2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第六讲：插值法与最小二乘法 – 1

第三章 §1

主讲人：张治国

zgzhang@szu.edu.cn

深圳大学 医学部 生物医学工程学院

SHENZHEN UNIVERSITY HEALTH SCIENCE CENTER SCHOOL OF BIOMEDICAL ENGINEERING

上节课回顾

- 介绍了两类针对特定形式线性方程组的解法。
- 对于对称正定线性方程组，介绍了平方根法（Cholesky分解）。
- 对于三对角线方程组，介绍了追赶法。

第二章回顾

- 线性方程组的数值解法是科学计算的基础，在各种数值方法中都有涉及。
- 解线性方程组的直接法包括Gauss消去法和直接三角分解法（通过$\boldsymbol{LU}$分解），其基本做法是将线性方程组约化为等价的三角形方程组再求解。
- 基本的直接三角分解法（如Doolittle算法）研究$\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{U}$ 的元素和 $\boldsymbol{A}$ 的元素之间的直接关系。Doolittle分解法的紧凑格式，可解矩阵方程。

第二章回顾

- 讨论了主元素的作用并介绍了Gauss列主元素消去法和部分选主元Doolittle分解法以避免小主元引起的误差。

- 在约化过程中，选主元是为了保证方法数值稳定性采取的必要措施。但对于特殊的稀疏矩阵（如对称正定矩阵和三对角线对角占优矩阵），即使不选主元，方法也是稳定的。

本章内容

第三章　插值法与最小二乘法

§1 插值法

§2 插值多项式中的误差

§3 分段插值法

§4 Newton插值

§5 Hermite插值

§6 三次样条插值

§7 数据拟合的最小二乘法

本节课内容

第三章 插值法与最小二乘法

§1 插值法

1-1 插值问题

1-2 插值多项式存在的唯一性

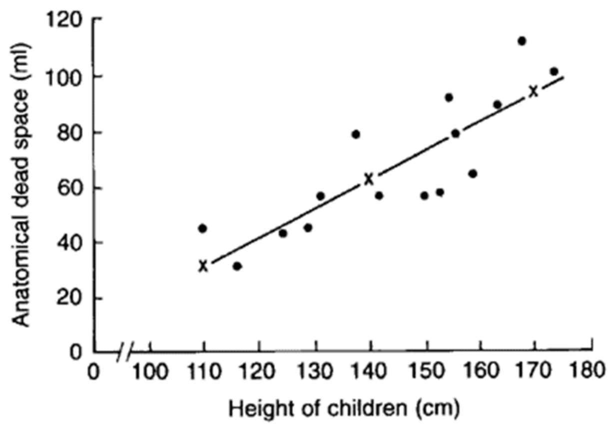
1-3 插值基函数及Lagrange插值

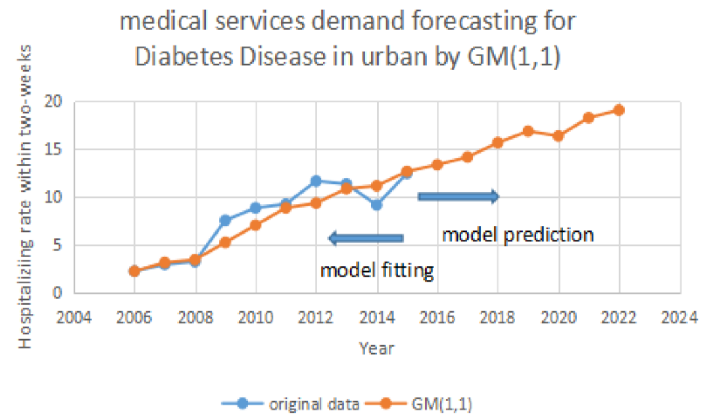
§1 插值法

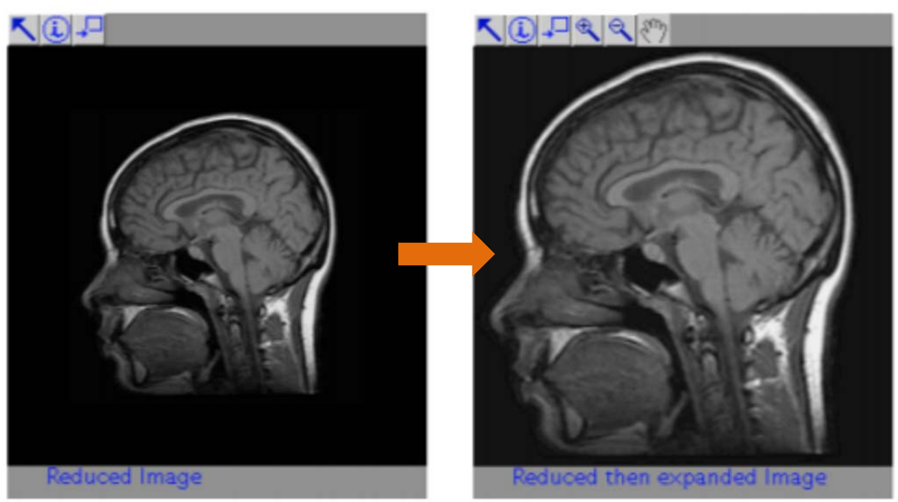
- 科学计算的很多问题和函数有关。但由于计算机硬件系统只能提供四则运算和逻辑运算，所以除了代数多项式和有理分式等少数函数关系式之外，绝大多数函数不能直接用计算机进行数值计算。
- 因此，需要研究能在计算机上实现的函数近似代替已知函数，并进行数值计算的问题。
- 插值法和数据拟合的最小二乘法是近似代替与计算的基本的并且是有效的方法。
- 基本出发点：根据函数 $f(x)$ 的一组数据，按照某种规则构造简单易算的函数 $P(x)$ 去近似 $f(x)$ 。

§1 插值法

- 插值在生物医学工程领域被非常广泛地应用：从有限的观测数据样本中估计出定量的函数关系，并预测出新数据







1-1 插值问题

- 问题描述：通过实验或者测量，获得函数 $y = f(x)$ 在区间 $[a, b]$上的一组互异的点 $\{x_i\}$ 上的函数值 $\{y_i\}$, $i = 0,1,\cdots,n$。

- 寻找一个简单易算的函数 $P(x)$，使得

$$P(x_i) = y_i \quad , \qquad i = 0,1,\cdots,n \tag{1.1}$$

并以 $P(x)$ 近似代替 $f(x)$。

- 上述问题称为插值问题，按条件(1.1)求函数 $f(x)$的近似表达式的方法称为插值法，称条件(1.1)为插值条件，$P(x)$ 为 $f(x)$ 的插值函数，$(i = 0,1,\cdots,n)$ 为插值节点，所属的区间 $[a, b]$ 为插值区间。

1-1 插值问题

- 一个特点：$y = P(x)$和 $y = f(x)$的曲线在 Oxy 平面上至少有 $n+1$个交点：$(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$，而在非节点处，$P(x)$ 和 $f(x)$可以有偏差，即 $P(x)$ 是 $f(x)$ 的近似值。

- 常见插值函数：插值函数应是在计算机上能进行直接计算的，包含多项式和有理函数。

1-1 插值问题

- 多项式：由变量和常数系数通过有限次加减法、乘法以及自然数幂次的乘方运算得到的代数表达式。

- 有理函数：通过多项式的加减乘除得到的函数。

- 常用插值函数是 n 次代数多项式，简称（代数）插值多项式，相应的求插值多项式的方法称为多项式插值。

1-1 插值问题

- 多项式的优点：
  - 多项式中的运算都是四则运算，可在计算机上执行；
  - 多项式微分和原函数演算后仍是多项式；
  - 可以逼近各种函数，可以估算逼近误差；
  - 可以用别的多项式（特别是正交多项式）作为基函数进行表达，从而简化求表达式系数的运算。

1-2 代数插值多项式的存在唯一性

- 设

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \qquad (1.2)$$

是满足条件(1.1)的 $f(x)$ 的插值多项式，即

$$P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1, \cdots, P(x_n) = y_n$$

- 故

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

1-2 代数插值多项式的存在唯一性

- 上式是关于待定参数 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的 n 阶线性方程组，其系数矩阵的行列式

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

称为Vandermonde行列式。

1-2 代数插值多项式的存在唯一性

- 若 $x_i \neq x_j$（当 $i \neq j$），则 $V \neq 0$ 。此时，(1.2)有唯一解，即满足插值条件(1.1)的函数 $f(x)$ 的代数插值多项式存在且唯一。
- 注：求解线性方程组的方法一般不便于用来求 $f(x)$ 的插值多项式，因为直接求解线性方程组的数值解计算量大、步骤多而易使舍入误差增大。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 由线性空间理论，全体次数小于等于 n 的代数多项式构成的 $n+1$ 维线性空间 $P_n[x]$ 中的基底是不唯一的，故它可写成多种形式。

- 例如，$1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为 $P_n[x]$的一组基，则(1.2)式 $P(x)_n$坐标为$(a_0, a_1, \cdots, a_n)$ 。另由$P(x)_n$ 在 c 点的 $n+1$ 阶Taylor展开，$P_n(x) = P_n(c) + P_n'(c)(x-c) + \cdots + \dfrac{P_n^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n$，可知 $1, (x-c), (x-c)^2, \cdots, (x-c)^n$ 也是 $P_n[x]$ 的一组基。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 在 $P_n[x]$ 中定义一种特殊的基称为插值基函数，为 $n+1$ 个线性无关的特殊代数多项式：

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

- 则插值多项式可表示为

$$P_n(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x) \qquad (1.3)$$

- 注意：虽然不同的插值基函数会组成不同形式的插值多项式，但插值多项式是唯一的。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 三种形式的插值多项式：

  1. Lagrange插值　　§1 – §3

  2. Newton插值　　§4

  3. Hermite插值　　§5

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- Lagrange插值设在区间 $[a, b]$上， $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为给定的一组互异的节点，构造 n 次多项式

$$l_j(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}$$

$$= \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq j}}^{n} \frac{x-x_i}{x_j-x_i}, \qquad j = 0,1,\cdots,n \tag{1.4}$$

称为 n 次Lagrange插值基函数。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 则 $l_j(x)$ 满足

$$l_j(x_i)=\delta_{ij}=\begin{cases}0 & i\neq j,\\ 1 & i=j\ ,\end{cases}\qquad i,j=0,1,\cdots,n \tag{1.5}$$

- (1.5)式说明 $l_j(x)$ 只与插值节点有关。

- 用 $l_0(x),l_1(x),\cdots,l_n(x)$ 的线性组合表示 n 次多项式：

$$P_n(x)=a_0l_0(x)+a_1l_1(x)+\cdots+a_nl_n(x) \tag{1.6}$$

其中, $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 为待定参数。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 对每个 $i=0,1,\cdots,n$ ，令

$$P_n(x_i)=a_0l_0(x_i)+a_1l_1(x_i)+\cdots+a_nl_n(x_i)=\sum_{j=0}^{n}a_jl_j(x_i)=y_i$$

- 利用(1.5)得到

$$a_i=y_i\ ,\quad i=0,1,\cdots,n$$

- 代入(1.6)得到多项式

$$L_n(x)=\sum_{j=0}^{n}y_jl_j(x)=\sum_{j=0}^{n}y_j\prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}\frac{x-x_i}{x_j-x_i} \tag{1.7}$$

称为Lagrange插值多项式。

- 一个Lagrange插值多项式要有 $n+1$ 个 n 次Lagrange插值基函数组合而成，其组合系数恰好是节点上的函数值。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 例1：给定 $f(x)=\sqrt{x}$ 的函数表如下：

x	144	169	255
$y=f(x)$	12	13	15

写出二次Lagrange插值基函数，并用二次Lagrange插值多项式计算 $f(175)$ 的近似值。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 解：设 $x_0 = 144$，$x_1 = 169$， $x_2 = 225$

$$l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 169)(x - 225)}{2025}$$

$$l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = -\frac{(x - 144)(x - 225)}{1400}$$

$$l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 144)(x - 169)}{4536}$$

1-3 插值基函数及Lagrange插值

$$L_2(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x)$$
$$= 12 l_0(x) + 13 l_1(x) + 15 l_2(x)$$

- 因此 $f(175) = \sqrt{175} \approx L_2(175) = 13.23015873$
- 但是 $\sqrt{175}$ 的准确值为 $f(175) = 13.22875656$

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 特别地， Lagrange插值在 $n=1$ 时为线性插值：只有两个插值节点，为两个一次插值基函数的线性组合。

- 设两节点和函数值为 $(x_k, y_k), (x_{k+1}, y_{k+1})$，则两个节点的一次插值基函数分别为：

$$l_k(x) = \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}}, \qquad l_{k+1}(x) = \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}$$

- 由它们组成的一次Lagrange插值多项式为

$$L_1(x) = y_k l_k(x) + y_{k+1} l_{k+1}(x)$$

$$= y_k \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + y_{k+1} \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}$$

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 例2：对例1中的函数表，用线性插值多项式计算 $f(175)$
- 解：因插值点 x=175 位于 x_1=169 和 x_2=225 之间，故取 x_1 和 x_2 为插值节点。于是

$$L_1(x) = y_1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} + y_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

- 可计算得

$$L_1(175) = 13.21428572$$

- 但是 $\sqrt{175}$ 的准确值为

$$f(175) = 13.22875656$$

- 可以看出 $L_1(175)$ 的误差比 $L_2(175)$ 大。

1-3 插值基函数及Lagrange插值

- 两个问题：

  1.怎样估计 $L_n(x)$ 近似值代替 $f(x)$ 时所产生的误差?

  2.是不是插值多项式次数越高，其计算结果就越精确?

本节课小结

- 插值法是函数近似代替与计算的基本且有效的方法之一。数值计算值最常用的是多项式插值。
- 讨论了插值的一系列基本概念（插值法、插值函数、插值节点、插值区间等 ）和性质（如，插值多项式的唯一性）。
- 介绍了Lagrange插值和其特例线性插值。

作业

习题三：1(2)（注：求 $f(0.5)$ 近似值需使用线性插值、二次和三次Lagrange插值）

【选做】以上题目的二次Lagrange插值用MATLAB编程实现（40分）

作业上交日期：2018年10月23日

下节课内容

第三章 插值法与最小二乘法

§2 插值多项式中的误差

§3 分段插值法