

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 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ ,  $L_n(x)$ 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  $M_{n+1} = \max_{a \leq x \leq b} |f^{(n+1)}(x)|$ , 则插值多项式  $L(x)$  逼近  $f(x)$  的截断误差限是

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

② 差商与 Newton 插值

逐次线性插值 新的插值基函数

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

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

差商

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

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

- 用差商重新表示插值多项式

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

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

Newton 差商插值多项式

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

插值余项

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

差商的性质

- 差商可以表示为函数值  $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_k)$  的线性组合

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \sum_{j=0}^k \frac{f(x_j)}{\prod_{i \neq j} (x_j - x_i)}$$

证明（归纳法）

- 差商与节点的排序无关, 即差商具有对称性
- 差商与阶导数之间的关系

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

思路: Lagrange 插值余项的定理

- （作为泛函对  $f$  的）线性性
- 对于不超过  $n$  次的多项式  $f(x)$ , 其  $n$  阶差商  $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$  为常数 ( $n$  次项系数)

等距节点插值公式  $\Rightarrow$  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

- 各阶差分均可用函数值表示  
 $m$  阶向前差分:  $\Delta^m f_k = (E - I)^m f_k$
- 可用各阶差分表示函数值  
 $f_{k+m} = (\Delta + I)^m f_k$
- 差商与差分的关系  
 $x_k = x_0 + kh, \quad f[x_k, x_{k+1}, \dots, x_{k+m}] = \frac{1}{m!} \frac{1}{h^m} \Delta^m f_k$
- 向前差分  $\Rightarrow$  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

$$\begin{aligned} H_{2n+1}(x) &= \sum_{i=0}^n [y_i \alpha_i(x) + m_i \beta_i(x)] \\ \alpha_i(x) &= \left[ 1 - 2(x - x_i) \sum_{k \neq i} \frac{1}{x_i - x_k} \right] l_i^2(x) \\ \beta_i(x) &= (x - x_i) l_i^2(x) \end{aligned}$$

- 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

$$\begin{aligned} H_3(x) &= y_0 \left( 1 + 2 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right) \left( \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right)^2 \\ &\quad + y_1 \left( 1 + 2 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right) \left( \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right)^2 \\ &\quad + m_0 (x - x_0) \left( \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \right)^2 \\ &\quad + m_1 (x - x_1) \left( \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \right)^2 \end{aligned}$$

- 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）

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

求二阶导数，得

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

其中  $h = \max_{0 \leq k \leq n-1} h_k = \max_{0 \leq k \leq n-1} |x_{k+1} - x_k|$ .

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  $\phi_k$  首项系数为  $a_k \neq 0$ ，则有

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

- 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）

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

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  $\sum_{j=0}^n \langle \phi_k, \phi_j \rangle a_j = \langle f, \phi_k \rangle, k = 0, 1, \dots, n$   
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：

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

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

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

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  $\{1, x, x^2, \dots, x^n, \dots\}$  正交化得到的多项式

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

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2}$$

$$P_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{2}$$

$$P_4(x) = \frac{35x^4 - 30x^2 + 1}{8}$$

性质

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

- 一般区间上的最佳平方逼近多项式

思路: 变量代换

$$g(x) = f(\mu + \delta x), p_f(x) = p_g\left(\frac{x - \mu}{\delta}\right)$$

2. Chebyshev 多项式

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

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

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

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

$$T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

性质

- 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  $2^{n-1}$  ( $n \geq 1$ )
- 正交性:  $\|T_n(x)\|_2^2 = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & n \neq 0 \\ \pi, & n = 0 \end{cases}$
- 奇偶性
- $n$ 个零点:  $\cos\left(\frac{2k - 1}{2n}\pi\right), k = 1, 2, \dots, n$   
**Chebyshev节点**
- $n + 1$ 个极值点:  $\cos \frac{k\pi}{n}, k = 0, 1, 2, \dots, n$

**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， $\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$

**与零的偏差最小**，其偏差为  $\frac{1}{2^{n-1}}$

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  $x^n - \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$

**定理** 设函数  $f(x) \in C^{n+1}[-1, 1]$ ，若插值节点  $x_0, x_1, \dots, x_n$  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

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

- 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  $\{1, x, x^2, \dots, x^n, \dots\}$  正交化得到的多项式

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

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

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

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

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