科学计算笔记

任云玮

目录

1 绪论

1.1 计算机数值计算基本原理

1.1.1 实数的存贮方法

1 定义 (二进制浮点数系) [1] 实数在计算机内部为**近似存贮**，采用二进制浮点数系

$$F(2, n, L, U) = \{\pm 0.a_1 a_2 \dots a_n \times 10^m\} \cup \{0\}$$

其中 $a_1 = 1$，$a_i \in \{0, 1\}$. 指数 m 满足 $L \leq m \leq U$. 称 n 为其字长，2 表示采用二进制.

2 标准 (IEEE)

1. 单精度: $t = 24, L = -126, U = 127$
2. 双精度: $t = 53, L = -1022, U = 1023$
3. Underflow Limit: $UFL = 0.1 \times 2^L$. 若 $0 < x < UFL$，则 $fl(x) = 0$.
4. Overflow Limit: $OFL = 0.11\dots 1 * 2^U$. 若 $x > OFL$，则 $fl(x) = \infty$.
5. 舍入: 若 $UFL \leq x \leq OFL$，则 $fl(x)$ 为舍入所得浮点数. 舍入规则如下：设 $x = 0.a_1 a_2 \dots a_n \dots \times 2^m$. 若 $a_{n+1} = 1$，则 $d_t + 1$ 并舍弃其后项；否则直接舍弃其后项.

3 定义 (机器精度) 下仅考虑舍去的情况.

$$\begin{aligned} x - fl(x) &= 2^m \times 0.0\dots 0 a_{n+2} \dots \\ &= 2^m \times [2^{-(t+2)} + 2^{-(t+3)} + \cdots] \\ &= 2^m \times 2^{-(t+1)} \end{aligned}$$

其相对误差满足

$$\frac{x - fl(x)}{x} < \frac{x - fl(x)}{0.5 \times 2^m} = 2^{-t}$$

记为 ε，称之为机器精度.

4 命题

$$fl(x) = x(1 + \delta), \text{ 其中 } |\delta| \leq \varepsilon$$

[1] floating Number System

1.1.2 实数的基本运算原理

加法 + 硬件实现 $\Rightarrow$ 四则运算.

5 实现 $(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})$ 设 x, y 为浮点数，则 $x+y$ 的实现方式如下:

1. 对阶：将指数 m 化为两者中较大者;
2. 尾数相加;
3. 舍入;
4. 溢出分析等……
5. 结果输出.

评注 由 $fl(x)+fl(y)=x(1+\delta_x)+y(1+\delta_y)$ 可知，当一个大数与一个小数相加时，小数有可能被忽略，所以应当避免大数小数间的相加.

1.2 误差的来源与估计

1.2.1 误差的来源

1. 模型问题. 例：近似地球为球体来计算.
2. 测量误差. 例：测量地球半径时的误差.
3. 方法误差（截断误差）. 例：对于 $y = f(x)$，求 $f(x^*)$ 时使用 Taylor 展开.
4. 舍入误差（rounding-off）. 例：计算机计算时的误差.

1.2.2 误差与有效数字

6 **定义 (绝对误差)** 设 x 为给定实数，x^* 为其近似值. 定义绝对误差为

$$e(x^*) = x^* - x.$$

称 ε^* 为其误差上界，若

$$|e(x^*)| \leq \varepsilon^*$$

7 **定义 (相对误差)** 对于同上的 x 和 x^*，定义其相对误差

$$e_r(x^*) = \frac{x^* - x}{x}$$

称 ε_r^* 为其相对误差界，若

$$|e_r(x^*)| \leq \varepsilon_r^*$$

评注 在实际应用中，x 通常是未知的，所以会采用

$$\bar{e}_r(x^*) = \frac{x^* - x}{x^*}$$

来代替相对误差. 对于分子，使用绝对误差界来替代，有如下不等式

$$|\bar{e}_r(x^*)| \leq \frac{\varepsilon^*}{|x^*|}.$$

这两种相对误差界间的差别，当 $\varepsilon^* \ll 1$ 时，满足

$$|e_r - \bar{e}_r| = O((\varepsilon_r^*)^2)$$

8 **定义 (有效数字)** 设 $x \in R$，$x^* = 0.a_1a_2\cdots a_k \times 10^m$ 为其近似值. 称 x^* 相对于 x 有 $n\,(n \leq k)$ 位有效数字，若 n 是满足下式的 n 的最大值.

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$$

评注 在实践中，一般可以采用更加简便的方法，对于归一化以后的 x^*，在尾数部分有 n 位，则称其有 n 位有效数字. 注意，此方法对于错误的舍入结果是不适用的，对于错误的情况，需要再减去一位有效数字.

9 定理 (误差与有效数字) 若 $x = 0.a_1a_2\ldots a_n \times 10^m$ 有 n 位有效数字，则

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2a_1} \times 10^{1-n}.$$

反之，若

$$\varepsilon_r^* \le \frac{1}{2(1+a_1)} \times 10^{1-n},$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字.

证明 对于前者，只需利用有效数字的定义，以及利用 $x \ge 0.a_1$（仅考虑 $a_1 \ne 0$ 的情况）. 对于后者，证明是类似的.

1.2.3 数值运算的误差估计

以下内容都假设运算无误差.

10 定理 (四则运算误差估计)

1. 加/减法: $\varepsilon(x^* \pm y^*) \le \varepsilon_x^* + \varepsilon_y^*$
2. 乘法: $\varepsilon(x^*y^*) \le |x^*|\varepsilon_y^* + |y^*|\varepsilon_x^*$
3. 除法: $\varepsilon(\frac{x^*}{y^*}) \le \frac{|x^*|\varepsilon_y^* + |y^*|\varepsilon_x^*}{|y^*|^2}$

证明 考虑加法的误差估计. 对于 x，y 及其近似值 x^*，y^*，计算 $x^* \pm y^*$ 和 $x \pm y$ 间的误差.

$$\begin{aligned} & |x^* \pm y^* - (x \pm y)| \le |x^* - x| + |y^* - y| \le \varepsilon_x^* + \varepsilon_y^* \\ \Rightarrow \quad & \varepsilon(x^* \pm y^*) \le \varepsilon_x^* + \varepsilon_y^* \end{aligned}$$

对于其他的运算，证明是类似的.（证明中可用 $+1-1$ 技巧）

11 定理 (运算的误差估计) 设 $A = f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$，$\mathbf{x}^*$ 是 $\mathbf{x}$ 的估计值. 利用带 Peano 余项的 Taylor 展开，可知 A 的绝对误差满足

$$\begin{aligned} e(A^*) &= f(\mathbf{x}^*) - f(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{p=1}^{q} \mathrm{d}^k f(\mathbf{x}^*) + o(||x^* - x||^q) \end{aligned}$$

取 q=1，则

$$= \sum_{k=1}^{n} \partial_k f(\mathbf{x}^*)(x^* - x) + o(||x^* - x||)$$

利用上式，可知

$$\varepsilon(A^*) \approx \sum_{k=1}^{n} |\partial_k f(\mathbf{x}^*)|\, \varepsilon(x^*)$$

$$\varepsilon_r(A^*) = \frac{\varepsilon(A^*)}{|A^*|}$$

评注 对于定义在 $\mathbf{R}$ 上的函数，即为

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$$

1.2.4 数字求和的舍入误差分析

12 **命题** n 个浮点数相加，若将它们从小到大排列后相加，则可以减小舍入误差.

证明 考虑浮点数的求和 $S_n = \sum_i^n a_i$，在计算机中的过程表现为

$$S_2^* = fl(a_1 + a_2) = (a_1 + a_2)(1 + \varepsilon_2), \quad |\varepsilon_2| \le \varepsilon = 2^{-t}$$
$$\cdots\cdots$$
$$S_n^* = fl(S_{n-1}^* + a_n)(1 + \varepsilon_n), \quad |\varepsilon_n| \le \varepsilon$$

对于 S_n^* 的误差，若定义 $\varepsilon_1 = 0$，则

$$S_n^* = \sum_{k=1}^{n} a_k \prod_{p=k}^{n} (1 + \varepsilon_p)$$

对误差进行估计，舍去高阶无穷小，有

$$\prod_{i=k}^{n} (1 + \varepsilon_k) \approx 1 + \sum_{i=k}^{n} \varepsilon_k$$

综合上两式，有

$$S_n^* \approx \sum_{k=1}^{n} a_k (1 + \sum_{p=k}^{n} \varepsilon_p)$$
$$= S_n + \sum_{k=1}^{n} a_k \sum_{p=k}^{n} \varepsilon_p$$

进行移项，并取绝对值，再利用三角不等式，以及 $|\varepsilon_i| \le \varepsilon$，得

$$|S_n^* - S_n| \le \sum_{k=1}^{n} |a_k| \sum_{p=k}^{n} |\varepsilon_p| \le \varepsilon \sum_{k=1}^{n} |a_k|(n - k + 1)$$

其中 $n - k + 1$ 关于 k 单调减少，所以根据排序不等式 [引理 71]，即可知命题成立. ■

1.3 避免算法失效的基本原则

13 定理 (原则)

1. 避免两数相除／相减，否则会严重损失有效数字.
2. 避免两相近数相减.
3. 避免绝对值很小的数做除数.
4. 避免大数与小数相加;
5. 简化计算步骤.

14 算法 (高效计算 e^A) 高效计算 e^A，其中 $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$. 首先有

$$e^A = e^{(A/2^n)2^n} = B^{2^n}$$

只需要得到 B，即可以利用倍乘的方法快速得到 B^{2^n}. 下对于 B 进行估计. 当 $x \to 0$ 时，e^x 有 Taylor 展开

$$e^x = 1 + x + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

而取足够大的 n，即可以使得 $A/2^n \approx 0$，则可以对它展开得

$$B \approx I + C + \frac{1}{2}C^2, \text{其中} C = A/2^n$$

而对于倍乘，考虑 B^2，展开平方得

$$B^2 \approx I + 2(C + \frac{1}{2}C^2) + (C + \frac{1}{2}C^2)^2$$

从右至左相加即可.

15 算法 (秦九韶，多项式估值) 设有多项式 (1)，计算 $p(z), z \in \mathbf{R}$ 的值.

$$p(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n \tag{1}$$

定义 b_n 满足

$$b_0 = a_0, \quad b_k = a_k + b_{k-1}z$$

则 b_n 即为所要求的值. 并且成立

$$p'(z) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k z^{n-1-k}$$

证明 用 $x-z$ 去除 $p(x)$，记所得余数为 $b_n(x)$，即

$$p(x)=(x-z)q(x)+b_n(x),$$

代入 $x=z$，则左侧第一项为 0，可知 $p(z)=b_n(z)$. 将两边的式子展开，利用对应系数相等，即可得算法中 b_n 的递推式.

16 定理 (外推法) 设 x_0，x_1 是 x 的两个估计值，且 x_1 相较于 x_0 更接近 x，则可以通过恰当的权值 ω，使得它们的加权平均

$$\bar{x}=x_1+\omega(x_1-x_0)$$

更加接近精确值 x.

17 算法 (π 的估计) 考虑单位圆，其面积为 π，设 π_n 为单位圆的内接正 $2n$ 边形的面积，以及

$$\widetilde{\pi}_n=\frac{1}{3}(4\pi_{2n}-\pi_n)$$

则 π_n 与 $\widetilde{\pi}_n$ 与 π 的误差满足

$$|\pi_n-\pi|=O(\frac{1}{n^2}),\quad |\widetilde{\pi}_n-\pi|=O(\frac{1}{n^4})$$

证明 对于 π_n.

$$\pi_n=n\sin\frac{\pi}{n}=\pi-\frac{\pi^3}{3!}\frac{1}{n^2}+\frac{\pi^5}{5!}\frac{1}{n^4}-\cdots\Rightarrow|\pi_n-\pi|=O(\frac{1}{n^2})$$

对于 $\widetilde{\pi}_n$.

$$\begin{aligned}\widetilde{\pi}_n&=\pi_{2n}+k(\pi_{2n}-\pi_n)=(1+k)\pi_{2n}-k\pi_n\\&=(1+k)(\pi-\frac{\pi^3}{3!}\frac{1}{4n^2}+\cdots)-k(\pi-\frac{\pi^3}{3!}\frac{1}{n^2}+\cdots)\\&=\pi-(\frac{k+1}{4}-k)\frac{\pi^3}{3!}\frac{1}{n^2}+O(\frac{1}{n^4})\end{aligned}$$

为使式子的第二项为零，取 $k=\frac{1}{3}$，则成立

$$|\widetilde{\pi}_n-\pi|=O(\frac{1}{n^4})\quad\blacksquare$$

评注 在实际中，π_n 也是没有办法直接计算而得的，但是对于 $n=3$，即 6 边形的情况，可以知道 $\pi_3=3\sqrt{3}/2$. 同时有递推公式

$$\pi_{2n}=\sqrt{2n(n-\sqrt{n^2-\pi_n^2})},$$

而开平方可以通过迭代的方式实现，从而即计算得到足够精确的 π_{2n} 和 π_n.

2 函数的多项式插值

2.1 问题的提出

18 **定义 (插值)** 设函数 $y = f(x)$ 在 $[a, b]$ 上有定义，且已知在点 $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ 处的函数值 $y_i = f(x_i)$，若存在一简单函数 $P(x)$，成立

$$P(x_i) = y_i,$$

则称 $P(x)$ 为 $f(x)$ 的插值函数，点 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 称为插值节点，$[a, b]$ 称为插值区间，求 $P(x)$ 的方法被称为插值法.

若 $P(x) \in P_n$ 为次数不超过 n 的多项式，则称为多项式插值.

19 **定理 (唯一性)** 给定满足定义 18的 $n+1$ 个点上的函数值，则次数不超过 n 的插值多项式 $P_n(x)$ 存在且唯一.

证明 利用待定系数法，设多项式的系数为 $a_0, \ldots a_n$，则有线性方程组

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

其系数矩阵为 Vandermonde 矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix}$$

根据定义 18中对于 x_i 的要求，矩阵行列式成立

$$\det A = \prod_{i,j=0,\, i>j}^{n} (x_i - x_j) \neq 0.$$

所以该方程组有唯一解.

评注 虽然插值多项式是唯一的，但是根据基函数的选取的不同，系数是不相同的，所以才需要不同的插值方法.

2.2 Lagrange 插值法

20 **定理 (Lagrange 插值法)** 定义

$$l_i(x) = \frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}$$

$$(L_n f)(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x),$$

则 $L_n f$ 即为 f 的插值多项式.

证明 考虑构造 $l_i \in P_n$，满足条件 $l_i(x_j) = \delta_{ij}$，这样 $L_n f = \sum y_i l_i$ 满足要求. 改写条件为（以 l_0 为例）

$$l_0(x) = \alpha(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

$$l_0(x_0) = 1$$

解得

$$\alpha = \frac{1}{(x_0-x_1)\cdots(x_0-x_n)} \quad \blacksquare$$

评注 这样构造插值多项式的动机在于在取定插值节点后，插值实际上相当于构造一个从 $\mathbf{y} = (y_0, \ldots, y_n) \in \mathbf{R}^{n+1}$ 到 $y^*(x) \in P_n$ 的一个映射 $\mathscr{F}$，并且可以证明，$\mathscr{F}$ 是线性的. 因此成立

$$\mathscr{F}(\mathbf{y}) = \mathscr{F}(\sum_{i=0}^{n} y_i \mathbf{e}_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i \mathscr{F}(\mathbf{e}_i) = \sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x).$$

21 **定理 (Lagrange 余项公式)** 设符号含义同定理 20且 f 充分光滑，则对于每一个固定的 x 成立

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

其中 $\xi \in (a,b)$ 且

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n).$$

证明 固定 $x \neq x_i$，定义 $R(x)$ 满足

$$f(x) - (L_n f)(x) = R(x)\omega_{n+1}(x).$$

构造辅助函数 $g(t)$

$$g(t) = f(t) - (L_n f)(t) - R(x)\omega_{n+1}(t).$$

根据插值法与 $R(x)$ 的定义，成立

$$g(x_i) = 0, \quad g(x) = 0,$$

即函数 $g(t)$ 有 $n+2$ 个零点. 反复应用 Rolle 定理，可知存在 $\xi \in (a,b)$，成立 $g^{(n+1)}=0$，即

$$\begin{aligned} &g^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - R(x)(n+1)! = 0 \\ \Rightarrow \quad &R(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \end{aligned}$$

结合 $R(x)$ 的定义式即可知命题成立. ■

评注 当已知 $f^{(n+1)}$ 有界时，可以使用此公式进行估计.

2.3 Runge 现象

22 **定理** 对于复函数 $f(z)$，如果存在 $r_0 > \frac{3}{2}(b-a)$，使得 $f(z)$ 在 $B_{r_0}(\frac{a+b}{2})$ 内解析，则 $P_n(x) = L_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上一致收敛与 $f(z)$. 这里 $B_{r_0}(\frac{a+b}{2})$ 为以 $\frac{a+b}{2}$ 为圆心，r_0 为半径的圆.

2.4 Newton 插值法

23 **例** $n=2$ 时问题的求解.

设 $y^*(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1)$，根据 $y^*(x_0) = y_0$，$y^*(x_0) = y_0$，得 $a_0 = f(x_0)$，$a_0 + a_1(x_1 - x_0) = f(x_1)$，即

$$a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

可以发现 a_1 为割线的斜率. 同理可知

$$a_2 = \frac{f(x_2) - f(x_0) - a_1(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1}$$

为斜率的斜率.

24 **定义 (差商)** 递归 $f(x)$ 在 $x_i, \ldots, x_{i+n}$ 的各阶差商为：$f[x_i] = f(x_i)$，第 k 阶差商为

$$f[x_i, \ldots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}] - f[x_i, \ldots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

25 **定理 (n 次 Newton 插值法)** $x_0, \ldots, x_n$ 为互异插值点，则函数 $f(x)$ 满足

$$\begin{aligned} f(x) = &f[x_0] + f[x_0, x_1](x-x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x-x_0))(x-x_1) + \cdots \\ &+ f[x_0, \ldots, x_n](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1}) + R_n(x). \end{aligned}$$

其中 $R_n(x)$ 为其 Newton 插值多项式的余项，为

$$R_n(x) = f[x_0, \ldots, x_n, x](x-x_0)\cdots(x-x_n).$$

证明 根据差商的定义，有

$$\begin{aligned} f(x) &= f[x_0] + f[x_0,x](x-x_0) \\ f[x_0,x] &= f[x_0,x_1] + f[x_0,x_1,x](x-x_1) \\ &\cdots\cdots\cdots \\ f[x_0,\ldots,x_{n-1},x] &= f[x_0,\ldots,x_n] + f[x_0,\ldots,x_n,x](x-x_n) \end{aligned}$$

将上述式子反复代入它上面的式子，即得 Newton 插值公式.

评注 Newton 插值法的优点在于，当插值点的个数增加时，无需重新计算原有的系数，即 Newton 插值多项式是可以递归计算的.

26 定理 根据 Newton 插值公式，可以得到如下差商的性质.

1. $$f[x_0,\ldots,x_m] = \sum_{i=0}^{m} \frac{f(x_i)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}$$

2. 设 $i_0,\ldots,i_m$ 为 $0,\ldots,m$ 的任意一个排列，则

$$f[x_0,\ldots,x_m] = f[x_{i_0},\ldots,x_{i_m}].$$

3. 广义 Lagrange 中值定理

$$f[x_0,\ldots,x_m] = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!}, \quad \xi \in (\min\{x_i\}, \max\{x_i\})$$

证明 交换插值节点的顺序后，n 次 Newton 插值多项式的 n 次项系数不变，所以 [2.] 成立. 同 $m-1$ 次的 Lagrange 插值多项式比较第 $m-1$ 次项系数及其余项，即可得到 [1.] 和 [3.]

评注 根据 [3.] 可知，对于一个 n 次多项式，n 阶差商即为其 n 次项系数，$k(k>n)$ 阶差商为零.

27 定义 给定序列 $\{f_k\}$，f_k 表示 f 在 $x=x_k$ 处的值，定义

1. 前向差分算符 $\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$,

2. 移位算符 $\mathrm{E}\, f_k = f_{k+1}$,

3. 恒等算符 $\mathrm{I}\, f_k = f_k$.

28 定理 (算符二项式定理) 对于算符 A，B，若它们可交换，则成立二项式定理

$$(A+B)^m = \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} A^k B^{m-k}$$

29 命题 根据定义 27和定理 28可知

$$\Delta = \mathrm{E} - \mathrm{I}$$
$$\Delta^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (-\mathrm{I})^{n-k} \mathrm{E}^k$$
$$\mathrm{E}^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \Delta^k$$

30 定理 (均匀插值) 设 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 满足 $x_k = x_0 + kh$，则有

$$f[x_k, x_{k+1}] = \frac{\Delta f_k}{h}$$
$$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}] = \frac{\Delta^2 f_k}{2h^2}$$
$$\cdots\cdots$$
$$f[x_k, \ldots, x_{k+m}] = \frac{\Delta^m f_k}{m!h^m}$$

31 定理 (Newton 前插公式) 设记号同定理 30，另 $x = x_0 + th$，$t \in \mathbf{R}$，代入定理 25，则成立

$$N_n(x) = f_0 + t\Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0 + \cdots + \frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0.$$

其余项为

$$R_n(x) = \frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

评注 利用广义二项式定理，有

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0 + th) = \mathrm{E}^t f(x_0) = (\mathrm{I} + \Delta)^t f(x_0) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{t}{k} \Delta^k f_0 \end{aligned}$$

2.5 Hermite 插值

32 定理 设 $f \in C^n[a,b]$，$x_0, x_1, \ldots, x_n$ 为 $[a,b]$ 上的互异节点，则 $f[x_0, \ldots, x_n, x]$ 在 $[a,b]$ 上连续.

33 定理 (Hermite 插值) 若给出 $m+1$ 个插值条件（含函数值和导数值）可构造出次数不超过 m 次的多项式.

评注 可以利用待定系数法或者基函数法求的 Hermite 插值多项式.

2.6 分段低次多项式插值

思路 局部入手，整体分析[2]. 化整为零，以直代曲[3].

34 引理 (ω_n 的估计) 任给节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$，记 $h = \max x_{i+1} - x_i : i = 0, 1, \ldots, n$，则对于任意 $x \in [x_0, x_n]$，成立

$$|(x - x_0) \cdots (x - x_n)| \leq \frac{n! h^{n+1}}{4}.$$

35 定理 (分段线性插值) 记 $a = x_0 < \cdots x_n = b$，$e_k = (x_k, x_{k+1})$，$h_k = x_{k+1} - x_k$，$h = \max h_k$. 找函数 $y = f_h(x)$，逼近原有函数，使得

1. 满足插值条件，$f_h(x_k) = f(x_k)$，

2. $f_h(x)$ 连续，

3. $f_h(x) \in P_1$，$x \in e_k$.

则 f_h 的结果为

$$f_h(x) = f_h(x_k) + f_h[x_k, x_{k+1}](x - x_k), \quad (x \in e_k).$$

设 M_2 表示二阶导数的上界，则误差 $R(x)$ 满足，

$$R(x) = \left| \frac{f^{(2)}(\xi)}{2}(x - x_k)(x - x_{k+1}) \right| \leq \frac{1}{8} M_2 h^2.$$

评注 若作整体的 Lagrange 插值，则余项 $R_L(x)$ 满足

$$\left| \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1} \right| \leq \frac{M_{n+1} h^{n+1}}{n+1}.$$

而求高阶导数后容易出现 Runge 现象.

36 定理 (分段三次 Hermite 插值) 节点同上，构造 $f_h(x)$ 使得

1. $f_h(x_k) = f(x_k)$, $f_h'(x_k) = f'(x_k)$

2. $f \in \mathscr{C}^1[a, b]$

3. $f_n(x) \in P_3$, $x \in e_k$

对于两插值点的情况，f 的结果为

$$f_h(x) = f(x_k)\alpha_k + f(x_{k+1})\alpha_{k+1} + f'(x_k)\beta_k + f'(x_{k+1})\beta_{k+1}.$$

其余项 $R(x)$ 满足

$$R(x) = \left| \frac{f^4(\xi)}{4}(x - x_k)^2(x - x_{k+1})^2 \right| \leq \frac{M_4}{4!} \times \left(\frac{h}{4}\right)^4 = \frac{1}{384} M_4 h^4.$$

[2]例：微分流形

[3]例：Riemann 积分

2.7 三次样条插值

37 定义 给定控制点 $a=x_0<\cdots<x_n=b$，设函数 $y=y^*(x)$ 满足

1. $y^*(x)=y_k$，
2. $(y^*)^{(4)}=0, x\in e_k \Leftrightarrow y^*\in P_3, x\in e_k$，
3. $y^*\in\mathscr{C}^2[a,b]$.

称满足后两个条件的函数为**三次样条函数**，称满足上述三个条件的函数为**三次样条插值函数**.

38 定义 (边界条件)

1. 转角条件：$S'(x_0)=f_0'$，$S'(x_n)=f_n'$，
2. 弯矩条件：$S''(x_0)=f_0''$，$S''(x_n)=f_n''$，称 $S''(x_0)=S''(x_n)=0$ 的特例为自然边界条件，
3. 周期条件：$S(x_0+0)=S(x_n-0)$，$S'(x_0+0)=S'(x_n-0)$，$S''(x_0+0)=S''(x_n-0)$，
4. 非纽结条件：$S'''(x)$ 在 $x=x_1$ 和 $x=x_{n-1}$ 处连续. [4]

评注 根据定义 37，在每个小区间上有 4 个待定系数，所以总共有 $4n$ 个待定系数. 而所给条件仅有 $n+1$ 个插值条件，以及在中间 $n-1$ 个插值节点处二阶导数连续（从而原函数与一阶导数也连续），有 $3n-3$ 个光滑性条件，共 $4n-2$ 个条件，因此需要额外的边界条件来确定剩余两个系数.

39 定理 (样条插值的求解) 设 $S''(x_i)=M_i$，通过求解 M_i 来确定插值多项式. 由于 $S(x)\in\mathscr{C}^2$ 且在每一段上 $S(x)\in P_3$，所以 $S''(x)$ 是分段的线性函数. 设在每一段上，

$$S''(x)=M_j\frac{x_{j+1}-x}{x_{j+1}-x_j}+M_{j+1}\frac{x-x_j}{x_{j+1}-x_j}.$$

对 S'' 积分一次、二次，并分别利用光滑性条件、插值条件，以及所给定的边界条件，即可求得 M_i 的值.

40 定理 设 $f(x)\in\mathscr{C}^4[a,b]$，则三次样条插值函数 $S_3(x)$，

$$\max_{a\le x\le b}\left|f^{(m)}(x)-S^{(m)}(x)\right|\le C_m\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|h^{4-m},\quad m=0,1,2,$$

其中 $C_0=5/384$，$C_1=1/24$，$C_2=3/8$.

[4]（Not-a-knot end Condition）这是 Matlab 中 spline 在 X 和 Y 长度相同时所应用的边界条件.

3 函数的多项式逼近

3.1 绪论

41 定义 (逼近) 对函数 f 逼近，即找一简单函数 g，使得在某种度量的意义下，它们之间的误差最小或足够小.

42 定理 (Weierstrass) 对于定义在 $[a,b]$ 上的连续复函数，存在一列复多项式 $\{P_n\}$，成立

$$\lim_{n\to\infty} P_n = f,$$

且是一致的. 若 f 是实函数，则 P_n 的系数也为实数.

评注 Stone-Weierstrass 定理 [5] 保证了至少在最大模的意义下，用多项式来逼近函数是可能的.

43 定义 (常用范数) 对于 $\mathbf{R}^n$，常用的范数有

1. $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1\le i\le n} |x_i|$,
2. $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$,
3. $\|\mathbf{x}\|_2 = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{1/2}$.

对于 $\mathscr{C}[a,b]$，常用的范数有

1. $\|f\|_\infty = \max_{a\le x\le b} |f(x)|$,
2. $\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| \mathrm{d}x$,
3. $\|f\|_2 = (\int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x)^{1/2}$.

评注 通常对于内积空间 X，可以定义范数为

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(x,x)}.$$

44 定义 (权函数) 设 $[a,b]$ 为有限或无限区间[6]，非负函数 $\rho(x)$ 称为 $[a,b]$ 上的权函数，若满足

1. $\int_a^b \rho(x)x^k\mathrm{d}x < \infty$，$k = 0, 1, 2, \ldots$,
2. 对任意非负 $g \in \mathscr{C}[a,b]$，若 $\int_a^b \rho(x)g(x)\mathrm{d}x = 0$，则 $g = 0$.

评注 利用权函数，可以定义带权内积和范数.

---

[5] **Theorem(Stone)** Suppose $\mathscr{A}$ is a self-adjoint algebra of complex continuous functions on a compact set K, $\mathscr{A}$ separates points on K, and $\mathscr{A}$ vanishes at no point of K. Then the uniform closure $\mathscr{B}$ of $\mathscr{A}$ consists of all complex continuous functions on K. In other words, $\mathscr{A}$ is dense in $\mathscr{C}(K)$.

[6] 例子中说 $\rho = 1$ 是一个常用的权函数，但我没有明白，在无限区间的时候 [1.] 是如何成立的.

3.2 最佳平方逼近

45 定义 (最佳平方逼近) 给定 $f \in \mathscr{C}[a,b]$ 和线性无关的函数列 $\varphi_0, \dots, \varphi_n \in \mathscr{C}[a,b]$，定义 $S_n = \operatorname{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$，称 $f^* \in S_n$ 为最佳平方逼近函数，若

$$\|f^* - f\| = \min_{g \in S_n} \|f - g\|_2.$$

即 f^* 是在 2-范数的含义下，S_n 中与 f 最接近的函数.

评注 对于离散的情况 [7]，可以描述为：给定 $x_0, \dots, x_n$ 处的函数值 $f(x_k)$，求 f^*，成立

$$\sum_{i=0}^{n} \rho(x_i)|f(x_j) - f^*(x_j)|^2 = \min_{g \in S_n} \sum_{i=0}^{n} \rho(x_i)|f(x_j) - g(x_j)|^2$$

46 定理 (最佳平方逼近的求解) 设记号同定义 45，设

$$g(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i(x),$$

则可以定义关于 $\mathbf{a} = (a_0, \dots, a_n)^\mathsf{T}$ 的函数

$$I(\mathbf{a}) = \|f - g\|_2^2 = \left\| f - \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i \right\|_2^2 = \int_a^b \rho \left(f - \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i \right)^2 \mathrm{d}x.$$

根据定义，$I(\mathbf{a})$ 在 f^* 处取极值，根据 Fermat 定理，在该点各偏导数为零，通常假设 f 的条件足够好，极限和积分可以换序，即有

$$\begin{aligned}
\frac{\partial I}{\partial a_j} &= \int_a^b \frac{\partial}{\partial a_i} \rho \left(f - \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i \right)^2 \mathrm{d}x \\
&= -2 \int_a^b \rho \left(f - \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i \right) \varphi_j \mathrm{d}x = 0.
\end{aligned}$$

即有线性方程组，

$$\begin{cases}
(\varphi_0, \varphi_0)a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)a_1 + \dots + (\varphi_0, \varphi_n)a_n = (f, \varphi_0) \\
(\varphi_1, \varphi_0)a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)a_1 + \dots + (\varphi_1, \varphi_n)a_n = (f, \varphi_1) \\
\dots\dots \\
(\varphi_n, \varphi_0)a_0 + (\varphi_n, \varphi_1)a_1 + \dots + (\varphi_n, \varphi_n)a_n = (f, \varphi_n)
\end{cases} \tag{2}$$

---

[7] 实际上我们可以利用 Riemann-Stieltjes 积分定义内积，

$$(f, g) = \int_a^b f \mathrm{d}G,$$

$$G(x) = \begin{cases} \int_a^b g \mathrm{d}x, & g \text{ 为函数}, \\ \sum_{i=0}^{n} f(x_i) I(x - x_i), & g \text{ 为离散点} \end{cases}$$

其中 $I(x)$ 为单位阶跃函数. 可以发现，这两种描述的方式是等价的. 在这样的描述下，对于离散点的 G 实际上是阶梯函数.

由于 $\{\varphi_k\}$ 线性无关，所以方程组 (2) 有唯一解. 设其解为 $\mathbf{a}^*$，则最佳平方逼近函数即为

$$f^* = \sum_{i=0}^{n} a_i^* \varphi_i(x),$$

评注 实际上在计算的时候一般采用 Legendre 多项式来计算，而非解法方程. 见定理 55.

几何描述 可以从几何的角度来理解最佳平方逼近. S_n 是 $\{\varphi_k\}$ 张成的空间，而 f 是 S_n 内或 S_n 外的一个向量，最佳平方逼近即找 S_n 中找 f^*，使得 $\|f - f^*\|$ 最小. 根据几何上的直观，$f - f^*$ 应该和 S_n"垂直"，即与张成 S_n 的向量组中的向量分别垂直. 而垂直可以被描述为内积为零. 从而就得到了式 (2). （见图 1）

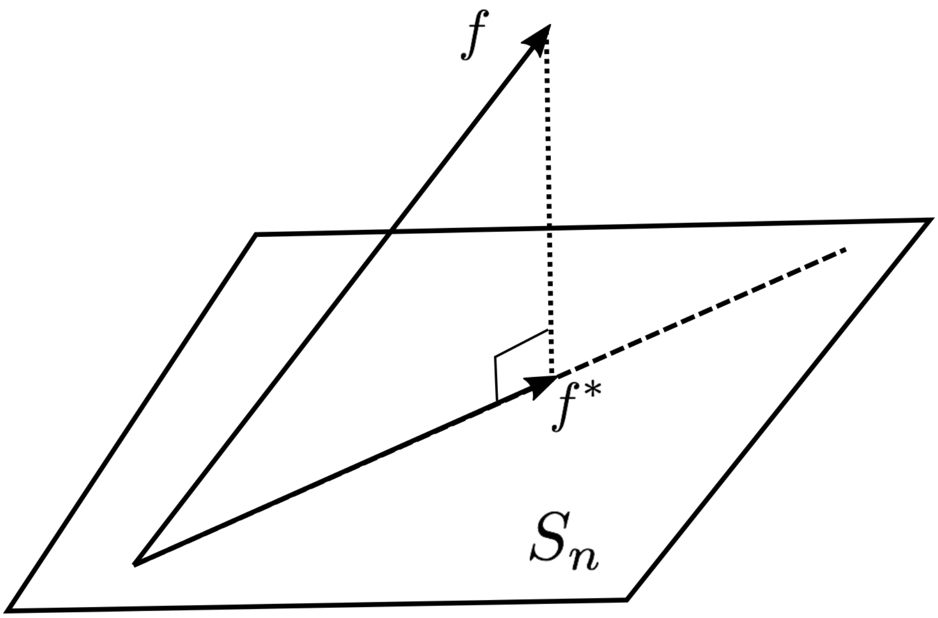

图 1: 最佳平方逼近几何含义

3.3 正交多项式 · 绪论

47 定义 (正交) 设函数 $f, g \in \mathscr{C}[a,b]$，$\rho$ 为 $[a,b]$ 上的权函数且满足

$$(f,g) = \int_a^b \rho f g \mathrm{d}x = 0,$$

则称 f 和 g 在 $[a,b]$ 上带权 ρ **正交**. 若函数组 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 满足

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ A_k > 0, & i = j \end{cases}$$

则称 $\{\varphi_k\}$ 为 $[a,b]$ 上的带权 ρ 的**正交函数组**. 若 $A_k = 1$，则称为**标准正交函数组**.

48 定义 (正交多项式) 设 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 是首项系数 $a_n \neq 0$ 的 n 次多项式序列. 若它们正交，则称它们为**正交多项式序列**.

49 算法 (Gram-Schmidt 正交化) 设 $\{\varphi_k\}$ 是内积空间 V 的一组基，定义

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \varphi_0, \\ \psi_n &= \varphi_n - \sum_{i=0}^{n-1} (\varphi_n, \psi_i) \eta_i \end{aligned}$$

其中 $\eta_i = \psi_i / \|\psi_i\|$. 则 $\{\psi_k\}$ 为 V 的一组正交基.

评注 要求 n 次正交多项式组，只需另 $\varphi_k = x^k$，再进行 Gram-Schmidt 正交化即可.

50 定理 设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 是一列正交多项式，根据正交性（从而线性无关）可以得到正交多项式的如下性质，

1. $P_n \subset \operatorname{span}\{\varphi_0, \ldots, \varphi_n\}$，
2. 设 $P \in P_{n-1}$，则 φ_n 与 P 正交.

51 定理 设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 是 $[a,b]$ 上带权 ρ 的正交多项式，则成立

$$\varphi_{n+1} = (x - \alpha_n)\varphi_n - \beta_n \varphi_{n-1}, \quad n = 0, 1, \ldots,$$

其中

$$\begin{aligned} &\varphi_0 = 1, \quad \varphi_{-1} = 0, \\ &\alpha_n = (x\varphi_n, \varphi_n)/(\varphi_n, \varphi_n), \\ &\beta_n = (\varphi_n, \varphi_n)/(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1}). \end{aligned}$$

证明 由于齐次性，不妨设 φ_n 首项系数为 1. 所以成立

$$\varphi_{n+1} - x\varphi_n = \sum_{k=0}^{n} \gamma_k \varphi_k,$$

对于系数 γ_k，成立 [8]

$$\gamma_k = \frac{(\varphi_{n+1} - x\varphi_n, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} = \frac{(\varphi_{n+1}, \varphi_k) - (\varphi_n, x\varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}.$$

由于 $\{\varphi_n\}$ 正交，所以当 $k < n-1$ 时，成立 $\gamma_k = 0$. 所以有

$$\varphi_{n+1} - x\varphi_n = \gamma_n \varphi_n + \gamma_{n-1}\varphi_{n-1}.$$

再进行一些代换，即可以得到原递推式. ■

52 定理 设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a,b]$ 上带权 ρ 的正交多项式，则 φ_n 在区间 (a,b) 上有 n 个不同的零点.

证明 首先利用权函数的定义，证明零点不可能都是偶数重的. 再假设 $x_1, \ldots, x_l$ 是 φ_n 的奇数重零点，则

$$(\varphi_n, (x - x_1)\cdots(x - x_l)) \neq 0,$$

再利用正交性可得 $l = n$. ■

[8] 设 B 是内积空间 V 的一组正交基，则对于任意 $x \in V$，成立

$$x = \sum_{\beta \in B} \frac{(x,\beta)}{(\beta,\beta)} \beta$$

另外，根据这里内积的定义，成立 $(\varphi_i, \varphi_j) = (\varphi_i/x, x\varphi_j)$.

3.4 Legendre 多项式

53 定义 (Legendre 多项式) 取区间 $[-1,1]$，$\rho(x)\equiv 1$，称由 $\{1,x,\ldots,x^n,\ldots\}$ 正交化而得的多项式为 Legendre 多项式. 其表达式为

$$P_0(x)=1,\quad P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n,\quad n=1,2,\ldots$$

首项系数为 1 的 Legendre 多项式为

$$\widetilde{P}_n(x)=\frac{n!}{(2n)!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n.$$

54 定理 (Legendre 多项式的性质) Legendre 多项式有如下性质，

1. 正交性：

$$\int_{-1}^{1}P_n(x)P_m(x)\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ \dfrac{2}{2n+1}, & m=n.\end{cases}$$

2. 奇偶性：

$$P_n(x)=(-1)^nP_n(-x)$$

3. 递推关系：

$$(n+1)P_{n+1}=(2n+1)xP_n-nP_{n-1},\quad n=1,2,\ldots$$

证明 todo

55 定理 (Legendre 多项式的逼近性质) 在区间 $[-1,1]$ 上，设 $\widetilde{L}_n$ 是首项系数为 1 的 Legendre 多项式，则

$$\|\widetilde{L}_n\|_2=\min_{P\in P_n}\|P(x)\|_2.$$

评注 应用方法和说明可以参考 Chebyshev 多项式的逼近性质. （定理 59）

56 引理 (前 4 项 Legendre 多项式)

$$\begin{aligned}P_0&=1,\\ P_1&=x,\\ P_2&=\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2},\\ P_3&=\frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x\end{aligned}$$

3.5 Chebyshev 多项式

57 定义 (Chebyshev 多项式) 取区间 $[-1,1]$, $\rho(x)=(1-x^2)^{-1/2}$, 称由 $\{1,x,\dots,x^n,\dots\}$ 正交化而得的多项式为 Chebyshev 多项式. 其表达式为

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

58 定理 (Chebyshev 多项式的性质) Chebyshev 多项式有如下性质，

1. 递推关系：

$$\begin{aligned}&T_0(x)=1,\quad T_1(x)=x,\\&T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x),\quad n=1,2,\dots\end{aligned}$$

2. 正交性：

$$\int_{-1}^{1}\frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & n\ne m,\\ \pi/2, & n=m\ne 0,\\ \pi, & n=m=0.\end{cases}$$

3. $T_{2k}(x)$ 只含 x 的偶次幂，$T_{2k+1}(x)$ 只含 x 的奇次幂.

4. T_n 在区间 $[-1,1]$ 上的 n 个零点为

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi,\quad k=1,2,\dots,n.$$

5. T_n 的首项系数为 2^{n-1}.

59 定理 (Chebyshev 多项式的逼近性质) 在区间 $[-1,1]$ 上，设 $\widetilde{T}_n$ 是首项系数为 1 的 Chebyshev 多项式，则

$$\|\widetilde{T}_n\|_\infty=\min_{P\in\widetilde{P}_n}\|P(x)\|_\infty=\frac{1}{2^{n-1}}.$$

评注 这一定理意味着，取区间 $[-1,1]$，n 次 Chebyshev 多项式是所有次数小于等于 n 的首项为 1 的多项式中，绝对值的最大值最小的一个. 从而，若想用 P_{n-1} 中的多项式来逼近 n 次多项式 f，只需找 $f^*\in P_{n-1}$，使得

$$f-f^*=a_n\widetilde{T}_n.$$

其中 a_n 为 f 的 n 次项系数. 对于一般的在区间 $[a,b]$ 上的情况，只需利用平移和伸缩映射到 $[-1,1]$ 上即可.

60 定理 (Chebyshev 零点插值) 设插值节点 $x_0,\dots,x_n$ 为 Chebyshev 多项式 T_{n+1} 的零点，被插值函数 $f\in\mathscr{C}^{n+1}[-1,1]$，则多项式插值的余项 R_n 满足

$$|R_n|\le\frac{1}{2^n(n+1)!}\|f^{(n+1)}(x)\|_\infty.$$

证明 由于插值点是 Chebyshev 多项式的零点，所以 $\omega_{n+1} = \widetilde{T}_n$，所以根据定理 59，成立

$$\omega_{n+1} \leq \frac{1}{2^n}. \quad \blacksquare$$

评注 这一定理保证了使用 Chebyshev 多项式的零点插值，至少可以使得误差的最大值最小.

4 变分方法与数据拟合

4.1 绪论

若要求函数 $f(\mathbf{x})$，$x \in \mathbf{R}^n$ 的最值点，根据 Fermat 引理，只需要求出所有成立 $\nabla f = 0$ 的点再逐一验证即可。变分是这一思想的推广，它所处理的是过程的优化。下给出一个优化过程的例子，完整的解答见之后的章节。(todo: ref)

61 例 (最速降线) 给定空中的一点 $A = (0,0)$，地上一点 $B = (x_1, y_1)$，求一条连接 A 和 B 的轨迹，使得假设在无阻力情况下，有小球沿轨道从 A 到 B 所需要的时间最短。

假设轨道曲线充分光滑，则问题可以转换为，设滑行轨道 $y \in \mathscr{C}^2$ 的方程为

$$y = y(x), \quad y(0) = 0, \quad y(x_1) = y_1.$$

试确定曲线 y 使得时间 $T(y)$ 最小. 根据机械能守恒，小球在 $(*, -y)$ 处 (见图 2) 的速度，为

$$v = \sqrt{2gy},$$

同时由速度的定义知

$$v = \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} = \sqrt{1 + y'^2(x)}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t},$$

根据上两式，即有

$$\sqrt{2gy}\mathrm{d}t = \sqrt{1 + y'^2(x)}\mathrm{d}x \;\Rightarrow\; \mathrm{d}t = \left(\frac{1 + y'^2}{2gy}\right)^{1/2} \mathrm{d}x$$

设过程为 $A \to B$，$0 \to t_1$，$0 \to x_1$，则

$$T(y) = t_1 = \int_0^{x_1} \left(\frac{1 + y'^2}{2gy}\right)^{1/2} \mathrm{d}x,$$

即为所要最小化的 $T(y)$.

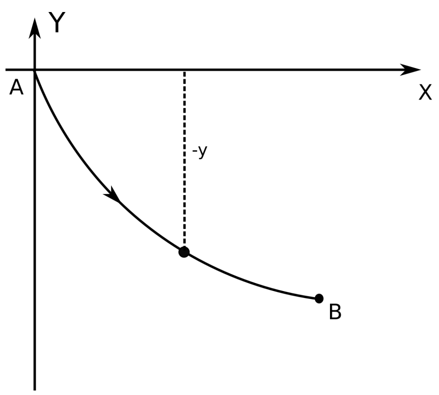

图 2: 最速降线问题

4.2 变分方法

62 定义 (过程优化) 过程的优化即求解

$$y^* = \arg\min_{y \in K} J(y)$$

的过程，其中函数集合

$$K = \{y \in \mathscr{C}^2[x_0, x_1] \,:\, y(x_0) = y_0,\, y(x_1) = y_1\}.$$

63 定义 定义函数集合

$$K = \{f \in \mathscr{C}^2[x_0, x_1] \,:\, f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1\},$$
$$K_0 = \{f \in \mathscr{C}^2[x_0, x_1] \,:\, f(x_0) = f(x_1) = 0\}.$$

对于任意 $f_0 \in K$，$\eta \in K_0$ 定义集合

$$K(f_0, \eta) = \{f_0 + \varepsilon\eta \,:\, \varepsilon \in \mathbf{R}\}.$$

64 定义 (泛函的方向导数) 记号同定义 63. 定义泛函

$$J(f) = \int_a^b L(x, f(x), f'(x))\mathrm{d}x, \quad f \in K.$$

如果 f^* 是函数 $J(f)$ 在集合 K 中的最小值点，即

$$f^* = \arg\min_{f \in K} J(f),$$

则对于任意 $\eta \in K_0$，f^* 也是 $J(f)$ 在集合 $K(f^*, \eta)$ 中的最小值点。所以成立

$$f^* = \arg\min_{\varepsilon \in \mathbf{R}} J(f^* + \varepsilon\eta).$$

由于函数 $J(f^* + \varepsilon\eta)$ 是关于实数 ε 的一元函数，所以在它最小值点，即 $\varepsilon = 0$ 处成立

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon} J(f^* + \varepsilon\eta)\right|_{\varepsilon=0} = 0. \tag{3}$$

称左侧为泛函 J 在 f^* 处沿 η 方向的**变分**或**方向导数**. 即为 $\delta J(f^*, \eta)$[9].

评注 这里采用的是分析学中一个常见思想，将一个在高维空间中的问题转化为一个低维空间中的问题。一个更加简单的例子是，证明若 k 维欧式空间中的函数 f 在凸集 K 中的各偏导数恒为零，则它在 K 中为常量。一个证法是取定 K 中任意一点 (向量)$\mathbf{x}_0$，则对于任意 $\mathbf{x} \in K$，则对于任意直线段 xx_0，有方程

$$y = \mathbf{x_0}t + \mathbf{x}(1 - t).$$

上式是一个一元实函数，对它求导并利用一元函数微分学中的知识，可以知道在这条直线段上 f 的函数值不变。由于 $\mathbf{x}_0$ 和 $\mathbf{x}$ 的选取是任意的，所以在 K 上 f 的值不变。

在这里采用的是同样的思想，只是把欧式空间换成了一个函数集合而已。

[9] 一般来讲，f^* 可以是集合中的任意一点.

65 引理 (变分引理) 设 $f \in \mathscr{C}[x_0, x_1]$，且对任意 $g \in K$，有

$$\int_{x_0}^{x_1} fg\mathrm{d}x = 0,$$

则成立

$$f(x) \equiv 0, \quad x \in [x_0, x_1].$$

66 定理 (Euler-Lagrange 方程) 记号同定义 64. 泛函 $J(f)$ 在极值点满足 Euler-Lagrange 方程

$$\frac{\partial L}{\partial f} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial L}{\partial f'} = 0. \tag{4}$$

证明 假设满足求导积分换序的条件，则泛函 $J(f)$ 在 $f_* + \varepsilon\eta$ 处沿 η 方向的方向导数为 [10]

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}J(f_* + \varepsilon\eta) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}\int_{x_0}^{x_1} L(x, f_* + \varepsilon\eta, f_*' + \varepsilon\eta')\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{\partial L}{\partial(f_* + \varepsilon\eta)}\eta + \frac{\partial L}{\partial(f_*' + \varepsilon\eta')}\eta'\,\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

代入 $\varepsilon = 0$，即得 J 在最小值点 f_* 处的方向导数，为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}J(f_*) &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{\partial L}{\partial f}\eta + \frac{\partial L}{\partial f'}\eta'\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_0}^{x_1} \frac{\partial L}{\partial f}\eta\mathrm{d}x + \frac{\partial L}{\partial f'}\eta\bigg|_{x_0}^{x_1} - \int_{x_0}^{x_1} \eta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial L}{\partial f'}\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_0}^{x_1} \eta\left(\frac{\partial L}{\partial f} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial L}{\partial f'}\right)\mathrm{d}x = 0.\end{aligned}$$

注意由于 $\eta \in K_0$，即有 $\eta(x_0) = \eta(x_1) = 0$. 由于 η 的选取是任意的，所以根据引理 65，式子 (4) 成立. ■

评注 对于 $L = L(f, f')$，即 L 不显含 x 的情况，(4) 是可以精确求解的.

67 定理 (守恒律定理) 设 $L = L(f, f')$，则沿着 (62) 的解曲线 $y^* = f^*(x)$，成立

$$H = f'\frac{\partial L}{\partial f'} - L = \mathrm{Const}.$$

证明

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}x} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(f'\frac{\partial L}{\partial f'} - L(f, f')\right) \\ &= f''\frac{\partial L}{\partial f'} + f'\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial L}{\partial f'} - \frac{\partial L}{\mathrm{d}f}f' - \frac{\partial L}{\mathrm{d}f'}f''.\end{aligned}$$

根据定理 66，$\mathrm{d}H/\mathrm{d}x = 0$，所以命题成立. ■

[10] 为了记号的清晰，这里用 f_* 替代之前的 f^*. 并且这里关于偏导数的记号，应理解为关于分母所表示的那一分量的偏导数.

4.3 曲线拟合的正则化方法

68 定义 (Tikhonov 正则化) 对于给定的数据 Y，定义数据拟合项为 $J_1(f)$，用于表示拟合结果相较于原数据的接近程度，同时要求拟合的结果尽可能满足对于结果的要求，用 $J_2(f)$ 来描述 f 满足要求的程度，则求解拟合结果的过程即为求解

$$f_* = \arg\min_{f\in K}(J_1(f) + \alpha J_2(f)).$$

其中 α 为**正则化参数**，用于表示拟合的过程中，应更接近原数据或是更满足拟合要求. 若取 $\alpha = 0$，即为插值.

69 问题 给定函数 y 在样本点 $0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = 1$ 处的近似值 $\tilde{y}_i$，误差满足

$$|\tilde{y}_i - y(x_i)| \le \delta,$$

试重构 y 的近似函数 f_*.

按照定义 68的思想，定义

$$\begin{aligned} J_1(f) &= \sum_{i=1}^{n-1} \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \left(\tilde{y}_i - f(x_i)\right)^2 \\ J_2(f) &= \int_0^1 (f'')^2 \mathrm{d}x \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} h_i &= x_i - x_{i-1}, \quad i = 1, 2, \ldots, n \\ h &= \max_{1\le i\le n} h_i \end{aligned}$$

则问题转换为求解

$$f_* = \arg\min_{f\in K} \left(J_1(f) + \alpha J_2(f)\right). \tag{5}$$

评注 不失一般性的，可以设 $\tilde{y}_0 = f(x_0)$ 且 $\tilde{y}_n = f(x_n)$. 否则只需要用

$$Y(x) = y(x) + \tilde{y}_0 - y(0) + (\tilde{y}_n - y(1) + y(0) - \tilde{y}_n)x$$

来替代 y 即可. 可以证明

1. $Y(0) = \tilde{y}_0$ 且 $Y(1) = \tilde{y}_n$，
2. $|\tilde{y}_i - Y(x_i)| \le 4\delta$.

todo

70 定理 对于任意 $\alpha > 0$，(5) 的解为三次样条函数.

证明 设 f_* 为式 (5) 的解.

对于任意 $\eta \in K_0$，$\varepsilon \in R$，

$$J(f_*+\varepsilon\eta) = \sum_{i=1}^{n-1} \frac{h_i+h_{i+1}}{2}[\tilde{y}_i - f_*(x_i) - \varepsilon\eta(x_i)]^2 + \alpha\int_0^1 (f_*''+\varepsilon\eta'')\,\mathrm{d}x.$$

求它关于 ε 的导数，成立

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}J(f_*+\varepsilon\eta) = -2\sum_{i=1}^{n-1} \frac{h_i+h_{i+1}}{2}[\tilde{y}_i - f_*(x_i) - \varepsilon\eta(x_i)]\eta(x_i) + 2\alpha\int_0^1 (f_*''+\varepsilon\eta'')\eta''\,\mathrm{d}x.$$

根据定义 64中的 (3)，上式在 $\varepsilon=0$ 时值为零，即

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}J(f_*+\varepsilon\eta)\right|_{\varepsilon=0} = -2\sum_{i=1}^{n-1} \frac{h_i+h_{i+1}}{2}[\tilde{y}_i - f_*(x_i)]\eta(x_i) + 2\alpha\int_0^1 f_*''\eta''\,\mathrm{d}x = 0. \tag{6}$$

接下来分两步构造出 f_*.

Step 1. 由于 η 的选取是任意的，所以我们选择恰当的 $\eta \in \mathscr{C}^\infty(x_i, x_{i+1})$，使得成立

$$\eta(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1$$

所以根据 (6)，成立

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f_*''\eta'' = 0.$$

对于上式进行两次分部积分，得到

$$0 = f_*''\eta'\Big|_{x_i}^{x_{i+1}} - f_*^{(3)}\eta\Big|_{x_i}^{x_{i+1}} + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f_*^{(4)}\eta\mathrm{d}x.$$

同样因为 η 的选取是任意的，所以可以在原来的基础上，选取 η 使得成立

$$\eta(x_i) = \eta'(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1$$

所以有

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f_*^{(4)}\eta\mathrm{d}x = 0.$$

根据变分引理，即成立

$$f_*^{(4)}(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad f \in P_3, \quad x \in (x_i, x_{i+1}). \tag{7}$$

Step 2. 设 $\eta \in \mathscr{C}^\infty[0,1]$，同样的选取在 $x_i (i = 0, 2, \ldots, n)$ 处为零的 η，根据之前的推导可知（注意 $f_*^{(4)} = 0$）

$$\begin{aligned}0 = \int_0^1 f_*''\eta'' = \sum_{i=1}^{n-1} f_*''\eta'\Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \\ &= -f_*''(0)\eta'(0) + \sum_{i=1}^{n-1}\left(f_*''(x_i-)\eta'(x_i) - f_*''(x_i+)\eta'(x_i)\right) + f_*''(1)\eta'(1).\end{aligned}$$

由于 η' 也是任意的，所以上式意味着

$$
\begin{aligned}
&f_*''(0) = f_*''(1) = 0 \\
&f_*''(x_i+) = f_*''(x_i-), \quad i = 1, 2, \ldots, n-1
\end{aligned}
\tag{8}
$$

根据 $f_*(0) = y(0)$，$f_*(1) = y(1)$ 的假设以及 (7) 和 (8)，可知 f_* 为三次样条函数. ■

5 附录

5.1 不等式

71 引理 (排序不等式) 对于满足下述条件的 $\{a_n\}$，$\{b_n\}$，

$$
\begin{aligned}
0 \le a_1 \le a_2 \le \cdots \le a_n \\
0 \le b_1 \le b_2 \le \cdots \le b_n
\end{aligned}
$$

则同序相乘求和值最大，逆序最小，即

$$\sum_{i=1}^{n} a_i b_i \ge \sum_{i=1}^{n} a_i b_{k_i} \ge \sum_{i=1}^{n} a_i b_{n-i+1}$$

72 引理 (算数-几何均值不等式)

$$(a_1 a_2 \cdots a_n)^{1/n} \le \frac{a_1 + a_2 + \cdots + a_n}{n}$$

当且仅当 $a_1 = a_2 = \cdots = a_n$ 时等号成立.

证明 因为有齐次性，所以不妨设 $\prod a_i = 1$，并令

$$a_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2}, \quad \ldots, \quad a_{n-1} = \frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n}, \quad a_n = \frac{\alpha_n}{\alpha_1}$$

则只需证明下式即可.

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} + \cdots + \frac{\alpha_n}{\alpha_1} \ge n$$

不妨设 $\alpha_1 \le \alpha_2 \le \cdots \le \alpha_n$，则根据排序不等式

$$\text{L.H.S} \ge \alpha_1 \frac{1}{\alpha_1} + \cdots + \alpha_n \frac{1}{\alpha_n} = n \quad \blacksquare$$

5.2 积分相关公式

73 引理 (分部积分) 设 $u, v \in \mathscr{C}^{n+1}[a,b]$，则成立

$$\int_a^b uv^{(n+1)}\mathrm{d}x = [uv^{(n)} - u'v^{(n-1)} + \cdots + (-1)^n u^{(n)} v]\Big|_a^b + (-1)^{n+1}\int_a^b u^{(n+1)} v \mathrm{d}x.$$