由于突发恶疾住院若干天,出院之后沉迷アトリ -My Dear Moments-和萨特《存在与虚无》,故本篇记录时隔一整月.

本篇继续讨论函数插值的问题

函数插值法

在前述的两种插值法中,我们都构造了一个函数,使得至少在各个节点处与潜在的函数f(x)同值。但如果我们想要通过插值函数H(x)来刻画f(x)更加深刻的性质,如一阶导数,那么前述的两种插值方法将难以胜任。

Hermite插值

我们试图找到某插值函数H(x)使得在(n+1)个点的点集上,有:

$$\forall i \in [0, n] : H(x_i) = y_i, H'(x_i) = y_i' \tag{5.1}$$

直观地,在H(x)中蕴含了更多的信息,这样一来就可能需要更多的自由度来承载这些信息,当然我们只有(2n+2)个约束条件,因此天然地,Hermite插值不可以也不会超过(2n+1)次.

基函数构造法

与在Lagrange插值法中作的工作相似,我们同样希望找到一组基,使得它满足这一问题中的要求:我们将上述的问题分开处理:

首先找到某一类函数 $h_i(x)$, 使得对于样本点集中的点 (x_i, y_i) 有:

$$h_i(x_j)=0, j
eq i$$

$$h_i(x_j) = 1, j = i$$

同时满足:它的一阶导数在样本点集上恒为0:

$$h_i'(x_j)\equiv 0$$

这样,我们即可使用h(x)来控制插值函数的函数值而不影响其导数.

同样地,我们试图找到 $H_i(x)$,使得对于样本点集中的点 (x_i,y_i) 有:

$$H_i'(x_j) = 0, j \neq i$$

$$H_i'(x_j)=1, j=i$$

同时,它的原值应当在样本点集上恒为0:

$$H_i(x_j)\equiv 0$$

这样,我们即可使用h(x)来控制插值函数的一阶导数而不影响其原值.

幸运的是,数学家们创造性地发现了这组基的形式:

其中, $l_i(x)$ 是关于 x_i 的Lagrange基:

$$l_i(x) = rac{\prod_{j=0, j
eq i}^n (x-x_j)}{\prod_{j=0, j
eq i}^n (x_i-x_j)}$$

因此,在该方法中,每一个点-导数三元组 (x_i,y_i,y_i') 生成一项

$$y_i[1-2l_i'(x_i)(x-x_i)]l_i^2(x)+y_i'(x-x_i)l_i^2(x)$$

由此可给出Hermite插值表达式:

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

Hermite插值法拥有误差表达式

$$R_n(x) = rac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \omega_{n+1}^2(x)$$

这样的"函数值-导数"分别控制的方法有着更广阔的应用空间,如给出点集中部分拥有导函数值而其余没有,而这种形式的问题需要构造额外的基函数(如使用原基函数则待定参数数量过多),而构造这一基函数的过程需要较强的分析要求,故不建议使用基函数构造法.(课后作业习题9涉及到这一方法,可以试着做一下)

对于上述这种"不完全"的情况,误差表达式会有所变化,但总得来说,如果给出了n组原值条件,其中有m组限制了导数值(不妨设它们就是第 $0 \to (m-1)$ 个),则误差可以表示为

$$R_n(x) = rac{f^{(n+m+2)}(\xi)}{(n+m+2)!} \omega_{n+1}(x) \prod_{i=0}^{(m-1)} (x-x_i)$$

待定系数法

这种方法直接将H(x)显式地假设出来,再代入点集解方程组(5.1). 严格地来讲这种算法不能称之为方法,但在数据量较小时很好用.

降阶法

而面对稍多的数据时, 待定系数法就不那么好用了. 因此我们试图通过某种方式来减少需要处理的自由度数:

我们先通过前述的插值法求出仅在原函数值上提供保证的插值函数:

$$N(x), s.t. \forall i \in [0, n], N(x_i) = y_i$$

明显地,Hermite插值函数与N(x)存在如下的关系:

$$H(x)-N(x)=P(x)\prod_{i=0}^n(x-x_i)$$

而此时,由于H(x)是2n+1阶多项式,而N(x)是n阶多项式,故H(x)-N(x)是2n+1阶多项式,故P(n)是n阶多项式.

此时再利用 $H'(x_i) = y_i$ 对P(n)待定系数直球求解即可.

样条插值法

样条

对于一水平弹性木条,在若干点 $\{x_0,x_1,x_2,...,x_n\}$ 处施加垂直于其的外力,产生弯矩M(x),由EulerBernoulli梁方程,每两点之间的弯矩M(x)与材料杨氏模量E、产生的惯性矩I与产生曲线的曲率k(x)有如下关系:

$$M(x) = EIk(x) = EIrac{y''}{(1+y'^2)^{1.5}}$$

一般的梁难以发生大的弯曲,故y'接近于0,有:

而每两点之间没有额外的力,故产生的弯矩是线性的,故y''是一分段一次函数,故可以得知y是一拥有连续二阶导数的分段三次函数。

样条插值

因此设置第i点和第(i+1), $i \in [0,n]$ 点之间的函数表达式是 $\phi_i = a_i + b_i x + c_i x^2 + d_i x^3$,总共有n段曲线,产生4n个自由度. 接下来数数我们有什么条件:

- 1. 插值条件,在 $i\in [0,n]$ 时 $\phi(x_i)=y_i$,(n+1)个
- 2. 插值条件中有(n-1)个被两段曲线共用,属自由度的冗余,消除(n-1)个自由度(书上称为函数值连续条件)
- 3. 一阶导数连续,在(n-1)个共用点上 $\phi_i'(x_{i+1})=\phi_{i+1}'(x_{i+1})$,(n-1)个
- 4. 二阶导数连续,在(n-1)个共用点上 $\phi_i''(x_{i+1}) = \phi_{i+1}''(x_{i+1})$,(n-1)个

如此,我们拥有(4n-2)个条件,明显不能解决4n个自由度的问题.

因此我们可以通过某些人为的限定来为其附加2个限定条件,而最佳的方式就是将其附加在未被连续性约束的两个边界点 x_0, x_n 上.

常用的方式有:

- 1. $\diamondsuit \phi'(x_0) = \phi'(x_n) = 0$
- 2. $\varphi\phi''(x_0)=\phi''(x_n)=0$,此时与工程中使用的样条之情况(边界弯矩为0)符合,称为自然三次样条

我们用自然三次样条为例,指出如何求解样条:

首先假定任意第 $i \in [1, n-1]$ 段函数均有参数列表 a_i, b_i, c_i, d_i ,我们采取较为巧妙的"自底向上"方式以降低计算难度:

在每一段上, $\phi_i(x)$ 的二阶导数均是线性函数,易知在每一段上:

$$\phi_i''(x) = \phi''(x_i) rac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} - \phi''(x_{i+i}) rac{x_i - x}{x_{i+1} - x_i}$$

为简化表达,我们约定新符号 $h_i=x_{i+1}-x_i$,使用之前在"力学背景"中提到的弯矩 M_i 来代表 $\phi(x_i)$:

$$\phi_i''(x)=M_irac{x_{i+1}-x}{h_i}-M_{i+1}rac{x_i-x}{h_i}$$

为利用函数值条件,对上式执行两次积分,并适当调整积分常数的位置,得到:

$$\phi_i(x) = rac{M_i}{6h_i}(x_{i+1}-x)^3 - rac{M_{i+1}}{6h_i}(x_i-x)^3 + C(x-x_i) + D(x_{i+1}-x)$$

代入条件 $\phi_i(x_i) = y_i, \phi_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$,解出上述积分常数:

$$\phi_i(x) = rac{M_i}{6h_i}(x_{i+1}-x)^3 - rac{M_{i+1}}{6h_i}(x_i-x)^3 + (rac{y_{i+1}}{h_i} - rac{M_{i+1}h_i}{6})(x-x_i) - (rac{y_i}{h_i} - rac{M_ih_i}{6})(x-x_{i+1})$$

有了这一方程,我们就只需求解出各个弯矩 M_i ,即可得解.

我们还有一个未用的条件,即(n-1)个导数的连续性条件:

对上述方程左右求导并令 $\phi_{i-1}(x_i) = \phi_i(x_i)$,有

$$h_{i-1}M_{i-1} + 2(h_i + h_{i-1})M_i + h_iM_{i+1} = rac{6}{h_i}(y_{i+1} - y_i) - rac{6}{h_i}(y_i - y_{i-1})$$

上述方程被称为三弯矩方程,其中 $i\in[1,n-1]$. 我们令它是自然样条,即 $M_0=M_n=0$,得到一方程组(为了简化表达,我们记 $v_i=RHS$, $u_i=2(h_i+h_{i-1})$):

使用前述的"追赶法"解决之,即可得到样条插值函数.

函数逼近

函数逼近问题给出一目标函数f(x),希望提出一(容易处理的)近似函数 $\phi(x)$ 来代替f(x),以近似刻画并简化对f(x)的诸多运算.

而插值问题是给出一系列点 $\{(x_i,y_i)\}$,希望提出一拟合函数 $\phi(x)$ 以近似刻画这些点所隐含的函数关系f(x).

函数逼近法的总体过程

- 1. 提出近似函数 $\phi(x)$ 的形式并预留一些待定系数 $\{a_0, a_1, a_2, ...\}$
- 2. 使用某种误差估计手段写出误差E关于上述待定系数 $\{a_0, a_1, a_2, ...\}$ 的关系
- 3. 通过最小化误差E求出 $\{a_0, a_1, a_2, ...\}$

由于其有着便于计算的性质,我们通常使用多项式函数 $\phi(x)=\sum_{i=0}^n a_i x^i$ 来进行拟合,同时使用最小二乘法来描述误差。

在某些情况下,可能会将自变量x映射为其它的函数,如设置原型 $y=a_0+a_1e^x+a_2e^{2x}$ 逼近,则可以对逼近点列进行变换如 (e^{x_0},y_0) .

最小二乘法

"最小二乘"是一种描述误差的尺度,即使用均方误差(假使在点集P上考察),其"误差泛函"表示如下: (注:仅仅是形式不同的事物不需要讨论多次,故此处的求和符号可以为离散求和,也可以为连续积分)

$$E[\phi_A(x)] = \sum_{(x,y) \in P} (f(x) - \phi(x))^2$$

我们找出某种手段来最小化这个E即可. 幸运的是,我们在针对"形式固定-系数待定"的多项式的讨论中不需要面对上述令人生畏的泛函,而可以将其转写为:

$$E(a_0,a_1,a_2,...,a_n) = \sum_{(x,y) \in P} [y - (\sum_{i=0}^n a_i x^i)]^2$$

特别地,这种最小二乘意义下的误差是一串平方和,这意味着它必定有一个最小值,以下简单**证明**(这证明是我自己写的,虽然还挺漂亮的,但是可能有逻辑断裂可以跳过不看)

假定有一(n+1)个相互独立的自变量之函数: $f(a_0,a_1,a_2,...,a_n) = \sum_{i=0}^n a_i^2$

易知 $\forall i \in [0,n], i=0$ 时函数f取得极值,而此时其Hessian矩阵为diag(2,2,2,2,...,2),明显是正定的,因此它在此处取最小值。

我们设置 $A=(a_0,a_1,a_2,...,a_n)$,那么对于任一和A无关的(n+1)个向量 x_i 与标量 $y_i(i\in[0,n])$,我们产生一个新的(n+1)维向量 $(y_0+Ax_0,y_1+Ax_1,y_2+Ax_2,...,y_n+Ax_n)$,易知这个向量仅仅是将向量A在其空间内平移、放缩而未旋转,未实际改变该空间的拓扑性质,因此f在新的自变量列 $(y_0+Ax_0,y_1+Ax_1,y_2+Ax_2,...,y_n+Ax_n)$ 下仍拥有一唯一最小值点.

而此时,f恰可以被写为 $f(a_0,a_1,a_2,...,a_n) = \sum_{(x,y)\in P} [y-(\sum_{i=0}^n a_i x^i)]^2$

因此这提示了我们最小二乘法的解决策略:对于误差函数 $E(a_0,a_1,a_2,...,a_n)=\sum_{(x,y)\in P}[y-(\sum_{i=0}^n a_i x^i)]^2$,我们求:

$$egin{cases} rac{\partial E}{\partial a_0} = -2\sum_{(x,y)\in P}(y-\sum_{j=0}^n a_jx^j) \ rac{\partial E}{\partial a_1} = -2\sum_{(x,y)\in P}(y-\sum_{j=0}^n a_jx^j)x \ rac{\partial E}{\partial a_k} = -2\sum_{(x,y)\in P}(y-\sum_{j=0}^n a_jx^j)x^k \ rac{\partial E}{\partial a_n} = -2\sum_{(x,y)\in P}(y-\sum_{j=0}^n a_jx^j)x^n \end{cases}$$

用更为通俗的方式展开之:

$$egin{aligned} rac{\partial E}{\partial a_0} &= -2 \sum_{(x,y) \in P} [y - (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n)] \ rac{\partial E}{\partial a_1} &= -2 \sum_{(x,y) \in P} [y - (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n)] x \ ... \ rac{\partial E}{\partial a_k} &= -2 \sum_{(x,y) \in P} [y - (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n)] x^k \ ... \ rac{\partial E}{\partial a_n} &= -2 \sum_{(x,y) \in P} [y - (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n)] x^n \end{aligned}$$

令其全部为0以找到最小值,整理得到方程组

$$\begin{cases} \sum_{(x,y)\in P} y = \sum_{(x,y)\in P} a_0 + \sum_{(x,y)\in P} xa_1 + \sum_{(x,y)\in P} x^2a_2 + \dots + \sum_{(x,y)\in P} x^na_n \\ \sum_{(x,y)\in P} xy = \sum_{(x,y)\in P} xa_0 + \sum_{(x,y)\in P} x^2a_1 + \sum_{(x,y)\in P} x^3a_2 + \dots + \sum_{(x,y)\in P} x^{n+1}a_n \\ \dots \\ \sum_{(x,y)\in P} x^ky = \sum_{(x,y)\in P} x^ka_0 + \sum_{(x,y)\in P} x^{k+1}a_1 + \sum_{(x,y)\in P} x^{k+2}a_2 + \dots + \sum_{(x,y)\in P} x^{k+n}a_n \\ \dots \\ \sum_{(x,y)\in P} x^ny = \sum_{(x,y)\in P} x^na_0 + \sum_{(x,y)\in P} x^{n+1}a_1 + \sum_{(x,y)\in P} x^{n+2}a_2 + \dots + \sum_{(x,y)\in P} x^{2n}a_n \end{cases}$$

写为矩阵形式则为:

$$MA = b$$

此方程组被称为**正则方程组**. 它依据求和方式的不同,可以有两种表示形式,分别对应在离散点集上逼近和连续 点集上逼近两种情况:

1. 离散点集逼近:

$$M = egin{pmatrix} \sum_{i=0}^{m} 1 & \sum_{i=0}^{m} x & \sum_{i=0}^{m} x^{2} & \dots & \sum_{i=0}^{m} x^{n} \\ \sum_{i=0}^{m} x & \sum_{i=0}^{m} x^{2} & \sum_{i=0}^{m} x^{3} & \dots & \sum_{i=0}^{m} x^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum_{i=0}^{m} x^{k} & \sum_{i=0}^{m} x^{k+1} & \sum_{i=0}^{m} x^{k+2} & \dots & \sum_{i=0}^{m} x^{k+n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \sum_{i=0}^{m} x^{n} & \sum_{i=0}^{m} x^{n+1} & \sum_{i=0}^{m} x^{n+2} & \dots & \sum_{i=0}^{m} x^{2n} \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{m} y \\ \sum_{i=0}^{m} xy \\ \dots \\ \sum_{i=0}^{m} x^{k}y \\ \dots \\ \sum_{i=0}^{m} x^{n}y \end{pmatrix}$$

2. 连续区间逼近

$$M = egin{pmatrix} \int_a^b 1 dx & \int_a^b x dx & \int_a^b x^2 dx & ... & \int_a^b x^n dx \ \int_a^b x dx & \int_a^b x^2 dx & \int_a^b x^3 dx & ... & \int_a^b x^{n+1} dx \ dots & dots & dots & dots \ \int_a^b x^k dx & \int_a^b x^{k+1} dx & \int_a^b x^{k+2} dx & ... & \int_a^b x^{k+n} dx \ dots & dots & dots & dots \ \int_a^b x^n dx & \int_a^b x^{n+1} dx & \int_a^b x^{n+2} dx & ... & \int_a^b x^{2n} dx \ \end{pmatrix}$$

$$b = egin{pmatrix} \int_a^b f(x) dx \ \int_a^b x f(x) dx \ & \cdots \ \int_a^b x^k f(x) dx \ & \cdots \ \int_a^b x^n f(x) dx \end{pmatrix}$$

非多项式逼近,一般函数族

在上述的讨论中,我们设置逼近函数为 $\phi(x)=\sum_{i=0}^n a_i x^i$,即我们使用了函数族 $\{1,x,x^2,...,x^n,...\}$ 的某一 线性组合来逼近目标函数f(x), 且逼近点集上的各个点有着相同的"重要程度".

我们将这个过程推广开来: 我们使用一般的函数族 $\{\phi_0(x),\phi_1(x),\phi_2(x),...,\phi_n(x),...\}$ 来刻画目标函数f(x),且不同的逼近锚点(x,y)拥有不同的非负非全零(实际上权函数有严格的约束,但我们可以理解为非负非全零 (反正不会考))的"重要性"权函数 $\omega(x)$,那么,我们设置逼近函数为 $\phi(x) = \sum_{i=0}^n a_i \phi_i(x)$,在带权点集P下, 其"最小二乘"尺度下的误差可以写作:

$$E(a_0,a_1,a_2,...,a_n) = \sum_{(x,y) \in P} \omega(x) [y - (\sum_{i=0}^n a_i \phi_i(x))]^2$$

(推导过程简单,略) 为了能使矩阵变得好看一点,我们简记 $(A,B)=\sum_{(x,y)\in P}\omega(x)A(x)B(x)$ 则正则方程 组可以写作

MA = b

$$(\phi_0, \phi_1)$$
 (ϕ_0, ϕ_2) ... (ϕ_1, ϕ_1) (ϕ_1, ϕ_2) ...

$$M = egin{pmatrix} (\phi_0,\phi_0) & (\phi_0,\phi_1) & (\phi_0,\phi_2) & ... & (\phi_0,\phi_n) \ (\phi_1,\phi_0) & (\phi_1,\phi_1) & (\phi_1,\phi_2) & ... & (\phi_1,\phi_n) \ dots & dots & dots & dots \ (\phi_i,\phi_0) & (\phi_i,\phi_1) & (\phi_i,\phi_2) & ... & (\phi_i,\phi_n) \ dots & dots & dots & dots & dots \ \end{pmatrix}$$

$$b = egin{pmatrix} (\phi_0,f) \ (\phi_1,f) \ ... \ (\phi_2,f) \ ... \ (\phi_n,f) \end{pmatrix}$$

为了使得上述方程恰定,矩阵M须满秩,这对函数族提出了要求(iff指"当且仅当"):

$$\sum_{i=0}^n a_i \phi_i(x) = 0 \ \ iff. orall i \in [0,n], a_i = 0$$

这一性质被称为函数族"线性无关".

正交函数族

解线性方程组是痛苦的,故我们对上述方程组可以作出更进一步的幻想:"如果矩阵M是一个对角矩阵就再好不过了"。这样的幻想要求函数族 ϕ_i 和权函数 $\omega(x)$ 具有这样的性质:

$$egin{aligned} orall i,j \in [0,n]: i
eq j &\Longleftrightarrow \sum_{(x,y) \in P} \omega(x) \phi_i(x) \phi_j(x) = 0 \ \ orall i \in [0,n]: \sum_{(x,y) \in P} \omega(x) \phi_i(x) \phi_i(x) = a_i > 0 \end{aligned}$$

如有此性质,则称函数族 $\{\phi_i\}$ 在域P上关于权函数 $\omega(x)$ 正交. 易知一正交函数族所导出的正则方程组之系数矩阵必满秩,故正则方程组必有唯一解.

特别地,若对于任意的i,上述 $a_i = 1$,则称其为**正交-归一化函数**族. 正交-归一化函数族不仅在函数逼近中出现,在诸多领域中均有应用(如量子化学中的本征波函数)

既然正交函数族如此好用,那么是否可以将设置出的简单的非正交函数族如 $\{x^i\}$ 转化为正交函数族呢?

构造正交函数族,Gram-Schmidt正交化方法

有一线性无关函数族 $\{\phi_i(x)\}$, 重构一新的函数族 $\{\Phi_i(x)\}$:

$$\Phi_{0}(x) = \phi_{0}(x)$$

$$\Phi_{i}(x) = \begin{vmatrix} (\phi_{0}, \phi_{0}) & (\phi_{0}, \phi_{1}) & \dots & (\phi_{0}, \phi_{i-1}) & \phi_{0}(x) \\ (\phi_{1}, \phi_{0}) & (\phi_{1}, \phi_{1}) & \dots & (\phi_{1}, \phi_{i-1}) & \phi_{1}(x) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ (\phi_{i}, \phi_{0}) & (\phi_{i}, \phi_{1}) & \dots & (\phi_{i}, \phi_{i-1}) & \phi_{i}(x) \end{vmatrix}$$

此时

$$(\Phi_i,\Phi_j) = egin{cases} 0, i
eq j \ \Delta_i, i = j \end{cases}$$

其中

课本151页给出了Gram-Schmidt正交化方法的一应用实例,在153页起给出了若干常用的正交函数族.