k] - f[x_i, x_j]}{x_k - x_i},$$

为 $f(x)$ 在节点 x_i, x_j, x_k 上的 **2 阶差商**. 一般地, 对于任意大于 1 的正整数 k, 有了 $k-1$ 阶差商之后, 可以定义 $f(x)$ 在节点 $x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}$ 上的 k **阶差商** $(k \geqslant 1)$ 为

$$\begin{aligned} & f[x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}] \\ & \qquad = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \ldots, x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}. \end{aligned}$$

对于给定的插值数据 $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, 1, \ldots, n$ 和不在插值节点上的一点 x, 根据差商的定义, 有下列等式:

$$
\begin{aligned}
f[x] &= f[x_0] + f[x, x_0](x - x_0), \\
f[x, x_0] &= f[x_0, x_1] + f[x, x_0, x_1](x - x_1), \\
f[x, x_0, x_1] &= f[x_0, x_1, x_2] + f[x, x_0, x_1, x_2](x - x_2), \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
f[x, x_0, \ldots, x_{n-2}] &= f[x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}] + f[x, x_0, \ldots, x_{n-1}](x - x_{n-1}), \\
f[x, x_0, \ldots, x_{n-1}] &= f[x_0, x_1, \ldots, x_n] + f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_n).
\end{aligned}
$$

依次将后一式代入前一式, 最后有

$$
f(x) = f[x] = N_n(x) + R_n(x), \tag{4}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
N_n(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\
&\quad + f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}), \\
R_n(x) &= f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n] \prod_{j=0}^{n} (x - x_j).
\end{aligned}
$$

为了证明 n 次多项式 $N_n(x)$ 满足插值条件:

$$N_n(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, 2, \dots, n.$$

只要证明 $N_n(x) \equiv L_n(x)$ 即可, 这里 $L_n(x)$ 就是 Lagrange 插值多项式. 对 $f(x) = L_n(x)$ 应用等式(4), 有

$$\begin{aligned} L_n(x) = {} & L_n[x_0] + L_n[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots \\ & + L_n[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \\ & + L_n[x, x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n). \end{aligned} \tag{5}$$

可以证明 (见后面关于插值误差的讨论): 如果函数 $f(x) \in C^n[a, b]$, $x_i \in [a, b], 0 \leq i \leq n$ 为互异节点, 则 $\exists \xi \in (a, b)$ 使得

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi).$$

由于 $L_n(x)$ 是一个阶多项式, 于是有

$$L_n[x, x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{1}{(n+1)!} L_n^{(n+1)}(\xi) \equiv 0.$$

又由于在每个节点 x_i 处 $L_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$，所以

$$L_n[x_0, x_1, \ldots, x_k] = f[x_0, x_1, \ldots, x_k],\ k = 0, 1, \ldots, n$$

再回到(5)式，就有

$$L_n(x) \equiv N_n(x).$$

定理

线性方程组(3)的解 $a_0, a_1, \ldots, a_n$ 的表达式为:

$$\begin{aligned} a_0 &= f[x_0], \\ a_k &= f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f[x_1, x_2, \cdots, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}. \end{aligned}$$

其中 $k = 1, 2, \ldots, n$.

定理

差商 $f[x_0, x_1, \cdots, x_k]$ 不依赖于节点 $x_0, x_1, \ldots, x_k$ 的顺序.

- 实现 Newton 插值的关键就是利用 $f(x)$ 的插值数据

$$(x_i, f(x_i)), \quad i = 0, 1, \dots, n$$

从低阶到高阶递推地计算 $f(x)$ 的各阶差商：

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k], \quad k = 1, 2, \dots, n$$

- 有了各阶差商后，Newton 插值多项式的表达式为：

$$p(x) = f(x_0) + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \cdots, x_k] \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j).$$

- 从 1 阶到 n 阶的所有各阶差商的总计算量为 $\mathcal{O}(n^2)$.
- 计算 Newton 插值多项式的函数值可以利用 Horner 算法.
- 当新增加一个插值数据 $(x_{n+1}, f(x_{n+1}))$ 的时候，只要再计算一个高一阶的差商 $f[x_0, x_1, \cdots, x_n]$.

Neville 插值

Neville 插值–逐次线性插值

给定数据 $\{(x_k, y_k = f(x_k))\}_{k=0}^{n}$，其中 x_k 互异.

- 先用每个节点产生 0 次插值多项式 $p_i(x) = f(x_i), i = 0, 1, \ldots, n$.
- 再用每两个相邻的 0 次插值多项式，比如 $p_0(x)$, $p_1(x)$ 产生 1 次插值多项式:

$$
\begin{aligned}
p_{0,1}(x) &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} p_0(x) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} p_1(x) \\
p_{1,2}(x) &= \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} p_1(x) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} p_2(x) \\
p_{2,3}(x) &= \frac{x - x_3}{x_2 - x_3} p_2(x) + \frac{x - x_2}{x_3 - x_2} p_3(x) \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

$p_{0,1}(x)$ 是在两个节点 x_0, x_1 上的 Lagrange 插值多项式,
$p_{1,2}(x)$ 是在两个节点 x_1, x_2 上的 Lagrange 插值多项式,
$p_{2,3}(x)$ 是在两个节点 x_2, x_3 上的 Lagrange 插值多项式, $\cdots$

- 再用每两个相邻的 1 次 Lagrange 插值多项式，比如 $p_{0,1}(x)$, $p_{1,2}(x)$ 产生 2 次插值多项式:

$$
\begin{aligned}
p_{0,1,2}(x) &= \frac{x-x_2}{x_0-x_2}p_{0,1}(x) + \frac{x-x_0}{x_2-x_0}p_{1,2}(x) \\
p_{1,2,3}(x) &= \frac{x-x_3}{x_1-x_3}p_{1,2}(x) + \frac{x-x_1}{x_3-x_1}p_{2,3}(x) \\
p_{2,3,4}(x) &= \frac{x-x_4}{x_2-x_4}p_{2,3}(x) + \frac{x-x_2}{x_4-x_2}p_{3,4}(x) \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

  不难验证 $p_{0,1,2}(x)$ 是在 3 个节点 x_0, x_1, x_2 上的插值多项式，$p_{1,2,3}(x)$ 是在两个节点 x_1, x_2, x_3 上的插值多项式，$p_{2,3,4}(x)$ 是在两个节点 x_2, x_3, x_4 上的插值多项式，$\cdots$

当 $n=4$ 时，以上过程可以产生下表:

$$
\begin{array}{c|ccccc}
x_0 & p_0(x) & & & & \\
x_1 & p_1(x) & p_{0,1}(x) & & & \\
x_2 & p_2(x) & p_{1,2}(x) & p_{0,1,2}(x) & & \\
x_3 & p_3(x) & p_{2,3}(x) & p_{1,2,3}(x) & p_{0,1,2,3}(x) & \\
x_4 & p_4(x) & p_{3,4}(x) & p_{2,3,4}(x) & p_{1,2,3,4}(x) & p_{0,1,2,3,4}(x)
\end{array}
$$

不难验证 $p_{0,1,2,3,4}(x)$ 就是在节点 x_0, x_1, x_2, x_3, x_4 上的 4 次插值多项式. 而且过程中间产生的也都是在相应节点上的插值多项式.

记 $x_{i_1}, x_{i_2}, \ldots, x_{i_k}$ 为一组 $(k$ 个$)$ 插值节点，$p_{i_1,i_2,\ldots,i_k}(x)$ 为在这 k 个节点上的插值多项式，上表中的每个多项式都具有

$$
p_{j,j+1,\ldots,j+m}(x), \quad j=0,1,2,\ldots,n;\ m=0,1,\ldots,n,\ j+m\leq n
$$

的形式.

抽象的描述：任取两个插值节点 x_j, x_i, $i > j$，递归地定义多项式

$$p_{j,j+1,\dots,i}(x) = \frac{x - x_j}{x_j - x_i} p_{j,j+1,\dots,i-1}(x) + \frac{x - x_i}{x_i - x_j} p_{j+1,j+2,\dots,i}(x) \tag{6}$$

为简化记号，记

$$p_{ji}(x) = p_{j,j+1,\dots,i}(x), \quad n \geq i > j \geq 0$$

可以证明 $p_{ji}(x)$ 就是 $f(x)$ 在 $i - j + 1$ 个插值节点 $x_j, x_{j+1}, \dots, x_i$ 上的插值多项式 (见下面的定理).
递推公式(6)可以写成

$$p_{ji}(x) = \frac{x - x_j}{x_j - x_i} p_{i-1,j}(x) + \frac{x - x_i}{x_i - x_j} p_{i,j+1}(x) \tag{7}$$

定理 ($p_{ij}(x)$ 的插值性质)

$$p_{ji}(x_k) = f(x_k), \quad k = j, j+1, \dots, i$$

多项式插值的截断误差

多项式插值的截断误差

定理

设函数 $f(x) \in C^{n+1}[a,b]$，$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. $p_n(x)$ 为用数据 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^n$ 确定的不高于 n 次的插值多项式. 则有

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k), \quad a < \xi < b.$$

证明：如果 x 就是插值节点，结论显然成立. 如果 x 不是插值节点，让它固定，并定义

$$\begin{aligned} w(t) &= \prod_{i=0}^{n} (t - x_i) && \text{(关于 } t \text{ 的多项式)} \\ c &= \frac{f(x) - p_n(x)}{w(x)} && \text{(常数)} \\ \varphi(t) &= f(t) - p_n(t) - c w(t) && \text{(关于 } t \text{ 的函数)} \end{aligned} \tag{8}$$

注意 $w(x) \neq 0$.
$\varphi(t)$ 有 $n+2$ 个零点 $x_0, x_1, \ldots, x_n, x$.
由 Rolle 定理，$\varphi'(t)$ 有 $n+1$ 个零点，$\varphi''(t)$ 有 n 个零点，$\varphi'''(t)$ 有 $n-1$ 个零点，$\cdots$，$\varphi^{(n+1)}(t)$ 有 1 个零点，即存在 $\xi \in (a,b)$ 使得

$$0 = \varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - p_n^{(n+1)}(\xi) - cw^{(n+1)}(\xi)$$

显然 $p_n^{(n+1)}(\xi) = 0$，因为 $p(t)$ 是不高于 n 次的多项式.
而 $w^{(n+1)}(\xi) = (n+1)!$.
所以有

$$0 = \varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - c(n+1)! = f^{(n+1)}(\xi) - \frac{(n+1)!}{w(x)}[f(x) - p_n(x)]$$

这就是

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k).$$

$\square$

定理

设函数 $f(x) \in C[a,b]$，$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. $p_n(x)$ 为用数据 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^n$ 确定的不高于 n 次的插值多项式. 则有

$$f(x) - p_n(x) = f[x, x_0, \ldots, x_n] \prod_{j=0}^n (x - x_j), \quad x \notin \{x_0, x_1, \cdots, x_n\}.$$

证明：如果 x 等于某个插值节点，结论显然成立. 考虑 $x \in (a,b)$ 并且不是插值节点，把在 $n+2$ 个数据点 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^n, (x, f(x))$ 上的不高于 $n+1$ 阶的 Newton 插值多项式记为 $q(u)$，则有

$$q(u) = p_n(u) + f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{i=0}^n (u - x_i)$$

令 $u = x$，由于 $q(x) = f(x)$，所以

$$f(x) = p_n(x) + f[x_0, \ldots, x_n, x] \prod_{i=1}^n (x - x_i)$$

□

定理

设函数 $f(x) \in C^n[a,b]$，$x_i \in [a,b], 0 \le i \le n$ 为互异节点，则 $\exists \xi \in (a,b)$ 使得

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n] = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)$$

证明：设 $p_{n-1}(x)$ 是函数 $f(x)$ 在节点 $x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}$ 上不高于 $n-1$ 次的插值多项式，由前面的定理，一方面存在 $\xi \in (a,b)$ 使得

$$f(x_n) - p_{n-1}(x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \prod_{k=0}^{n-1} (x_n - x_k)$$

另一方面，又有

$$f(x_n) - p_{n-1}(x_n) = f[x_0, x_1, \cdots, x_{n-1}, x_n] \prod_{k=0}^{n-1} (x_n - x_k)$$

所以定理结论成立. □

引理

如果 $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, 2, \ldots, n$，其中 $h = (b-a)/n$，则对任意 $x \in [a, b]$ 都有

$$\prod_{i=0}^{n} |x - x_i| \le \frac{1}{4} h^{n+1} n!$$

- 如果 $f(x) \in C^\infty[a, b]$ 且 $\max_{x\in[a,b]} |f^{(n)}(x)| \le M, \forall\, n \in \mathbb{N}$，$M$ 与 n 无关，$p_n(x)$ 是等距节点 $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, 2, \ldots, n$ 的插值多项式，则有

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p_n(x)| \le \frac{Mh^{n+1}}{4(n+1)} \to 0, \text{ 当 } n \to +\infty.$$

- 如果只有 $f(x) \in C^\infty[a, b]$，则

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p_n(x)| \le \frac{\max_{x\in[a,b]} |f^{(n+1)}(x)|}{4(n+1)} h^{n+1}$$

当 $n \to +\infty$ 时右端很可能无界！

高次多项式插值的缺点

```
x = -5:5;
y = 1./(1+x.^2);
p = polyfit(x,y,10);
xq = -5:0.01:5;
f = polyval(p,xq);
figure
plot(x,y,'o',xq,f,'-r','Linewidth',2)
hold on
fplot(@(x) 1./(1+x.^2), [-5 5],'b','Linewidth',2)
title('Runge现象');
```

Runge 函数：$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in [-5, 5]$，无穷次可微 (蓝色).
用等距节点做 10 阶插值多项式 (红色).

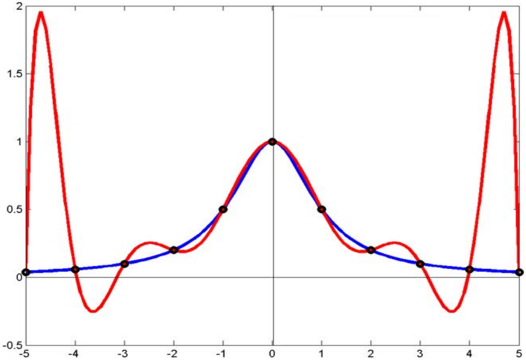


图: 等距节点高次插值多项式的 Runge 现象

等距节点 Lagrange 多项式插值过程是不稳定的.
如果插值数据有误差

$$\{(x_k, y_k)\}_{k=0}^n \ \rightarrow \ \{(x_k, \tilde{y}_k)\}_{k=0}^n$$

相应的 Lagrange 插值多项式

$$p_n(x) - \tilde{p}_n(x) = \sum_{k=0}^{n} (y_k - \tilde{y}_k) l_k(x)$$

于是有

$$\max_{a \le x \le b} |p_n(x) - \tilde{p}_n(x)| \le \Lambda_n \max_{0 \le k \le n} |y_k - \tilde{y}_k|, \ \Lambda_n = \max_{a \le x \le b} \sum_{k=0}^{n} |l_k(x)|,$$

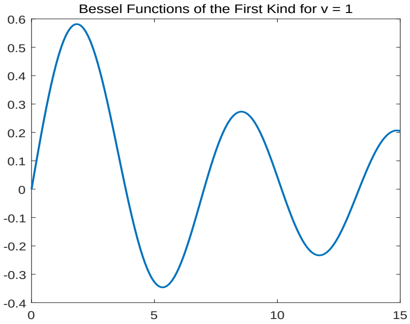
如果 $[a, b]$ 区间上的等距节点数 n 不断增加，可以证明：

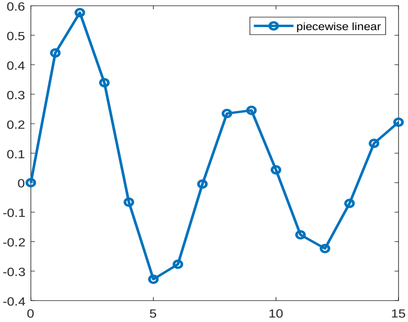
$$\Lambda_n \simeq \frac{2^{n+1}}{n \log(n)}.$$

分段线性插值

分段线性插值

分段线性插值就是将相邻插值数据用直线连起来.





很好地反应了数据点的变化趋势. 插值函数在节点处有“尖点”. 在整个区间上不再是一个多项式!
又称为一阶样条函数 (first-degree spline).

定理

设函数 $f(x) \in C^2[a, b]$. $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 为插值节点，记 $h = \max_k |x_{k+1} - x_k|$，$\phi_h(x)$ 为用数据 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^n$ 确定的分段线性插值函数. 则有

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - \phi_h(x)| \le \frac{M}{8} h^2.$$

其中 $M = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$.

- 事实上，如果只知道 $f(x) \in C[a, b]$，也能证明

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - \phi_h(x)| \to 0, \ h \to 0^+.$$

- 分段线性插值关于插值数据是稳定的.

分段三次 Hermite 插值

两点三次 Hermite 插值

Hermite 插值：不光用函数值，还用导数值的插值.
设 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 两端的数据 $f(a), f(b), f'(a), f'(b)$，要找一个三次插值多项式 $H_3(x)$ 满足插值条件：

$$H_3(a) = f(a),\ H_3(b) = f(b),\ H_3'(a) = f'(a),\ H_3'(b) = f'(b).$$

首先构造区间 $[a, b]$ 上三次多项式空间 $\mathbb{P}_3$ 的基函数

$$\alpha_1(x),\ \alpha_2(x),\ \beta_1(x),\ \beta_2(x),$$

使之满足：

$$\begin{aligned}
&\alpha_1(a) = 1,\ \alpha_1(b) = 0,\ \alpha_1'(a) = 0,\ \alpha_1'(b) = 0,\\
&\alpha_2(a) = 0,\ \alpha_2(b) = 1,\ \alpha_2'(a) = 0,\ \alpha_2'(b) = 0,\\
&\beta_1(a) = 0,\ \beta_1(b) = 0,\ \beta_1'(a) = 1,\ \beta_1'(b) = 0,\\
&\beta_2(a) = 0,\ \beta_2(b) = 0,\ \beta_2'(a) = 0,\ \beta_2'(b) = 1.
\end{aligned}$$

利用上述条件可得:

$$\alpha_1(x) = \left(1 + 2\frac{x-a}{b-a}\right)\left(\frac{x-b}{a-b}\right)^2, \quad \beta_1(x) = (x-a)\left(\frac{x-b}{a-b}\right)^2,$$
$$\alpha_2(x) = \left(1 + 2\frac{x-b}{a-b}\right)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2, \quad \beta_2(x) = (x-b)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)^2.$$

$[a, b]$ 区间上的两点三次 Hermite 插值多项式 $H_3(x)$ 的表达式为

$$H_3(x) = f(a)\alpha_1(x) + f(b)\alpha_2(x) + f'(a)\beta_1(x) + f'(b)\beta_2(x).$$

定理

设 $f(x) \in C^4[a, b]$，则有

$$|f(x) - H_3(x)| \le \frac{M}{384}(b-a)^4$$

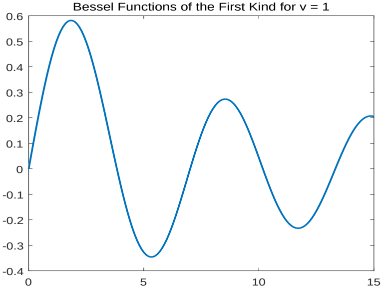
其中 $M = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$. 并且 $H_3(x)$ 关于插值数据是稳定的.

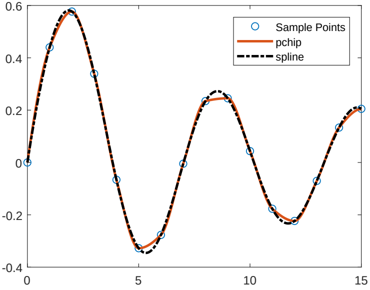
分段三次 Hermite 插值

设 $f(x)$ 在 [a,b] 区间上定义，并且已知它在 n 个点处的函数值和导数值

$$(x_k, f(x_k), f'(x_k)), \quad k = 0, 1, 2, \cdots, n.$$

在每个小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上进行两点三次 Hermite 插值，就得到 $[a, b]$ 区间上的分段三次 Hermite 插值.





分段三次 Hermite 插值

分段三次 Hermite 插值能很好地逼近被插函数.

定理

设函数 $f(x) \in C^4[a,b]$. $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 为互异插值节点，记 $h = \max_k |x_{k+1} - x_k|$， $H_h(x)$ 为用插值数据 $\{(x_k, f(x_k), f'(x_k))\}_{k=0}^n$ 确定的分段三次 Hermite 插值函数. 则有

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - H_h(x)| \leq \frac{M}{384} h^4.$$

其中 $M = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$.

- 插值函数 $H_h(x) \in C^1[a,b]$，没有“尖点”.
- 分段三次 Hermite 插值关于插值数据是稳定的.

Shape-Preserving Piecewise Cubic 插值

如果插值数据仅有 $\{(x_k, y_k)\}_{k=0}^n$，没有一阶导数值，可以用

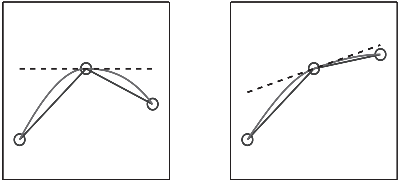
$$f'(x_k) \approx \delta_k = \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}, \quad \text{或者 } f'(x_k) \approx \delta_{k-1} = \frac{y_k - y_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}.$$

Shape-Preserving 的想法：如果 $\delta_k \delta_{k-1} \le 0$，取 $f'(x_k) = 0$；否则用 δ_{k-1}, δ_k 的调和平均 (harmonic mean).

记 $h_k = x_{k+1} - x_k$，取 $f'(x_k)$ 满足：

$$\frac{w_1 + w_2}{f'(x_k)} = \frac{w_1}{\delta_k} + \frac{w_2}{\delta_{k-1}}, \text{ 其中 } w_1 = 2h_k + h_{k-1}, w_2 = h_k + 2h_{k-1}$$

$f'(x_0), f'(x_n)$ 称为边界条件，需要另外给定.



三次样条插值

三次样条插值 (cubic spline interpolation)

定义 (三次样条):

设函数 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 区间定义. 插值数据为 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^n$. 如果函数 $S(x)$ 满足:

1. $S(x)$ 在每个区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上是不超过三次的多项式;
2. $S(x_k) = f(x_k),\ k = 0, 1, \ldots, n$;
3. $S(x) \in C^2[a,b]$.

则称 $S(x)$ 为三次样条插值函数.

记函数 $f(x)$ 在每个节点处的函数值为 y_k, 导数值为 d_k(未知).
用插值数据 $(x_k, y_k, d_k), (x_{k+1}, y_{k+1}, d_{k+1})$ 可以得到区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的三次 Hermite 插值多项式 $H^{(k)}(x)$.

显然，三次样条插值函数可以表示为

$$S(x)=\begin{cases} H^{(0)}(x), & x\in[x_0,x_1) \\ H^{(1)}(x), & x\in[x_1,x_2) \\ \vdots & \vdots \\ H^{(n-1)}(x), & x\in[x_{n-1},x_n] \end{cases}$$

在每个内部节点 $x_k(1\le k\le n-1)$ 处，在其左侧和右侧分别计算 $S''(x_k-0)$ 和 $S''(x_k+0)$，并令二者相等，就会得到一个关于 d_k 的线性方程组.

解出 d_k 就实现了三次样条插值.

未知量 $d_0,d_1,\cdots,d_n$ 有 $n+1$ 个，方程只有 $n-1$ 个，所以需要补充在两个端点 $x_0=a$, $x_n=b$ 处的边界条件. 常用的边界条件有下列三种：

1. $S'(a)=d_0$，$S'(b)=d_n$ 事先给定 (clamped，固支)
2. $S''(a)=S''(b)=0$(natural，自然)
3. $S(a)=S(b)$，$S'(a)=S'(b)$，$S''(a)=S''(b)$(periodic，周期)

以三次自然样条插值为例，记 $z_i = S''(x_i)$，$i = 0, \ldots, n$，由于 $S''(x)$ 在区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上为一次函数，所以有

$$S''(x) = \frac{z_{i+1}}{h_i}(x - x_i) + \frac{z_i}{h_i}(x_{i+1} - x), \quad x \in [x_i, x_{i+1}]$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$, $0 \le i \le n - 1$. 把此式积分两次，得到

$$\begin{aligned} S(x) =& \frac{z_{i+1}}{6h_i}(x - x_i)^3 + \frac{z_i}{6h_i}(x_{i+1} - x)^3 + \\ & + \left(\frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{6} z_{i+1}\right)(x - x_i) + \left(\frac{y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6} z_i\right)(x_{i+1} - x) \end{aligned}$$

其中 $x \in [x_i, x_{i+1}]$. 对上式求一次导数，又得

$$S'(x) = \frac{z_{i+1}}{2h_i}(x - x_i)^2 - \frac{z_i}{2h_i}(x_{i+1} - x)^2 + \frac{y_{i+1}}{h_i} - \frac{h_i}{6} z_{i+1} - \frac{y_i}{h_i} + \frac{h_i}{6} z_i$$

$$S'(x_i + 0) = -\frac{h_i}{6} z_{i+1} - \frac{h_i}{3} z_i + b_i, \quad \text{其中 } b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i}$$

类似地，在区间 $[x_{i-1}, x_i]$ 上有

$$S'(x_i - 0) = \frac{h_{i-1}}{6} z_{i-1} + \frac{h_{i-1}}{3} z_i + b_{i-1}$$

因为 $S(x) \in C^1[a, b]$，所以令 $S'(x_i - 0) = S'(x_i + 0)$ 可得

$$h_{i-1} z_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i) z_i + h_i z_{i+1} = 6(b_i - b_{i-1}),\ 1 \le i \le n-1$$

这是一个关于 z_i 的三对角线性方程组 $(z_0 = z_n = 0)$.

定理

设函数 $f(x) \in C^4[a, b]$. $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 为互异插值节点. 记 $h = \max_k |x_{k+1} - x_k|$，$S_h(x)$ 为用数据 $\{(x_k, f(x_k))\}_{k=0}^n$ 和上述三种边界条件确定的三次样条插值函数. 则有

$$\max_{x\in[a,b]} |f^{(j)}(x) - S_h^{(j)}(x)| \le C_j h^{4-j},\ \ j = 0, 1, 2.$$

其中 $M = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$，$C_0 = 5/384$, $C_1 = 1/24$, $C_2 = 3/8$.

```matlab
x = 0:pi/4:2*pi;
v = sin(x);
xq = 0:pi/16:2*pi;
figure
vq1 = interp1(x,v,xq);
plot(x,v,'o',xq,vq1,'-','Linewidth',2);
title('piecewise linear');
figure
vq2 = interp1(x,v,xq,'spline');
plot(x,v,'o',xq,vq2,':.','Linewidth',2);
xlim([0 2*pi]);
title('cubic spline');
```

```
x = -4:1:5;
y = [ 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0];
figure
plot(x ,y , 'k*-','Linewidth',2)
hold on
xq = -4:0.1:5;
y1 = interp1(x,y,xq,'pchip');
plot (xq ,y1 , 'r-','Linewidth',2)
title('piecewise cubic Hermite (shape-preserving)');
figure
plot(x ,y , 'k*-','Linewidth',2)
hold on
y2 = interp1(x,y,xq,'spline');
plot (xq ,y2 , 'g-','Linewidth',2)
title('cubic spline');
figure
plot(x ,y , 'k*-','Linewidth',2)
hold on
p = polyfit(x,y,9);
y3 = polyval(p,xq);
plot (xq ,y3 , 'c-','Linewidth',2)
title('interpolation polynomial of order 9');
```

```
figure
fplot(@(x) 1./(1+x.^2), [-5 5],'g','Linewidth',2)
hold on
x = -5:1:5;
y = 1./(1+x.^2);
xq = -5:0.05:5;
yq = interp1(x,y,xq,'spline');
plot(xq,yq,'-','Linewidth',2)
title('cubic spline');
figure
fplot(@(x) 1./(1+x.^2), [-5 5],'g','Linewidth',2)
hold on
x = -5:1:5;
y = 1./(1+x.^2);
xq = -5:0.05:5;
yq2 = interp1(x,y,xq,'pchip');
plot(xq,yq2,'-','Linewidth',2)
title('pchip');
figure
fplot(@(x) 1./(1+x.^2), [-5 5],'g','Linewidth',2)
hold on
p = polyfit(x,y,10);
yq1 = polyval(p,xq);
```

数值微分

数值微分

设 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 区间上定义, 并假定

$$a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leqslant b$$

是 $[a,b]$ 区间中的 n 个给定的节点.

数值微分问题的典型提法是：已知函数在上述节点处的函数值为

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$\cdots$	$f(x_n)$

利用这些函数值求 $f'(x)$(或 $f''(x)$，$f'''(x)$ 等) 在某些点处的近似值.

差商型数值微分公式

设节点为等距的，即 $x_{i+1} = x_i + h,\ h = (b-a)/n$，$k$ 为一个正整数，并假定 $f(x)$ 有 k 阶的微商，对 $1 \leqslant i \leqslant n-1$，有如下的 Taylor 展开式：

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \cdots + \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(\xi_1) \tag{9}$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \cdots + \frac{(-h)^k}{k!} f^{(k)}(\xi_2) \tag{10}$$

分别在上面两式中取 $k = 2, 3, 4$，并且做简单的代数运算，可得

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{1}{2} hf''(\xi_1) \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + \frac{1}{2} hf''(\xi_2) \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{1}{6} h^2 f'''(\xi_3) \\ f''(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} - \frac{1}{12} h^2 f^{(4)}(\xi_4) \end{aligned} \tag{11}$$

忽略上面各式右端的最后一项，可得用差商近似微商的如下数值微分公式.

(1) 一阶微商的**向前差商**近似:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}.$$

(2) 一阶微商的**向后差商**近似:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}.$$

(3) 一阶微商的**中心差商**近似:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}.$$

(4) 二阶微商的**中心差商**近似:

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}.$$

当 f 的各阶导函数有界时，利用(11)式，可知一阶微商的向前、向后差商近似的截断误差是 $O(h)$，一阶微商的中心差商近似的截断误差是 $O(h^2)$，二阶微商的中心差商近似的截断误差是 $O(h^2)$. 显然，从截断误差来看，中心差商近似优于“偏心”差商近似 (用同样多的点值，可以得到更高阶的精度).

从(11)式还可看出，h 越小，数值微分公式的截断误差也越小，但是，由于舍入误差的存在，使用上述数值微分公式时，不能把 h 取得太小. 请看下例.

例 假定在字长为 9 的十进制数系下用向前差商公式求 $f(x) = e^x$ 在 $x = 1.15$ 处的导数值, 则其绝对误差如下表所示:

h	10^{-3}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-9}
误差	0.002	-0.0002	0.04	3.2

观察上表我们发现, 在实际计算时，并非步长 h 取得越小, 计算精度越高.

为了改进差商公式的数值稳定性，还可以利用 Taylor 展开构造**隐式数值微分格式**. 下面就来导出计算一阶微商的隐式数值微分格式. 在 (9) 式和 (10) 式中取 $k=6$ 并将两式相加，可得

$$f''(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-2f(x_i)+f(x_{i-1})}{h^2}-\frac{1}{12}h^2f^{(4)}(x_i)+O(h^4); \tag{12}$$

在 (9) 式和 (10) 中取 $k=7$ 并将两式相减，可得

$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(x_i)-\frac{h^4}{120}f^{(5)}(x_i)+O(h^6). \tag{13}$$

由 (12) 式可得

$$f'''(x_i)=(f')''|_{x=x_i}=\frac{f'(x_{i+1})-2f'(x_i)+f'(x_{i-1})}{h^2}-\frac{1}{12}h^2f^{(5)}(x_i)+O(h^4),$$

将此式带入 (13) 式, 有

$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}-\frac{h^2}{6}\frac{f'(x_{i+1})-2f'(x_i)+f'(x_{i-1})}{h^2}+O(h^4)$$

略去上式右端的 $O(h^4)$ 项，记 $f'(x_i)$ 的近似值为 m_i，记 $f(x_i)$ 为 f_i，得到

$$m_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{1}{6}(m_{i+1} - 2m_i + m_{i-1}), \qquad i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

再补充两个边界条件，例如假设 $f'(x_0)$, $f'(x_n)$ 已知，即假定 $m_0 = f'(x_0)$ 和 $m_n = f'(x_n)$ 已知，则可得关于 m_i 的线性代数方程组：

$$\begin{cases} 4m_1 + m_2 = \frac{3}{h}(f_2 - f_0) - m_0, \\ m_1 + 4m_2 + m_3 = \frac{3}{h}(f_3 - f_1), \\ \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ m_{n-3} + 4m_{n-2} + m_{n-1} = \frac{3}{h}(f_{n-1} - f_{n-2}), \\ m_{n-2} + 4m_{n-1} = \frac{3}{h}(f_n - f_{n-2}) - m_n. \end{cases}$$

显然，这是一个对角占优的三对角线性代数方程组，可用追赶法快速求解. 这种方法需要求解线性代数方程组，所以称为**隐式格式**，但它可以同时计算所有点的导数，而且精度较高，在微分方程数值解等领域有很多应用. 隐式格式的另一个优点是其数值稳定性比较好.

插值型求导公式

利用 $f(x)$ 在 $n+1$ 个节点的函数值，根据多项式插值方法，可以构造 n 阶插值多项式 $p_n(x)$, 使得

$$f(x) = p_n(x) + R_n(x), \qquad R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega(x),$$

其中 $\omega(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$. 我们可以用 $p_n'(x)$ 来近似 $f'(x)$，这样做的截断误差可推导如下：首先有

$$\begin{aligned} f'(x) &= p_n'(x) + R_n'(x) \\ &= p'(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega'(x) + \omega(x)\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi(x)), \end{aligned}$$

在上式中令 $x = x_i$，即得

$$f'(x_i) = p_n'(x_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_i))}{(n+1)!}\omega'(x_i).$$

这表明用 $p_n'(x_i)$ 近似 $f'(x_i)$ 的截断误差为 $\dfrac{f^{(n+1)}(\xi(x_i))}{(n+1)!}\omega'(x_i)$.

例如，$n=1$ 时，有一阶 Lagrange 插值多项式：

$$p_1(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0) + \frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1).$$

从而有

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} + \frac{f''(\xi(x_0))}{2!}(x_1-x_0), \\ f'(x_1) &= \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} - \frac{f''(\xi(x_1))}{2!}(x_1-x_0), \end{aligned}$$

这就是一阶微商的向前与向后差商近似.

再如, $n=2$ 时, 有二阶 Lagrange 插值多项式:

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+ \\ +\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$$

如果 $x_1-x_0=x_2-x_1=h$,

$$p_2'(x)=\frac{2x-x_1-x_2}{2h^2}f(x_0)-\frac{2x-x_0-x_2}{h^2}f(x_1)+\frac{2x-x_0-x_1}{2h^2}f(x_2).$$

于是可推出数值微分公式:

$$f'(x_0)\approx p_2'(x_0)=\frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h},$$

$$f'(x_1)\approx p_2'(x_1)=\frac{f(x_2)-f(x_0)}{2h},$$

$$f'(x_2)\approx p_2'(x_2)=\frac{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)}{2h},$$

以及它们的截断误差

$$
\begin{aligned}
|f'(x_0) - p_2'(x_0)| &= \left|\frac{2}{3!} f^{(3)}(\xi(x_0)) h^2\right| \leqslant \frac{M}{3} h^2, \\
|f'(x_1) - p_2'(x_1)| &= \left|\frac{1}{3!} f^{(3)}(\xi(x_1)) h^2\right| \leqslant \frac{M}{6} h^2, \\
|f'(x_2) - p_2'(x_2)| &= \left|\frac{2}{3!} f^{(3)}(\xi(x_2)) h^2\right| \leqslant \frac{M}{3} h^2,
\end{aligned}
$$

其中

$$
M = \max_{x_0 \leqslant x \leqslant x_2} |f^{(3)}(x)|.
$$

与 Taylor 展开方法相比，因为插值多项式的构造并不要求节点 x_i 是等距的，所以插值型求导方法的适用范围更广.

有些时候，还可以使用更复杂的插值 (例如，三次样条插值) 来做数值微分.

参考文献

1. Cleve Moler,
   Numerical Computing with MATLAB,
   SIAM, 2004.
2. Alfio Quarteroni, Riccardo Sacco, Fausto Saleri,
   Numerical Mathematics(2nd Edition),
   Springer, 2007.
3. Ward Cheney, David Kincaid, Numerical Mathematics and Computing (6th Edition), Thomson Brooks/Cole, 2008.
4. Walter Gander, Martin J. Gander, Felix Kwok,
   Scientific Computing: an introduction using Maple and MATLAB,
   Springer 2014.