第四章　数据建模

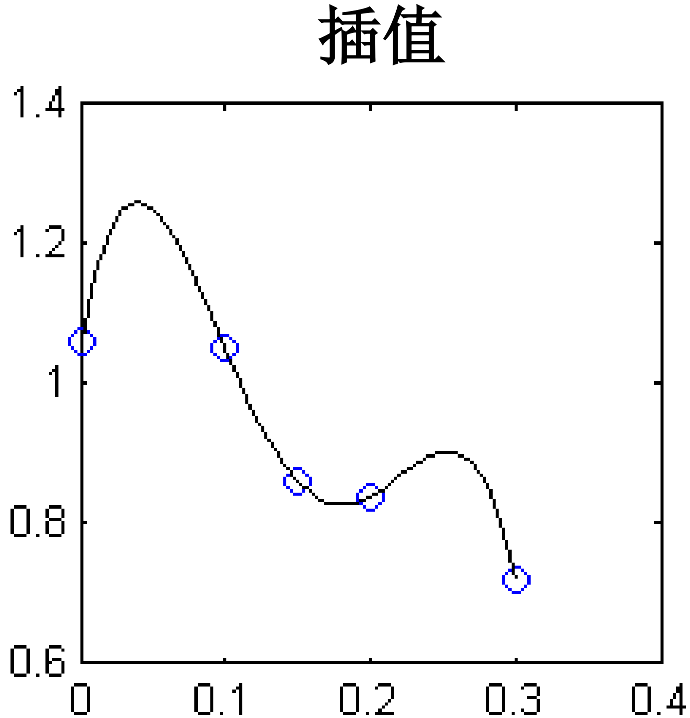
数据建模：插值和拟合

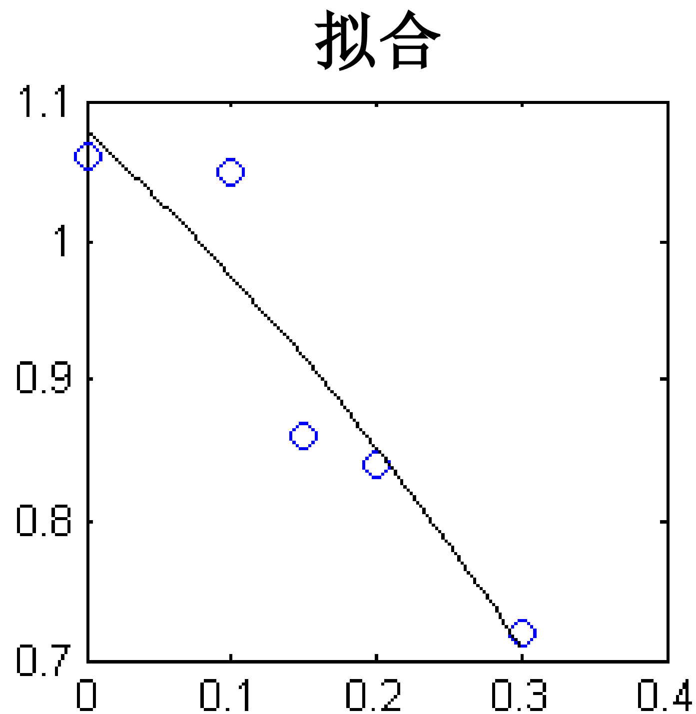
数据建模: 插值和拟合

已知函数$y=f(x)$的一批数据(x_1,y_1), (x_2,y_2), …, (x_n,y_n)，而函数表达式未知，现在要从某函数类（如多项式函数、样条函数等）中求的一个函数$\varphi(x)$作为函数$f(x)$的近似，这类数值计算问题称为数据建模。

数据建模的两类方法：插值方法，拟合方法。

插值与拟合



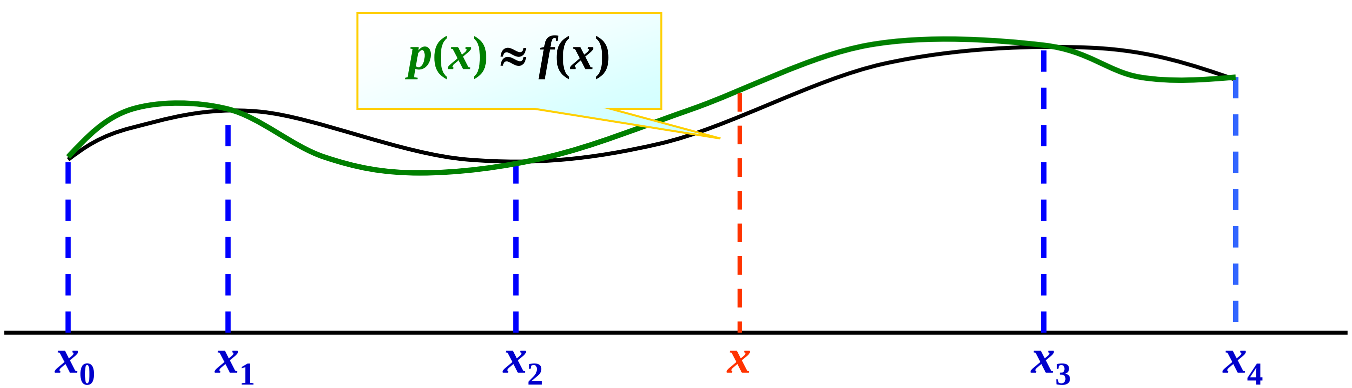


（一致拟合、最小二乘拟合）

4.1 多项式插值

- 已知函数$y=f(x)$在若干点x_i上的函数值$y_i=f(x_i)$ $(i=0,1,\ldots,n)$，一个插值问题就是求一个“简单”的函数$p(x)$满足 $\boxed{p(x_i) = y_i,}$ 这时称$p(x)$为$f(x)$的**插值函数**，而$f(x)$ 称为**插值原函数**, $x_0, x_1,\ldots,x_n$称为**插值点**。

- 最常用的插值函数是 **多项式**



当$p(x)$为不超过n次多项式时称为n次拉格朗日插值。

多项式插值（拉格朗日插值）

插值区间　　插值节点

定义 设 $y = f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上有定义，且已知它在 $n+1$ 个$\boxed{\text{互异点}}$ $a \le x_0 < x_1 \ldots < x_n \le b$ 上的函数值 $y_0, y_1, \ldots, y_n$，若存在一个$\boxed{\text{次数不超过 } n}$次的多项式

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$$

满足条件　　插值条件

$$p(x_i) = y_i \quad (i = 0, \ldots, n) \qquad (4\text{-}1)$$

则称 $p(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次**插值多项式**。

- ❑ 求函数 $f(x)$ 的近似表达式 $p(x)$ 的方法就称为**插值法**。内插、外推。

插值多项式的唯一性

定理4.1 **(唯一性)** **满足$n+1$个插值条件的n** 次插值多项式存在且唯一。

证明： 设所要构造的插值多项式为：

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

由插值条件 $P_n(x_i) = y_i$， $i = 0, 1, \cdots, n$

得到如下线性代数方程组：

$$\begin{cases} 1 \cdot a_0 + x_0 a_1 + \cdots + x_0^n a_n = y_0 \\ 1 \cdot a_0 + x_1 a_1 + \cdots + x_1^n a_n = y_1 \\ \cdots\cdots \\ 1 \cdot a_0 + x_n a_1 + \cdots + x_n^n a_n = y_n \end{cases}$$

存在唯一性定理证明(续)

此方程组的系数行列式为

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

范德蒙行列式 ！

因 $x_i \neq x_j \quad i=1,2,\cdots n; \quad j=1,2,\cdots n$ 时，

$D\neq 0$， 因此，$P_n(x)$ 由 a_0，a_1，…，a_n 唯一确定。

注：该定理的证明过程实质上给出了一种求插值多项式的一个方法，但此方法不适合计算机求解（计算量大、病态方程组（n比较大时）），**我们要寻找用计算机的求解方法。**

插值基函数

- 令 $P_n(x)$={次数不超过 n 的多项式的全体}，则 $P_n(x)$ 构成一个 $n+1$ 维线性空间，设其一组基为

$$\varphi_0(x),\ \varphi_1(x),\ \ldots,\ \varphi_n(x)$$

则插值多项式 $p_n(x)$可以被这组基线性表出，即：

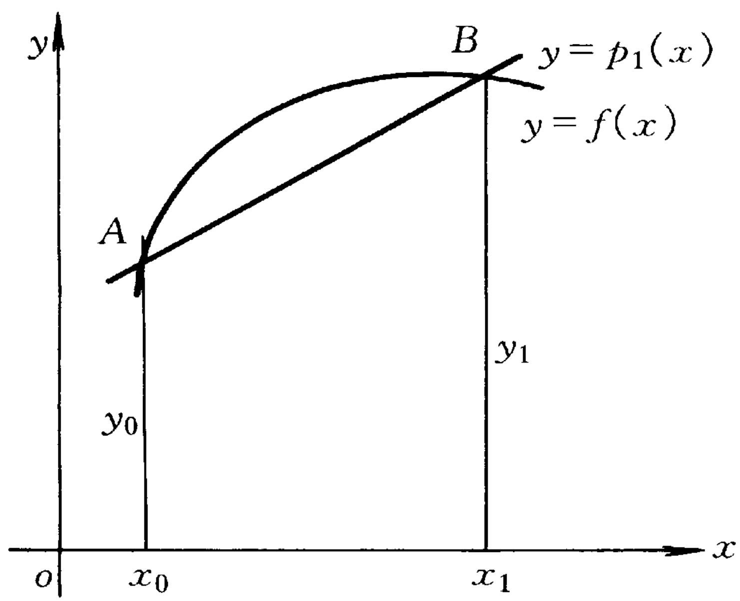
$$p(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\ldots+a_n\varphi_n(x)$$

这样就可以通过不同的基来构造插值多项式 $p_n(x)$ 项，这样的方法称为基函数法。

- 基函数法基本步骤：
  1) 寻找特殊的基函数组（插值基函数）
  2) 确定插值多项式在这组基下的表示系数。

一次Lagrange插值多项式

已知函数 $y=f(x)$ 在点 x_0,x_1 上的值为 y_0,y_1，要求多项式 $y=p_1(x)$，使 $p_1(x_0)=y_0$，$p_1(x_1)=y_1$。其几何意义，就是通过两点 $A(x_0,y_0),B(x_1,y_1)$ 的一条直线，如图所示。



一次Lagrange插值多项式

由直线两点式可知，通过A,B的直线方程为

$$y = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}\left(x - x_0\right) = L_1(x)$$

它也可变形为 $$\boxed{L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1}$$

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

显然有: $l_0(x_0) = l_1(x_1) = 1,\ \ l_0(x_1) = l_1(x_0) = 0,$

$$L_1(x_0) = y_0,\ \ L_1(x_1) = y_1,$$

拉格朗日（Lagrange）插值

定义 若存在一个次数为 n 的多项式$l_k(x)$，在n+1个节点 $x_0, \dots, x_n$ 上满足：

$$l_k(x_i)=\begin{cases}1, & i=k\\0, & i\neq k\end{cases}$$

与节点有关，但与$f(x)$无关.

则称 $l_k(x)$为节点 $x_0, \dots, x_n$ 上的拉格朗日插值基函数。

- 由构造法可得

$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$$

$$k=0,1,2,\dots,n$$

- 可以证明 $l_0(x), l_1(x), \dots, l_n(x)$ 线性无关，即它们构成线性空间 $P_n(x)$ 的一组基。

- 设 $f(x)$ 的 n 次插值多项式为

$$p(x) = a_0 l_0(x) + a_1 l_1(x) + \cdots + a_n l_n(x)$$

满足插值条件： $p(x_i) = y_i \ (i = 0, \ldots n)$

将 $x_0, \ldots, x_n$ 分别代入即可得： $a_i = y_i \ (i = 0, \ldots n)$

所以

$$p(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + \cdots + y_n l_n(x)$$

称为拉格朗日插值多项式，记作 $L_n(x)$，即

$$L_n(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j l_j(x) = \sum_{j=0}^{n} y_j \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{x - x_i}{x_j - x_i}$$

线性插值与抛物插值

- 当 $n=1$ 时

$$L_1(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$$

线性插值多项式（一次插值多项式）

- 当 $n=2$ 时

$$L_2(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x)$$

$$= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2$$

抛物(线)插值多项式（二次插值多项式）

插值余项

问题 如何估计用 $L_n(x)$ 近似 $f(x)$ 的误差？

插值余项 $\boxed{R_n(x) = f(x) - L_n(x)}$

定理 4.2 假设 $x_0, .., x_n \in [a,b]$, $f(x)$ 在[a, b]上连续的n+1阶导数，$L_n(x)$为$f(x)$关于节点 $x_0, .., x_n$ 的n次拉格朗日插值多项式，则对任意 $x \in [a,b]$, 插值余项公式为：

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega(x)$$

插值举例

- 例：已知函数 $y = \ln x$ 的函数值如下

x	10	11	12	13	14
$\ln x$	2.3026	2.3979	2.4849	2.5649	2.6391

试分别用线性插值和抛物插值计算 ln11.75的近似值。

解：在插值计算中，为了减小截断误差，通常选取与插值点 x 邻接的插值节点。

线性插值：取 $x_0=11$, $x_1=12$ 得

$$L_1(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} y_0 + \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)} y_1 = 0.087x + 1.4409$$

插值举例

将 x=11.75 代入可得：$\ln 11.75 \approx L_1(11.75) \approx 2.4632$

抛物插值：取 $x_0=11$, $x_1=12$, $x_2=13$ 。

将 x=11.75 代入可得：

$$\ln 11.75 \approx L_2(11.75) \approx 2.4638$$

可以计算出 ln11.75 的近似值为：

$$\boxed{\ln 11.75 \approx 2.4638532405902}$$

可见，抛物插值的精度比线性插值要高。

Lagrange插值多项式简单方便，只要取定节点就可写出基函数,进而得到插值多项式。易于计算机实现。

插值误差举例

- 例：已知函数 $y=\ln x$ 的函数值如下

x	10	11	12	13	14
$\ln x$	2.3026	2.3979	2.4849	2.5649	2.6391

试给出线性插值和抛物插值计算 ln11.75的误差。

解：$$R_1(x)=\frac{f''(\xi)}{2!}(x-x_0)(x-x_1),\ \xi\in(x_0,x_1)$$

又$f''(x)=-1/x^2$，且$x_0=11,\ x_1=12,\ \xi\in(11,12)$

1. 线性插值误差 $$|R_1(11.75)|=\left|\frac{f''(\xi)}{2}(11.75-x_0)(11.75-x_1)\right|$$

$$<\left|-\frac{1}{11^2\times 2}\right|\left|(11.75-11)(11.75-12)\right|$$

$$\approx 0.77479\times 10^{-3}<0.5\times 10^{-2},$$ 有1+2=3位有效数字.

插值误差举例

2.抛物线插值误差

$$R_2(x)=\frac{f^{(3)}(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2),\ \xi\in(x_0,x_2)$$

又$f^{(3)}(x)=2/x^3,\ \xi\in(11,13) \Rightarrow \left|f^{(3)}(\xi)\right|=2/\xi^3<2/11^3$

$$|R_2(11.75)|<\left|-\frac{2}{11^3\times 6}\right|\left|(11.75-11)(11.75-12)(11.75-13)\right|$$

$\approx \underline{0.58696\times 10^{-5}} < 0.5\times 10^{-4}$，有1+4=5位有效数字.

$|R_1(11.75)|\approx \underline{0.77479\times 10^{-3}} < 0.5\times 10^{-2}$，有1+2=3位有效数字.

$\boxed{\text{高次插值通常优于低次插值}}$

但绝对不是次数越高就越好…

4. Hermite插值

拉格朗日插值仅考虑节点的函数值约束，而一些插值问题还需要考虑在某些节点具有插值函数与被插值函数导函数值的一致性，称具有节点的导函数值约束的插值为埃尔米特插值。

具有节点的导函数值约束的插值

已知 $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), y_0' = f'(x_0), y_1' = f'(x_1)$

求不超过3次多项式$H_3(x)$使满足

$$H_3(x_0) = y_0, H_3(x_1) = y_1, H_3'(x_0) = y_0', H_3'(x_1) = y_1'$$

- 存在唯一性
- 计算公式
- 余项公式(截断误差)

存在唯一性 $H_3(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$

$$a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + a_3 x_0^3 = y_0$$

$$a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + a_3 x_1^3 = y_1$$

$$a_1 + 2a_2 x_0 + 3a_3 x_0^2 = y_0'$$

$$a_1 + 2a_2 x_1 + 3a_3 x_1^2 = y_1'$$

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0^3 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 0 & 1 & 2x_0 & 3x_0^2 \\ 0 & 1 & 2x_1 & 3x_1^2 \end{vmatrix} = -(x_1 - x_0)^4 \neq 0$$

导出计算公式 (基函数法)

记$h = x_1 - x_0$, 变量代换 $\hat{x} = \dfrac{x - x_0}{h}$, $x \in [x_0, x_1] \Leftrightarrow \hat{x} \in [0,1]$

令 $\hat{f}(\hat{x}) = f(x)$, 则

1. $\hat{f}(0) = y_0, \hat{f}(1) = y_1$

2. $\dfrac{d\hat{f}(\hat{x})}{d\hat{x}} = \dfrac{df(x)}{d\hat{x}} = \dfrac{df(x)}{dx} \cdot \dfrac{dx}{d\hat{x}} = \dfrac{df(x)}{dx} h$

3. $\hat{f}'(0) = hy_0', \hat{f}'(1) = hy_1'$

插值条件变为:

$$\hat{f}(0) = f(x_0) = H_3(x_0) = \mathrm{y}_0$$

$$\hat{f}(1) = f(x_1) = H_3(x_1) = \mathrm{y}_1$$

$$\hat{f}'(0) = f'(x_0) = hH_3'(x_0) = hy_0'$$

$$\hat{f}'(1) = f'(x_1) = hH_3'(x_1) = hy_1'$$

导出计算公式 (基函数法)

设 $H_3(x) = \hat{f}(\hat{x}) = y_0\alpha_0(\hat{x}) + y_1\alpha_1(\hat{x}) + hy_0'\beta_0(\hat{x}) + hy_1'\beta_1(\hat{x})$,

其中基函数 $\alpha_0(\hat{x}), \alpha_1(\hat{x}), \beta_0(\hat{x}), \beta_1(\hat{x})$ **均为3次多项式，且满足:**

$$\begin{cases} \alpha_0(0) = 1 \\ \alpha_0(1) = 0 \\ \alpha_0'(0) = 0 \\ \alpha_0'(1) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \alpha_1(0) = 0 \\ \alpha_1(1) = 1 \\ \alpha_1'(0) = 0 \\ \alpha_1'(1) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \beta_0(0) = 0 \\ \beta_0(1) = 0 \\ \beta_0'(0) = 1 \\ \beta_0'(1) = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \beta_1(0) = 0 \\ \beta_1(1) = 0 \\ \beta_1'(0) = 0 \\ \beta_1'(1) = 1 \end{cases}$$

由条件$\begin{cases}\alpha_0(0)=1\\ \alpha_0(1)=0\\ \alpha_0'(0)=0\\ \alpha_0'(1)=0\end{cases}$，可得$\alpha_0(\hat{x})=(2\hat{x}+1)(\hat{x}-1)^2=2\hat{x}^3-3\hat{x}^2+1,$

同理可得

$$\alpha_1(\hat{x})=\hat{x}^2(-2\hat{x}+3)=-2\hat{x}^3+3\hat{x}^2,$$

$$\beta_0(\hat{x})=\hat{x}(\hat{x}-1)^2=\hat{x}^3-2\hat{x}^2+\hat{x}$$

$$\beta_1(\hat{x})=\hat{x}^2(\hat{x}-1)=\hat{x}^3-\hat{x}^2$$

从而Hermite 插值公式为：

$$H_3(x)=y_0\alpha_0(\hat{x})+y_1\alpha_1(\hat{x})+hy_0'\beta_0(\hat{x})+hy_1'\beta_1(\hat{x})$$

即

$$H_3(x)=y_0\alpha_0(\frac{x-x_0}{h})+y_1\alpha_1(\frac{x-x_0}{h})+hy_0'\beta_0(\frac{x-x_0}{h})+hy_1'\beta_1(\frac{x-x_0}{h})$$

余项公式(截断误差)

Hermite余项

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

$$\xi\in[\min(x_0,x_1,x),\max(x_0,x_1,x)]$$

比较:

Lagrange余项(n=3)

$$f(x)-L_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)$$

程序与算法：p75（拉格朗日）

4.2 Newton 插值

- Lagrange 插值公式（4.9）简单易用，但若要增加一个节点时，全部基函数 $l_i(x)$ 都需重新算过。

- 考虑插值基函数组（节点为 $x_0, \dots, x_n$ ）

$$
\begin{cases}
\varphi_0(x) = 1 \\
\varphi_1(x) = x - x_0 \\
\varphi_2(x) = (x - x_0)(x - x_1) \\
\cdots\cdots \\
\varphi_n(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})
\end{cases}
$$

当增加一个节点 x_{n+1} 时，只需加上基函数 $\varphi_{n+1} = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$ 即可。

Newton 插值

- 此时 $f(x)$ 的 n 次插值多项式为

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n \prod_{i=1}^{n-1}(x - x_i)$$

问题 怎样确定参数 $a_0, \ldots, a_n$？

差商的定义

定义 设 $f(x)$在节点 $x_0, \dots, x_n$ 的函数值为 $f_0, \dots, f_n$

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

称为 $f(x)$ 关于 x_i, x_j 的一阶差商;

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

$f(x)$ 关于 x_i, x_j, x_k 的二阶差商

一阶差商的差商

一般地，称

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

为 $f(x)$ 关于 $x_0, \dots, x_k$ 的 k 阶差商。

差商的计算

例题 设已知f(0)=1, f(-1)=5, f(2)=-1, 分别求f[0, -1, 2], f[-1, 2, 0]。

解：f[0,-1]=-4

f[0,2]=-1

f[0,-1,2]=1

f[-1,2]=-2

f[-1,0]=-4

f[-1,2,0]=1

差商的计算

设 $f(x)$ 在节点 $x_0, \dots, x_n$ 的函数值为 $f_0, \dots, f_n$,
可按如下的差商表顺序逐次计算各阶差商值

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	…	n 阶差商
x_0	$f(x_0)$					
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0, x_1]$				
x_2	$f(x_2)$	$f[x_0, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2]$			
x_3	$f(x_3)$	$f[x_0, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$		
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	…	
x_n	$f(x_n)$	$f[x_0, x_n]$	$f[x_0, x_1, x_n]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_n]$	…	$f[x_0, x_1, \dots, x_n]$

差商举例

例：**已知 $y = f(x)$ 的函数值表，试计算其各阶差商。**

k	0	1	2	3
x_k	-2	-1	1	2
$f(x_k)$	5	3	17	21

解：差商表如下

k	x_k	$f(x_k)$	$f[x_0, x_k]$	$f[x_0, x_1, x_k]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_k]$
0	-2	5			
1	-1	3	-2		
2	1	17	4	3	
3	2	21	4	2	-1

差商的性质

1) 差商可以表示为函数值的线性组合。

可以用归纳法证明

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \sum_{i=0}^{k} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_0)\cdots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\cdots(x_i - x_k)}$$

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

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \sum_{j=0}^{k} \frac{f(x_j)}{\omega_{n+1}'(x_j)}$$

2) 差商对节点具有对称性：

$$f[x_0, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_k] = f[x_0, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_k]$$

任意交换两个节点的次序，差商不变！

差商的性质

推广：

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = f[x_{i_0}, x_{i_1}, \cdots, x_{i_k}]$$

其中i_0 , i_1 , … , i_k 是 0 , 1, … , k 的任一排列。

说明差商与节点的排列无关。

3*) 若 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上具有 k 阶导数，则至少存在一点 $\xi \in (a,b)$

使得 $$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$

k 阶差商与 k 阶导数之间的关系

Newton 插值法

由差商的定义可得：

$$f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f[x,x_0] \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \quad ①$$

$$f[x,x_0]=f[x_0,x_1]+(x-x_1)f[x,x_0,x_1] \quad \cdots\cdots\cdots\cdots \quad ②$$

$$\cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots$$

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

$$① + (x-x_0)\times ② + \ldots\ \ldots + (x-x_0)\ldots(x-x_{n-1})\times (n-1)$$

$$\Rightarrow f(x)=\boxed{f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)+\ldots+f[x_0,\ldots,x_n](x-x_0)\ldots(x-x_{n-1})}$$

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

$N_n(x)$

$R_n(x)$

Newton 插值公式

于是 $f(x) = N_n(x) + R_n(x)$

$N_n(x)$ 是 n 次多项式

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

$R_n(x_i)=0$ $\Rightarrow$ $N_n(x_i) = f(x_i)$，$i = 0, 1, 2, \ldots, n$

$N_n(x)$ 是 $f(x)$ 的 n 次插值多项式（牛顿）

$$N_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n\prod_{i=1}^{n-1}(x - x_i)$$

其中 $a_0 = f(x_0),\ a_i = f[x_0, \cdots, x_i],\ i = 1, 2, \cdots, n$

Newton 插值公式

由插值公式的唯一性可知 $N_n(x) \equiv L_n(x)$， 只是算法不同，因此余项也相同，即

$$R_n(x) = f[x, x_0, \ldots, x_n]\prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

所以 $$f[x, x_0, \ldots, x_n] = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$$

Newton 插值举例

❑ 例：已知函数 $y = \ln x$ 的函数值如下

x	10	11	12	13	14
$\ln x$	2.3026	2.3979	2.4849	2.5649	2.6391

试用牛顿线性插值和抛物线插值计算 ln11.75。

解：分别取节点 $x_0=11, x_1=12$ 和 $x_0=11, x_1=12, x_2=13$，作差商表

k	x_k	$f(x_k)$	$f[x_0, x_k]$	$f[x_0, x_1, x_k]$
0	11	2.3979		
1	12	2.4849	0.0870	
2	13	2.5649	0.0835	-0.0035

$$N_1(x) = 2.3979 + 0.0870\,(x - 11)$$

$$N_2(x) = 2.3979 + 0.0870\,(x - 11) + (-0.0035)(x-11)(x-12)$$

Newton 插值举例

线性插值： $\ln 11.75 \approx N_1(11.75) \approx 2.4632$

抛物线插值： $\ln 11.75 \approx N_2(11.75) \approx 2.4638$

可以计算出 ln11.75 的近似值为：

$$\boxed{\ln 11.75 \approx 2.4638532405902}$$

可以看出，当增加一个节点时，牛顿插值公式只需在原来的基础上增加一项，前面的计算结果仍然可以使用。与拉格朗日插值相比，牛顿插值具有灵活增加节点的优点！

例4.3

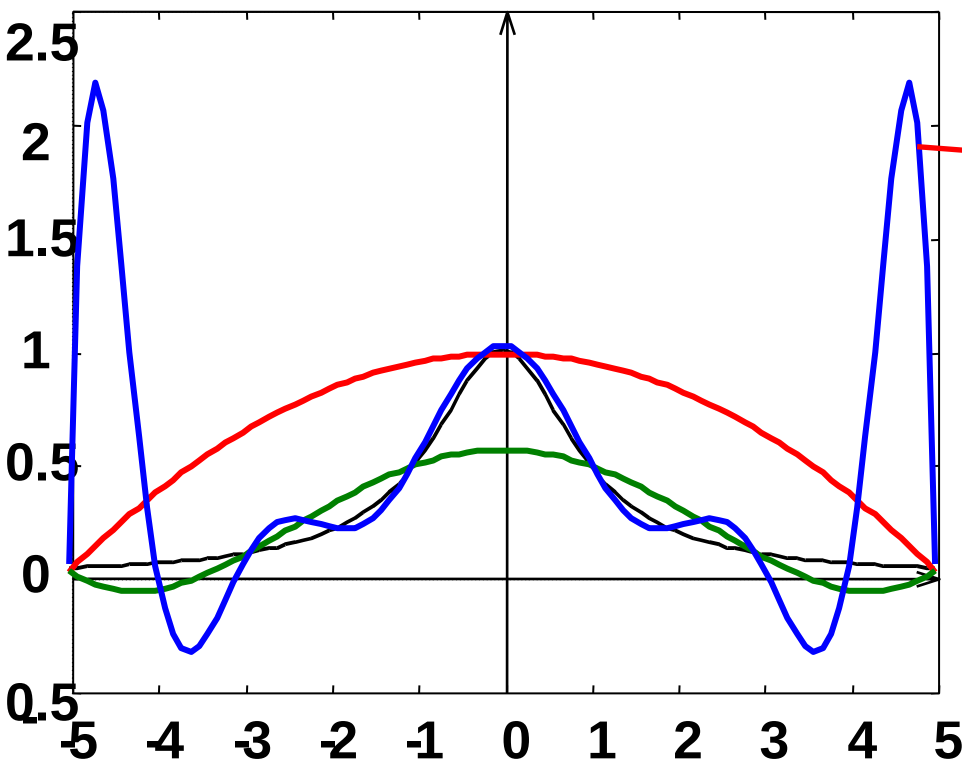
x_k	$f(x_k)$	$f[x_0, x_k]$	$f[x_0, x_1, x_k]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
π/6	0.5000			
π/4	0.7071	0.7911		
π/3	0.8660	0.6990	-0.3518	
π/2	1.0000	0.4775	-0.3993	-0.09072

4.3 三次样条插值

问题 抛物线插值的误差比线性插值要小，**是不是插值多项式的次数越高，精度** **NO!** **好?**

例：**在** [–5, 5] **上考察** $f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$ **的** $L_n(x)$。**取** $x_k=-5+kh$

$(h=10/n,\ k=0,\ldots,n;\ n=2,5,10)$



n 越大，端点附近的抖动越大，称为Runge现象。

$L_n(x) \not\rightarrow f(x)$

1）分段插值

- 在处理实际问题时，总是希望将所得到的数据点用得越多越好。最简单的方法是用直线段将函数值点直接连接。

- 分段低次插值

基本思想：**用分段低次多项式来代替单个高次多项式。**

具体作法：**(1) 把整个插值区间分割成多个小区间；**

(2) 在每个小区间上作低次插值多项式；

(3) 将所有插值多项式拼接整一个多项式。

优点：**公式简单、 运算量小、稳定性好、收敛性 ...**

缺点：**节点处的导数可能不连续，失去原函数的光滑性。**

分段线性插值

假设：已知 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 及 $f(x_i) = y_i$ i=0,1,...,n

$I_1(x)$ 为[x_{i-1}, x_i]上的线性函数（不超过1次的多项式）

且满足

$$I_1(x_{i-1}) = y_{i-1},\ I_1(x_i) = y_i \qquad i = 0,\cdots,n$$

由线性插值公式可得：

$$I_1(x) = \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} y_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} y_i$$

$$x_{i-1} \le x \le x_i, \qquad i = 1,\cdots,n$$

分段线性插值

余项公式

$$R_1(x) = f(x) - I_1(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_{i-1})(x - x_i) \quad (x_{i-1} \le x \le x_i)$$

收敛性

由于： $$\max_{x_{i-1} \le x \le x_i} \left|(x - x_{i-1})(x - x_i)\right| = \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{2}\right)^2$$

因此： $$|R_1(x)| = |f(x) - I_1(x)| \le \frac{h^2}{8} M_2$$

其中 $$h = \max_{1 \le i \le n}(x_i - x_{i-1}),\ M_2 = \max_{x_0 \le x \le x_n} \left| f''(x) \right|, \quad i = 1, \cdots, n$$

$$\left|R_1(x)\right| = \left| f(x) - I_1(x) \right| \le \frac{h^2}{8} M_2 \to 0$$ 但不光滑！

例题4.5.1

已知函数 $f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$ 在区间**[-5,5]**上取等距插值节点，**10**等分时，用线性分段插值求**f(x)**的数值解的误差限，并分析几等分可使结果有**3**位有效数字。

解题关键

1. h=1→ M_2=2，从而误差 **≤ ¼**

2. 分段讨论，最小值决定**m**，误差决定**k**，又由**n=10/h**

→ n?

例题4.5.2

已知函数 $f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$在区间**[0,5]**上取等距插值节点，如下表。求区间上的分段线性插值函数，并利用它求出**f(4.5)**的近似值。

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1	0.5	0.2	0.1	0.05882	0.03846

2）分段3次Hermite插值

已知 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 及 $y_i = f(x_i)$，$y_i' = f'(x_i)$ ，$I_3(x)$

为$[x_{i-1}, x_i]$上不超过3次多项式，且满足

$$I_3(x_{i-1}) = y_{i-1},\ I'_3(x_{i-1}) = y'_{i-1},\ I_3(x_i) = y_i,\ I'_3(x_i) = y'_i,$$

由3次埃尔米特插值式可得到：

$$I_3(x) = \alpha_0\left(\frac{x - x_{i-1}}{h_i}\right)y_{i-1} + \alpha_1\left(\frac{x - x_{i-1}}{h_i}\right)y_i + h_i\beta_0\left(\frac{x - x_{i-1}}{h_i}\right)y'_{i-1} + h_i\beta_1\left(\frac{x - x_{i-1}}{h_i}\right)y'_i$$

$$x_{i-1} \le x \le x_i,$$

$$\alpha_0(t) = (2t+1)(t-1)^2 = 2t^3 - 3t^2 + 1,\ \alpha_1(t) = t(-2t+3) = -2t^3 + 3t^2,$$

$$\beta_0(t) = t(t-1)^2 = t^3 - 2t^2 + t,\ \beta_1(t) = t^2(t-1) = t^3 - t^2$$

2）分段3次Hermite插值

余项公式

$$R_3(x) = f(x) - I_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x - x_{i-1})^2(x - x_i)^2$$

收敛性

$$h = \max_{1\le i\le n}(x_i - x_{i-1}),\ M_4 = \max_{x_0\le x\le x_n}\left|f^{(4)}(x)\right|,$$

$$\left|R_3(x)\right| = \left|f(x) - I_3(x)\right| \le \frac{M_4}{4!}\left(\frac{h^2}{4}\right)^2 = \frac{h^4}{384}M_4 \to 0$$

一阶光滑！并且实际工程中一般不知道 $f'(x_i)$ 的值！

三次样条函数

- 样条函数（Spline function

--piecewise polynomial function）

由一些按照某种光滑条件分段拼接起来的多项式组成的函数。

最常用的样条函数为三次样条函数，即由三次多项式组成，具有二阶连续导数。

定义 设节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$，若函数 S(x)在[a, b]上有二阶连续导数，在每个小区间$[x_{i-1}, x_i]$上是三次多项式，则称其为三次样条函数。如果同时满足$S(x_i) = f(x_i)$ $(i = 0, 1, 2, \ldots, n)$，则称 $S(x)$ 为 $f(x)$ 在 $[a, b]$上的三次样条函数。

三次样条插值

定义：已知 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 及$y_i = f(x_i)$，S(x)为在每个小区间[x_{i-1}, x_i]上是不超过3次的多项式且具有二阶连续导数，则称S(x) 为三次样条插值。具体地，满足

(1) 插值条件： $S(x_i) = y_i$，$i = 0, \cdots, n$

(2) 连接条件： $S(x_i - 0) = S(x_i + 0),$

$$S'(x_i - 0) = S'(x_i + 0),$$

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

三次样条插值解的存在性

节点： $x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n$

函数值： $y_i = f(x_i)$ $(i = 0, 1, 2, \ldots, n)$

$S(x)$ 满足: $S(x_i) = y_i$ $(i = 0, 1, 2, \ldots, n)$

由定义可设: $$S(x) = \begin{cases} s_1(x), & x \in [x_0, x_1] \\ s_2(x), & x \in [x_1, x_2] \\ \vdots & \\ s_n(x), & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

其中 $s_k(x)$ 为 $[x_{k-1}, x_k]$ 上的三次多项式，且满足

$$s_k(x_{k-1}) = y_{k-1},\ s_k(x_k) = y_k \quad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

每个 $s_k(x)$ 均为三次多项式，有4个待定系数，所以共有 $4n$ 个待定系数，需 $4n$ 个方程才能确定。前面已经得到 $n+1+3(n-1)=4n-2$ 个方程，还缺 2 个方程！

- 实际问题通常对样条函数在端点处的状态有要求，即所谓的边界条件。

边界条件

- 第一类边界条件：**给定函数在端点处的一阶导数，**

$$\boxed{s'(x_0)=y_0'\ ,\ s'(x_n)=y_n'}$$

- 第二类边界条件：**给定函数在端点处的二阶导数，即**

$$\boxed{s''(x_0)=y_0''\ ,\ s''(x_n)=y_n''}$$

当 $s''(x_0)=s''(x_n)=0$ 时，称为自然边界条件，此时的样条函数称为自然样条函数。

- 第三类边界条件：**设 $f(x)$ 是周期函数，并设 x_n-x_0 是一个周期，于是 $s(x)$ 满足**

$$\boxed{s'(x_0)=s'(x_n),\ s''(x_0)=s''(x_n)}$$

- 第四类边界条件（非扭结）：**第一、二段多项式三次项系数相同，最后一段和倒数第二段三次项系数相同.**

三次样条插值求解

利用分段3次Hermite插值

- 设 $S'(x_i)=m_i$，利用分段3次Hermite插值公式(含未知m_i)，使得插值条件和连接条件的连续性和一阶光滑性满足；
- 由n-1个二阶光滑性约束条件和2个边界条件来求个待定参数 $m_0,m_1,\cdots,m_n$，转化为解三对角方程组(一阶导数边界条件)

$$\begin{pmatrix} 2 & \mu_1 & & & \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \\ & & & \lambda_{n-1} & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g_1-\lambda_1 y_0' \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1}-\mu_{n-1}y_n' \end{pmatrix}$$

三次样条插值求解步骤

求解步骤

- 由边界条件和插值条件列三对角方程组;
- 用追赶法解方程组求得$m_0, m_1, \cdots, m_n$;
- 判断插值点 x 在第i 个小区间;
- 用第i 个小区间的三次样条插值多项式求插值.

例**4.6** 求满足下列数据的三次样条插值函数 $S(x)$

x	-1	0	1
$f(x)$	-1	0	1
$f'(x)$	0		-1

- 解法一（分析推导, 称为承袭法）;
- 解法二（待定系数法）;
- 解法三（用计算公式）.

三次样条插值求解

解法2

设三次样条插值函数为：

$$S(x)=\begin{cases} a_0+a_1x+a_2x_2+a_3x_3, & -1\le x\le 0 \\ a_0+a_1x+a_2x_2+a_3x_3, & 0\le x\le 1 \end{cases}$$

由插值条件、连接条件、边界条件列出8阶线性方程组

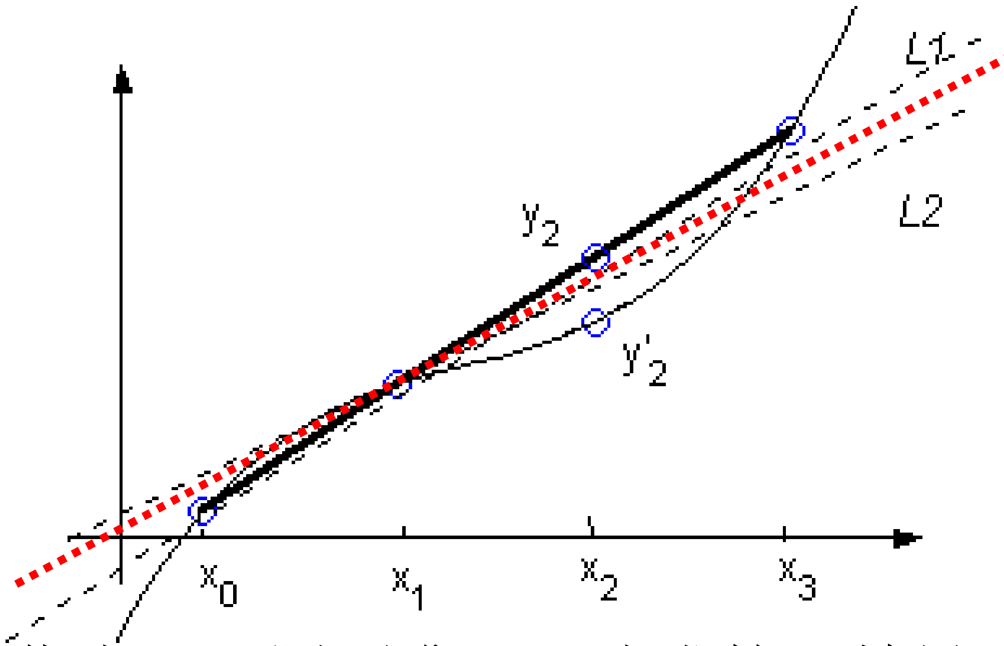
联立求解

作业

P101: 12, 13(2), 14.

4.4 最小二乘拟合

数据建模



增加节点约束来弱化由于“测不准”而造成的“差异”？

No

解决方法：“满足节点约束”→“节点误差总体最小”拟合

插值：过点；（适合精确数据）

拟合：不过点，整体近似；(有经验公式或有误差的数据)

1. 最小二乘拟合定义

拟合问题：设已知$x_1,\dots,x_n$及 $y_i = f(x_i)$ $(i=1,2,\dots,n)$，要在一类曲线Φ中求一曲线$\varphi(x)$，使与$f(x)$在节点$x_1,\dots,x_n$的误差$e_i = |y_i - \varphi(x_i)|$总体上最小。

上述e_i $(i=1,\dots,n)$总体上最小，一般指误差向量$e=(e_1,\dots,e_n)$的范数$\|e\|$最小。在拟合算法中一般取2-范数

$$\|e\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} e_i^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} [y_i - \varphi(x_i)]^2}$$

- 当误差向量取2范数时的拟合算法就是**最小二乘拟合**

例1　线性拟合

问题：对于给定的数据点 $(x_i, y_i),\ i=1,2,\cdots,n$，求拟合直线

$y=a+bx$ ，使总误差为最小，即在二元函数式中

$$g(a,b)=\sum_{i=1}^{N}[y_i-(a+bx_i)]^2$$

为最小。

这里g(a, b)是关于未知数a和b的二元函数，这一问题就是要确定a和b取何值时，二元函数

$$g(a,b)=\sum_{i=1}^{N}[y_i-(a+bx_i)]^2$$

的值最小?

线性拟合

由微积分的知识可知，这一问题的求解，可归结为求二元函数 $g(a,b)$ 的极值问题，

即 a 和 b 应满足：

$$\frac{\partial g}{\partial a}=0, \quad \frac{\partial g}{\partial b}=0,$$

线性拟合

$$\frac{\partial Q}{\partial a}=\sum_{i=1}^{N}2[y_i-(a+bx_i)]\cdot(-1)=0,\quad \text{即 } Na+b\sum_{i=1}^{N}x_i=\sum_{i=1}^{N}y_i,$$

$$\frac{\partial Q}{\partial b}=\sum_{i=1}^{N}2[y_i-(a+bx_i)]\cdot(-x_i)=0,\quad \text{即 } a\sum_{i=1}^{N}x_i+b\sum_{i=1}^{N}x_i^2=\sum_{i=1}^{N}x_iy_i,$$

从而，未知数a, b 满足如下方程组(正则方程组)：

$$\begin{cases} na+b\sum\limits_{i=1}^{n}x_i=\sum\limits_{i=1}^{n}y_i, \\ a\sum\limits_{i=1}^{n}x_i+b\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2=\sum\limits_{i=1}^{n}x_iy_i. \end{cases}$$

解出a, b, 就可得最小二乘拟合直线 $g=a+bx$。

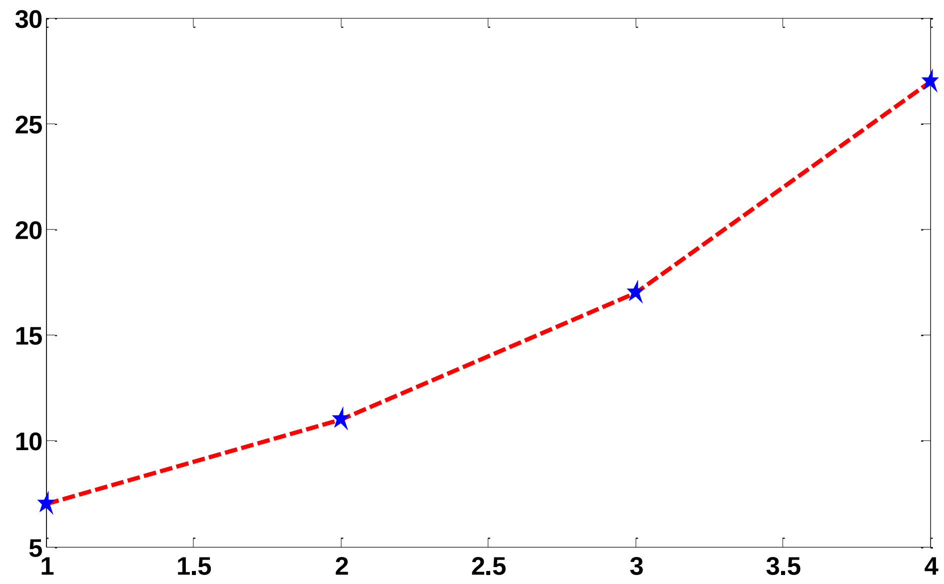
其它类型拟合问题

正如本节开头所指出的最小二乘法并不只限于多项式，也可用于任何具体给出的函数形式。特别重要的是有些非线性最小二乘拟合问题通过适当的变换可以转化为线性最小二乘问题求解。

线性化拟合

例2　已知数据表

x_i	1	2	3	4
y_i	7	11	17	27



求一形如 $y = Ae^{Bx}$ 的经验公式与已知数据拟合.

解：所求拟合函数是一个指数函数，对它两边取自然对数，得

$$\ln y = \ln A + Bx$$

线性化拟合

于是对应于上述数据表得到另一个数据表：

x_i	1	2	3	4
$\ln y_i$	1.95	2.40	2.83	3.30

若记 $z = \ln y, a_0 = \ln A, a_1 = B$ 则

$$z = a_0 + a_1 x$$

从而将原问题转化为由新数据表所给出的线性拟合问题。
易知其正则方程组为：

线性化拟合

$$\begin{cases} 4a_0 + 10a_1 = 10.48, \\ 10a_0 + 3a_1 = 28.44, \end{cases}$$

解得 $a_0 = 1.50, a_1 = 0.448$

于是 $\ln y = 1.50 + 0.448x$

故所求经验公式为

$$y = e^{1.50+0.448x} = 4.48e^{0.448x}$$

超定方程组（矛盾方程组）

试求下列超定方程组的解：

$$\begin{cases} x - 15.5 = 0, \\ y - 6.1 = 0, \\ x + y = 20.9. \end{cases}$$

很显然，直接求解是不行的，因为满足方程组的精确解是不存在的！只能求出尽量满足方程组的近似解。

超定方程组

运用最小二乘法，要求满足方程组的解，即求使各方程误差平方和 ***u*** 最小的解 ***x, y***，就是方程组的近似解:

$$u=(x-15.5)^2+(y-6.1)^2+(x+y-20.9)^2$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial x}=2(x-15.5)+2(x+y-20.9)=0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial y}=2(y-6.1)+2(x+y-20.9)=0. \end{cases}$$

得近似解: $\begin{cases} x=15.26667, \\ y=5.86667. \end{cases}$

2. 最小二乘拟合法的一般理论：

内积和范数

函数f(x)和g(x)关于节点 $x_1,\cdots,x_n$的内积和2-范数:

$$(f,g)=\sum_{i=1}^{n} f(x_i)g(x_i), \quad \|f\|=\sqrt{(f,f)}$$

对任意函数f, g, h和数λ，有

(i) $(f, g+h) =(f, g)+(f, h)$;

(ii) $(\lambda f, g)= \lambda(f, g)$;

(iii) $(f, g)= (g, f)$;

(iv) $\|f\|\geq 0$且$\|f\|=0 \Leftrightarrow f=0$. （定义2.1，正定性）

注意:内积和范数依赖于节点选取.

基函数

称函数$\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$, …, $\varphi_m(x)$关于节点$x_1,\dots,x_n$ **线性无关**，如果它们的

取值向量 $\begin{pmatrix} \varphi_0(x_1) \\ \varphi_0(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_0(x_n) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1) \\ \varphi_1(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_1(x_n) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \varphi_m(x_1) \\ \varphi_m(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_m(x_n) \end{pmatrix}$ 线性无关，

即只有当k_0, k_1, …,k_m全为零时

$$k_0\varphi_0(x_i)+k_1\varphi_1(x_i)+\dots+k_m\varphi_m(x_i)=0,\ i=1,2,\dots,n$$

才全部成立。

基函数

线性无关函数$\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m$的线性组合全体$\Phi$称为由$\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m$张成的**函数空间(functional sapce)**，记

$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m\}$

$=\{\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\ldots+a_m\varphi_m(x)\,|\,a_0, a_1,\ldots,a_m\in \boldsymbol{R}\}$,

则$\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m$称为$\Phi$的**基函数**。

最小二乘拟合

最小二乘拟合用数学语言表达：已知数据x_i，$y_i=f(x_i)$ $(i=1,\ldots,n)$和函数空间$\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots \varphi_m\}$，求函数$\varphi^* \in \Phi$，使

$$\| f-\varphi^* \| = \min \|f-\varphi\| .$$

问题等价于: 求$a^*_0, a^*_1, \ldots, a^*_m \in R$，使

$$S(a^*_0, a^*_1, \ldots, a^*_m) = \min S(a_0, a_1, \ldots, a_m).$$

其中 $S(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \|f-\varphi\|^2$

$$= \sum_{i=1}^{n} [y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)]^2, \quad \varphi(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x)$$

(二次函数最小化)

函数极值的必要条件

对S求关于$a_0, a_1, \ldots, a_m$ 的偏导，

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0, k = 0,1, \cdots, m$$

$$-2\sum_{i=1}^{n}[y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j\varphi_j(x_i)]\varphi_k(x_i) = 0$$

$$\boxed{\sum_{j=0}^{m}\sum_{i=1}^{n} a_j\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) = \sum_{i=1}^{n} y_i\varphi_k(x_i) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\varphi_k(x_i)}$$

用内积表示为： $\sum_{j=0}^{m}(\varphi_j,\varphi_k)a_j = (f,\varphi_k), k = 0, \ldots, m$

（线性方程组）

法方程组

其矩阵形式为： <u>法方程组(正规方程组)</u>

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_m) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_m) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_m,\varphi_0) & (\varphi_m,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_m,\varphi_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\varphi_0) \\ (f,\varphi_1) \\ \vdots \\ (f,\varphi_m) \end{pmatrix} \qquad (*)'$$

定理4.3 如果函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_m(x)$ 关于节点 $x_1, \ldots, x_n$ 线性无关，则

1) **法方程组(*)的解存在唯一；**

2) **法方程组(*)的解是最小二乘拟合的唯一最优解。**

证明略，流程图如4-4

例题 4.10

已知 $\sin 0=0,\ \sin\frac{\pi}{6}=\frac{1}{2},\ \sin\frac{\pi}{3}=\frac{\sqrt{3}}{2},\ \sin\frac{\pi}{2}=1.$

由最小二乘法求 $\sin x$ 的拟合曲线 $\varphi(x)=ax+bx^3$

解题思路：

- 确定 $\varphi_0(x)=x,\varphi_1(x)=x^3, f(x)=\sin(x)$
- 计算出 $(\varphi_j,\varphi_k),(f,\varphi_k),\ k=0,1$ 得到法方程组
- 解得系数 **a，b**
- 构建最小二乘拟合曲线 $\varphi(x)=ax+bx^3$

3. 正交最小二乘拟合

多项式拟合

$\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$, …, $\varphi_m(x)=x^m$, 法方程组为:

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

高阶多项式拟合的病态

$$令A=\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m \end{pmatrix}, 则上式化为 A^T A\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = A^T\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

- m很大时, 法方程组病态
- 系数矩阵A^TA的条件数太大!

正交最小二乘拟合

避免病态: 选取函数类Φ的正交基函数ψ_0, ψ_1, …, ψ_m, 法方程组就成为简单的对角方程组, 其解

$$a_k = \frac{(f,\psi_k)}{(\psi_k,\psi_k)}, k=0,1, \cdots, m$$

- Gram-Schmit正交化方法

$$\psi_0(x) = \varphi_0(x), \quad \psi_1(x) = \varphi_1(x) - \frac{(\varphi_1,\psi_0)}{(\psi_0,\psi_0)}\psi_0(x),$$

$$\psi_m(x) = \varphi_m(x) - \frac{(\varphi_m,\psi_0)}{(\psi_0,\psi_0)}\psi_0(x) - \frac{(\varphi_m,\psi_1)}{(\psi_1,\psi_1)}\psi_1(x), \ldots$$

$$- \frac{(\varphi_m,\psi_{m-1})}{(\psi_{m-1},\psi_{m-1})}\psi_{m-1}(x)$$

例4.11

解法1：一般的多项式拟合

解法2：先进行施密特正交化，再解对角方程组

解法3：为了减轻病态问题的影响，采用递推正交化公式，再求解

$$\psi_0(x)=1,$$

$$\psi_1(x)=(x-\alpha_0)\psi_0(x),\ \alpha_0=\frac{(x\psi_0,\psi_0)}{(\psi_0,\psi_0)}$$

$$\psi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\psi_k(x)-\beta_k\psi_{k-1}(x),$$

$$\alpha_k=\frac{(x\psi_k,\psi_k)}{(\psi_k,\psi_k)},\beta_k=\frac{(\psi_k,\psi_k)}{(\psi_{k-1},\psi_{k-1})},k=1,..m-1$$

作业

第102页: *15, 17*