1-绪论

误差与有效数字

- **有效数字定义：** 若 $\lfloor \log_{10}(x^*) \rfloor = m$，$\lceil \log_{10}(2|x-x^*|) \rceil = m-n+1$，则称近似值 x^* 有 **n** 位有效数字

2-多项式插值

① Lagrange 插值

Lagrange 插值法的误差分析 设$f^{(n+1)}(x)$在$[a,b]$内存在，节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，$L_n(x)$是 Lagrange 插值多项式，则插值余项

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

- 如果可以求出 $M_{n+1} = \max\limits_{a\le x\le b}|f^{(n+1)}(x)|$，则插值多项式 $L(x)$ 逼近 $f(x)$ 的截断误差限是

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

② 差商与 Newton 插值

逐次线性插值

新的插值基函数

$$\begin{aligned}
&\omega_0 = 1\\
&\omega_1 = x - x_0\\
&\omega_2 = (x-x_0)(x-x_1)\\
&\quad\vdots\\
&\omega_n = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\\
&\quad \Rightarrow \omega_{n+1} = \omega_n \cdot (x - x_n)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&p_1(x) = y_0\omega_0 + \frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}\omega_1\\
&p_2(x) = p_1(x) + \frac{\frac{y_2-y_0}{x_2-x_0} - \frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}}{x_2-x_1}\omega_2\\
&\qquad\vdots\\
&p_n(x) = p_{n-1}(x) + a_n\omega_n
\end{aligned}$$

差商

- 已知函数 $f(x)$ 和节点 $x_0, x_1, \ldots, x_k$，则

$$\begin{aligned}
f[x_0,x_k] &= \frac{f(x_k)-f(x_0)}{x_k-x_0}\\
f[x_0,x_1,x_k] &= \frac{f[x_0,x_k]-f[x_0,x_1]}{x_k-x_1}\\
f[x_0,x_1,\ldots,x_k] &= \frac{f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-2},x_k] - f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-2},x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}
\end{aligned}$$

- 用差商重新表示插值多项式

$$\begin{aligned}
p_1(x) &= y_0 + f[x_0,x_1]\omega_1\\
p_2(x) &= y_0 + f[x_0,x_1]\omega_1 + f[x_0,x_1,x_2]\omega_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(x) =& f(x_0) + f[x_0,x](x-x_0)\\
=& f(x_0) + \big(f[x_0,x_1] + f[x_0,x_1,x](x-x_1)\big)\cdot(x-x_0)\\
=& f(x_0) + f[x_0,x_1](x-x_0) + f[x_0,x_1,x]\cdot(x-x_0)(x-x_1)\\
=& f(x_0) + f[x_0,x_1](x-x_0) + \big(f[x_0,x_1,x_2]\\
&-f[x_0,x_1,x_2,x](x-x_2)\big)\cdot(x-x_0)(x-x_1)\\
=& f(x_0) + f[x_0,x_1](x-x_0)\\
&+ f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)\\
&+ f[x_0,x_1,x_2,x](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)
\end{aligned}$$

Newton 差商插值多项式

$$N_n(x) = f[x_0] + f[x_0,x_1]\omega_1(x) + \cdots + f[x_0,\ldots,x_n]\omega_n(x)$$

插值余项

$$R_n(x) = f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]\cdot\omega_{n+1}(x)$$

差商的性质

1. 差商可以表示为函数值 $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_k)$ 的线性组合
$$f[x_0,x_1,\ldots,x_k] = \sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{\prod_{i\ne j}(x_j-x_i)}$$
证明（归纳法）
2. 差商与节点的排序无关，即差商具有对称性
3. 差商与阶导数之间的关系
$$f[x_0,x_1,\ldots,x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$
思路：Lagrange 插值余项的定理
4. （作为泛函对f的）线性性
5. 对于不超过 n 次的多项式 $f(x)$，其 n 阶差商 $f[x_0,x_1,\ldots,x_n]$ 为常数（n 次项系数）

等距节点插值公式 ⇒ 差分

- 为表示方便，引入不变算子 I 和移位算子 E
- 可以发现，向前差分算子 $\Delta = E - I$
同理可得，向后差分算子 $\nabla = I - E^{-1}$

差分的性质

1. 各阶差分均可用函数值表示
m 阶向前差分：$\Delta^m f_k = (E-I)^m f_k$
2. 可用各阶差分表示函数值
$f_{k+m} = (\Delta + I)^m f_k$
3. 差商与差分的关系
$x_k = x_0 + kh,\quad f[x_k,x_{k+1},\ldots,x_{k+m}] = \dfrac{1}{m!}\dfrac{1}{h^m}\Delta^m f_k$
4. 向前差分 ⇒ Newton 前插公式
$$N_n(x) = N_n(x_0+th) = f(x_0) + t\Delta f_0 + \binom{t}{2}\Delta^2 f_0 + \cdots + \binom{t}{n}\Delta^n f_0$$
$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\binom{t}{n+1}h^{n+1},\quad \xi\in(x_0,x_n)$$

③ Hermite 插值

Hermite 插值多项式

- $2n+1$ 次 Hermite 插值多项式
$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}[y_i\alpha_i(x) + m_i\beta_i(x)]$$
$$\alpha_i(x) = \left[1 - 2(x-x_i)\sum_{k\ne i}\frac{1}{x_i-x_k}\right]l_i^2(x)$$
$$\beta_i(x) = (x-x_i)l_i^2(x)$$
- Hermite 插值余项
$$R_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}\omega_{n+1}^2(x)$$
- 两点三次 Hermite 插值
$$\begin{aligned}
H_3(x) =& y_0\left(1+2\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2\\
&+ y_1\left(1+2\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2\\
&+ m_0(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2\\
&+ m_1(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2
\end{aligned}$$
- 插值余项
$$R_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2$$

④ 分段插值

三次样条插值

如何求解三次样条插值函数？

思路 1：直接利用分段三次 Hermite 插值

对 $k=0,1,\dots,n-1$，计算 $s_k(x)$ 的二阶导数，列出 $n+1$ 个方程，求解未知数 $m_0,m_1,\dots,m_n$（一阶导数值）

$$\begin{aligned} s_k(x) =& y_k\left(1+2\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2 \\ &+ y_{k+1}\left(1+2\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2 \\ &+ {\color{red}m_k}(x-x_k)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2 \\ &+ {\color{red}m_{k+1}}(x-x_{k+1})\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2 \end{aligned}$$

求二阶导数，得

$$\begin{aligned} s_k''(x) =& 2\frac{(2m_k+m_{k+1})(x-x_{k+1})+(m_k+2m_{k+1})(x-x_k)}{(x_{k+1}-x_k)^2} \\ &- 6\frac{y_{k+1}-y_k}{(x_{k+1}-x_k)^3}(x-x_{k+1}+x-x_k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & s_k''(x_k) = 2\frac{3f[x_k,x_{k+1}]-2m_k-m_{k+1}}{x_{k+1}-x_k}, \\ & s_k''(x_{k+1}) = 2\frac{-3f[x_k,x_{k+1}]+2m_{k+1}+m_k}{x_{k+1}-x_k} \end{aligned}$$

代入二阶导数连续的条件

$s_k''(x_{k+1}) = s_{k+1}''(x_{k+1})$

并利用 $h_k = x_{k+1}-x_k$ 化简，得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{h_k}{\color{red}m_k} + 2\left(\frac{1}{h_k}+\frac{1}{h_{k+1}}\right){\color{red}m_{k+1}} + \frac{1}{h_{k+1}}{\color{red}m_{k+2}} \\ &= 3\left(\frac{f[x_k,x_{k+1}]}{h_k}+\frac{f[x_{k+1},x_{k+2}]}{h_{k+1}}\right) \end{aligned}$$

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

思路 2：基于 $S(x)$ 的二阶导数 $S''(x_k)={\color{red}M_k}$ $(k=0,1,\dots,n)$ 反推 $S(x)$

由于 $s_k(x)$ 是三次多项式，可知 $s_k''(x)$ 是线性函数

$$s_k''(x) = M_k\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}} + M_{k+1}\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}$$

对上式积分两次，可得

$$\begin{aligned} s_k(x) =& \frac{(x-x_{k+1})^3}{6(x_k-x_{k+1})}{\color{red}M_k} + \frac{(x-x_k)^3}{6(x_{k+1}-x_k)}{\color{red}M_{k+1}} \\ &+ c_1\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}} + c_2\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k} \end{aligned}$$

代入插值条件 $s_k(x_k)=y_k$ 和 $s_k(x_{k+1})=y_{k+1}$，可确定积分常数 c_1 和 c_2

整理后，得到

$$\begin{aligned} s_k(x) =& \frac{(x-x_{k+1})^3}{6(x_k-x_{k+1})}{\color{red}M_k} + \frac{(x-x_k)^3}{6(x_{k+1}-x_k)}{\color{red}M_{k+1}} \\ &+ \left(y_k - \frac{{\color{red}M_k}(x_k-x_{k+1})^2}{6}\right)\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}} \\ &+ \left(y_{k+1} - \frac{{\color{red}M_{k+1}}(x_{k+1}-x_k)^2}{6}\right)\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k} \end{aligned}$$

对上式求导，得到一阶导数表达式

$$\begin{aligned} s_k'(x) =& \frac{M_k}{6}\frac{3(x-x_{k+1})^2-(x_k-x_{k+1})^2}{x_k-x_{k+1}} \\ &+ \frac{M_{k+1}}{6}\frac{3(x-x_k)^2-(x_{k+1}-x_k)^2}{x_{k+1}-x_k} \\ &+ f[x_k,x_{k+1}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow & s_k'(x_k) = \frac{2M_k+M_{k+1}}{6}(x_k-x_{k+1}) + f[x_k,x_{k+1}] \\ & s_k'(x_{k+1}) = \frac{2M_{k+1}+M_k}{6}(x_{k+1}-x_k) + f[x_k,x_{k+1}] \end{aligned}$$

代入条件 $s_k'(x_{k+1}) = s_{k+1}'(x_{k+1})$

并利用 $h_k = x_{k+1}-x_k$ 化简，得

$$\begin{aligned} & h_k{\color{red}M_k} + 2(h_k+h_{k+1}){\color{red}M_{k+1}} + h_{k+1}{\color{red}M_{k+2}} \\ &= 6(f[x_{k+1},x_{k+2}]-f[x_k,x_{k+1}]) \end{aligned}$$

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

误差估计 设 $f(x)\in C^4[a,b]$，$S(x)$ 为满足第一或第二类边界条件的三次样条函数，则有

$$\begin{aligned} \max_{a\le x\le b}|f(x)-S(x)| &\le \frac{5}{384}\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^4 \\ \max_{a\le x\le b}|f'(x)-S'(x)| &\le \frac{1}{24}\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^3 \\ \max_{a\le x\le b}|f''(x)-S''(x)| &\le \frac{3}{8}\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^2 \end{aligned}$$

其中 $h=\max\limits_{0\le k\le n-1}h_k = \max\limits_{0\le k\le n-1}|x_{k+1}-x_k|$.

3-函数逼近

① 最佳一致逼近

偏差点

$$|p_n(x_0)-f(x_0)| = \|p_n-f\|_\infty$$

Chebyshev定理 $p_n(x)\in H_n$ 是 $f(x)\in C[a,b]$ 的最佳一致逼近多项式的 **充分必要条件** 是 $p_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上有 $n+2$ 个轮流为”正”、”负”的偏差点

- **推论1**：若 $f(x)\in C[a,b]$，则其 n 次最佳一致逼近多项式存在且唯一
- **推论2**：若 $f(x)\in C[a,b]$，则其 n 次最佳一致逼近多项式是 $f(x)$ 的一个 Lagrange 插值多项式

② 最佳平方逼近

正交多项式

- **性质 1**：$\{\phi_k(x)\}_{k=0}^n$ 构成 H_n 的一组基
- **性质 2**：$\phi_n(x)$ 与所有次数小于 n 的多项式正交
- **性质 3**：三项递推公式设 ϕ_k 首项系数为 $a_k\ne 0$，则有

$$\begin{aligned} {\color{blue}\phi_{n+1}(x)} =& \frac{a_{n+1}}{a_n}\Bigg[\left(x-\frac{\langle x\phi_n(x),\phi_n(x)\rangle}{\langle\phi_n(x),\phi_n(x)\rangle}\right){\color{blue}\phi_n(x)} \\ &- \frac{a_{n-1}}{a_n}\frac{\langle x\phi_n(x),\phi_n(x)\rangle}{\langle\phi_{n-1}(x),\phi_{n-1}(x)\rangle}{\color{blue}\phi_{n-1}(x)}\Bigg] \end{aligned}$$

- **性质 4**：设 $\{\phi_k(x)\}_{k=0}^\infty$ 为 $[a,b]$ 上的带权 $\rho(x)$ 的 k 次正交多项式，则 $\phi_n(x)$ 在 (a,b) 内有 n 个 不同的零点（单实根）

法方程（也适用于非正交多项式的基）

$$\left\langle f-\sum_{j=0}^n a_j\phi_j,\phi_k\right\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^n\langle\phi_k,\phi_j\rangle a_j = \langle f,\phi_k\rangle$$

求解 n 次最佳平方逼近多项式

方法 1 ：以 $1,x,x^2,\dots,x^n$ 为基，设 $\rho(x)\equiv 1$, $f(x)\in C[0,1]$ 直接求解法方程 $\sum_{j=0}^n\langle\phi_k,\phi_j\rangle{\color{red}a_j} = \langle f,\phi_k\rangle$, $k=0,1,\dots,n$

其中 $\langle\phi_k,\phi_j\rangle = \int_0^1 x^{k+j}dx = \frac{1}{k+j+1}$

最后代入 $p^*(x)=\sum_{j=0}^n a_j\phi_j(x)$ 即可

$\langle f-p^*,\phi_k\rangle = 0,\quad k=0,1,\dots,n$

平方误差：

$$\begin{aligned} \|\delta(x)\|_2^2 &= \langle f-p^*,f-p^*\rangle \\ &= \langle f,f\rangle - \langle p^*,f\rangle \\ &= \|f(x)\|_2^2 - \sum_{j=0}^n{\color{red}a_j}\langle\phi_j,f\rangle \end{aligned}$$

方法 2 ：以正交多项式 $\phi_0,\phi_1,\phi_2,\dots,\phi_n$ 为基

平方误差： $\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{j=0}^n{\color{red}\dfrac{\langle f,\phi_j\rangle^2}{\langle\phi_j,\phi_j\rangle}}$

常见的正交多项式

1. Legendre 多项式

当区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 时，由 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n,\ldots\}$ 正交化得到的多项式

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]$$

$$\begin{aligned}P_0(x)&=1\\P_1(x)&=x\\P_2(x)&=\frac{3x^2-1}{2}\\P_3(x)&=\frac{5x^3-3x}{2}\\P_4(x)&=\frac{35x^4-30x^2+1}{8}\end{aligned}$$

性质

1. 递推关系：$(n+1)P_{n+1}(x)=(2n+1)xP_n(x)-nP_{n-1}(x)$
2. 正交性：$\|P_n(x)\|_2^2=\dfrac{2}{2n+1}$
3. 奇偶性

- **一般区间上的最佳平方逼近多项式**
  思路：变量代换
  $g(x)=f(\mu+\delta x),\ p_f(x)=p_g\left(\dfrac{x-\mu}{\delta}\right)$

2. Chebyshev 多项式

当区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 时，由 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n,\ldots\}$ 正交化得到的多项式

$$T_n(x)=\cos(n\cdot\arccos(x)),\quad |x|\le 1$$

若令 $x=\cos\theta$，则 $T_n(x)=\cos n\theta$

$$\begin{aligned}T_0(x)&=1\\T_1(x)&=x\\T_2(x)&=2x^2-1\\T_3(x)&=4x^3-3x\\T_4(x)&=8x^4-8x^2+1\end{aligned}$$

性质

1. 递推关系：$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x)$
   $T_n(x)$ 的最高项系数为 2^{n-1} $(n\ge 1)$
2. 正交性：$\|T_n(x)\|_2^2=\begin{cases}\frac{\pi}{2}, & n\neq 0\\ \pi, & n=0\end{cases}$
3. 奇偶性
4. n个零点：$\cos\left(\dfrac{2k-1}{2n}\pi\right),\ k=1,2,\ldots,n$
   Chebyshev节点
5. $n+1$个极值点：$\cos\dfrac{k\pi}{n},\ k=0,1,2,\ldots,n$

定理 在区间 $[-1,1]$ 上的所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，$\dfrac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与零的偏差最小，其偏差为 $\dfrac{1}{2^{n-1}}$

由 Chebyshev 定理可知，在区间 $[-1,1]$ 上，x^n 在 H_{n-1} 中的最佳一致逼近多项式是 $x^n-\dfrac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$

定理 设函数 $f(x)\in C^{n+1}[-1,1]$，若插值节点 $x_0,x_1,\ldots,x_n$ 为 Chebyshev 多项式的 $n+1$ 个零点，则插值误差 $\|f(x)-L_n(x)\|_\infty$ 最小，且

$$\|f(x)-L_n(x)\|_\infty=\max_{-1\le x\le 1}|R_n(x)|\le\frac{|M_{n+1}|}{(n+1)!}\|\omega_{n+1}(x)\|_\infty=\frac{|M_{n+1}|}{2^n(n+1)!}$$

- 用 Chebyshev 多项式的零点插值，可以使得总体插值误差最小！
- 可通过 变量代换，将上述定理推广至区间 $[a,b]$

3. Hermite 多项式

当区间为 $(-\infty,\infty)$，权函数 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 时，由 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n,\ldots\}$ 正交化得到的多项式

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}=e^{-x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{x^2}$$

$$\begin{aligned}H_0(x)&=1\\H_1(x)&=2x\\H_2(x)&=4x^2-2\\H_3(x)&=8x^3-12x\\H_4(x)&=16x^4-48x^2+12\end{aligned}$$

性质

- 递推关系：$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)$
  首项系数为 2^n
- 正交性：$\|H_n(x)\|_2^2=\sqrt{\pi}2^n n!$

Hermite 多项式可用作神经网络的激活函数的一组基

③曲线拟合的最小二乘法

求解最小二乘逼近函数

- **方法 1**：直接求解法方程
- **方法 2**：用正交多项式作最小二乘拟合

构造带权正交多项式的方法

- **三项递推公式**

$$\begin{cases}\phi_0(x)=1,\quad \phi_1(x)=x-\alpha_0,\\ \phi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\phi_k(x)-\beta_k\phi_{k-1}(x),\end{cases}$$

其中

$$\alpha_k=\frac{\langle x\phi_k,\phi_k\rangle}{\langle\phi_k,\phi_k\rangle}$$
$$\beta_k=\frac{\langle\phi_k,\phi_k\rangle}{\langle\phi_{k-1},\phi_{k-1}\rangle}$$

- **正交多项式是目前为止多项式拟合的最好方法**
  不需要解线性方程组，给定次数 n，可以根据三项递推公式方便地计算正交多项式