第四章　插值与拟合

在许多实际问题及科学研究中，各因素之间往往存在着函数关系，但这种函数关系很难给出解析表达，而只是通过观察或测试得到一些离散数值。有时，虽然给出了解析表达式，但由于解析表达式过于复杂，使用或计算起来十分麻烦。于是，这就需要**建立函数的某种近似表达**，本章所讨论的**多项式插值**和**最小二乘拟合**就是函数近似表达的一种形式。

§1　插值概念与基础理论

1.1　插值问题提法

给定函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个函数值：

x	x_0	x_1	...	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	...	$f(x_n)$

（4.1）

$x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个互不相同的点，Φ 为给定的某一个函数类。若 Φ 上有函数 $\varphi(x)$，满足

$$\varphi(x_i)=f(x_i),i=0,1,2,\cdots,n \quad \textbf{（4.2）}$$

则称 $\varphi(x)$ 为 $f(x)$ 关于结点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 在 Φ 上的**插值函数**。点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 称为**插值结点**，$[a,b]$ 称为插值区间，$f(x)$ 称为**被插函数**。

- **几何意义：**根据插值定义，插值函数实际上是一条经过平面上点 $(x_i,f(x_i))_{i=0,1,\cdots,n}$ 的曲线，这条平面曲线函数，就可

作为 $f(x)$ 的逼近函数。

- **关于函数插值，需要解决几个问题：**

（1）如何根据 $f(x)$ 的信息，**确定插值函数类** Φ 。

（2）给定了被插函数 $f(x)$ 的插值结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 及插值函数类 Φ ，满足插值条件 $\varphi(x_i)=f(x_i)_{i=0,1,\cdots,n}$ 的插值函数 $\varphi(x)$ 是否存在？若存在，则是否唯一？即插值的**存在唯一性问题**。

（3）若插值函数存在唯一，如何寻求或**构造插值函数**。

（4）$\varphi(x)$ 作为 $f(x)$ 的逼近函数，存在逼近误差，如何**估计逼近误差** $f(x)-\varphi(x)$ 。进而，当无穷加密插值结点，相应地扩充插值函数类，那么插值函数数列是否**收敛**于被插函数 $f(x)$ 。需要说明的是，$x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的大小不必按序排列。

- **插值函数的存在唯一性**

插值函数类 Φ 为一个函数空间，若插值结点数为 $n+1$，实际上给出了 $n+1$ 个限制条件，为了保证插值函数的存在唯一性，给出的插值函数空间应是 $n+1$ 维的，即 $\dim\Phi=n+1$。

任取 Φ 上 $n+1$ 个线性无关函数 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots\varphi_n(x)$，它们可作为 Φ 的一组基（函数），Φ 视为由 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots\varphi_n(x)$ 张成的空间，简记为

$$\Phi=span\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots\varphi_n(x)\}$$

于是，任取 $\varphi(x)\in\Phi$ ，则 $\varphi(x)$ 可唯一地表为

$$\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)$$

这里，（$a_0,a_1,\cdots,a_n$）称之为 $\varphi(x)$ 在基 $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$ 下的坐标。

关于插值的存在唯一性，有如下定理：

(*) **定 理** $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 为 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个互异点，$\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)\}$ 为 $n+1$ 维函数空间，则定义在 $[a,b]$ 上的函数 $f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 在 Φ 上的插值函数存在且唯一的充要条件为行列式

$$\begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \\ \varphi_0(x_{n-1}) & \varphi_1(x_{n-1}) & \cdots & \varphi_n(x_{n-1}) \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0$$

证明 若有

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \in \Phi$$

满足

$$\varphi(x_i) = f(x_i), i = 0,1,2,\cdots,n$$

则 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 应满足

$$a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + \cdots + a_n\varphi_n(x_i) = f(x_i), i = 0,1,\cdots,n$$

上式实际上是关于 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的一个 $n+1$ 阶线方程组，由**克莱姆定理**，线性方程组的解存在且唯一的充要条件是其系数行列式不为 0，即

$$\begin{vmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \\ \varphi_0(x_{n-1}) & \varphi_1(x_{n-1}) & \cdots & \varphi_n(x_{n-1}) \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix} \neq 0$$

例 x_0,x_1 为相异两点，$\Phi=span\{1,x\}$，求 $f(x)$ 关于结点 x_0,x_1 在 Φ 上的插值函数。

解 若 $P(x)=a_0+a_1x$ 为满足插值条件的插值函数，则 a_0,a_1 满足的线性方程组系数行列式：

$$\begin{vmatrix}\varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0)\\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1)\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & x_0\\ 1 & x_1\end{vmatrix}=x_1-x_0\neq 0$$

由上述定理知，插值函数存在且唯一，且

$$a_0=\begin{vmatrix}f(x_o) & x_o\\ f(x_1) & x_1\end{vmatrix}\Big/\begin{vmatrix}1 & x_0\\ 1 & x_1\end{vmatrix}=\frac{x_1f(x_0)-x_0f(x_1)}{x_1-x_o}$$

$$a_1=\begin{vmatrix}1 & f(x_0)\\ 1 & f(x_1)\end{vmatrix}\Big/\begin{vmatrix}1 & x_0\\ 1 & x_1\end{vmatrix}=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_o}$$

因此，$f(x)$ 关于结点 x_0,x_1 在 Φ 上的插值函数为：

$$P(x)=\frac{x_1f(x_0)-x_0f(x_1)}{x_1-x_0}+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}x$$

事实上，$P(x)$ 是过平面上点 $(x_0,f(x_0)),(x_1,f(x_1))$ 的直线。

例 求 $f(x)$ 关于结点 x_0,x_1 在 $\Phi=span\{1,x^2\}$ 的插值函数。

解 1，x^2 为 Φ 上的一组基，由定理 2.1，插值存在且唯一的充要条件为

$$\begin{vmatrix}1 & x_0^2\\ 1 & x_1^2\end{vmatrix}=x_1^2-x_0^2=(x_1+x_0)(x_1-x_0)\neq 0$$

由于 x_0,x_1 相异。因此，插值函数存在且唯一的充要条件

为 $x_1 \neq -x_0$。

（1）当 $x_1 = -x_0$ 时，或插值函数不存在，或插值函数有无穷多个，这决定于 $f(x_0)$ 与 $f(x_1)$ 是否有相同的数值。

（2）当 $x_1 \neq -x_0$ 时，插值函数存在且唯一，且有

$$P(x) = a_0 + a_1 x^2$$

$$= \begin{vmatrix} f(x_0) & x_0^2 \\ f(x_1) & x_1^2 \end{vmatrix} \Big/ \begin{vmatrix} 1 & x_0^2 \\ 1 & x_1^2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & f(x_0) \\ 1 & f(x_1) \end{vmatrix} \Big/ \begin{vmatrix} 1 & x_0^2 \\ 1 & x_1^2 \end{vmatrix} \cdot x^2$$

$$= \frac{x_1^2 f(x_0) - x_0^2 f(x_1)}{x_1^2 - x_0^2} + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1^2 - x_0^2} x^2 \text{。}$$

1.2　插值多项式的存在唯一性

构造插值函数，自然**要求插值函数类中的函数有尽可能“好”的性质**，如易于求导、求积等，**多项式**具有无穷光滑的性质，且它也易于求积及其他数值运算。若记

$$P_n = \{a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \mid a_i \in R\}$$

则 P_n 为一个 $n+1$ 维的线性空间（n 次多项式空间）。因此，具有 $n+1$ 个插值结点的插值空间，就当首推 P_n。

- **问题表述：**若 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 为 $[a,b]$ 上互异点，$f(x)$ 为定义在 $[a,b]$ 上的函数，若有

$$P_n(x) \in P_n$$

满足

$$P_n(x_i) = f(x_i),\ i = 0,1,\cdots,n \qquad \textbf{（4.4）}$$

则称 $P_n(x)$ 为 $f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的 n **次插值多项式**，其几何意义见教材图 4-1（p. 75）。

定理 1 $f(x)$ 关于 $n+1$ 个互异结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的 n 次插值多项式存在且唯一。

证明 取 P_n 上一组基 $1, x, x^2, \cdots, x^n$，设插值多项式为

$$P_n(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n \qquad \textbf{(4.3)}$$

则 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 应满足

$$a_0+a_1x_i+\cdots+a_nx_i^n=f(x_i), i=0,1,\cdots,n \qquad \textbf{(4.5)}$$

而

$$D=\begin{vmatrix}1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n\\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}=\prod_{n\geq i>j\geq 0}(x_i-x_j)$$

由于 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 互不相同，因此 $D\neq 0$，由克莱姆法则得 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 存在唯一，即 P_n 上存在且唯一的有 $P_n(x)$，满足

$$P_n(x_i)=f(x_i)\text{，} i=0,1,\cdots,n$$

所以，$f(x)$ 关于 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的 n 次插值多项式存在且唯一。

由**克莱姆定理**，n 次插值多项式 $P(x)$ 可表示为

$$P_n(x)=a_o+a_1x+\cdots+a_nx^n$$

其中 $a_i=\dfrac{D_i}{D}$，$i=0,1,2,\cdots,n$

$$D_i=\begin{vmatrix}1 & x_0 & \cdots & x_0^{i-1} & f(x_0) & x_0^{i+1} & \cdots & x_0^n\\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^{i-1} & f(x_1) & x_1^{i+1} & \cdots & x_1^n\\ & & & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & & & & \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^{i-1} & f(x_n) & x_n^{i+1} & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}$$

从代数角度考虑，$f(x)$ 关于 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的 n 次多项式已经求得，然而，这里需要计算 $n+2$ 个 $n+1$ 阶行列式 D，$D_0,D_1,\cdots,D_n$，因此，**从计算方法的角度讲，问题还没有解决。**

1.3 插值余项

多项式插值作为函数的逼近，它与被插函数的误差：

$R_n(x)=f(x)-P_n(x)$称为**插值余项**（或称**误差**），有

定理 2 若 $f\in C^{n+1}[a,b]$，互异点 $\{x_i\}_{i=0}^n\subset[a,b]$，则 $f(x)$ 以 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 为插值结点的 n 次插值多项式余项：

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad \textbf{(4.6)}$$

其中：$\min\{x_0,x_1,\cdots,x_n,x\}\le\xi=\xi(x)\le\max\{x_0,x_1,\cdots,x_n,x\}$。

证明 若 x 与某个结点相同，则 **(4.6)** 式显然成立，下设 x 不是结点。由$P_n(x_i)=f(x_i)\ (i=0,1,\cdots,n)$，得 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为余项函数 $R_n(x)$ 的零点。于是，$R_n(x)$ 可写成形成：

$$R_n(x)=K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \qquad \textbf{(4.7)}$$

作变量为 t 的**辅助函数：**

$$F(t)=f(t)-P_n(t)-K(x)(t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_n)$$

则有

$F(x_i)=0,\ i=0,1,\cdots,n$

$F(x)=f(x)-P_n(x)-K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=0$

即 $F(t)$ 至少有 $n+2$ 个零点 $x,x_0,x_1,\cdots,x_n$，由于 $f\in C^{n+1}[a,b]$，由罗尔定理，$F'(t)$至少有$n+1$个零点，反复应用罗尔定理，得$F^{(n+1)}(t)$至少有一个零点ξ，于是

$$0=F^{(n+1)}(\xi)=f^{(n+1)}(\xi)-K(x)(n+1)! \quad \textbf{(4.8)}$$

因而有：$K(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$，得

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

其中：$\min\{x_0,x_1,\cdots,x_n,x\}\le\xi=\xi(x)\le\max\{x_0,x_1,\cdots,x_n,x\}$。

若$\left|f^{(n+1)}(x)\right|$在$[a,b]$上有上界$M_{n+1}$，则有

推论 若 $f(x)\in C^{n+1}[a,b]$，且$\left|f^{(n+1)}(x)\right|\le M_{n+1}(a\le x\le b)$

则$[a,b]$上 $f(x)$ 以$\{x_i\}_{i=0}^{n}$为结点的n次插值多项式余项

$$\left|R_n(x)\right|\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\left|\omega_{n+1}(x)\right|$$

其中：$\boldsymbol{\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)}$

注：若插值点x位于插值区间$[\min_{1\le i\le n}x_i,\ \max_{1\le i\le n}x_i]$内，则该插值过程称为**内插**，否则称为**外插**。一般情况下，内插效果要比外插好一点，所以，插值结点尽可能选取在插值区间内。

例 设$f(x)\in C^2[a,b]$， $f(a)=f(b)=0$，求证

$$\max_{a\le x\le b}\left|f(x)\right|\le\frac{(b-a)^2}{8}\max_{a\le x\le b}\left|f''(x)\right|$$

证明 满足条件 $P_1(a)=P_1(b)=0$ 的线性插值多项式 $P_1(x)=0$，由**定理 2** 知，存在 $\xi\in(a,b)$，使得

$$f(x)=f(x)-P_1(x)=\frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)$$

而 $$\max_{a\le x\le b}\left|(x-a)(x-b)\right|\le\frac{(b-a)^2}{4}$$

可知结论成立。

§2 插值多项式的求法

由克莱姆法则求插值多项式，由于工作量太大，从计算的角度讲是不可行的，目前主要有**两种方法**构造插值多项式，分别是**拉格朗日型插值多项式**和**牛顿型插值多项式**。

2.1 拉格朗日(Lagrange)型插值多项式

对于给定的 $n+1$ 个互异结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$，如果能找到 P_n 上 $n+1$ 个多项式 $\{l_i(x)\}_{i=0}^n$，满足

$$l_i(x_j)=\delta_{ij}=\begin{cases}1, & i=j\\0, & i\ne j\end{cases}\quad i,j=0,1,\cdots,n \qquad \textbf{(4.9)}$$

那么

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^n l_i(x)f(x_i) \qquad \textbf{(4.11)}$$

就是 $f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的 n **次插值多项式。**

其中，$\{l_i(x)\}_{i=0}^n\subset P_n$，有 $\sum\limits_{i=0}^n l_i(x)f(x_i)\in P_n$，且有

$$L_n(x_k)=\sum_{i=0}^n l_i(x_k)f(x_i)=f(x_k),\ k=0,1,\cdots,n$$

对于确定的i，$l_i(x)$实际上是P_n上满足$n+1$个插值条件

$$l_i(x_i)=1, l_i(x_j)=0,\ j=0,1,\cdots,i-1,i+1,\cdots,n$$

的插值多项式，由**定理 1**，$l_i(x)$存在且唯一。

- **n 次多项式$l_i(x)$的构造：**

由$l_i(x_j)=0\ (j\neq i)$ 及 $l_i(x)\in P_n$,得

$$l_i(x)=\prod_{j=0,j\neq i}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)} \quad \textbf{(4.12)}$$

$\{l_i(x)\}_{i=0}^{n}$ 是一组线性无关的函数，它可作为P_n的一组基，称这组基为**关于结点$\{x_i\}_{i=0}^{n}$的 Lagrange 基**，其插值多项式称为 **Lagrange 型插值多项式**，记为$L_n(x,f)$或$L_n(x)$，即

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

(4.13)

- **注：由插值多项式的唯一性，（4.3）与（4.13）其实是同一个多项式，只不过因P_n上取基不同，其插值多项式的表达形式不同而已。插值多项式的 Lagrange 型式（4.13)比插值型式（4.3）具有许多优越性。插值函数的 Lagrange 型式简单而优雅，插值多项式的诸多理论结果也是通过其 Lagrange 型式得到的。**

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

由 $\omega'_{n+1}(x_i)=\prod_{j=0,j\neq i}^{n}(x_i-x_j)$

得，$l_i(x)$可表示为

$$l_i(x)=\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}$$

- **Lagrange 型插值多项式(4.13)可以表示成：**

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}f(x_i)$$

- **当 $\boldsymbol{n=1}$ 时，即可得 $f(x)$ 关于 x_0,x_1 的线性插值多项式的 Lagrange 型式：**

$$L_1(x)=l_0(x)f(x_0)+l_1(x)f(x_1)$$

$$=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}f(x_0)+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}f(x_1) \qquad (4.15)$$

其 Lagrange 基函数：

$$l_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1},\ l_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

例　已知 $\sqrt{2}=1.41421356,\sqrt{3}=1,73205081$，试用线性插值求 $\sqrt{2.5}$ 的值。

解　$x_0=2, f(x_0)=1.41421356, x_1=3, f(x_1)=1.73205081$，

$x=2.5$ 代入线性插值多项式 $L_1(x)$：

$$\sqrt{2.5}\approx L_1(2.5)=l_0(x)f(x_0)+l_1(x)f(x_1)$$

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

$$=\frac{2.5-3}{2-3}*1.41421356+\frac{2.5-2}{3-2}*1.73205081$$

$$=1.573132185$$

$\sqrt{2.5}=1.58113883$，有 2 位有效数字。

- **当 $\boldsymbol{n=2}$ 时，关于结点 x_0,x_1,x_2 的二次插值多项式：**

$$
\begin{aligned}
L_2(x) &= l_0(x)f(x_0)+l_1(x)f(x_1)+l_2(x)f(x_2) \\
&= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) \\
&\quad +\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)
\end{aligned}
\tag{4.16}
$$

其 Lagrange 基函数：

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

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

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

几何意义：$y=L_2(x)$ 为平面上通过点 $(x_0,f(x_0)),(x_1,f(x_1)),(x_2,f(x_2))$的二次函数，故三点插值又称**抛物插值。**

例 已知 $\sqrt{1}=1,\sqrt{2}=1.41421356,\sqrt{3}=1.73205081$，试用二次插值求 $\sqrt{2.5}$ 的值及误差估计。

解 取 $\begin{cases}x_0=1\\ y_0=1\end{cases}$, $\begin{cases}x_1=2\\ y_1=1.41421356\end{cases}$, $\begin{cases}x_2=3\\ y_2=1.73205081\end{cases}$

把 $x=2.5$ 代入 $L_2(x)$，得

$$
\begin{aligned}
L_2(x) &= \frac{(2.5-2)(2.5-3)}{(1-2)(1-3)}\times 1+\frac{(2.5-1)(2.5-3)}{(2-1)(2-3)}\times 1.41421356 \\
&\quad +\frac{(2.5-1)(2.5-2)}{(3-1)(3-2)}\times 1.73205081=1.58517922
\end{aligned}
$$

由 $R_2(x)=\frac{f'''(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{3!}$，$f'''(x)=\frac{3}{8}x^{-5/2}$，得

$$|R_2(2.5)|\le\frac{3}{8}\cdot\frac{|(2.5-1)(2.5-2)(2.5-3)|}{3!}=0.0234375$$

$\sqrt{2.5}$ 的精确值为 1.58113883，有 3 位有效数字。

例 1（见教材 p.78）.

- **（*）误差的事后估计方法**

定理 2 给出了当被插函数充分光滑时的插值误差表达式，推论给出了误差的界。但在实际计算中，涉及到高价导数，很难给出较精确的估计，所以常用误差的事后估计。

记 $L_n(x)$ 为 $f(x)$ 以 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为结点的插值多项式，对确定的 x，我们需要对误差 $f(x)-L_n(x)$ 做出估计。为此，另取一个结点 x_{n+1}，记 $L_n^{(1)}(x)$ 为 $f(x)$ 以 $x_1,x_2,\cdots,x_n,x_{n+1}$ 为结点的插值多项式，由**定理 2**，可得到

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

$$f(x)-L_n^{(1)}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_2)}{(n+1)!}(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)(x-x_{n+1})$$

若 $f^{(n+1)}(x)$ 在插值区间上变化不太大时，则

$$\frac{f(x)-L_n(x)}{f(x)-L_n^{(1)}(x)}\approx\frac{x-x_0}{x-x_{n+1}}$$

从而可得到：

$$f(x)\approx\frac{x-x_{n+1}}{x_0-x_{n+1}}L_n(x)+\frac{x-x_0}{x_{n+1}-x_0}L_n^{(1)}(x)$$

即： $f(x)-L_n(x)\approx\dfrac{x-x_0}{x_0-x_{n+1}}(L_n(x)-L_n^{(1)}(x))$

上式较好地给出了插值误差的实际估计。

例 用插值逼近方法求 $\sqrt{7}$ 的近似值。

解 作函数 $f(x)=\sqrt{x}$，$\sqrt{7}$ 为 $f(x)$ 在 $x=7$ 时的值，取 $x_0=4, x_1=9, x_2=6.25$.

用 $f(x)$ 关于 x_0, x_1, x_2 的二次插值函数在 $x=7$ 的取值作为 $f(7)=\sqrt{7}$ 的近似：

$$L_2(x)=\frac{(x-9)(x-6.25)}{(4-9)(4-6.25)}\times 2+\frac{(x-4)(x-6.25)}{(9-4)(9-6.25)}\times 3+\frac{(x-4)(x-9)}{(6.25-4)(6.25-9)}\times 2.5$$

以 $x=7$ 代入上式，得到 $L_2(7)\approx 2.64849$

在区间 $[4,9]$ 上，$\left|f^{(3)}(x)\right|$ 的界 $M_3=0.011719$，由推论，可得到比较保守的误差估计：

$$\left|R_2(7)\right|\le\frac{M_3}{3!}\left|(7-4)(7-9)(7-6.25)\right|\approx 0.00879$$

若采用事后估计方法，另取结点 $x_3=4.84$, $f(x)$ 以 x_1, x_2, x_3 为结点的插值多项式：

$$L_2^{(1)}(x)=\frac{(x-9)(x-6.25)}{(4.84-9)(4.84-6.25)}\times 2.2+\frac{(x-4.84)(x-6.25)}{(9-4.84)(9-6.25)}\times 3+\frac{(x-4.84)(x-9)}{(6.25-4.84)(6.25-9)}\times 2.5$$

以 $x=7$ 代入上式，得到

$$L_2^{(1)}(7)\approx 2.64752$$

按事后误差估计公式(2.16)，可得到

$$f(7)-L_2(7)\approx\frac{7-4}{4-4.84}(2.64849-2.64752)=-0.00346$$

它与实际误差：

$$\sqrt{7}-L_2(7)=-0.00274$$

相差无几。

2.2 差商与牛顿基本插值多项式

对于给定的$n+1$个结点$x_0,x_1,\cdots,x_n$，考虑n次多项式：

$$N_n(x)=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots$$
$$+a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \qquad (4.17)$$

满足插值条件：$N_n(x_i)=f(x_i)=y_i \quad i=0,1,\cdots,n$

称 $N_n(x)$ **是以** $x_0,x_1,\cdots,x_n$ **为结点的** n **次牛顿型插值多项式。**

系数 a_i可以通过插值条件确定，为了更简便地给出 a_i 的表达式，引入差商概念如下：

定义 1 设函数 $f(x)$ 在点 $x_0,x_1,x_2,\cdots$ 上的值依次为 $f(x_0),f(x_1),f(x_2),\cdots$. 则称

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

为 $f(x)$ 在 x_i,x_j 处的**一阶差商**。

称 $f[x_i,x_j,x_k]=\frac{f[x_j,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_i}$ 为 $f(x)$ 在 x_i,x_j,x_k 处的**二阶差商**。一般地，称 $m-1$ 阶差商的差商：

$$f[x_{i0},x_{i1},\cdots,x_{im}]=\frac{f[x_{i1},\cdots,x_{im}]-f[x_{i0},\cdots,x_{im-1}]}{x_{im}-x_{i0}}$$

为 $f(x)$ 在 $x_{i0},x_{i1},\cdots,x_{im}$ 处的 m **阶差商**。

特别地，规定**零阶差商**为：$f[x_i]=f(x_i)$ 。

- **计算相异点$\{x_i\}_{i=0}^n$的各阶差商表：**

表 4-1

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	…	n 阶差商
x_0 x_1 x_2 x_3 $\vdots$ x_n	$f(x_0)$ $f(x_1)$ $f(x_2)$ $f(x_3)$ $\vdots$ $f(x_n)$	$f[x_0,x_1]$ $f[x_1,x_2]$ $f[x_2,x_3]$ $\vdots$ $f[x_{n-1},x_n]$	$f[x_0,x_1,x_2]$ $f[x_1,x_2,x_3]$ $\vdots$ $f[x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$ $\vdots$ $f[x_{n-3},x_{n-2},x_{n-1},x_n]$	… …	$f[x_0.x_1,\cdots,x_n]$

通过归纳法，m**阶差商**可表示成$f(x_0),f(x_1),\cdots,f(x_m)$的线性组合：

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_m]$$
$$=\sum_{j=0}^{m}\frac{f(x_j)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_m)} \tag{4.18}$$

- **差商具有对称性：**任意调换结点的次序，不影响差商的值。
- **差商与牛顿型插值多项式的关系：**

由插值条件$N_n(x_i)=f(x_i)$，可得：

$$N_n(x_0)=a_0=f(x_0)\ \Rightarrow\ a_0=f(x_0)$$

$$N_n(x_1)=a_0+a_1(x_1-x_0)=f(x_1)\ \Rightarrow\ a_1=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

$$=f[x_0,x_1]$$

$$N_n(x_2) = a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = f(x_2)$$

$$\Rightarrow\ a_2 = \frac{f[x_0, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = f[x_0, x_1, x_2]$$

由归纳法，可得：

$$a_k = f[x_0, x_1, \cdots, x_k]\ (k = 0,1, \cdots, n)$$

- **以 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为结点的 n 次牛顿型插值多项式：**

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

(4.19)

- **注：**$N_n(x) \equiv L_n(x)$，只是形式不同或选取的基函数不同，其插值余项也仍为 $R_n(x)$。
- **Lagrange 插值型式的缺点在于没有承袭性质，当需要增加插值结点时，不得不重新计算基函数；Newton 插值型式具有承袭性质，即**

若已得到了 $f(x)$ 关于 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的 n 次插值多项式的 Newton 型式 $N_n(x)$，当新增加一个结点 x_{n+1} 时，只需再计算一排商差值：

$$f(x_{n+1}), f[x_n, x_{n+1}], \cdots, f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}]$$

那么，**$f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^{n+1}$ 的 $n+1$ 次插值多项式 $N_{n+1}(x)$ 只是在 $N_n(x)$ 的基础上加上最后一项：**

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

例 $f(x) = x^4 + 1, x_0 = -2, x_1 = 0, x_2 = 1, x_3 = 2$.

按差商定义，可得到如下差商表：

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
$x_0=-2$	17	-8	3	1
$x_1=0$	1	1	7	
$x_2=1$	2	15		
$x_3=2$	17			

因而，$f(x)$ 关于 x_0,x_1,x_2,x_3 的插值 Newton 型式为：

$$N_3(x)=17-8(x+2)+3(x+2)x+(x+2)x(x-1)$$

$$R_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{4!}$$

$$=(x+2)x(x-1)(x-2)\text{。}$$

注：$f(x)$ 关于 x_0,x_1,x_2 的插值 Newton 型式为：

$$N_2(x)=17-8(x+2)+3(x+2)x\text{ 。}$$

例 2 见教材 p.83。

- **插值多项式的误差(差商形式)表示：**

对任意的 x，若 $x\neq x_i$，$i=0,1,\cdots,n$，则

$$\boldsymbol{f(x)}\equiv f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$$

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

$$+f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

$$=\boldsymbol{N_n(x)}$$

$$\boldsymbol{+f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}$$

由此得到，若 $f(x)\in C^{n+1}[a,b]$，则有：

$$\boldsymbol{R_n(x)=f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)} \quad \textbf{(4.20)}$$

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

一般地，若 $f(x)\in C^n[a,b]$，则存在 $\xi\in(a,b)$，使得

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \quad \textbf{(4.21)}$$

2.3 差分与等距结点下的牛顿公式

设函数 $y=f(x)$ 在**等距结点**

$$x_k=x_0+kh \quad (k=0,1,2,\cdots) \quad \textbf{(4.22)}$$

上的值 $f(x_k)$ 已知，**步长** h 为常数。则 **Newton 插值公式中的差商可以用差分代替**，其形式更加简捷。

定义 2 函数 $y=f(x)$ 在 x_k 处以 h 为步长的**一阶向前差分：**

$$\Delta y_k \triangleq \Delta f(x_k)=f(x_{k+1})-f(x_k) \quad \textbf{(4.23)}$$

$f(x)$ 在 x_k 处的**二阶向前差分：**

$$\begin{aligned}\Delta^2 y_k \triangleq \Delta^2 f(x_k)&=\Delta\big(\Delta f(x_k)\big)=\Delta f(x_{k+1})-\Delta f(x_k)\\&=f(x_{k+2})-2f(x_{k+1})+f(x_k)\end{aligned}$$

一般性，m **阶向前差分：**

$$\begin{aligned}\Delta^m y_k \triangleq \Delta^m f(x_k)&=\Delta\big(\Delta^{m-1} f(x_k)\big)\\&=\Delta^{m-1}f(x_{k+1})-\Delta^{m-1}f(x_k) \quad \textbf{(4.24)}\end{aligned}$$

定义 3 函数 $y=f(x)$ 在 x_k 处以 h 为步长的**一阶向后差分：**

$$\nabla y_k \triangleq \nabla f(x_k)=f(x_k)-f(x_{k-1}) \quad \textbf{(4.28)}$$

$f(x)$ 在 x_k 处的**二阶向后差分：**

$$\nabla^2 y_k \triangleq \nabla^2 f(x_k) = \nabla\big(\nabla f(x_k)\big) = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$$
$$= f(x_k) - 2f(x_{k-1}) + f(x_{k-2})$$

一般性，m **阶向后差分：**

$$\nabla^m y_k \triangleq \nabla^m f(x_k) = \nabla\big(\nabla^{m-1} f(x_k)\big)$$
$$= \nabla^{m-1} f(x_k) - \nabla^{m-1} f(x_{k-1}) \qquad (4.29)$$

- **类似于差商表,我们也可以构造差分表:**

表 4-3

x_i	$f(x_i)$	$\Delta f(x_i)$	$\Delta^2 f(x_i)$	$\Delta^3 f(x_i)$	$\cdots$	$\Delta^n f(x_i)$
x_0	$f(x_0)$	$\Delta f(x_0)$	$\Delta^2 f(x_0)$	$\Delta^3 f(x_0)$	$\cdots$	$\Delta^n f(x_0)$
x_1	$f(x_1)$	$\Delta f(x_1)$	$\Delta^2 f(x_1)$	$\vdots$	$\cdots$	
x_2	$f(x_2)$	$\Delta f(x_2)$	$\vdots$	$\Delta^3 f(x_{n-3})$		
x_3	$f(x_3)$	$\vdots$	$\Delta^2 f(x_{n-2})$			
$\vdots$	$\vdots$	$\Delta f(x_{n-1})$				
x_n	$f(x_n)$					

- **在等距结点下，差商与差分关系：**

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_m] = \frac{\Delta^m f(x_0)}{m!h^m} \qquad (4.25)$$

$$f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-m}] = \frac{\nabla^m f(x_n)}{m!h^m} \qquad (4.30)$$

- **等距结点的 Newton 型多项式插值的差分形式**

引入变量 t，设 $x = x_0 + th$（有 $x - x_i = (t-i)h$ ），则**等距结点的 Newton 插值公式：**

$$N_n(x_0+th)=f(x_0)+t\Delta f(x_0)+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0)$$
$$+\cdots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f(x_0) \qquad \textbf{(4.26)}$$

公式中仅用到差分表中的第一排各阶差分值。

若 $f(x)\in C^{n+1}[a,b]$, 则**插值误差**可表为

$$R_n(x)=R_n(x_0+th)=\frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{(n+1)!}h^{n+1}f^{(n+1)}(\zeta)$$
$$\zeta\in(x_0,x_n) \qquad \textbf{(4.27)}$$

- **等距插值常被用来加密函数表。**给出的等距离散点的数目往往很大, 以 $x_0<x_1<x_2<\cdots<x_m$ 记这些等距点, 点距为 h , 函数表给出了函数在这些点的值。用插值方法加密函数表时往往只有 n （ $n<<m$ ）阶的方法。对于具体的加密点，插值结点只用到其中的 $n+1$ 个。对不同的加密点，$n+1$ 个点的选取也不同。

用牛顿插值公式计算 $f(x)$ 的近似值时, 总是先用 x 附近的信息较好, 由此, 有**牛顿表初、表末和表中公式:**

(1) 牛顿表初公式或**牛顿向前差分公式**

若 x 在 x_0 附近，选取的牛顿型插值公式为(4.26):

$$N_n(x_0+th)=f(x_0)+t\Delta f(x_0)+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f(x_0)$$
$$+\cdots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f(x_0)$$

式中的各阶差分就是差分表中的第一排值。

(2) 牛顿表末公式或**牛顿向后差分公式**

若 x 在 x_n 附近，选取的牛顿型插值公式为:

$$N_n(x)=N_n(x_n+th)=f(x_n)+f[x_n,x_{n-1}](x-x_n)$$

$$+f[x_n,x_{n-1},x_{n-2}](x-x_n)(x-x_{n-1})+\cdots$$

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

$$=f(x_n)+t\nabla f(x_n)+\frac{t(t+1)}{2!}\nabla^2 f(x_n)$$

$$+\cdots+\frac{t(t+1)\cdots(t+n-1)}{n!}\nabla^n f(x_n) \qquad \textbf{(4.31)}$$

其中：$x_k=x_n-(n-k)h$

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

$$\zeta\in(x_0,x_n) \qquad \textbf{(4.32)}$$

(3) 牛顿表中插值公式(*)

若 x 在表的中部附近，记表的中部靠近 x 的结点为 x_0，此时结点的选取为：$x_0,x_1,x_{-1},x_2,x_{-2},\cdots,x_n,x_{-n+1}$，可以得到相应的牛顿表中插值公式。

例 3　参见教材 p.87 。

定义 4　$\delta y_k=f\left(x_k+\frac{h}{2}\right)-f\left(x_k-\frac{h}{2}\right)=y_{k+\frac{1}{2}}-y_{k-\frac{1}{2}}$ 称为**一阶中心差分。**

$$\delta^m y_k=\delta^{m-1}y_{k+\frac{1}{2}}-\delta^{m-1}y_{k-\frac{1}{2}} \quad (m=2,3,\cdots)$$

称为m **阶中心差分。**

§4　埃尔米特（Hermite）插值

- **插值问题：**插值在给定的结点处，不但要求插值多项式的函数值与被插函数的函数值相同，同时还要求在结点处，插值多项式的一阶直至指定阶的导数值也与被插函数的

相应阶导数值相等。——埃尔米特（Hermite）插值。

设 $f(x)$ 为 $[a,b]$ 上充分光滑函数，对给定的插值结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 及相应的重数标号 $\{m_i\}_{i=0}^n$，当 $\sum_{i=0}^n m_i = N+1$ 时，若有 $H(x)\in P_N$ 满足：

$$H^{(l)}(x_i)=f^{(l)}(x_i),\ \ l=0,1,\cdots,m_i-1;\ i=0,1,\cdots,n$$

则称 $H(x)$ 为 $f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 及重数标号 $\{m_i\}_{i=0}^n$ 的**埃尔米特插值多项式。**

- **二重埃尔米特插值多项式**

常用的埃尔米特插值为 $m_i=2$ 的情况，即给定的插值结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 均为二重结点。即，$f(x)\in C^2[a,b]$，及插值结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$，若有 $H_{2n+1}(x)\in P_{2n+1}$，满足

$$H_{2n+1}(x_i)=f(x_i)$$

$$H'_{2n+1}(x_i)=f'(x_i),\ \ i=0,1,\cdots,n$$

称 $H_{2n+1}(x)$ 为 $f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的**二重埃尔米特插值多项式**。

注：由克拉默法则容易得到：二重埃尔米特插值多项式存在且唯一。

- **二重埃尔米特插值多项式的构造：基函数构造法**

$$H_{2n+1}(x)=\sum_{i=0}^n A_i(x)f(x_i)+\sum_{i=0}^n B_i(x)f'(x_i)$$

在 P_{2n+1} 上构造 $2n+2$ 个基函数 $\{A_i(x),B_i(x)\}_{i=0}^n$，它们分别满足

$$\begin{cases} A_i(x_j)=\delta_{ij} \\ A_i'(x_j)=0 \end{cases} \quad j=0,1,\cdots,n,\ i=0,1,\cdots n$$

及 $$\begin{cases} B_i(x_j)=0 \\ B_i'(x_j)=\delta_{ij} \end{cases} \quad j=0,1,\cdots,n,\ i=0,1,\cdots n$$

由 $x_0,x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n$ 为 $A_i(x)$ 的二重零点及 $A_i(x)\in P_{2n+1}$，有

$$A_i(x)=(a_ix+b_i)[(x-x_0)^2(x-x_1)^2\cdots(x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2\cdots(x-x_n)^2]$$

（注：可设 $A_i(x)=[a_i(x-x_i)+b_i]\prod_{j=0,\,j\neq i}^{n}(x-x_j)^2$ **，使计算更简便）**

又由 $A_i(x_i)=1$ 及 $A_i'(x_i)=0$，可得到

$$A_i(x)=[1-2(x-x_i)\sum_{j=0,\,j\neq i}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}]l_i^2(x)$$

其中，$l_i(x)$ 为关于点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的 Lagrange 基函数。用类似的方法，可得到

$$B_i(x)=(x-x_i)l_i^2(x)$$

$f(x)$ 关于结点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的**二重埃尔米特插值多项式**为：

$$H_{2n+1}(x)=\sum_{i=0}^{n}A_i(x)f(x_i)+\sum_{i=0}^{n}B_i(x)f'(x_i)$$

注：基函数构造法也适用于一般的埃尔米特多项式插值。

- **二重埃尔米特插值多项式的误差分析**

若 $f\in C^{2n+2}[a,b]$，则 $f(x)$ 关于 $[a,b]$ 上结点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的二重埃尔米特插值多项式误差为

$$f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)$$

这里， $\min\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\} \le \xi = \xi(x) \le \max\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\}$ 。

定理的证明方法与 Lagrange 插值误差定理类似。

- **具有两个结点 x_0, x_1 的二重埃尔米特插值**

为一个三次多项式，基函数分别为：

$$A_0(x) = \left[1 - 2\frac{x - x_0}{x_0 - x_1}\right]\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2$$

$$A_1(x) = \left[1 - 2\frac{x - x_1}{x_1 - x_0}\right]\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2$$

$$B_0(x) = (x - x_0)\left(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\right)^2$$

$$B_1(x) = (x - x_1)\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)^2$$

所以， $f(x)$ **关于结点 x_0, x_1 的二重埃尔米特插值多项式为：**

$$H_3(x) = A_0(x)f(x_0) + A_1(x)f(x_1) + B_0(x)f'(x_0) + B_1(x)f'(x_1)$$

若 $f \in C^4[a,b]$，则有**误差表达式**：

$$R_3(x) = f(x) - H_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x - x_0)^2(x - x_1)^2$$

例 已知函数 $f(x)$ 在结点 x_0, x_1, x_2 上的函数值 y_0, y_1, y_2 和在 x_1 处的导数值 m_1，求一个次数不超过 3 次的多项式 $P(x)$，使得

$$P(x_i) = y_i,\ i = 0,1,2; \qquad P'(x_1) = m_1$$

解 使用基函数构造法。设

$$P(x)=y_0\varphi_0(x)+y_1\varphi_1(x)+y_2\varphi_2(x)+m_1\psi(x)$$

其中 $\varphi_i(x)(i=0,1,2),\psi(x)\in P_3$，满足

$$\varphi_0(x_0)=1,\quad \varphi_0(x_1)=\varphi_0(x_2)=\varphi_0'(x_1)=0$$

$$\varphi_1(x_1)=1,\quad \varphi_1(x_0)=\varphi_1(x_2)=\varphi_1'(x_1)=0$$

$$\varphi_2(x_2)=1,\quad \varphi_2(x_0)=\varphi_2(x_1)=\varphi_2'(x_1)=0$$

$$\psi'(x_1)=1,\quad \psi(x_0)=\psi(x_1)=\psi(x_2)=0$$

可以得到

$$\varphi_0(x)=\frac{(x-x_1)^2(x-x_2)}{(x_0-x_1)^2(x_0-x_2)}$$

$$\varphi_1(x)=(x-x_0)(x-x_2)[\frac{(x_0+x_2-2x_1)}{(x_1-x_0)^2(x_1-x_2)^2}(x-x_1)$$

$$+\frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}]$$

$$\varphi_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)^2}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)^2}$$

$$\psi(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

余项为： $R(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)(x-x_1)^2(x-x_2)$

另一种构造方法见教材 p.98～99 。

§3　分段低次插值

● 龙格（Runge）现象

对于多项式插值，增加插值结点，是否能使其插值误差更小些？即**当插值次数 $n \to \infty$ 时，是否有**

$$\|f - P_n\| = \max_{a\le x\le b} |f(x) - P_n(x)| \to 0 \ ?$$

其实不然，1901 年 **Runge 给出这样一个例子：**

取 $[a,b]=[-1,1]$, $\boldsymbol{f(x)=\frac{1}{1+25x^2}}$ ，对 $[-1,1]$ 作等距分割，得等距结点 $x_0,\cdots,x_n$， $x_i=-1+ih, i=0,1,\cdots,n; h=\dfrac{2}{n}.$

作 $f(x)$ 关于等距离结点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的 n 次插值多项式 $L_n(x)$ 。对 $n=10$，插值多项式 $L_{10}(x)$ 如图 4-5 所示。从图中看出，点 x 在零附近，$L_{10}(x)$ 对 $f(x)$ 有很好的逼近效果；而点 x 距零点越远，逼近效果就越差，以致完全失真。事实上，当 $n \to \infty$ 时，$L_n(x)$ 不收敛于 $f(x)$，这种现象被称为 **Runge 现象**。

Runge 现象表明：为减少逼近误差，盲目地提高插值阶是不可取的。

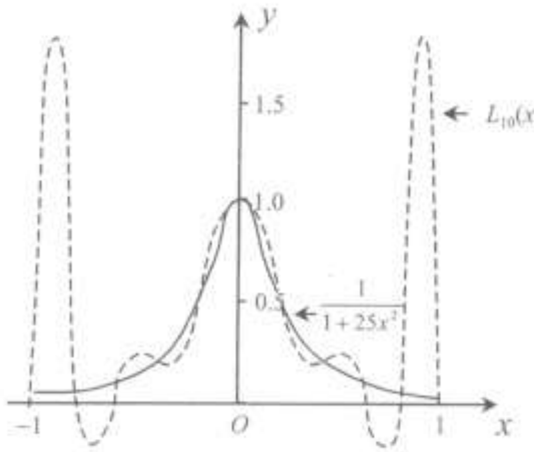


图 4-5

通过提高插值阶的方法来减小误差不可取，**一个解决办法：缩小插值区间，即分段低次插值**。

3.1 分段线性插值与分段二次插值

对给定区间$[a,b]$作分割：

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

在每个小区间$[x_{i-1}, x_i]$上作 $f(x)$ 以 x_{i-1}, x_i 为结点的线性插值，记这个插值函数为$L_1(x)$，则

$$f(x) \approx L_1(x) = f(x_{i-1})\frac{x-x_i}{x_{i-1}-x_i} + f(x_i)\frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} \quad \textbf{(4.33)}$$

—— **分段线性插值**(或**折线插值**)

- **分段线性插值函数$L_1(x)$有如下特点：**

（1）$L_1(x) \in C[a,b]$；

（2）$L_1(x)$在$[x_{i-1}, x_i]$上为一个不高于一次的多项式。

几何上看，**$L_1(x)$是平面上以点$(x_i, f(x_i))$为折点的折线（参见教材 p.89，图 4-6）。**

- **关于误差，我们有：**

若 $f(x) \in C^2[a,b]$，则： $|f(x) - L_1(x)| \le \frac{M_2}{8}h^2$

其中 $M_2 = \max\limits_{a \le x \le b}|f''(x)|$，$h_i = x_i - x_{i-1}$，$h = \max\limits_{1 \le i \le n} h_i$ 。

证明 当 $x \in [x_{i-1}, x_i]$时，由线性插值误差公式可得：

$$f(x) - L_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2!}(x - x_{i-1})(x - x_i)$$

因而

$$|f(x) - L_1(x)| \le \frac{M_2}{2}\left|(x - x_{i-1})(x - x_i)\right|$$

$$\le \frac{M_2}{2} \cdot \frac{1}{4}(x_i - x_{i-1})^2 = \frac{M_2}{8}h_i^2 \le \frac{M_2}{8}h^2$$

由此可得，**当区间分割加密，即：**$\max_i(x_i - x_{i-1}) \to 0$**时，分段线性插值**$L_1(x)$**收敛于**$f(x)$**。**

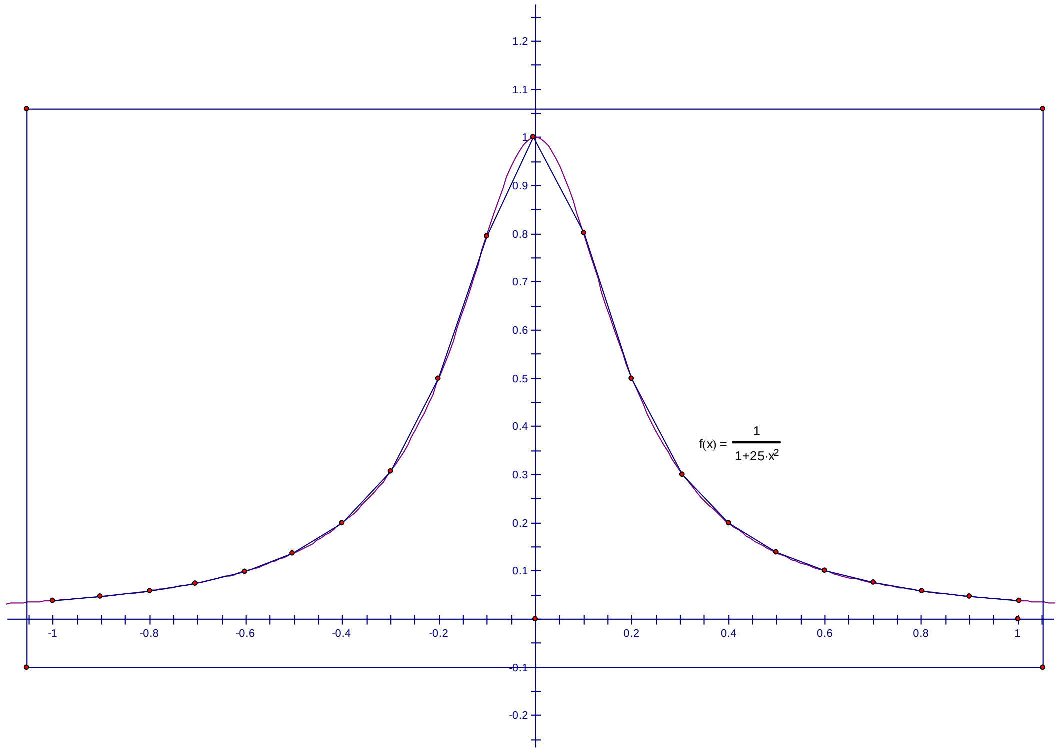
例　对于 Runge 函数 $f(x)=\dfrac{1}{1+25x^2}$，在$[-1,1]$上作步长为$h=\dfrac{2}{n}$的等距分割，$x_i=-1+ih$，$i=0,1,\cdots,n$。在这个分割上构造分段线性插值多项式$L_1(x)$，问要使误差$R(x)=f(x)-L_1(x)$的绝对值小于10^{-5}，h应该取多大？n要多大？

解　由$f(x)=\dfrac{1}{1+25x^2}$，得：$f''(x)=-50\dfrac{1-75x^2}{(1+25x^2)^3}$

因此：$|f''(x)|\le 50$，$\forall x\in[-1,1]$

于是，只要h满足：$|R(x)|\le \dfrac{50}{8}h^2<10^{-5}$

即可。由此得：$h<0.0013$，$n=\dfrac{2}{h}>1538$



注：分段线性插值有很好的收敛性质，但却是不光滑的。

类似地，为求$f(x)$的近似值，可选距点x最近的三个结点x_{i-1},x_i,x_{i+1}进行二次插值，得到

- **分段二次插值**（或**分段抛物插值**）**：**

$$f(x)\approx L_2(x)=\sum_{k=i-1}^{i+1}[f(x_i)\prod_{j=i-1,j\neq k}^{i+1}(\frac{x-x_j}{x_k-x_j})] \quad \textbf{(4.34)}$$

- ## (*) 分段三次 Hermite 插值

对$[a,b]$作分割$a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b$，若在每个小区间$[x_i,x_{i+1}]$上，作$f(x)$关于点$x_i,x_{i+1}$的二重 Hermite 插值，记这个三次插值多项式为$S_3(x)$，满足

$$S_3(x_i)=f(x_i),\quad S_3(x_{i+1})=f(x_{i+1})$$

$$S_3'(x_i)=f'(x_i),\quad S_3'(x_{i+1})=f'(x_{i+1})$$

则在$[x_i,x_{i+1}]$上

$$\mathrm{S}_3(x)=(1-2\frac{x-x_i}{x_i-x_{i+1}})(\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}})^2 f(x_i)$$

$$+(1-2\frac{x-x_{i+1}}{x_{i+1}-x_i})(\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i})^2 f(x_{i+1})$$

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

记$h_{i+1}=x_{i+1}-x_i$，上式可表为

$$S_3(x)=\frac{1}{h_{i+1}^3}[h_{i+1}+2(x-x_i)](x-x_{i+1})^2 f(x_i)$$

$$+\frac{1}{h_{i+1}^3}[h_{i+1}+2(x-x_{i+1})](x-x_i)^2 f(x_{i+1})$$

$$+\frac{1}{h_{i+1}^2}(x-x_i)(x-x_{i+1})^2 f'(x_i)$$
$$+\frac{1}{h_{i+1}^2}(x-x_{i+1})(x-x_i)^2 f'(x_{i+1})$$

把每个小区间上的三次插值函数连接在一起，就得到了 $[a,b]$ 上以 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$ 为结点的**分段三次 Hermite 插值**，记这个函数为 $S_3(x)$，$S_3(x)$ **有如下特点：**

（1）$S_3(x)\in C^1[a,b]$

（2）$S_3(x)$ 在每个小区间 $[x_i,x_{i+1}]\,(i=0,1,\cdots,n-1)$ 上为一个不高于三次的多项式。

3.2 三次样条插值

分段低次插值有很好的收敛性质，而且在每个小区间上只是一个低次的多项式，但其光滑性不够理想，往往不能满足实际问题所提出的光滑性要求。在工业设计中，对曲线的光滑性均有一定的要求，例如，飞机、船舶、汽车等外形设计中，要求外形曲线呈流线型，即要求曲线很光顺，作为逼近曲线的分段低次插值并不能满足光顺条件，为此，希望有**一条逼近曲线：它在给出的结点上与函数有相同的值，在两个结点之间为一条三次曲线，在整条曲线上有二阶连续导数，这就是三次样条（spline）函数，及三次样条插值。**

定义 5　$\Delta: a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b$ 为 $[a,b]$ 上的一个分割，若函数 $S(x)$ 满足：

（1）$S(x)$在每个子区间$[x_i, x_{i+1}]$上为不高于三次的多项式；

（2）$S(x) \in C^2(a,b)$。

则称$S(x)$为**分割**Δ上的一个**三次样条函数**。

（3）$S(x_i) = f(x_i),\ i = 0,1,\cdots,n$

则称$S(x)$为$f(x)$在Δ上的**三次样条插值函数。**

- **注：k次样条插值函数$S(x)$：**

$\Delta: a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$为$[a,b]$上的一个分割，若函数$S(x)$满足：

（1）$S(x) \in C^{k-1}(a,b)$；

（2）$S(x)$在每个小区间$[x_i, x_{i+1}]$上为不高于k次的多项式；

（3）$S(x_i) = f(x_i), i = 0,1,\cdots,n$

则称$S(x)$为$f(x)$在Δ上的k**次样条插值函数。**

对$[a,b]$上的分割Δ，若$S^{(1)}(x), S^{(2)}(x)$均为Δ上三次样函数，则它们的线性组合$\alpha S^{(1)}(x) + \beta S^{(2)}(x)$也是$\Delta$上的三次样条函数。记$S(\Delta,3)$为$\Delta$上三次样函数集合，则$S(\Delta,3)$成为一个线性空间，且$S(\Delta,3)$的维数为$n+3$（即 $4n-3(n-1)$）。

- **$f(x)$在分割Δ上的三次样条插值的提法：**

对$[a,b]$上分割$\Delta: a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$，若有$S(x) \in S(\Delta,3)$，满足

$$S(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0,1,\cdots,n$$

则称$S(x)$为$f(x)$在Δ上的**三次样条插值函数**。

由于$\dim S(\Delta,3) = n+3$，而已知条件共有$n+1$个：

$$S(x_i) = f(x_i),\ i = 0,1,\cdots,n$$

所以满足条件的三次条插值函数实际上有无穷多个。

唯一性：需要提出**另外两个限制条件。**这两个条件一般在端点提出，称为**边界条件**或**端点条件**。**边界条件通常有三种提法：**

（1）$S(x)$两端的一阶导数等于预先给定的值，即

$$S'(x_0) = y'_0,\ S'(x_n) = y'_n$$

称为 D_1 **样条**。

（2）$S(x)$两端的二阶导数值等于预先给定值，即

$$S''(x_0) = y''_0,\ S''(x_n) = y''_n$$

称为 D_2 **样条**。特别地，当$S''(x_0) = S''(x_n) = 0$时，为**自然样条**。

（3）若三次样条为以$b-a$为周期的周期函数(给出的函数应满足 $f(x_n)=f(x_0)$，此时$S(x_0+0) = S(x_n-0)$)，则称

$$S'(x_0+0) = S'(x_n-0),\quad S''(x_0+0) = S''(x_n-0)$$

为**周期样条**。

三次样条插值函数的计算：

● 三次样条插值的三斜率（三转角）方程组

对分割$\Delta: a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$，记$S(x)$为$f(x)$关于分割$\Delta: a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$的三次样条插值函数。

设 $S'(x_i) = d_i,\ i = 0,1,\cdots,n$。

在小区间$[x_i, x_{i+1}]$上，$S(x)$为一个不高于三次的多项式，记$S(x)$在$[x_i, x_{i+1}]$上的表达式为$S_i(x)$，于是有

$$S_i(x_i)=f(x_i),\quad S_i(x_{i+1})=f(x_{i+1})$$
$$S_i'(x_i)=d_i,\qquad S_i'(x_{i+1})=d_{i+1}$$

$S_i(x)$**为满足以上条件的一个三次 Hermite 插值**。记 $h_{i+1}=x_{i+1}-x_i$，得

$$S_i(x)=\frac{1}{h_{i+1}^3}[h_{i+1}+2(x-x_i)](x-x_{i+1})^2f(x_i)$$
$$+\frac{1}{h_{i+1}^3}[h_{i+1}+2(x-x_{i+1})](x-x_i)^2f(x_{i+1})$$
$$+\frac{1}{h_{i+1}^2}(x-x_i)](x-x_{i+1})^2d_i$$
$$+\frac{1}{h_{i+1}^2}(x-x_{i+1})](x-x_i)^2d_{i+1}$$

故有

$$S_i''(x)=\frac{6}{h_{i+1}^3}[h_{i+1}+2(x-x_{i+1})]f(x_i)$$
$$+\frac{6}{h_{i+1}^3}[h_{i+1}-2(x-x_i)]f(x_{i+1})$$
$$+\frac{1}{h_{i+1}^2}[6(x-x_{i+1})+2h_{i+1}]d_i$$
$$+\frac{1}{h_{i+1}^2}[6(x-x_i)-2h_{i+1}]d_{i+1}$$

同样，在$[x_{i-1},x_i]$上，$S(x)$的表达式$S_{i-1}(x)$的二阶导数函数为

$$S_{i-1}''(x)=\frac{6}{h_i^3}[h_i+2(x-x_i)]f(x_{i-1})$$
$$+\frac{6}{h_i^3}[h_i-2(x-x_{i-1})]f(x_i)$$
$$+\frac{1}{h_i^2}[6(x-x_i)+2h_i]d_{i-1}$$

$$+\frac{1}{h_i^2}[6(x-x_{i-1})-2h_i]d_i$$

由于 $S(x)\in C^2(a,b)$，故有

$$S_i''(x_i+0)=S_{i-1}''(x_i-0)$$

整理后得到关系式

$$\frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}}d_{i-1}+2d_i+\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}d_{i+1}$$
$$=3[\frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}}\cdot\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h_i}+\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}\cdot\frac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{h_{i+1}}]$$

引入记号

$$\lambda_i=\frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}},\qquad \mu_i=1-\lambda_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}$$

$$C_i=3(\lambda_i f[x_{i-1},x_i]+\mu_i f[x_i,x_{i+1}])$$

则有

- **三次样条插值的 d 关系式（或 m 关系式）：**

$$\lambda_i d_{i-1}+2d_i+\mu_i d_{i+1}=C_i, i=1,2,\cdots,n-1$$

d 关系式中包含有 $n-1$ 个线性方程，而未知量有 $n+1$ 个，需加上两个端点条件，才能解得 $\{d_i\}_{i=0}^n$ 。

（1）D_1 样条：$S(x)$ 的两端一阶导数为一个预先给定的值：

$$S'(x_0)=y_0',\ S'(x_n)=y_n'$$

对这类边界条件,只需求出内结点上 d_i $(i=1,\cdots,n-1)$ 值，它们可由线性方程组

$$
\begin{pmatrix}
2 & \mu_1 & & & \\
\lambda_2 & 2 & \mu_2 & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \\
& & & \lambda_{n-1} & 2
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} C_1 - \lambda_1 y_0' \\ C_2 \\ \vdots \\ C_{n-2} \\ C_{n-1} - \mu_{n-1} y_n' \end{pmatrix}
$$

决定。

（2）D_2 样条：$S(x)$两端的二阶导数值等于预先给定值：

$$S''(x_0) = y_0'',\ S''(x_n) = y_n''$$

由$S''(x)$在$[x_i, x_{i+1}]$的表达式，容易得到

$$2d_0 + d_1 = 3f[x_0, x_1] - \frac{h_1}{2} y_0''$$

$$d_{n-1} + 2d_n = 3f[x_{n-1}, x_n] + \frac{h_n}{2} y_n''$$

于是可得到关于$\{d_i\}_{i=0}^{n}$的一组线性方程组

$$
\begin{pmatrix}
2 & 1 & & & \\
\lambda_1 & 2 & \mu_1 & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1} \\
& & & 1 & 2
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 3f[x_0, x_1] - \frac{h_1}{2} y_0'' \\ C_1 \\ \vdots \\ C_{n-1} \\ 3f[x_{n-1}, x_n] - \frac{h_n}{2} y_n'' \end{pmatrix}
$$

（3）周期样条：若三次样条为以$b-a$为周期的周期函数（给出的函数应满足$f(x_n) = f(x_0)$，此时$S(x_0) = S(x_n)$）：

$$S'(x_0) = S'(x_n),\ S''(x_0) = S''(x_n)$$

于是，在 d 关系式中，$i = n-1$的那个方程为：

$$\lambda_{n-1} d_{n-2} + 2d_{n-1} + \mu_{n-1} d_0 = C_{n-1}$$

而由$S'(x_0)=S'(x_n)$，可得到另一关系式：

$$\lambda_0 d_{n-1}+2d_0+\mu_0 d_1=C_0$$

这里 $\lambda_0=\dfrac{h_1}{h_n+h_1},\mu_0=1-\lambda_0=\dfrac{h_n}{h_n+h_0}$

$$C_0=3(\lambda_0 f[x_{n-1},x_n]+\mu_0 f[x_0,x_1])$$

于是得到关于 $\{d_i\}_{i=0}^{n-1}$ 的线性方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & \mu_0 & & & \lambda_0 \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \\ \mu_{n-1} & & & \lambda_{n-1} & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_{n-2} \\ C_{n-1} \end{pmatrix}$$

- **三次样条插值的三弯矩方程组（M 关系式）**

对于样条插值函数 $S(x)\in C^2(a,b)$，**设**

$$S''(x_i)=M_i,\ \ i=0,1,\cdots,n$$

为待求参数。

记 $S(x)$在$[x_i,x_{i+1}]$上的表达式为$S_i(x)$，于是有

$$S_i(x_i)=f(x_i),\ \ S_i(x_{i+1})=f(x_{i+1})$$

$$S_i''(x_i)=M_i,\qquad S_i''(x_{i+1})=M_{i+1}$$

则 $S_i(x)$可表示为：

$$S_i(x)=M_i\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_{i+1}}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^3}{6h_{i+1}}$$

$$+\left(y_i-\frac{M_i}{6}h_{i+1}^2\right)\frac{x_{i+1}-x}{h_{i+1}}+(y_{i+1}-\frac{M_{i+1}}{6}h_{i+1}^2)\frac{x-x_i}{h_{i+1}}\qquad \textbf{(4.39)}$$

故有

$$S_i'(x) = -M_i \frac{(x_{i+1}-x)^2}{2h_{i+1}} + M_{i+1} \frac{(x-x_i)^2}{2h_{i+1}} + \frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}} - \frac{h_{i+1}}{6}(M_{i+1} - M_i) \qquad \textbf{(4.41)}$$

同样, 在$[x_{i-1}, x_i]$上，$S(x)$的表达$S_{i-1}(x)$的二阶导数函数为

$$S_{i-1}'(x) = -M_{i-1} \frac{(x_i-x)^2}{2h_i} + M_i \frac{(x-x_{i-1})^2}{2h_i} + \frac{y_i-y_{i-1}}{h_i} - \frac{h_i}{6}(M_i - M_{i-1})$$

由于 $S(x) \in C^2(a,b)$，故有

$$S_i'(x_i+0) = S_{i-1}'(x_i-0)$$

可得:

$$f[x_i, x_{i+1}] - \frac{h_{i+1}}{3} M_i - \frac{h_{i+1}}{6} M_{i+1} = f[x_{i-1}, x_i] + \frac{h_i}{3} M_{i-1} + \frac{h_i}{6} M_i$$

整理上式，可得到

- **三次样条插值的M关系式：**

$$\mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} = c_i,\ i = 1,2,\cdots,n-1 \qquad \textbf{(4.45)}$$

式中λ_i, μ_i定义如前，$c_i = 6f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}]$

若加上两个端点条件，通过M关系式可解得$\{M_i\}_{i=0}^n$。

下面给出不同端点条件时，$\{M_i\}_{i=0}^n$满足的方程组：

（1）D_1 **样条：**$S(x)$的两端一阶导数为一个预先给定的值:

$$S'(x_0) = y_0',\ S'(x_n) = y_n'$$

对$i=0$及$i=n-1$时的$S_i(x)$求导，并分别对x_0, x_n代入，整理后可得到:

$$2M_0 + M_1 = \frac{6}{h_1}(f[x_0, x_1] - y_0') \tag{4.46}$$

$$M_{n-1} + 2M_n = \frac{6}{h_n}(y_n' - f[x_{n-1}, x_n]) \tag{4.47}$$

得到关于 $\{M_i\}_{i=0}^{n}$ 的方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{h_1}(f[x_0, x_1] - y_0'] \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ \frac{6}{h_n}(y_n' - f[x_{n-1}, x_n]) \end{pmatrix} \tag{4.48}$$

（2）D_2 样条：$S(x)$两端的二阶导数值等于预先给定值：

$$S''(x_0) = y_0''，S''(x_n) = y_n''$$

得到关于 $\{M_i\}_{i=1}^{n-1}$ 方程组：

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 - \mu_1 y_0'' \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} - \lambda_{n-1} y_n'' \end{pmatrix} \tag{4.50}$$

（3）周期样条：若三次样条为以$b-a$为周期的周期函数（给出的函数应满足 $f(x_n) = f(x_0)$，此时$S(x_0) = S(x_n)$）：

$$S'(x_0) = S'(x_n),\ S''(x_0) = S''(x_n)$$

可得到：

$$\mu_0 M_{n-1} + 2M_0 + \lambda_0 M_1 = \frac{6}{h_1 + h_n}(f[x_0, x_1] - f[x_{n-1}, x_n])$$

这里 $\lambda_0 = \dfrac{6}{h_1 + h_n},, \mu_0 = 1 - \lambda_0 = \dfrac{h_n}{h_1 + h_n}$

而在 M 关系式中，$i = n-1$ 时的关系可改写为:

$$\mu_{n-1}M_{n-1} + 2M_{n-1} + \lambda_{n-1}M_0 = c_{n-1}$$

于是可得到关于 $\{M_i\}_{i=0}^{n-1}$ 的线性方程组:

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_0 & & & \mu_0 \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ \lambda_{n-1} & & & \mu_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{6}{h_1 + h_n}(f[x_0, x_1] - f[x_{n-1}, x_n]) \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{pmatrix} \quad \textbf{(4.52)}$$

定理 3 满足第（1）或第（2）或第（3）种边界条件的三次样条插值函数 $S(x)$存在且唯一。

例4 参见教材 p. 95 。

§6　曲线拟合的最小二乘法

- **函数逼近论的研究通常涉及两类问题：**

（1）当一个函数显式地给出时，希望用“更简单”的函数类（一般要求在给定结点上的函数值相等），比如多项式、三角多项式等来近似该函数，如函数的多项式插值等。

（2）使函数“拟合”给定的数据并在某一特定的函数类中寻找“最佳”的一个函数来表示这些数据（不要求在给定结点上的函数值相等）。

在科学实验和生产实践中，经常要**从一组实验数据$(x_i, y_i)\,(i=1,2,\cdots,m)$出发，寻求函数$y=f(x)$的一个近似表达式$y=\varphi(x)$（称为经验公式）。从几何上看**，就是根据给定的$m$个点$(x_i, y_i)$，求曲线$y=f(x)$的一条近似曲线$y=\varphi(x)$。这是一个**曲线似合**的问题。

多项式插值虽然在一定程度上解决了求函数的近似表达式问题，但它存在**缺陷：首先，由实验提供的数据通常带有测试误差；其次，实验提供的数据往往较多（即m较大），用插值法得到的近似表达式，缺乏实用价值。**

- **怎样从给定的一组实验数据出发，在某个函数类中寻求一个“最好”的函数$\varphi(x)$来拟合这组数据？**

根据拟合效果“好”、“坏”标准的不同，解决此类问题的方法也就不同。这里，我们介绍**一种最常用的曲线拟合方法，即最**

小二乘法。

6.1　最小二乘问题的提法

不要求近似曲线 $y=\varphi(x)$ 严格地通过所有数据点 (x_i, y_i)，即**不要求**拟合函数在 x_i 处的**偏差**（亦称**残差**）：

$$\delta_i=\varphi(x_i)-y_i \quad (i=1,2,\cdots,m)$$

都**严格地等于零**。但是，**为了使近似曲线能尽量反映给定数据点的变化趋势，要求 $|\delta_i|$ 都较小。**

- **几种常用的衡量标准：**

（1）选取 $\varphi(x)$，使偏差绝对值之和最小：

$$\sum_{i=1}^{m}|\delta_i|=\sum_{i=1}^{m}|\varphi(x_i)-y_i|=\min$$

（2）选取 $\varphi(x)$，使偏差最大绝大值最小：

$$\max_{1\le i\le m}|\delta_i|=\max_{1\le i\le m}|\varphi(x_i)-y_i|=\min$$

（3）选取 $\varphi(x)$，使偏差平方和最小：

$$\sum_{i=1}^{m}\delta_i^2=\sum_{i=1}^{m}[\varphi(x_i)-y_i]^2=\min \qquad \textbf{(4.53)}$$

为了便于计算、分析与应用，较多地**根据“使偏差平方和最小”的原则（称为最小二乘原则）来选取拟合曲线 $y=\varphi(x)$。**

按最小二乘原则选择拟合曲线的方法，称为最小二乘法。

- **用最小二乘法解决实际问题包含两个基本环节：**

（1）确定函数类：根据所给数据点的变化趋势与问题的实际背

景确定函数类Φ，即确定$\varphi(x)$所具有的形式；

（2）**最小二乘法求解**：按最小二乘原则，求满足**(4.53)**的最小二乘解$\varphi^*(x)$。

6.2　最小二乘解的求法

设 $\varphi(x)$具有如下形式:

$$\varphi(x) = F(a_0, a_1, \cdots, a_n, x) \qquad \textbf{(4.54)}$$

其中 $n < m$, $a_k\ (k = 0,1, \cdots, n)$ 是待定参数。

记

$$S(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=1}^{m}[F(a_0, a_1, \cdots, a_n, x_i) - y_i]^2$$

根据最小二乘法原则，求 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$，满足:

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 0,1, \cdots, n) \qquad \textbf{(4.56)}$$

由**法方程组(4.56)**的解 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$ 而得到的:

$$\varphi^*(x) = F(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*, x) \qquad \textbf{(4.55)}$$

就为所求的**最小二乘解**。

- **线性最小二乘问题**的**求法**:

在某个函数类$\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$中寻求一个函数:

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x)$$

使$\varphi^*(x)$满足条件:

$$\sum_{i=1}^{m}[\varphi^*(x_i)-y_i]^2=\min_{\varphi(x)\in\Phi}\sum_{i=1}^{m}[\varphi(x_i)-y_i]^2$$

其中 $\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)\in\Phi$ 。

此时，

$$S(a_0,a_{1,}\cdots,a_n)=\sum_{i=1}^{m}[\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i]^2$$

由 $\frac{\partial S}{\partial a_k}=0\quad(k=0,1,\cdots,n)$，得

$$\sum_{i=1}^{m}\varphi_k(x_i)[a_0\varphi_0(x_i)+\cdots+a_n\varphi_n(x_i)-y_i]=0,k=0,1,\cdots,n$$

即

$$a_0\sum_{i=1}^{m}\varphi_k(x_i)\varphi_0(x_i)+\cdots+a_n\sum_{i=1}^{m}\varphi_k(x_i)\varphi_n(x_i)=\sum_{i=1}^{m}\varphi_k(x_i)y_i$$

若引入内积记号：

$$(h,g)=\sum_{i=1}^{m}h(x_i)g(x_i) \qquad \textbf{(4.58)}$$

则上述方程组可以表示成

$$a_0(\varphi_k,\varphi_0)+\cdots+a_n(\varphi_k,\varphi_n)=(\varphi_k,f)\text{，}\quad k=0,1,\cdots,n$$

写成矩形式即：

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0)&(\varphi_0,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_0,\varphi_n)\\(\varphi_1,\varphi_0)&(\varphi_1,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_1,\varphi_n)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\(\varphi_n,\varphi_0)&(\varphi_n,\varphi_1)&\cdots&(\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\varphi_0,f)\\(\varphi_1,f)\\\vdots\\(\varphi_n,f)\end{bmatrix} \qquad \textbf{(4.59)}$$

若方程组（4.59）存在唯一解：

$$a_0 = a_0^*,\ a_1 = a_1^*, \cdots,\ a_n = a_n^*$$

则相应的函数：

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x)$$

就是满足条件**(4.53)**的**最小二乘解**。

定义 9（哈尔条件） 设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x) \in C[a,b]$的任意线性组合在点集 $\{x_i\}_{i=1}^m$ $(m \geq n+1)$ 上至多只有 n 个不同的零点，则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在集合 $\{x_i\}_{i=1}^m$ 上满足哈尔（Haar）条件。

当 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$在集合 $\{x_i\}_{i=1}^m$ 上满足哈尔条件时，法方程组对应的系数矩阵行列式不等于0，故方程组存在唯一解，相应的函数：$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x)$ 就是满足条件**(4.53)**的最小二乘解。

- **多项式拟合最小二乘法：**

曲线拟合的一种常用情况：取函数空间 Φ 为代数多项式函数空间，即取

$$\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_1(x) = x, \cdots,\ \varphi_n(x) = x^n$$

则可得

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=1}^m x_i^j x_i^k = \sum_{i=1}^m x_i^{j+k}, \qquad j,k = 0,1,\cdots,n$$

$$(\varphi_j, f) = \textstyle\sum_{i=1}^m x_i^j y_i,\ \ k = 0,1,\cdots,n$$

故相应的法方程组为：

$$
\begin{bmatrix}
m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^n \\
\sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
\sum_{i=1}^{m} x_i^n & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{2n}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{i=1}^{m} y_i \\
\sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\
\vdots \\
\sum_{i=1}^{m} x_i^n y_i
\end{bmatrix}
\qquad \textbf{(4.61)}
$$

- **求最小二乘法解的步骤：**

（1）根据数据$(x_i, y_i)\,(i=1,2,\cdots,m)$，确定函数空间$\Phi$和基函数$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$；

（2）根据$\varphi(x)$的特点，建立$a_k\,(k=0,1,\cdots,n)$的法方程组；

（3）通过解法方程组求取最小二乘解$\varphi^*(x)$对应的参数$a_k^*\,(k=0,1,\cdots,n)$。

下面，通过具体例子来说明**用最小二乘法解决实际问题的具体步骤与某此技巧。**

例 某种铝合金的含铝量为x (%)，其熔解为y（c），由实验测得x与y的数据如下表左边三列。试用最小二乘法建立x与y这间的经验公式。**（本例类同于教材 p. 106，例 5）**

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	36.9	181	1361.61	6678.9
2	46.7	197	2180.89	9199.9
3	63.7	235	4057.69	14969.5
4	77.8	270	6052.84	21006.0
5	84.0	283	7056.00	23772.0
6	87.5	292	7656.25	25550.0
$\sum$	396.6	1458	28856.25	101176.3

解 根据前面讨论，**解决问题的过程如下：**

（1）画草图。将表中给出的数据点(x_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,6)$描绘在坐标纸上，如下图所示。

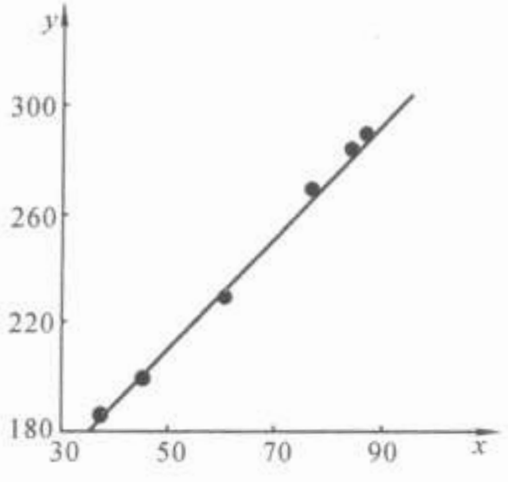


图 3-1

（2）确定拟合曲线的形式。由上图可以看出，六个点位于一条直线的附近，故可以用**线性函数**来拟合这组实验数据，即令

$$\varphi(x) = a + bx$$

其中，a, b 为待定常数。

（3）建立法方程组。由于问题归结为一次多项式拟合问题，故由**(4.61)**知，相应的法方程组为：

$$\begin{bmatrix} 6 & \sum_{i=1}^{6} x_i \\ \sum_{i=1}^{6} x_i & \sum_{i=1}^{6} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{6} y_i \\ \sum_{i=1}^{6} x_i y_i \end{bmatrix}$$

经过计算（见上表），即得确定待定数a, b的法方程组：

$$\begin{cases} 6a + 396.9b = 1458 \\ 396.6a + 28365.28b = 101176.3 \end{cases}$$

（4）解法方程组，得

$$a = 95.3524，b = 2.2337$$

将所得的结果代入方程，即得经验公式

$$\varphi(x) = 95.3524 + 2.2337\,x$$

所得经验公式能否较好地反映客观规律，还需通过实践来检验。由**经验公式**算出的函数值（称为拟合值）：

$$\varphi_i = 95.3524 + 2.2337\, x_i\,,\ i = 1,2,\cdots,6$$

与实测值之间有一定偏差。

i	1	2	3	4	5	6
x_i	36.9	46.7	63.7	77.8	84.0	87.5
φ_i	177.78	199.67	237.64	269.13	282.98	290.80
y_i	181	197	235	270	283	292
δ_i	−3.22	2.67	2.64	−0.87	−0.02	−1.20
δ_i^2	10.37	7.13	6.97	0.76	0.76	1.44
$\sum\delta_i^2$	26.6704					

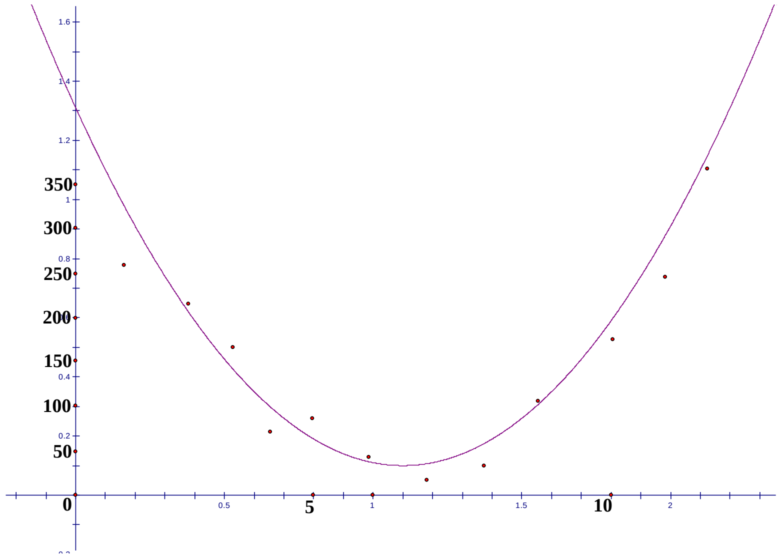
由上表可以看出，**偏差的平方和**$\sum_{i=1}^{6}\delta_i^2 = 26.6704$，其**平方根**（称为**均方误差**）$\sqrt{\sum\delta_i^2} = 5.164$，在一定程度上反映了所得经验公式的好坏。同时由表 2 可以看出，最大偏差$\max\limits_{1\le i\le 6}\left|\delta_i\right| = 3.22$。如果认为这样的误差都允许的话，我们就可以用经验公式来计算含铝量在 36.9%～87.5%之间的熔解温度。否则，就要用改变函数型增加实验数据等办法来建立新的经验公式。

例 下表记录的是某羊毛衫厂一年来羊毛衫的销售情况，销售单位为箱。试建立月份（x）与销量（y）之间的关系。

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
y	256	201	159	61	77	40	17	25	103	156	222	345

解 **(1)画草图。**将表中给出的数据点(x_i, y_i) $(i = 1,2,\cdots,12)$

描绘在坐标纸上，如下图所示。



（2）**确定拟合曲线的形式。**由上图可以看出，六个点位于一抛物线的两侧，故可以用**抛物线函数**来拟合这组实验数据，即令

$$\varphi(x)=a+bx+cx^2$$

其中，a,b,c 为待定常数。

（3）**建立法方程组。**由于问题归结为一次多项式拟合问题，故由**经验公式**知，相应的法方程组形如

$$\begin{bmatrix} 12 & \sum_{i=1}^{6} x_i & \sum_{i=1}^{6} x_i^{\ 2} \\ \sum_{i=1}^{6} x_i & \sum_{i=1}^{6} x_i^2 & \sum_{i=1}^{6} x_i^{\ 3} \\ \sum_{i=1}^{6} x_i^{\ 2} & \sum_{i=1}^{6} x_i^3 & \sum_{i=1}^{6} x_i^{\ 4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{6} y_i \\ \sum_{i=1}^{6} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{6} x_i^{\ 2} y_i \end{bmatrix}$$

经过计算，即得确定待定数 a,b,c 的法方程组：

$$\begin{bmatrix} 12 & 78 & 650 \\ 78 & 650 & 6084 \\ 650 & 6084 & 60710 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1662 \\ 11392 \\ 109750 \end{bmatrix}$$

（4）解法方程组，得

$$a=386，\ b=-113.43,\ \ c=9.04$$

将所得的结果代入方程，即得经验公式

$$\varphi(x)=386-113.43\,x+9.04x^2$$

例 6 在某化学反应里，测得生成物浓度 y（%）与时间 t（min）的数据见表 4-6，试用最小二乘法建立 t 与 y 之间的经验公式。

表 4-6

t	1	2	3	4	5	6	7	8
y	4.00	6.40	8.00	8.80	9.22	9.50	9.70	9.86
t	9	10	11	12	13	14	15	16
y	10.00	10.20	10.32	10.42	10.50	10.55	10.58	10.60

解 将已知数据点 (t_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,16)$ 描绘在坐标纸上，见下图。

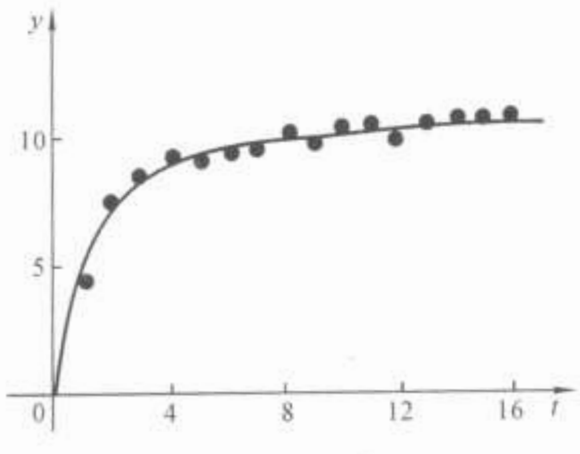


图 3-2

由上图及问题的物理背景可以看出，**拟合曲线 $y=\varphi(t)$ 应具有下列特点：**

（1） 曲线随着 t 的增加而上升，但上升速度由快到慢。

（2） 当 $t=0$，反应尚未开始，即 $y=0$；当 $t\to\infty$ 时，y 趋于某一常数。故曲线应通过原点（或者当 $t\to 0$ 时以原点为极限点），且有一水平渐近线。

具有上述特点的曲线很多，选用不同的数学模型，可以获得不同的拟合曲线与经验公式。

下面提供两种方案：

方案 1 设 $y=\varphi(t)$ 是双曲线的，并且具有下面的形式：

$$y=\frac{t}{at+b} \tag{4.62}$$

此时，若直接按最小二乘原则去确定参数 a 和 b，则问题归结为求二元函数：

$$S(a,b)=\sum_{i=1}^{16}\left(\frac{t_i}{at_i+b}-y_i\right)^2$$

的极小点，这将导致求解**非线性方程组**

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S}{\partial a}=-2\sum_{i=1}^{16}\dfrac{t_i^2}{(at_i+b)^2}\left(\dfrac{t_i}{at_i+b}-y_i\right)=0\\[2ex]\dfrac{\partial S}{\partial b}=-2\sum_{i=1}^{16}\dfrac{t_i}{(at_i+b)^2}\left(\dfrac{t_i}{at_i+b}-y_i\right)=0\end{cases}$$

给计算带来了麻烦。

可以**通过变量替换将它转化为关于待定参数的线性函数。**为

此，将**(4.62)**改写成：

$$\frac{1}{y}=a+\frac{b}{t}$$

于是，若引入新变量：$y^{(1)}=\frac{1}{y}$，$t^{(1)}=\frac{1}{t}$

则**(4.62)**就是

$$y^{(1)}=a+bt^{(1)} \qquad \textbf{(4.63)}$$

同时，由题中所给数据表 4-6 可以算出新的数据表 4-7：

表 4-7

i	1	2	3	…	16
$t_i^{(1)}=\frac{1}{t_i}$	1.00000	0.50000	0.33333	…	0.06250
$y_i^{(1)}=\frac{1}{y_i}$	0.25000	0.15625	0.12500	…	0.09434

这样**问题就归结为：根据数据表 4-7，求形如** $y^{(1)}=a+bt^{(1)}$ **的最小二乘解。**

参照例 1 的做法，解法方程组：

$$\begin{bmatrix} 16 & \sum_{i=1}^{16} t_i^{(1)} \\ \sum_{i=1}^{16} t_i^{(1)} & \sum_{i=1}^{16}[t_i^{(1)}]^2 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{16} y_i^{(1)} \\ \sum_{i=1}^{16} t_i^{(1)} y_i^{(1)} \end{pmatrix}$$

即得

$$a=80.6621，\ b=161.6822$$

代入**(4.62)**式，得**经验公式：**

$$y=\frac{t}{80.6621t+161.6822} \qquad \textbf{(4.64)}$$

方案 2 设 $y=\varphi(t)$ 具有指数形式：

$$y=ae^{b/t}\,,\quad a>0,\ b<0 \tag{4.65}$$

为了在求取参数 a 和 b 时，避免求解一个非线性方程组，对上式两边取对数：

$$\ln y=\ln a+\frac{b}{t}$$

此时若此入新变量 $y^{(2)}=\ln y,\ \ t^{(2)}=\frac{1}{t}$

并记 $A=\ln a$，$B=b$，则上式就是：

$$y^{(2)}=A+Bt^{(2)} \tag{4.66}$$

又由数据表 4-6 可算出新的数据表 4-8。

表 4-8

i	1	2	3	⋯	16
$t_i^{(2)}=1/t_i$	1.00000	0.50000	0.33333	…	0.06250
$y_i^{(2)}=\ln y_i$	1.38629	1.85360	2.07944	…	2.36085

于是**问题归结为：根据数据表 4-8，求形如 $y^{(2)}=A+Bt^{(2)}$ 的最小二乘解。**

参照方案 1，写出相应的法方程组并解之，即得：

$$A=-4.4807,\quad B=-1.0567$$

于是

$$a=e^{A}=0.011325,\quad b=B=-1.0567$$

故得**另一个经验公式：**

$$y=0.011325e^{-\frac{1.0567}{t}} \tag{4.67}$$

把两个不同的**经验公式(4.64)**和**(4.67)**进行比较（见表 4-9），**从均方误差与最大偏差两个不同的角度看，后者均优于前者。**

表 4-9

经验公式	均方误差	最大偏差
(4.64)式	1．19×10^{-3}	0．568×10^{-3}
(4.67)式	0．34×10^{-3}	0．277×10^{-3}

因此，在解决实际问题时，常常要经过反复分析，多次选择、计算与比较，才能获得较好的数学模型。

- **思考题：用最小二乘法原理，求超定线性方程组：**

$$\begin{cases} 2x+4y=11 \\ 3x-5y=3 \\ x+2y=6 \\ 2x+y=7 \end{cases}$$，**并给出均方误差。**

6.3 加权技巧的应用

在实际问题中测得的所有实验数据，并不总是等精度、等地位的。显然，对于精度高或地位较重要的那些数据(x_i, y_i)，应当给予较大的权。在这种情况下，求给定数据的拟合曲线，就要采用**加权最小二乘法**。

- **用加权最小二乘法进行曲线拟合的要求与原则是：**对于给定的一组实验数据(x_i, y_i) $(i=1,2,\cdots,m)$，要求在某个函数类$\Phi=span\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$中，寻求一个函数：

$$\varphi^*(x)=a_0^*\varphi_0(x)+a_1^*\varphi_1(x)+\cdots+a_n^*\varphi_n(x)$$

使

$$\sum_{i=1}^{m} W_i[\varphi^*(x_i) - y_i]^2 = \min_{\varphi(x)\in\Phi} \sum_{i=1}^{m} W_i[\varphi(x_i) - y_i]^2 \quad \textbf{(4.68)}$$

其中，$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \in \Phi$；$W_i$ $(i = 1, 2, \cdots, m)$ 是一列正数，称为**权**，**它的大小反映了数据** (x_i, y_i) **地位的强弱。**

- **求** $\varphi^*(x)$ **的问题可归结为求多元函数：**

$$S(a_0, a_{1,} \cdots, a_n) = \sum_{i=1}^{m} W_i[\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x_i) - y_i]^2$$

的极小点 $(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*)$。采用类似的方法，可得相应的法方程组，其中

$$\left(\varphi_{k,}\varphi_j\right) = \sum_{i=1}^{m} W_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i), \quad k, j = 0, 1, \cdots, n$$

$$\left(\varphi_{k,} f\right) = \sum_{i=1}^{m} W_i\varphi_k(x_i)y_i, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

作为特例，如果选用多项式拟合曲线：

$$\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_1(x) = x, \cdots,\ \varphi_n(x) = x^n$$

那么，**相应的法方程组：**

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} W_i & \sum_{i=1}^{m} W_i x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} W_i x_i & \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^n & \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} W_i y_i \\ \sum_{i=1}^{m} W_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} W_i x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

例 7　已知一组实验数据(x_i, y_i)及相应的权W_i，如下表所示。若x与y之间有线性关系$y = a + bx$，试用最小二乘法确定系a和b。

i	1	2	3	4
W_i	14	27	12	1
x_i	2	4	6	8
y_i	2	11	28	40

解　因为拟合曲线为一次多项式曲线（直线）：

$$\varphi(x) = a + bx$$

可得到相应的法方程组。将表中各已知数据代入即得法方程组：

$$\begin{cases} 54a + 216b = 701 \\ 216a + 984b = 3580 \end{cases}$$

解得：　$a = -12.885$，$b = 6.467$。

注： 偏差δ_i绝对值的大小与权W_i的取法有关。为了使偏差$\max_{1 \le i \le m} |\delta_i|$最小，就有**迭代权因子最小二乘法**（参见教材 p.112）。

● (*) 利用正交函数作最小二乘拟合

求解最小二乘法的法方程组中，当 $n \geq 7$ 时，法方程组往往是病态的，解决这一困难的方法之一就是**利用正交函数作最小二乘拟合**。

对于点集 $\{x_i\}$ 和权 $\{W_i\}(i=1,2,\cdots,m)$，若一组函数 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\quad(n<m)$ 满足条件：

$$(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=1}^{m}W_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)=\begin{cases}0, & k\neq j\\ A_k>0, & k=j\end{cases}$$

则称 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是关于点集 $\{x_i\}$ 带权 $\{W_i\}$ 的**正交函数族**。

若所考虑的函数类

$$\Phi = span\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$$

中的基函数 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是关于给定点集 $\{x_i\}$ 和权 $\{W_i\}$ 的正交函数族，则法方程组的系数矩阵中，**非对角线上元素** $(\varphi_k,\varphi_j)=0\ (k\neq j)$，此时**法方程组简化为：**

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & & & \\ & (\varphi_1,\varphi_1) & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\varphi_0,f)\\ (\varphi_1,f)\\ \vdots\\ (\varphi_n,f)\end{bmatrix}$$

只要由此解出

$$a_k=a_k^*,\quad k=0,1,\cdots,n$$

就可得到**最小二乘解：**

$$\varphi^*(x)=a_0^*\varphi_0(x)+a_1^*\varphi_1(x)+\cdots+a_n^*\varphi_n(x)$$

由$\left(\varphi_k,\varphi_k\right)\neq 0\ \left(k=0,1,\cdots,n\right)$，故由方程组的解为：

$$a_k^*=\frac{(\varphi_k,f)}{(\varphi_k,\varphi_k)}=\frac{\sum_{i=1}^{m}W_i\varphi_k(x_i)y_i}{\sum_{i=1}^{m}W_i[\varphi_k(x_i)]^2},\quad k=0,1,\cdots,n$$

这样，就避免了求解一个病态方程组。