第二章　插值法

1　引言

我们先看三个具体的问题:

问题1: 假设已知某个函数在一些离散点的值

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$\cdots$	$f(x_n)$

能不能有一个简单的公式能近似计算出这个函数在其他点的值?

一个更具体的例子如下: 假定我们已经测出水在一些不同温度下的粘度如下,

temperature	0^o	5^o	10^o	15^o
viscosity	1.792	1.519	1.308	1.140

能不能由此估计出水在8^o时的粘度?

利用本章介绍的多项式插值, 我们可以得到一个多项式, 该多项式在这些温度的取值刚好就是测量值. 由此可以近似计算出水在8^o的粘度为1.386.

问题2: 这个问题与问题1类似, 不同之处在于表中的测量值包含有误差. 我们希望能找到一个公式近似的匹配这些数据, 并给出误差估计.

问题3: 给定一个函数$f(t)$的表达式, 但是它可能很复杂, 难以计算, 比如很难计算$sin(0.8)$. 我们希望用另一个较简单较容易计算的函数$g(t)$来近似f.

在所有这些问题中, 我们都要找一个简单的函数p来表示或近似表示给定的离散数据或连续函数.

几种常见的近似函数$p(x)$

- **(i)** 多项式: $p(x) = \sum_{r=0}^{n} a_r x^r$;
- **(ii)** 分段定义的多项式;
- **(iii)** 指数函数: $p(x) = \sum_{r=1}^{n} a_r e^{b_r x^r}$;
- **(iv)** Fourier级数: $p(x) = \sum_{r=1}^{n} \{a_r \sin(rx) + b_r \cos(rx)\}$;
- **(v)** 有理函数: $p(x) = p_n(x)/p_m(x)$

这一章我们只考虑前两类的$p(x)$.

下面我们来解释什么叫用$p(x)$去"近似"一个只给定离散点值的函数或连续函数. 当然我们希望这个近似的误差越小越好. 误差的定义不同, 结果和计算方法也不同.

1. 给定$n+1$个离散数据(x_0, f_0), (x_1, f_1), ..., (x_n, f_n), 定义函数$p(x)$的近似误差E为

$$E = \sum_{i=1}^{n} | p(x_i) - f_i | .$$

如果取$p(x)$为一个n次多项式, 且满足

$$p(x_i) \ = \ f_i \qquad i = 0,\ 1,\ \ldots\ ,\ n,$$

则可以使得$E \ = \ 0$. 这就是本章介绍的**多项式插值问题**.

2. 给定离散数据(x_0, f_0), (x_1, f_1), ... , (x_n, f_n), 其中n很大, 我们希望找一个$k(k << n)$次多项式使得近似误差E尽可能小. 如果我们取

$$E \ = \ \sum_{i=0}^{n} \{p(x_i) \ - \ f_i\}^2.$$

则最小化E的问题就是下一章介绍的**最小二乘问题**.

3. 给定区间$[a, b]$上的函数$f(x)$, 定义函数$p(x)$的近似误差E为

$$E \ = \ \max_{a \le x \le b} \ |\ p(x) \ - \ f(x)\ |\ .$$

一般把$p(x)$取作多项式. 使得E最小的问题就是下一章介绍的**函数逼近问题**. 根据误差E定义的不同, 有最佳一致逼近和最佳平方逼近.

为什么是多项式

定理2.1 (Weierstrass逼近定理) 设f是$[a,\ b]$上的连续函数, 则对于任意的$\epsilon > 0$, 存在$[a,\ b]$上的多项式$P(x)$, 满足

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon, \quad \forall x \in [a,\ b].$$

因此, 对于任意闭区间上的连续函数, 都可以找到一个多项式, 使得该多项式与这个函数任意接近.

另一个用多项式的重要原因是多项式的导数和原函数都仍是多项式, 且容易计算.

2 拉格朗日插值

给定$n+1$组数据 (x_0, f_0), (x_1, f_1), ..., (x_n, f_n) , 我们要找一个n次多项式$p_n(x)$经过这些给定点, 即

$$p_n(x_i) \ = \ f_i, \qquad i = 0, 1, 2, ..., n\,.$$

如果我们把多项式$p_n(x)$写成

$$p_n(x) \ = \ a_0 \ + \ a_1 x \ + a_2 x^2 \ + ... \ + a_n x^n\,,$$

则系数 $a_0, a_1, a_2, ..., a_n$ 要满足

$$\begin{gathered}
a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n = f_0, \\
a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n = f_1, \\
\vdots \\
a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n = f_n,
\end{gathered}$$

写成矩阵形式即为

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}.$$

这个线性方程组中的系数矩阵就是范德蒙Vandermonde矩阵. 可以证明如果 $x_0, x_1, x_2, ..., x_n$ 都互不相同, 则这个矩阵非奇异, 上面的方程组有唯一解. 设这个解为 $(a_0^*, a_1^*, a_2^*, ..., a_n^*)^{\mathrm{T}}$, 则

$$p_n(x) \; = \; a_0^* \, + \, a_1^* x \, + \, a_2^* x^2 \, + \, ... \, + \, a_n^* x^n$$

就是要求的插值多项式, 且从上面的证明可知这个多项式是唯一的. 当然唯一性也可以用下面的方式证明.

唯一性

假设 $q_n(x)$ 是另一个满足要求的次数不超过n的多项式, 则

$$\phi(x) \; = \; p_n(x) \, - q_n(x)$$

是次数不超过n的多项式, 且

$$\phi(x_i) \; = \; p_n(x_i) \, - q_n(x_i) \; = f_i \, - \, f_i \; = \; 0 \qquad i = 0, 1, 2, ..., n.$$

即$\phi(x)$有$n+1$个零点, 因此必有

$$\phi(x) \; = \; 0,$$

所以$p_n(x) \; = \; q_n(x)$.

$p_n(x)$的计算

前面已经介绍可以通过求解线性方程组来计算插值多项式, 下面介绍更简单的方法. 我们把$p_n(x)$写成

$$\begin{aligned} p_n(x) \quad = \quad & \alpha_0(x - x_1)(x - x_2)...(x - x_n) \\ & + \alpha_1(x - x_0)(x - x_2)...(x - x_n) \\ & + \cdots + \alpha_n(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1}), \end{aligned} \tag{2.1}$$

计算这些 $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$, ..., α_n 会更简单. 注意到

$$p_n(x_i) \; = \; \alpha_i(x_i - x_0) \ldots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \ldots (x_i - x_n) \; = \; f_i,$$

则有

$$\alpha_i \; = \; \frac{f_i}{(x_i - x_0) \ldots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \ldots (x_i - x_n)} \, .$$

代回(2.1), 则有

$$p_n(x) \; = \; \sum_{i=0}^{n} l_i(x) \, f_i, \tag{2.2}$$

其中

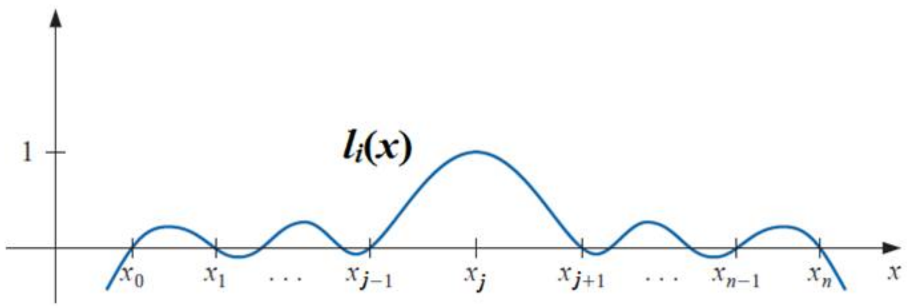
$$l_i(x) = \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}\,. \tag{2.3}$$

这里 $l_i(x)$ 是一个满足

$$\begin{aligned} l_i(x_i) &= 1 \\ l_i(x_j) &= 0 \quad \text{for } j \neq i \end{aligned}$$

的n次多项式, 被称作插值基函数. (2.2)中形式的多项式被称作**拉格朗日Lagrange插值多项式**.

下图是一个典型的基函数$l_i(x)$的图像.



设 $\psi(x)$ 为

$$\psi(x) \;=\; (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n),$$

则

$$\begin{aligned} \psi'(x) \;=\;& (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n) + (x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n) \\ & + \dots + (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}), \end{aligned}$$

从而有

$$\psi'(x_i) \;=\; (x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)\,.$$

利用上面的记号,

$$l_i(x) \;=\; \frac{\psi(x)}{(x-x_i)\psi'(x_i)}\,.$$

从而 $p_n(x)$ 可以写成

$$p_n(x) \;=\; \sum_{i=0}^{n} \frac{\psi(x)}{(x-x_i)\psi'(x_i)}\, f_i\,.$$

例1 计算经过点(-2,6), (-1,4), (0,3), and (1,3)的3次拉格朗日插值多项式.

解: 在这个例子里, $n = 3$, $x_0 = -2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 0$, $x_3 = 1$.

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= (x+2)(x+1)(x-0)(x-1) \\
\psi'(x_0) &= (-2+1)(-2)(-2-1) \;=\; -6 \\
\psi'(x_1) &= (-1+2)(-1)(-1-1) \;=\; 2 \\
\psi'(x_2) &= (0+2)(0+1)(0-1) \;=\; -2 \\
\psi'(x_3) &= (1+2)(1+1)(1) \;=\; 6
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_3(x) &= \tfrac{x(x+1)(x-1)}{-6}(6) \;+\; \tfrac{x(x+2)(x-1)}{2}(4) \\
&\quad + \tfrac{(x+2)(x+1)(x-1)}{-2}(3) \;+\; \tfrac{x(x+2)(x+1)}{6}(3) \\
&= -x(x+1)(x-1) \;+\; 2x(x+2)(x-1) \\
&\quad -\tfrac{2}{3}(x+2)(x+1)(x-1) \;+\; \tfrac{1}{2}x(x+2)(x+1)\,.
\end{aligned}$$

如果要近似计算f在$x^* = \frac{1}{2}$的值, 则

$$\begin{aligned}
f(1/2) &\approx p_3(x^*) \;=\; p_3(\tfrac{1}{2}) \\
&= (-\tfrac{1}{2})(\tfrac{3}{2})(-\tfrac{1}{2}) \;+\; 1(\tfrac{5}{2})(-\tfrac{1}{2}) \;-\; \tfrac{2}{3}(\tfrac{5}{2})(\tfrac{3}{2})(-\tfrac{1}{2}) \;+\; \tfrac{1}{4}(\tfrac{5}{2})(\tfrac{3}{2}) = \tfrac{21}{16}\,.
\end{aligned}$$

例2 利用函数$f(x) = 1/x$在$x_0 = 2$, $x_1 = 2.5$ 和$x_2 = 4$点的值计算$f(x)$的拉格朗日插值多项式.

解: 由于

$$l_0(x) = \frac{(x-2.5)(x-4)}{(2-2.5)(2-4)} = (x-6.5)x + 10,$$

$$l_1(x) = \frac{(x-2)(x-4)}{(2.5-2)(2.5-4)} = \frac{(-4x+24)x-32}{3},$$

$$l_2(x) = \frac{(x-2)(x-2.5)}{(4-2)(4-2.5)} = \frac{(x-4.5)x+5}{3},$$

且

$$f(x_0) = f(2) = 0.5,\ f(x_1) = f(2.5) = 0.4,\ f(x_2) = f(4) = 0.25,$$

因此有

$$p_2(x) = \sum_{k=0}^{2} f(x_k) l_k(x) = (0.05x - 0.425)x + 1.15.$$

如果要近似$f(3) = 1/3$, 则有

$$f(3) \approx p_2(3) = 0.325.$$

我们还可以利用$f(x)$的Taylor展开来得到$f(x)$的近似多项式. 对于某些$f(x)$这样确实可以得到很好的近似多项式. 但并不都是如此. 例如如果用$f(x) = 1/x$在$x_0 = 1$的Taylor展开式来近似计算$f(3) = 1/3$. 由于

$$f^{(k)}(x) = (-1)^k k! x^{-k-1},$$

其Taylor展开为

$$q_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(1)}{k!}(x-1)^k = \sum_{k=0}^{n}(-1)^k(x-1)^k.$$

对于不同的n, 用$q_n(3)$来近似$f(3) = 1/3$的结果如下表:

n	0	1	2	3	4	5	6	7
$q_n(3)$	1	-1	3	-5	11	-21	43	-85

可以看到结果完全错误. 这表明利用Taylor多项式来做近似并不好. 这其实很容易理解, 因为Taylor展开主要是在某个点附近的近似.

3 插值多项式的截断误差

下面我们来考虑$p_n(x)$作为$f(x)$的近似的截断误差. 定义

$$e_n(x) = f(x) - p_n(x),$$

我们希望知道$e_n(x)$**有多大?** 下面的定理给出了一个结果.

定理2.2 设$f(x) \in \mathrm{C}^{(n+1)}[a,b]$, 即$f(x)$在$[a,b]$上$(n+1)$ 连续可微. 令$p_n(x)$是利用$f(x)$在$(n+1)$个不同的点$x_0, x_1, x_2, ..., x_n \in [a,b]$上的取值得到的拉格朗日插值多项式. 则对任意$x \in [a,b]$, $x \neq x_i$, $i = 0, 1, 2, ..., n$,有

$$f(x) - p_n(x) = \{\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)\}\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!},$$

其中$\xi \in \mathrm{Spr}\{x, x_0, x_1, \ldots x_n\}$. 这里$\mathrm{Spr}\{x, x_0, x_1, \ldots x_n\}$表示包含$x, x_0, x_1, \ldots x_n$的最小区间.

证明: 当$x = x_k$时$f(x_k) = p_n(x_k)$, 此时定理显然成立, 因此下面只考虑

$$x \neq x_k, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

的情形. 下面假设x已经**取定**, 而t是变量.

记

$$\psi(x) = \prod_{j=0}^{n}(x - x_j),$$

则

$$f(x) = p_n(x) + \psi(x)\frac{f(x) - p_n(x)}{\psi(x)},$$

即,

$$f(t)|_{t=x} = [p_n(t) + \psi(t)\frac{f(x) - p_n(x)}{\psi(x)}]|_{t=x},$$

也就是说,

$$[f(t) - p_n(t) - \psi(t)\frac{f(x) - p_n(x)}{\psi(x)}]|_{t=x} = 0,$$

由此我们定义函数 $\Phi(t)$ 为

$$\Phi(t) \;=\; f(t) \;- p_n(t) \;-\; \psi(t)g(x), \quad g(x) \;=\; \frac{f(x) \;-\; p_n(x)}{\psi(x)}\,.$$

显然有

$$\Phi(x) \;=\; \Phi(x_0) \;=\; \Phi(x_1) \;=\; \ldots \;= \Phi(x_n) \;=\; 0,$$

这表明 $\Phi(t)$ 在区间 $[a, b]$ 上有 $n+2$ 个互不相同的零点 $t = x_i \;\; i = 0, 1, 2, ..., n$,和 $t = x$. 利用罗尔定理可知 $\Phi'(t)$ 在 $\mathrm{Spr}\{x, x_0, x_1, ..., x_n\}$ 内至少有 $n+1$ 个互不相同的零点. 类似的有, $\Phi''(t)$ 至少有n个不同的零点. 反复利用罗尔定理可知 $\Phi^{(n+1)}(t)$ 至少有一个零点, 设其为 $t = \xi$, 则

$$f^{(n+1)}(\xi) \;=\; (n+1)!\,g(x),$$

因此就有

$$f(x) \;-\; p_n(x) \;=\; \frac{\psi(x)\,f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}.$$

注意这里 ξ 的取值与 x 有关. □

从计算角度讲, 由于ξ是x的未知函数, 上式并不能用来精确计算误差. 不过由于 $f^{(n+1)}(x)$ 是连续函数, 我们可以得到如下的误差上界估计:

$$|\; f(x) \;-\; p_n(x) \;| \leq \; \frac{M}{(n+1)!} \;\; |\; \psi(x) \;|,$$

其中

$$M \;=\; \max_{a \leq \xi \leq b} \;|\; f^{(n+1)}(\xi) \;|\;.$$

例3 用一个二次多项式来近似计算函数 $f(x) \;=\; \cos(x)$ 在 $x^* \;= 1.5$ 的取值, 这里用到的点是 $(x_0, f_0) = (0, \cos 0)$, $(x_1, f_1) = (1, \cos 1)$, $(x_2, f_2) = (2, \cos 2)$.

解: 其拉格朗日插值多项式为:

$$\phi_2(x) \;=\; (\cos 0)\frac{(x-1)(x-2)}{2} \;-\; (\cos 1)x(x-2) \;+\; (\cos 2)\frac{x(x-1)}{2}\,.$$

所以有

$$\phi_2(1.5) \;=\; -\frac{1}{8} \;+\; (\cos 1)\frac{3}{4} \;+\; (\cos 2)\frac{3}{8} \;\approx\; 0.124.$$

下面来估计误差. 由于

$$f'(x) \;=\; -\sin x, \quad f''(x) \;=\; -\cos x, \quad f'''(x) \;=\; \sin x\,.$$

$$M \;=\; \max_{0 \leq x \leq 2} \;|\sin x\;| =\; 1\,.$$

所以

$$\delta(\cos x) \;\leq\; \frac{1}{3!} \;|\; x(x-1)(x-2) \;|\;\; 1.$$

特别的当 $x^* = 1.5$, 时

$$\delta(\cos x^*) \ \le\ \frac{1}{6}\ |\, 1.5 \times 0.5 \times 0.5\, | =\ 0.0625.$$

真实误差 $\approx\ 0.124 - 0.071\ =\ 0.053$.

例4 利用 $(0,0)$, $(1,e)$, $(2,4e^2)$, $(3,9e^3)$, $(4,16e^4)$ 近似计算 $f(x) = x^2e^x$ 在 $x^* = \frac{5}{2}$ 的取值.

解: 拉格朗日插值多项式为

$$\begin{aligned}\phi_4(x) \quad = \quad & \tfrac{(x-1)(x-2)(x-3)(x-4)}{(-1)(-2)(-3)(-4)}(0)\ +\ \tfrac{x(x-2)(x-3)(x-4)}{1(-1)(-2)(-3)}(e)\\ & +\tfrac{x(x-1)(x-3)(x-4)}{(2)(1)(-1)(-2)}(4e^2)\ +\ \tfrac{x(x-1)(x-2)(x-4)}{3(2)(1)(-1)}(9e^3)\\ & +\tfrac{x(x-1)(x-2)(x-3)}{4(3)(2)(1)}(16e^4)\,.\end{aligned}$$

因此有

$$\phi_4(\frac{5}{2})\ \approx\ 70.969004.$$

下面来估计误差, 由于

$f'(x)\ =\ 2xe^x + x^2e^x \quad f''(x)\ =\ 2e^x + 2xe^x + 2xe^x + x^2e^x$

$f'''(x)\ =\ 2e^x + 4e^x + 4xe^x + 2xe^x + x^2e^x$

$f^{(4)}(x)\ =\ 6e^x + 6e^x + 6xe^x + 2xe^x + x^2e^x$

$f^{(5)}\ =\ 20e^x + 10xe^x + x^2e^x$.

$M\ =\ \max\limits_{0\le x\le 4}\ |\, f^{(5)}(x)\,| \approx\ 4149.4594$.

因此有

$$\delta(f(\tfrac{5}{2})) \quad \le \quad \tfrac{1}{5!}\ |\ \tfrac{5}{2}(\tfrac{3}{2})(\tfrac{1}{2})(-\tfrac{1}{2})(-\tfrac{3}{2})\ |\ 4149.4594$$

$$48.626477\,.$$

真实误差 $\approx |\, 70.969004 - 76.140587\, | =\ 5.1715833$.

4 均差与牛顿插值公式

利用插值基函数很容易得到拉格朗日插值多项式，公式结构紧凑，在理论分析中甚为方便，但当插值节点增减时全部插值基函数 $l_k(x)$ 均要随之变化，整个公式也将发生变化.

4.1 均差

设 $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, ..., $(x_n, f(x_n))$ 是 $n+1$ 个给定的数据点, 定义 $f(x)$ 关于点 x_0 和 x_1 的**一阶均差** $f[x_0, x_1]$ 为:

$$f[x_0, x_1]\ :=\ \frac{f(x_1)\ -\ f(x_0)}{x_1\ -\ x_0}.$$

类似的, 函数 $f(x)$ 关于点 x_1 和 x_2 的一阶均差为

$$f[x_1, x_2]\ :=\ \frac{f(x_2)\ -\ f(x_1)}{x_2\ -\ x_1}.$$

进一步, 还可以定义关于点 (x_0, x_1, x_2) 的**二阶均差**

$$f[x_0, x_1, x_2] \ := \ \frac{f[x_1, x_2] \ - \ f[x_0, x_1]}{x_2 \ - \ x_0}.$$

一般的, 函数 $f(x)$ 在点 $(x_0, x_1, ..., x_n)$ 的n**阶均差**可以由 $(n-1)$阶均差定义如下:

$$f[x_0, x_1, ..., x_n] \ := \ \frac{f[x_1, x_2, ..., x_n] \ - \ f[x_0, x_1, ..., x_{n-1}]}{x_n \ - \ x_0}\,.$$

例5 设 $f(x) \ = \ \cos x, , \ x_0 \ = \ 0, \ x_1 \ = \ 1, \ x_2 \ = \ 2.$

$$f(x_0) \ = \ \cos 0$$

$$f[x_0, x_1] \ = \ \tfrac{\cos 1 - \cos 0}{1 - 0}$$

$$f(x_1) \ = \ \cos 1$$

$$f[x_1, x_2] \ = \ \tfrac{\cos 2 - \cos 1}{2 - 1}$$

$$f(x_2) \ = \ \cos 2$$

$$f[x_0, x_1, x_2] \ = \ \frac{(\cos 2 - \cos 1) \ - \ (\cos 1 \ - 1)}{2 \ - \ 0} \ = \ -0.25\ .$$

当 $x_i \ = \ x_{i+1}$ 时, 如果 $f'(x_i)$ 存在, 则我们定义 $f[x_i, x_i]$ 为

$$f[x_i, x_i] \ = \ \lim_{x_{i+1} \to x_i} \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \ = \ f'(x_i).$$

类似的, 如果 $f''(x_i)$ 存在, 则定义$f[x_i, x_i, x_i]$为

$$\begin{aligned}
f[x_i, x_i, x_i] \ &= \ \lim_{x_{i+1}\to x_i} f[x_i, x_{i+1}, x_{i+1}] \\
&= \ \lim_{x_{i+1}\to x_i} \tfrac{f'(x_{i+1}) - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+1} - x_i} \\
&= \ \lim_{x_{i+1}\to x_i} \tfrac{\frac{d}{dx_{i+1}}[(x_{i+1}-x_i)f'(x_{i+1}) - (f(x_{i+1}) - f(x_i))]}{\frac{d}{dx_{i+1}}(x_{i+1}-x_i)^2} \\
&= \ \lim_{x_{i+1}\to x_i} \tfrac{(x_{i+1}-x_i)f''(x_{i+1})}{2(x_{i+1}-x_i)} \\
&= \ \tfrac{1}{2} f''(x_i).
\end{aligned}$$

类似继续下去, 可以得到

$$f[x_i, x_i, ..., x_i] \ = \ \frac{1}{r!}\, f^{(r)}(x_i)\,.$$

例如对于函数 $f(x) = \cos x$, 有

$$f[0,0,0] \;=\; \frac{1}{2!}\, f''(0) \;=\; -\frac{1}{2}\cos 0 \;=\; -\frac{1}{2}.$$

4.2 牛顿插值公式

利用前面的记号,

$$f[x, x_0] \;=\; \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x}\,,$$

因此就有

$$f(x) \;=\; f(x_0) \,+\, (x - x_0) f[x, x_0]\,.$$

进一步, 由于

$$f[x, x_0, x_1] \;=\; \frac{f[x_0, x_1] \,-\, f[x, x_0]}{x_1 \,-\, x}\,,$$

因此有

$$f[x, x_0] \;=\; f[x_0, x_1] \,+\, (x - x_1) f[x, x_0, x_1].$$

将上式代入前面的公式, 即有

$$f(x) \;=\; f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x, x_0, x_1]\,.$$

继续进行下去可以得到

$$\begin{aligned} f(x) \quad &= \quad f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x_2] \\ &\quad + ... \,+\, (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1}) f[x_0, x_1, ..., x_n] \\ &\quad + \mathrm{R}_n(x), \end{aligned}$$

其中

$$\mathrm{R}_n(x) \;=\; \psi(x) f[x, x_0, x_1, ..., x_n]\,.$$

如果我们记 $f_i \;=\; f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, ..., n,$, 并记 $p_n(x)$ 为

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

则$p_n(x)$是次数不超过 n 的多项式, 而且由于 $\psi(x_i) = 0 (i = 0, 1, 2, ..., n)$, 因此有$\mathrm{R}_n(x_i) = 0$, 这说明

$$p_n(x_i) \;=\; f(x_i) \;=\; f_i, \qquad\quad i = 0, 1, 2, ..., n\,.$$

由于插值多项式唯一, 因此 $p_n(x)$ 就是由 (x_0, f_0), (x_1, f_1), ..., (x_n, f_n)得到的插值多项式. 上式就是**牛顿插值公式**.

例6 仍然是上例, 给定点为 $(0, \cos 0)$, $(1, \cos 1)$, $(2, \cos 2)$, 则利用牛顿插值公式有

$$\begin{aligned} p_2(x) &= \cos 0 + (x-0)(\cos 1 - 1) + x(x-1)\tfrac{\cos 2 - 2\cos 1 + 1}{2} \\ &= 1 - 0.46x - 0.25x(x-1). \end{aligned}$$

例7 利用牛顿插值公式完成下表:

x	0	1	2	$\frac{5}{2}$	3	4	5
$f(x)$	0	3	7	?	1	-2	0

利用均差公式:

$$\begin{array}{lll} f(x_0) = 0 & & \\ & f[x_0, x_1] = 3 & \\ f(x_1) = 3 & & f[x_0, x_1, x_2] = \frac{1}{2} \\ & f[x_1, x_2] = 4 & \\ f(x_2) = 7 & & f[x_1, x_2, x_3] = -5 \\ & f[x_2, x_3] = -6 & \\ f(x_3) = 1 & & f[x_2, x_3, x_4] = \frac{3}{2} \\ & f[x_3, x_4] = -3 & \\ f(x_4) = -2 & & f[x_3, x_4, x_5] = \frac{5}{2} \\ & f[x_4, x_5] = 2 & \\ f(x_5) = 0 & & \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} f[x_0, x_1, x_2, x_3] = -\frac{11}{6} & \\ & f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] = 1 \\ f[x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{13}{6} & \\ & f[x_1, x_2, x_3, x_4, x_5] = -\frac{11}{24} \\ f[x_2, x_3, x_4, x_5] = \frac{1}{3} & \end{array}$$

$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5] = -\frac{7}{24}$.

因此就有

$$\begin{aligned} p_5(x) &= 0 + (x-0)(3) + (x-0)(x-1)(\tfrac{1}{2}) \\ &\quad +(x-0)(x-1)(x-2)(-\tfrac{11}{6}) \\ &\quad +(x-0)(x-1)(x-2)(x-3)(1) \\ &\quad +(x-0)(x-1)(x-2)(x-3)(x-4)(-\tfrac{7}{24}). \end{aligned}$$

从而可得

$$p_5\left(\frac{5}{2}\right) = 4.58984375000\ldots$$

牛顿插值多项式的优点还在于它的递进性，当增加插值节点时，只要在原来插值多项式的基础上增加一项即可:

$$p_{n+1}(x) = p_n(x) + (x - x_0)\cdots(x - x_n)f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}].$$

也就是说, 如果我们想要增加数据点来获得更好的近似, 利用牛顿插值公式来计算的话, 以前的计算结果仍然可以用. 注意拉格朗日插值并没有这个性质, 如果增加一个数据点, 那么所有的基函数 $l_i(x)$ 都要重新计算. 从这个角度讲, 牛顿插值公式更有效.

5 埃尔米特插值

有些实际的插值问题不但要求在节点上函数值相等，而且还要求对应的导数值也相等，甚至要求高阶导数也相等. 满足这种要求的插值多项式就是**埃尔米特Hermite插值多项式**.

下面只讨论函数值与导数值个数相等的情况. 设在节点$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$上, $y_j = f(x_j)$, $m_j = f'(x_j)(j = 0, 1, \ldots, n)$, 问题是求插值多项式$H(x)$, 满足条件

$$H(x_j) = y_j, \quad H'(x_j) = m_j, \qquad j = 0, 1, \ldots, n.$$

这里共有$2n+2$个插值条件, 可以唯一确定一个次数不超过$2n+1$的多项式$H_{2n+1}(x)$, 其形式为

$$H_{2n+1}(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_{2n+1}x^{2n+1}.$$

我们仍然采用基函数的方法, 即先求$2n+2$个插值基函数$\alpha_j(x), \beta_j(x)(j = 0, 1, \ldots, n)$, 每一个都是$2n+1$次多项式, 且满足条件

$$\begin{aligned} &\alpha_j(x_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 0, & j \ne k, \\ 1, & j = k, \end{cases} && \alpha_j'(x_k) = 0, \\ &\beta_j(x_k) = 0, && \beta_j'(x_k) = \delta_{jk}. \end{aligned}$$

这样要求的多项式可以表示为

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{j=0}^{n}(y_j\alpha_j(x) + m_j\beta_j(x)).$$

下面来看如何计算这些基函数. 为此可以利用拉格朗日基函数$l_j(x)$. 令

$$\alpha_j(x) = (ax + b)l_j^2(x),$$

则有

$$\begin{aligned} \alpha_j(x_j) &= (ax_j + b)l_j^2(x_j) = 1, \\ \alpha_j'(x_j) &= l_j(x_j)(al_j(x_j) + 2(ax_j + b)l_j'(x_j)) = 0, \end{aligned}$$

整理可得

$$\begin{aligned} ax_j + b &= 1, \\ a + 2l_j'(x_j) &= 0. \end{aligned}$$

由此解得

$$a = -2l_j'(x_j), \quad b = 1 + 2x_j l_j'(x_j).$$

可以计算出

$$l_j'(x_j) = \sum_{k=0, k\neq j}^{n} \frac{1}{x_j - x_k},$$

于是

$$\alpha_j(x) = \left(1 - 2(x - x_j)\sum_{k=0, k\neq j}^{n} \frac{1}{x_j - x_k}\right) l_j^2(x).$$

类似可以计算出

$$\beta_j(x) = (x - x_j) l_j^2(x).$$

还可以证明满足上述条件的插值多项式是唯一的. 令$\tilde{H}_{2n+1}(x)$是另一个满足条件的次数不超过$2n+1$的多项式, 于是

$$\phi(x) = H_{2n+1}(x) - \tilde{H}_{2n+1}(x)$$

在每个节点x_k上都有二重根, 即有$2n+2$重根. 但它的次数不超过$2n+1$, 因此必有$\phi(x) \equiv 0$.

与拉格朗日插值余项的证明类似, 若$f(x)$在(a,b)内的$2n+2$阶导数存在, 则其误差为

$$R_n(x) = f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)^2.$$

例8 求满足$P(x_j) = f(x_j)(j = 0, 1, 2)$和$P'(x_1) = f'(x_1)$的插值多项式及其余项表达式.

解: 由于给定4个插值条件, 可以确定次数不超过3的插值多项式. 由于其经过三个点$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))$, 故其形式为

$$P(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + A(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2),$$

其中A是待定系数, 可以由条件$P'(x_1) = f'(x_1)$确定, 容易计算出

$$A = \frac{f'(x_1) - f[x_0, x_1] - (x_1 - x_0) f[x_0, x_1, x_2]}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}.$$

为了计算余项$R(x) = f(x) - P(x)$的表达式, 令

$$R(x) = k(x)(x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2),$$

其中$k(x)$是待定函数. 构造

$$\varphi(t) = f(t) - R(t) - k(x)(t - x_0)(t - x_1)^2(t - x_2).$$

显然$\varphi(x_j) = 0(j = 0, 1, 2), \varphi(x) = \varphi'(x_1) = 0$, 反复利用罗尔定理可知至少存在一个$\xi$, 使得

$$0 = \varphi^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\xi) - 4!k(x) = 0,$$

即$k(x) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi)$, 余项表达式为

$$R(x) = \frac{1}{4!} f^{(4)}(\xi)(x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2).$$

6 分段低次插值

6.1 高次插值的病态性质

一般来说, 较多的插值点可以得到更好的近似. 但是并不是越高越好. 下面是一个例子. 下面的图是一只鸟.

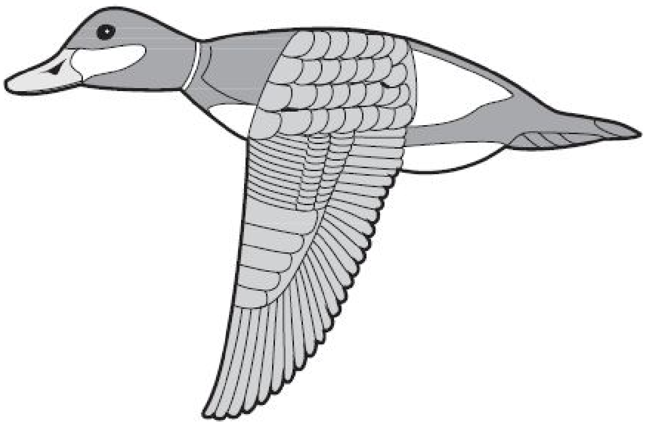


Figure 1

为了近似鸟的后背, 我们选取了21个点作为插值点. 注意在变化较剧烈的地方点取得比较密, 而变化较平缓的地方点取得比较稀疏.

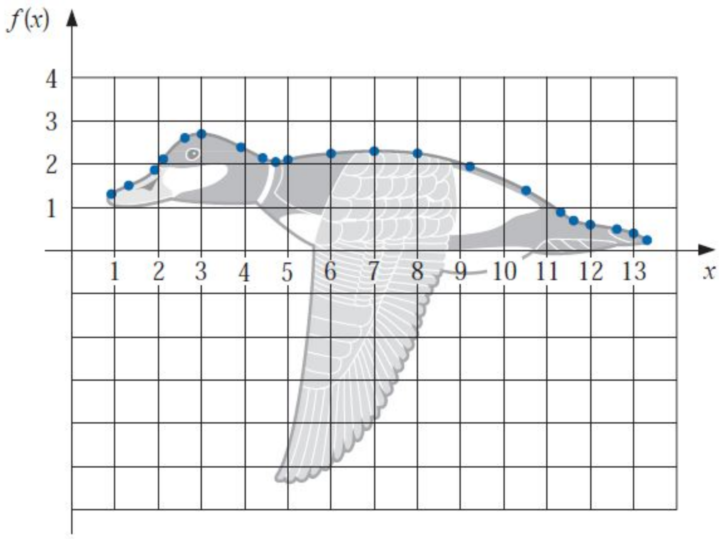


Figure 2

x_i	0.9	1.3	1.9	2.1	2.6	3.0	3.9	4.4	4.7	5.0	6.0
$f_i = f(x_i)$	1.3	1.5	1.85	2.1	2.6	2.7	2.4	2.15	2.05	2.1	2.25

x_i	7.0	8.0	9.2	10.5	11.3	11.6	12.0	12.6	13.0	13.3
$f_i = f(x_i)$	2.3	2.25	1.95	1.4	0.9	0.7	0.6	0.5	0.4	0.25

利用上面两个表中的数据进行拉格朗日插值可得

$$p_{20}(x) \;=\; \sum_{i=0}^{20} l_i(x)\, f_i,$$

其中

$$\begin{aligned} l_i(x) &= \tfrac{(x-x_0)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_{20})}{(x_i-x_0)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_{20})} \\ &= \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{20} \frac{(x\;-\;x_j)}{(x_i\;-\;x_j)}\,. \end{aligned}$$

下图是$p_{20}(x)$的图像:

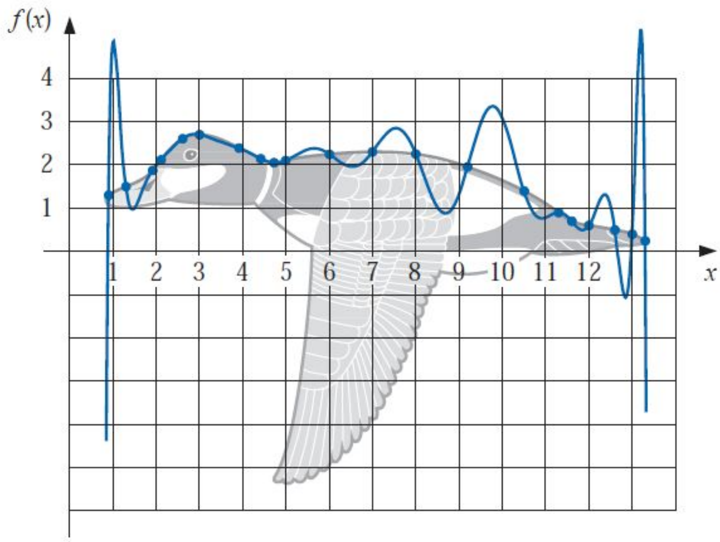


Figure 3

显然$p_{20}(x)$是一个非常差的近似, 振动非常剧烈.

6.2 分段低次插值

针对这个问题, 一般使用分段低次插值, 而不是高次插值. 最简单的分段低次插值就是分段线性插值, 就是用一些直线把各个点

$$\{(x_0, f_0),\ (x_1, f_1),\ \ \cdots,\ (x_n, f_n)\}$$

连起来, 如下图所示:

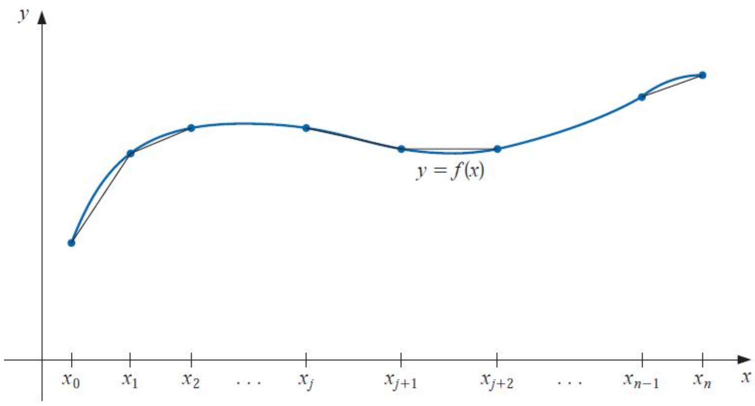


Figure 4

分段线性插值的缺点是在每个小区间的端点处一般是不可微的, 即不足够光滑. 通常物理或工程实际上要求一定的光滑性. 一种解决方法是下面介绍的分段Hermite插值. 另一种是下一节介绍的样条插值.

分段Hermite插值就是在每个小区间$[x_k, x_{k+1}]$上根据在端点处的函数值$f(x_k), f(x_{k+1})$ 和导数值$f'(x_k), f'(x_{k+1})$构造三次Hermite插值多项式. 这样分段定义的插值函数就是一阶连续可微的.

7 三次样条插值

早期工程师制图时, 把富有弹性的细长木条(所谓样条)固定在样点上, 在其他地方让它自由弯曲, 然后划下长条的曲线, 这就是样条曲线. 样条曲线实际上是由分段三次曲线拼接而成, 在连接点上还要求二阶导数连续. 下面讨论最常用的三次样条函数.

定义: 给定$[a, b]$上的函数$f(x)$在$n+1$个节点$a = x_0 < x_1 < \ ... \ < x_{n-1} < x_n = b$, 上的取值, 如果$S(x)$满足下面的条件, 则称$S(x)$为**三次样条插值函数**:

(1) S在每个小区间$[x_j, x_{j+1}]$$(j = 0, 1, \ ..., \ n-1)$的取值$S_j(x)$是一个三次多项式;

(2) $S(x_j) = f(x_j), (j = 0, 1, \ ..., \ n)$;

(3) $S_j^{'}(x_{j+1}) = S_{j+1}^{'}(x_{j+1}) \quad j = 0, 1, ..., n-2$;

(4) $S_j^{''}(x_{j+1}) = S_{j+1}^{''}(x_{j+1}) \quad i = 0, 1, ..., n-2$;

(5) 满足下面其中之一的边界条件:

(a) 给定两端的一阶导数值, 即$S'(x_0) = f'(x_0), S'(x_n) = f'(x_n)$;

(b) 给定两端的二阶导数值, 即$S''(x_0) = f''(x_0), S''(x_n) = f''(x_n)$. 一种特殊情况是$S''(x_0) = S''(x_n) = 0$(自然边界条件);

(c) 当$f(x)$是周期函数时, 常见的是如下的周期边界条件:

$$S(x_0 + 0) = S(x_n - 0), S'(x_0 + 0) = S'(x_n - 0), S''(x_0 + 0) = S''(x_n - 0).$$

注意此时$f(x_0)=f(x_n)$.

我们先通过一个简单的例子来看如何构造三次样条插值.

例9 利用函数$f(x) = x^4$在-1, 0, 1点的值构造三次样条插值函数, 其中边界条件为(a), 即$S'(-1)=f'(-1), S'(1)=f'(1)$.

解: 在这个例子中$n=2$, 且

$$x_0 = -1,\ f(x_0) = 1;\ x_1 = 0,\ f(x_1) = 0;\ x_2 = 1,\ f(x_2) = 1.$$

又由 $f'(x) = 4x^3$, 可知

$$f'(x_0) = -4 \qquad f'(x_2) = 4\,.$$

令

$$S(x) = \begin{cases} S_0(x), & x \in [x_0,\ x_1]; \\ S_1(x), & x \in [x_1,\ x_2]. \end{cases}$$

由条件(1)可知$S_0(x)$和$S_1(x)$都是三次多项式, 即

$$S_0(x) = a_0 + b_0 x + c_0 x^2 + d_0 x^3,$$

$$S_1(x) = a_1 + b_1 x + c_1 x^2 + d_1 x^3\,.$$

容易计算出

$$S_0^{'}(x) = b_0 + 2c_0 x + 3d_0 x^2\,, \qquad S_1^{'}(x) = b_1 + 2c_1 x + 3d_1 x^2$$

$$S_0^{''}(x) = 2c_0 + 6d_0 x\,, \qquad S_1^{''}(x) = 2c_1 + 6d_1 x$$

利用条件(2)可得

$$\begin{aligned} S_0(x_0) = f(x_0),\ \Longrightarrow\ S_0(-1) &= a_0 - b_0 + c_0 - d_0 = 1 \\ S_0(x_1) = f(x_1),\ \Longrightarrow\ S_0(0) &= a_0 = 0 \\ S_1(x_1) = f(x_1),\ \Longrightarrow\ S_1(0) &= a_1 = 0 \\ S_1(x_2) = f(x_2),\ \Longrightarrow\ S_1(1) &= a_1 + b_1 + c_1 + d_1 = 1 \end{aligned}$$

由条件(3)可得

$$S_0^{'}(0) = S_1^{'}(0), \quad = b_0 = b_1, \quad = b_0 - b_1 = 0,$$

利用条件(4)可得

$$S_0^{''}(0) = S_1^{''}(0), \quad = 2c_0 = 2c_1, \quad = c_0 - c_1 = 0,$$

最后利用条件(5)(a)有

$$S_0'(-1) \;=\; b_0 \;-\; 2c_0 \;+\; 3d_0 = -4$$

$$S_1'(1) \;=\; b_1 \;+\; 2c_1 \;+\; 3d_1 = 4$$

把这些方程综合在一起即得到一个关于8个未知数 $a_0, b_0, c_0, d_0, a_1, b_1, c_1, d_1$, 的线性方程组:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \\ c_0 \\ d_0 \\ a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ d_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ -4 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

求解这个线性方程组可得

$$a_0 \;=\; b_0 \;=\; a_1 \;=\; b_1 \;=\; 0,$$

$$c_0 \;=\; c_1 \;=\; -1,\;\; d_0 \;=\; -2,\;\; d_1 \;=\; 2\,.$$

因此要求的三次样条插值函数为

$$S(x) \;=\; \begin{cases} -\,2x^3 \,-\, x^2, & -1 \le x \le 0, \\ \\ \;\;2x^3 \,-\, x^2, & 0 \le x \le 1. \end{cases}$$

这种方法需要求解一个$4n \times 4n$的线性方程组, 而且没有充分利用系数矩阵的稀疏性. 下面我们会介绍其他的构造样条插值函数的方法, 只需要求解一个$n+1$阶线性方程组, 而且系数矩阵是对称正定的三对角矩阵.

一种构造 $s(x)$ 的方法

$s(x)$在小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上的取值 $s_i(x)$ 是一个三次多项式, 即 $s_i''(x)$ 是线性函数. 令

$$M_i \;=\; s_i''(x_i) \quad \text{and} \quad M_{i+1} \;=\; s_i''(x_{i+1}) \qquad i = 0, 1, 2, ..., n-1\,.$$

由条件(4)可知 $s''(x)$ 在节点上连续, 即

$$s_{i-1}''(x_i) \;=\; M_i \;=\; s_i''(x_i) \qquad i = 1, 2, ..., n-1\,.$$

利用拉格朗日插值多项式, 可知 $s_i''(x)$ 可以写成

$$\begin{aligned} s_i''(x) \;&=\; l_i(x)\,M_i \;+\; l_{i+1}(x)\,M_{i+1} \\ &=\; \left(\tfrac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}\right)M_i \;+\; \left(\tfrac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}\right)M_{i+1} \\ &=\; \tfrac{x-x_{i+1}}{-h_i}\,M_i \;+\; \tfrac{x-x_i}{h_i}\,M_{i+1}, \end{aligned}$$

其中 $h_i = x_{i+1} - x_i$. 注意这里h_i是已知的, 而M_i是未知的.

对 $s_i^{''}(x)$ 积分两次可得,

$$s_i(x) = \frac{(x - x_{i+1})^3}{-6h_i} M_i + \frac{(x - x_i)^3}{6h_i} M_{i+1} + A_i x + B_i,$$

其中 A_i 和 B_i 是待定常数. 利用条件

$$s_i(x_i) = f_i, \qquad s_i(x_{i+1}) = f_{i+1},$$

可得

$$\frac{h_i^2}{6} M_i + A_i x_i + B_i = f_i,$$

$$\frac{h_i^2}{6} M_{i+1} + A_i x_{i+1} + B_i = f_{i+1}.$$

由此解得

$$A_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} + \frac{h_i}{6}(M_i - M_{i+1}),$$

$$B_i = \frac{x_{i+1} f_i - x_i f_{i+1}}{h_i} + \frac{h_i}{6}(x_i M_{i+1} - x_{i+1} M_i).$$

因此就有

$$\begin{aligned} s_i(x) &= \tfrac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i} M_i + \tfrac{(x-x_i)^3}{6h_i} M_{i+1} \\ &\quad + (\tfrac{f_i}{h_i} - \tfrac{h_i M_i}{6})(x_{i+1} - x) + (\tfrac{f_{i+1}}{h_i} - \tfrac{h_i M_{i+1}}{6})(x - x_i), \end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned} s_i(x) &= \tfrac{1}{6h_i}[(x_{i+1} - x)^3 M_i + (x - x_i)^3 M_{i+1}] \\ &- \tfrac{h_i}{6}[(x_{i+1} - x) M_i + (x - x_i) M_{i+1}] \\ &+ \tfrac{1}{h_i}[(x_{i+1} - x) f_i + (x - x_i) f_{i+1}]. \end{aligned}$$

注意到这里M_i仍然是未知的. 从上面的推导过程可知(1)(2)(4)已经满足. 上式求导可得

$$\begin{aligned} s_i^{'}(x) &= \tfrac{1}{2h_i}[-(x_{i+1} - x)^2 M_i + (x - x_i)^2 M_{i+1}] \\ &- \tfrac{h_i}{6}(-M_i + M_{i+1}) + \tfrac{1}{h_i}(-f_i + f_{i+1}), \end{aligned}$$

把上式中的 i 换成 $i-1$ 可得

$$\begin{aligned} s_{i-1}^{'}(x) &= \tfrac{1}{2h_{i-1}}[-(x_i - x)^2 M_{i-1} + (x - x_{i-1})^2 M_i] \\ &- \tfrac{h_{i-1}}{6}(-M_{i-1} + M_i) + \tfrac{1}{h_{i-1}}(-f_{i-1} + f_i). \end{aligned}$$

利用条件(3)

$$s_{i-1}^{'}(x_i) \ = \ s_i^{'}(x_i) \quad\ i=1,2,...,n-1$$

可得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2h_{i-1}}(h_{i-1}^2 M_i) \ - \ \frac{1}{6}h_{i-1}(-M_{i-1} \ + \ M_i) \ + \ \frac{1}{h_{i-1}}(-f_{i-1}+yf_i) \\ = \ &\frac{1}{2h_i}(-h_i^2 M_i) \ - \ \frac{h_i}{6}(-M_i \ + \ M_{i+1}) \ + \ \frac{1}{h_i}(-f_i \ + \ f_{i+1}), \end{aligned}$$

上式可以改写成, 对所有的$i=1,2,...,n-1$, 有

$$\frac{1}{6}h_{i-1}M_{i-1} \ + \ \frac{1}{3}(h_{i-1}+h_i)M_i \ + \ \frac{1}{6}h_iM_{i+1} \ = \ \frac{f_{i+1}-f_i}{h_i} \ - \ \frac{f_i-f_{i-1}}{h_{i-1}}.$$

注意上面是关于$n+1$个未知数$M_0,M_1,...,M_n$的$n-1$个线性方程, 剩下的两个方程由边界条件得到.

如果采用的是自然边界条件$M_0 \ = \ s_0^{''}(x_0) \ = \ 0, M_n \ = \ s_{n-1}^{''}(x_n) \ = \ 0$, 那么就可以得到如下的$n-1$阶线性方程组

$$\mathbf{A}\,\mathbf{m} \ = \ \mathbf{b}$$

其中

$$\mathbf{A} \ = \ \begin{bmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & & & \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & h_{n-3} & 2(h_{n-3}+h_{n-2}) & h_{n-2} \\ & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{m} \ = \ (M_1,\, M_2,\, M_3,\, \ldots,\, M_{n-1})^{\mathrm{T}}$$

$$\mathbf{b} \ = \ 6\begin{bmatrix} \frac{f_0}{h_0} - \frac{f_1}{h_0} - \frac{f_1}{h_1} + \frac{f_2}{h_1} \\ \frac{f_1}{h_1} - \frac{f_2}{h_1} - \frac{f_2}{h_2} + \frac{f_3}{h_2} \\ . \\ . \\ . \\ \frac{f_{i-1}}{h_{i-1}} - \frac{f_i}{h_{i-1}} - \frac{f_i}{h_i} + \frac{f_{i+1}}{h_i} \\ . \\ . \\ . \\ \frac{f_{n-3}}{h_{n-3}} - \frac{f_{n-2}}{h_{n-3}} - \frac{f_{n-2}}{h_{n-2}} + \frac{f_{n-1}}{h_{n-2}} \\ \frac{f_{n-2}}{h_{n-2}} - \frac{f_{n-1}}{h_{n-2}} - \frac{f_{n-1}}{h_{n-1}} + \frac{f_n}{h_{n-1}} \end{bmatrix}.$$

如果采用边界条件

$$s_0^{'}(x_0) \ = \ f_0^{'} \quad \text{and} \quad s_{n-1}^{'}(x_n) \ = \ f_n^{'},$$

那么就有

$$2h_0M_0 \ + \ h_0M_1 \ = \ 6(-\frac{f_0}{h_0} \ + \ \frac{f_1}{h_0} \ - \ f_0^{'})$$

$$h_{n-1}M_{n-1} \ + \ 2h_{n-1}M_n \ = \ 6(\frac{f_{n-1}}{h_{n-1}} \ - \ \frac{f_n}{h_{n-1}} \ + \ f_n^{'})$$

这两个方程跟前面的$n-1$个方程一起就得到了一个关于$n+1$个未知数M_i（$i=0,1,...,n$)的$n+1$个线性方程:

$$2h_0M_0 \ + \ h_0M_1 \ = \ 6(-\frac{f_0}{h_0} \ + \ \frac{f_1}{h_0} \ - \ f_0^{'}),$$

$$h_{i-1}M_{i-1} + 2(h_{i-1}+h_i)M_i + h_iM_{i+1} = 6\frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{h_i} - 6\frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}}, \qquad i = 1,2,\cdots,n-1,$$

$$h_{n-1}M_{n-1} \ + \ 2h_{n-1}M_n \ = \ 6(\frac{f_{n-1}}{h_{n-1}} \ - \ \frac{f_n}{h_{n-1}} \ + \ f_n^{'}),$$

写成矩阵形式$\mathbf{A}\,\mathbf{m} \ = \ \mathbf{b}$, 其中

$$\mathbf{A} \ = \ \begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & & & & \\ h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ & & & & h_{n-1} & 2h_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{m} \ = \ (M_0,\, M_1,\, M_2,\, \ldots,\, M_n)^{\mathrm{T}}$$

$$\mathbf{b} \ = \ 6\begin{bmatrix} -\frac{f_0}{h_0} \ + \ \frac{f_1}{h_0} \ - \ f_0' \\ \frac{f_0}{h_0} \ - \ \frac{f_1}{h_0} \ - \ \frac{f_1}{h_1} \ + \ \frac{f_2}{h_1} \\ . \\ . \\ . \\ \frac{f_{i-1}}{h_{i-1}} \ - \ \frac{f_i}{h_{i-1}} \ - \ \frac{f_i}{h_i} \ + \ \frac{f_{i+1}}{h_i} \\ . \\ . \\ . \\ \frac{f_{n-2}}{h_{n-2}} \ - \ \frac{f_{n-1}}{h_{n-2}} \ - \ \frac{f_{n-1}}{h_{n-1}} \ + \ \frac{f_n}{h_{n-1}} \\ \frac{f_{n-1}}{h_{n-1}} \ - \ \frac{f_n}{h_{n-1}} \ + \ f_n' \end{bmatrix}.$$

例10 利用下表的数据构造自然样条插值函数$S(x)$, 并计算$S(0.5)$, $S(1.5)$:

x_i	0	1	2	3
$f(x_i)$	-1	2	1	4

解: 在这个例子中$n=3, h_i=1$. 因此线性方程组$\mathbf{Am}=\mathbf{b}$是

$$A=\begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}, \qquad b=\begin{bmatrix} -24 \\ 24 \end{bmatrix},$$

由此解出$M_1=-8, M_2=8$. 再由$M_0=M_3=0$可知要求的自然样条插值函数为

$$\begin{aligned} s_i(x) \quad = \quad & \tfrac{1}{6h_i}[(x_{i+1}-x)^3\,M_i \,+\, (x-x_i)^3\,M_{i+1}] \\ - \quad & \tfrac{h_i}{6}[(x_{i+1}-x)\,M_i \,+\, (x-x_i)\,M_{i+1}] \\ + \quad & \tfrac{1}{h_i}[(x_{i+1}-x)\,f_i \,+\, (x-x_i)\,f_{i+1}], \end{aligned}$$

即

$$S(x)=\begin{cases} s_0(x)=-\frac{4}{3}x^3+\frac{13}{3}x-1, & 0\le x<1, \\ s_1(x)=\frac{8}{3}x^3-12x^2+\frac{49}{3}x-5, & 1\le x<2, \\ s_2(x)=-\frac{4}{3}x^3+12x^2-\frac{95}{3}x+27, & 2\le x\le 3. \end{cases}$$

由此可以计算出

$$S(0.5)=s_0(0.5)=1, \qquad S(1.5)=s_1(1.5)=1.5.$$

例11 利用函数$f(x)=e^{-x^2}$在$0, 0.5, 1, 1.5, 2$的取值和边界条件(a)构造三次样条插值函数.
解: 在这个例子中$h=0.5$, $n=4$.

x_i	$f(x_i)$
0	1.0000
0.5	0.7788
1.0	0.3679
1.5	0.1054
2.0	0.0183

,

$$\begin{aligned} & f'(x)=-2xe^{-x^2}, \\ & f'(x_0)=f'(0)=0, \\ & f'(x_n)=f'(2)=-0.0733. \end{aligned}$$

对应的线性方程组$\mathbf{Am}=\mathbf{b}$为

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 0.5 & & & \\ 0.5 & 2 & 0.5 & & \\ & 0.5 & 2 & 0.5 & \\ & & 0.5 & 2 & 0.5 \\ & & & 0.5 & 1 \end{bmatrix}$$

$$b=???$$

解出M_0, M_1, M_2, M_3, M_4后, 即可求出所要求的样条插值函数为

$$
\begin{aligned}
s_i(x) \quad = \quad & \tfrac{1}{6h_i}[(x_{i+1}-x)^3\,M_i \,+\, (x-x_i)^3\,M_{i+1}] \\
- \quad & \tfrac{h_i}{6}[(x_{i+1}-x)\,M_i \,+\, (x-x_i)\,M_{i+1}] \\
+ \quad & \tfrac{1}{h_i}[(x_{i+1}-x)\,f_i \,+\, (x-x_i)\,f_{i+1}], \qquad i = 0, 1, \ldots, 4.
\end{aligned}
$$