Numerical Computing Methods
数值计算方法

李晓鹏
Li Xiao-Peng

电子与信息工程学院
School of Electronic and Information Engineering

Semester–I 25/26

插值法与最小二乘法

引论

问题背景

实际问题中经常要涉及到函数值的计算问题：

1. 函数表达式过于复杂不便于计算，而又需要计算许多点处的函数值
2. 仅有几个采样点处的函数值, 而又需要知道非采样点处的函数值

上述问题的一种解决思路：建立复杂函数或者未知函数的一个便于计算的近似表达式

解决方法 - 插值法

插值法

已知定义域区间 $[a,b]$ 上的实值函数 $f(x)$ 在 $n+1$ 个互异节点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 处的函数值 $\{f(x_i)\}_{i=0}^n$，若函数集合 Φ 中的函数 $\phi(x)$ 满足

$$\phi(x_i) = f(x_i) \tag{3.1}$$

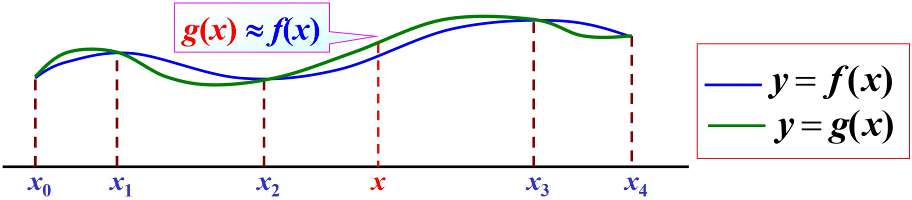
则称 $\phi(x)$ 为 $f(x)$ 在函数集合 Φ 中关于节点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的一个插值函数，并称 $f(x)$ 为被插值函数, $[a,b]$ 为插值区间, $\{x_i\}_{i=0}^n$ 为插值节点, (3.1)式为插值条件。

求插值函数$\phi(x)$的问题称为插值问题。

插值类型

1. 多项式插值（代数插值)：集合 Φ 为多项式函数集
2. 有理插值：集合 Φ 为有理分式函数集
3. 三角插值：集合 Φ 为三角函数集

几何意义：



代数插值的存在唯一性

设

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \tag{3.2}$$

是满足条件 (3.1) 的 $f(x)$ 的插值多项式，即

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

故

$$\left\{\begin{array}{l} P_n\left(x_0\right) = a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = y_0 \\ P_n\left(x_1\right) = a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = y_1 \\ \cdots\cdots\cdots \\ P_n\left(x_n\right) = a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = y_n \end{array}\right. \tag{3.3}$$

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为

$$V = \left|\begin{array}{ccccc} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{array}\right| = \prod_{0 \leq j < i \leq n} \left(x_i - x_j\right)$$

称为 Vandermonde (范德蒙德) 行列式。

插值法

若 $x_i \neq x_j (i \neq j)$ 成立, 则 $V \neq 0$ 。此时, (3.3) 有唯一解, 即满足 (3.1) 的函数 $f(x)$ 的代数插值多项式存在且唯一。

Remark: 上述过程不便于用来求 $f(x)$ 的插值多项式，因计算量大，步骤多而易使误差增大。

插值基函数

由线性代数知识：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 $P[x]_n$ 中的基底是不唯一的，故它可写成多种形式。

在 $P[x]_n$ 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

$$P_n(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \tag{3.4}$$

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，但因为插值多项式是唯一的，故不同形式的插值多项式本质上是同一个。

三种形式的插值多项式：

1. Lagrange插值
2. Newton插值
3. Hermite插值 （不作为考点）

Lagrange插值基函数

已知 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ ，求 $L_1(x) = a_0 + a_1 x$ 使得 $L_1(x_0) = y_0, L_1(x_1) = y_1$ 可见 $L_1(x)$ 是过 (x_0, y_0) 和 (x_1, y_1) 两点的直线。

$$\begin{aligned}
\longrightarrow L_1(x) &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\
&= \underbrace{(\frac{x - x_1}{x_0 - x_1})}_{l_0(x)} y_0 + \underbrace{\left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)}_{l_1(x)} y_1
\end{aligned}$$

记 Lagrange插值基函数：

$$l_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad l_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

则: $L_1(x) = l_0(x) y_0 + l_1(x) y_1$

分析两个基函数有: $\begin{cases} l_0(x_0) = 1 \\ l_0(x_1) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} l_1(x_0) = 0 \\ l_1(x_1) = 1 \end{cases}$

Lagrange插值基函数

若 n 次多项式 $l_k(x)(k=0,1,\ldots,n)$ 在 $n+1$ 个插值节点 $x_0<x_1<\ldots<x_n$ 上满足插值条件:

$$l_k\left(x_i\right)=\delta_{ik}=\begin{cases}1 & (i=k)\\ 0 & (i\neq k)\end{cases}\quad (i,k=0,1,\cdots,n)$$

则称这 $n+1$ 个 n 次多项式 $l_0(x),l_1(x),\ldots,l_n(x)$ 为插值节点 $x_0,x_1,\ldots,x_n$ 上的 n 次插值基函数。

Remark: 容易验证 n 次插值基函数的线性组合在插值节点 $x_0,x_1,\ldots,x_n$ 上满足插值条件，从而可以利用插值基函数来构造插值多项式。

Lagrange插值基函数

由于 $i \neq k$ 时， $l_k\left(x_i\right)=0$ ，故 $x_0, x_1, \ldots, x_{k-1}, x_{k+1}, \ldots, x_n$ 为 $l_k(x)$ 的零点，从而可以设

$$l_k(x)=A_k\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right) \cdots\left(x-x_{k-1}\right)\left(x-x_{k+1}\right) \cdots\left(x-x_n\right)$$

由 $l_k\left(x_k\right)=1$ 可得

$$A_k=\frac{1}{\left(x_k-x_0\right)\left(x_k-x_1\right) \cdots\left(x_k-x_{k-1}\right)\left(x_k-x_{k+1}\right) \cdots\left(x_k-x_n\right)}$$

故

$$l_k(x)=\frac{\left(x-x_0\right)\left(x-x_1\right) \cdots\left(x-x_{k-1}\right)\left(x-x_{k+1}\right) \cdots\left(x-x_n\right)}{\left(x_k-x_0\right)\left(x_k-x_1\right) \cdots\left(x_k-x_{k-1}\right)\left(x_k-x_{k+1}\right) \cdots\left(x_k-x_n\right)}$$

$$(k=0,1, \cdots, n)$$

Lagrange插值

将 Lagrange 插值基函数代入插值多项式中，得：

$$L_n(x) \triangleq \sum_{i=0}^{n} a_j l_i(x)$$

$L_n(x)$ 是不超过 n 项的多项式，且满足所有的插值条件，其中，$a_0, a_1, \cdots, a_n$ 为待定参数。

对每个 $i = 0, 1, \cdots, n$，令

$$L_n(x_i) = a_0 l_0(x_i) + a_1 l_1(x_i) + \cdots + a_n l_n(x_i) = \sum_{j=0}^{n} a_j l_j(x_i) = y_i$$

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

得到多项式

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

称为 Lagrange 插值多项式

Lagrange插值

当 $n=1$ 时，有

$$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1$$

当 $n=2$ 时，有

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2$$

例题

例：给定 $f(x)=\sqrt{x}$ 的函数表如下:

x	144	169	225
$y=f(x)$	12	13	15

写出一次 Lagrange 插值基函数，并用一次 Lagrange 插值多项式计算 $f(175)$ 的近似值。

例题

例：给定 $f(x) = \sqrt{x}$ 的函数表如下:

x	144	169	225
$y = f(x)$	12	13	15

写出一次 Lagrange 插值基函数，并用一次 Lagrange 插值多项式计算 $f(175)$ 的近似值。

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 $L_1(175) = 13.21428572$

例题

例：给定 $f(x)=\sqrt{x}$ 的函数表如下:

x	144	169	225
$y=f(x)$	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。

例题

例：给定 $f(x) = \sqrt{x}$ 的函数表如下:

x	144	169	225
$y = f(x)$	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。

解：设 $x_0 = 144, x_1 = 169, x_2 = 225$

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

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

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

例题

$$
\begin{aligned}
L_2(x) &= y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + y_2 l_2(x) \\
&= 12 l_0(x) + 13 l_1(x) + 15 l_2(x)
\end{aligned}
$$

因此

$$L_2(175) = 13.23015873$$

注： $\sqrt{175} \approx 13.22875656$

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. 是不是插值多项式的次数越高，其计算结果就越精确？

引论

插值余项

估计 $L_n(x)$ 近似值代替 $f(x)$ 时所产生的截断误差在区间 $[a,b]$ 上用插值多项式 $L_n(x)$ 近似 $f(x)$ 时应该满足:

$$R_n(x_i) = f(x_i) - L_n(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \cdots, n$$

设

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x)$$

因此, $R_n(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上至少有 $n+1$ 个零点, 可设

$$\begin{aligned} R_n(x) &= K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \\ &= K(x)\omega_{n+1}(x) \end{aligned} \tag{3.5}$$

$K(x)$ 为待定函数

引进辅助函数

$$\varphi(t)=f(t)-L_n(t)-K(x)\omega_{n+1}(t)$$

将 x 固定，且 $x\neq x_i(i=0,1,\cdots,n)$，则在 $x,x_0,x_1,\cdots,x_n$ 共 $n+2$ 个点上取值为0。

由 Rolle(罗尔) 中值定理，导函数 $\varphi'(x)$ 在 (a,b) 上至少有 $n+1$ 个零点。因此，$\varphi''(x)$ 在 (a,b) 上至少有 n 个零点，递推可知，在 (a,b) 上至少有一个点 ξ，使 $\varphi^{(n+1)}(\xi)=0$。

因此

$$\varphi^{(n+1)}(\xi)=f^{(n+1)}(\xi)-L_n^{(n+1)}(\xi)-K(x)\omega_{n+1}^{(n+1)}(\xi)=0$$

由于 $L_n^{(n+1)}(\xi)=0$ 和 $\omega_{n+1}^{(n+1)}(\xi)=(n+1)\,!$，于是

$$f^{(n+1)}(\xi)-K(x)\cdot(n+1)!=0 \quad K(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

得 $R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x),\xi\in(a,b)$ 称 $R_n(x)$ 为 n 次插值多项式 $L_n(x)$ 的余项或截断误差。

Lagrange插值多项式中的误差

定理： 设 $f(x)$ 在含节点 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的区间 $[a,b]$ 上 $n+1$ 次可微，$L_n(x)$ 是 $f(x)$ 关于给定的 $n+1$ 个节点的 n 次插值多项式，则对于任意 $x \in [a,b]$，存在与 x 有关的 $\xi \in (a,b)$，使 (3.5)式成立。

特别地，若 $M_{n+1} = \max_{a \le x \le b} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$

则由 (3.5)

$$|R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)| \tag{3.6}$$

从而

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

因

$$\max_{a \le x \le b} |\omega_{n+1}(x)| = \max_{a \le x \le b} \left| \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \right|$$

故当节点数大于插值多项式的次数时，应当选取靠近 x 的节点做插值多项式。（误差会小）

例题

例: 利用余项公式

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

估计上例中 $L_2(175)$ 和 $L_1(175)$ 的误差。

例题

例: 利用余项公式

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

估计上例中 $L_2(175)$ 和 $L_1(175)$ 的误差。

解: 因 $f''(x) = (\sqrt{x})'' = -x^{-3/2}/4$, $f'''(x) = 3x^{-5/2}/8$, 故

$$M_2 = \max_{169 \le x \le 225} |f''(x)| = |f''(169)| \le 1.14 \times 10^{-4}$$

$$M_3 = \max_{144 \le x \le 225} |f'''(x)| = |f'''(144)| \le 1.51 \times 10^{-6}$$

于是

$$|R_1(175)| \le \frac{M_2}{2}|(175-169)(175-225)| \le 1.71 \times 10^{-2}$$

$$|R_2(175)| \le \frac{M_3}{3!}|(175-144)(175-169)(175-225)| \le 2.34 \times 10^{-3}$$

可见, $L_2(175)$ 比 $L_1(175)$ 的误差小

高次插值多项式的问题

Runge 发现：误差并不一定会随插值节点加密而减少。

例如, 对于函数 $f(x) = 1/\left(x^2+1\right)$, $-5 \leq x \leq 5$ 取等距的插值节点:

$$x_k = -5 + kh, \quad h = 10/n, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

所得的 Lagrange 插值多项式

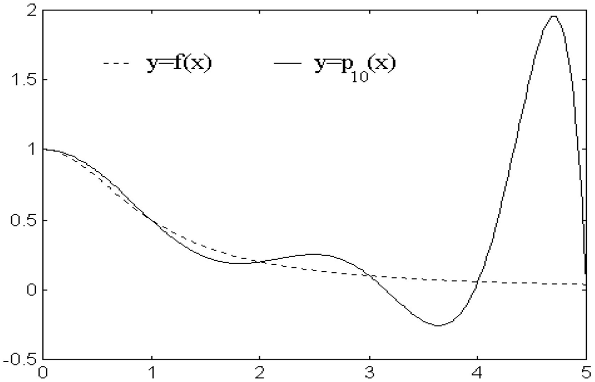
$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \left(\prod_{i=0, i \neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \right) \cdot \frac{1}{1 + x_k^2}$$

则在节点等距的条件下, 当 $n \to \infty$ 时, 由上述表达式表示的多项式$L_n(x)$ 只在 $x \leq 3.63$ 内收敛。之外发散到无穷。

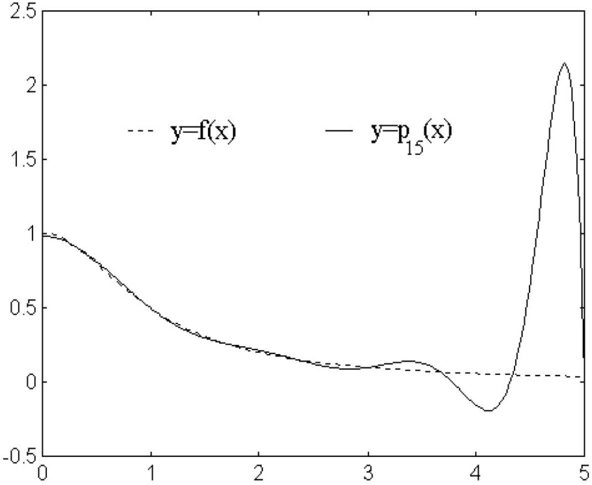
把多项式不收敛的现象称作 Runge 现象。该现象说明并非多项式的次数越高, 精度就越高。

高次插值多项式的问题

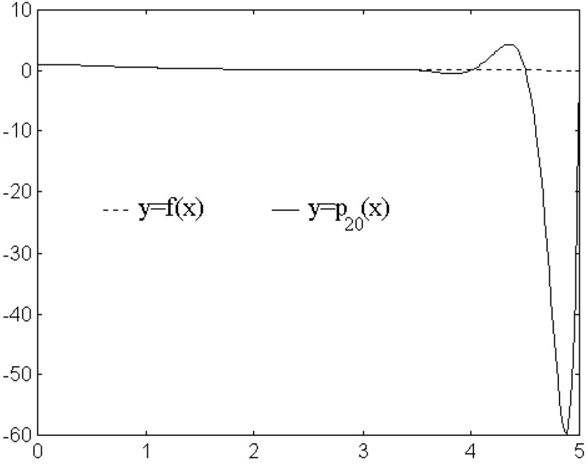
函数 $y = \frac{1}{1+x^2}$, $x \in [-5, 5]$ 的等距节点插值公式 $p_n x$ 在区间 $[0, 5]$ 上的近似程度示意图。



高次插值多项式的问题



高次插值多项式的问题



分段插值法

为了保证插值函数的逼近效果，需要较多的插值节点，然而导致较高的多项式次数。

然而在实际应用中，很少采用高次插值。因为高次插值多项式在两相邻插值节点间，插值函数未必能够很好地近似被插值函数。

为了避免高次插值的缺点，常采用分段插值，即将插值区间分成若干小区间，在每个小区间上利用前面介绍的插值方法构建低次插值多项式。

分段插值法

设给定 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的节点:

$$a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$$

对应的函数值 $y_0, y_1, \cdots, y_n$, 要求插值多项式 $P(\boldsymbol{x})$, 满足

$$P\left(x_i\right) = y_i, \quad i = 0, 1, \cdots, n$$

当 n 较大时, 为克服高次插值多项式的弊端, 将 $[a, b]$ 划分为若干个插值子区间, 区间的分点取在节点上, 在每一个子区间上做 $f(x)$ 的低次插值多项式。

所有插值子区间上的插值多项式构成 $[a, b]$ 上的分段函数, 称为 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的分段插值多项式。

分段线性Lagrange插值

取相邻的两个节点 x_k, x_{k+1} 形成一个插值子区间 $[x_k, x_{k+1}]$，做线性插值多项式：

对 $k = 0, 1, \cdots, n-1$

$$L_h^{(k)}(x) = y_k \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + y_{k+1} \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}$$

令

$$L_h(x) = \begin{cases} L_h^{(0)}(x) & x \in [x_0, x_1] \\ L_h^{(1)}(x) & x \in [x_1, x_2] \\ \cdots\cdots & \\ L_h^{(n-1)}(x) & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$$

由上述两式，得 $L_h(x_i) = y_i, \quad (i = 0, 1, \cdots, n)$ 称 $L_h(x)$ 为 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的分段线性插值多项式。

$L_n(x)$ 的余项为

$$\begin{aligned} R_1(x) = f(x) - L_h(x) &= f(x) - L_h^{(k)}(x) \\ &= \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_k)(x - x_{k+1}) \end{aligned}$$

因此, 如果

$$M_2 = \max_{a \le x \le b} |f''(x)|, \quad h = \max_{0 \le k \le n-1} h_k, \quad h_k = x_{k+1} - x_k$$

则

$$\max_{a \le x \le b} |R_1(x)| \le \frac{M_2}{2} \max_{a \le x \le b} |(x - x_k)(x - x_{k+1})| \le \frac{M_2}{8} h^2$$

分段线性插值多项式 $y = L_n(x)$ 的图形是连接平面上的点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$ 的一条折线。

可以证明: $\lim_{h \to 0} L_h(x) = f(x)$ 在 $[a, b]$ 上一致成立。

分段线性Lagrange插值

对于给定的一组数据 $(x_i, y_i)\,(i = 0, 1, \cdots, n)$, 设节点按 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ 排列, 对于插值点 $x = u$, 有

$$\nu = L_h^{(k)}(u) = y_k \frac{u - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + y_{k+1} \frac{u - x_k}{x_{k+1} - x_k} \quad u \in [x_k, x_{k+1}]$$

问题：对于给定的插值点 $x = u$, 公式中的下标 k 如何确定?

1. 若点 u 位于两节点 x_i, x_{i+1} 之间, 则取这两节点进行内插;
2. 当 $u < x_0$ 或 $u > x_n$ 时, 则需要外推, 前者取 $x_0, x_1 (k = 0)$, 后者取 $x_{n-1}, x_n (k = n - 1)$ 。

归纳如下: $$k = \begin{cases} 0 & u \le x_0 \\ i & x_i < u \le x_{i+1}, 1 \le i \le n - 1 \\ n - 1 & u \ge x_n \end{cases}$$

分段二次Lagrange插值

当给定的函数表中节点数远多于3时，采用分段二次插值法可以提高计算精度。

给定插值点 $x = u$，应取靠近 u 的三个节点做二次插值多项式。
当 $u \in [x_k, x_{k+1}]$，另一个节点取 x_{k-1} 还是 x_{k+2}，需要判断偏向区间的哪一侧。

- 如果 $|u - x_k| \le |u - x_{k+1}|$，我们选择 x_{k-1}, x_k, x_{k+1} 三个节点
- 如果 $|u - x_k| > |u - x_{k+1}|$，我们选择 x_k, x_{k+1}, x_{k+2} 三个节点
- 如果 $|u - x_0| \le |u - x_1|$，我们选择 x_0, x_1, x_2 三个节点
- 如果 $|u - x_n| \le |u - x_{n-1}|$，我们选择 x_{n-2}, x_{n-1}, x_n 三个节点

分段二次Lagrange插值

选取靠近 u 的相邻三个节点的方法:

$$k = \begin{cases} 0 & u < x_1 \\ i-1 & x_i < u \le x_{i+1} \quad \text{and } \left|u - x_i\right| \le \left|u - x_{i+1}\right|, (i = 1, 2, \cdots, n-1) \\ i & x_i < u \le x_{i+1} \quad \text{and } \left|u - x_i\right| > \left|u - x_{i+1}\right|, (i = 1, 2, \cdots, n-2) \\ n-2 & u > x_{n-1} \end{cases}$$

分段二次插值的计算公式:

$$v = L_h^{(k)}(u) = \sum_{j=k}^{k+2} y_j \left(\prod_{r=k, r\neq j}^{k+2} \frac{u - x_r}{x_j - x_r} \right)$$

例题

例：给出 $y = f(x)$ 的数据如下:

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.30	0.40	0.55	0.65	0.80	1.05
y_i	0.30163	0.41075	0.57815	0.69675	0.87335	1.18885

用分段二次插值多项式计算 $f(x)$ 在 $x = 0.36, 0.42, 0.75, 0.98$ 处的近似值。

例题

例：给出 $y = f(x)$ 的数据如下:

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.30	0.40	0.55	0.65	0.80	1.05
y_i	0.30163	0.41075	0.57815	0.69675	0.87335	1.18885

用分段二次插值多项式计算 $f(x)$ 在 $x = 0.36, 0.42, 0.75, 0.98$ 处的近似值。

解: 因 $u_1 = 0.36 \in [0.30, 0.40]$, 应该取 $x_0 = 0.30, x_1 = 0.40, x_2 = 0.55$;
因 $u_2 = 0.42 \in [0.40, 0.55]$, 且它靠近 0.40, 故仍取 $x_0 = 0.30, x_1 = 0.40, x_2 = 0.55$。
于是, 计算 $f(0.36)$ 和 $f(0.42)$ 的分段二次插值公式:

$$L_h(u) = \sum_{j=0}^{2} y_j \prod_{r=0, r\neq j}^{2} \frac{u - x_r}{x_j - x_r}$$

因此

$$f(0.36) \approx L_h(0.36) = 0.36671$$

$$f(0.42) \approx L_h(0.42) = 0.43243$$

例题

同样分析：在 $x = 0.75, 0.98$ 处, 应该选取如下 3 点:

$$x_3 = 0.65, x_4 = 0.80, x_5 = 1.05$$

$f(0.75)$ 和 $f(0.98)$ 的插值公式:

$$L_h(u) = \sum_{j=3}^{5} y_j \prod_{r=3, r\neq j}^{5} \frac{u - x_r}{x_j - x_r}$$

因此

$$f(0.75) \approx L_h(0.75) = 0.81344$$
$$f(0.98) \approx L_h(0.98) = 1.09764$$

例题

例：给出 $y = f(x)$ 的数据如下:

i	0	1	2	3	4
x_i	1	2	4	6	7
y_i	4	1	0	1	1

用分段二次插值多项式计算 $f(x)$ 在 $x = 1.5$ 处的近似值。

例题

例：给出 $y = f(x)$ 的数据如下:

i	0	1	2	3	4
x_i	1	2	4	6	7
y_i	4	1	0	1	1

用分段二次插值多项式计算 $f(x)$ 在 $x = 1.5$ 处的近似值。

解: 因 $u_1 = 1.5 \in [1, 2]$, 应该取 $x_0 = 1, x_1 = 2, x_2 = 4$;

$$l_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 2)(x - 4)}{3}$$

$$l_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 1)(x - 4)}{-2}$$

$$l_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 1)(x - 2)}{6}$$

$$L_2(x) = 4l_0(x) + l_1(x) \Rightarrow L_2(1.5) = 4x\frac{5}{12} + \frac{5}{8} = \frac{55}{24}$$

引论

Newton插值

回顾 Lagrange 插值公式：
当 $n = 1$ 时，有

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} y_1$$

当 $n = 2$ 时，有

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2$$

当增加插值节点时，已有的插值基函数改变。
想要构造一个更加方便灵活的插值格式：当增加插值节点时，只需在原有格式的基础上再一些项。

解决方法:

Newton 插值（考虑多项式之间的关系）

Newton插值

设已知函数 $f(x)$ 在 $n+1$ 个节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的函数值依次为:

$$f_0, f_1, \cdots, f_n$$

Newton 插值法的插值基函数:

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_j(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{j-1}) \\ \qquad\quad = \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i) \, (j = 1, 2, \cdots, n) \end{cases}$$

利用它们组合成如下形式的 n 次多项式:

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j \prod_{k=0}^{j-1} (x - x_k)$$

其中, $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 为待定参数。

Newton插值

特别:

$$P_1(x) = a_0 + a_1 (x - x_0)$$
$$P_2(x) = a_0 + a_1 (x - x_0) + a_2 (x - x_0)(x - x_1)$$

插值多项式满足条件:

$$P_n(x_i) = f_i, \quad (i = 0, 1, \cdots, n)$$

即

$$P_n(x_i) = a_0 + \sum_{j=1}^{n} a_j \prod_{k=0}^{j-1} (x_i - x_k) = f_i, \quad (i = 0, 1, \cdots, n)$$

得

$$a_0 = f_0,$$
$$a_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0},$$
$$a_2 = \frac{\frac{f_2 - f_0}{x_2 - x_0} - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1},$$

均差

定义: 设 $f(x)$ 在互异的节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的函数值为 $f_0, f_1, \cdots, f_n$, 称

$$f[x_i, x_k] = \frac{f_k - f_i}{x_k - x_i}, \quad (k \neq i)$$

为 $f(x)$ 关于 x_i, x_k 的一阶均差 (差商)。

称

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_k] - f[x_i, x_j]}{x_k - x_j}, \quad (i \neq j \neq k)$$

为 $f(x)$ 关于 x_i, x_j, x_k 的二阶均差。

一般地, 称

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-2}, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}}$$

为 $f(x)$ 关于 $x_0, x_1, \cdots, x_k$ 的 k 阶均差。

均差性质

性质1： 均差是微商的离散形式

$$f'(x_j) = \lim_{x_i \to x_j} = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j} = \lim_{x_i \to x_j} f[x_i, x_k]$$

性质2： k 阶均差是 $f(x)$ 在点 $x_0, x_1, \cdots, x_k$上的函数值的线性组合，即

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x_k] = \sum_{j=0}^{k} f(x_j) \prod_{i=0, i\neq j}^{k} \frac{1}{x_j - x_i}$$

性质3： 均差与节点的排列顺序无关

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

均差

均差的列表计算: 均差表以 $n=4$ 为例, 见下表

x_k	$f(x_k)$	$f[x_k, x_{k+1}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}, x_{k+3}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}, x_{k+3}, x_{k+4}]$
x_0	f_0				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	f_1		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	f_2		$f[x_1, x_2, x_3]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$	
x_3	f_3		$f[x_2, x_3, x_4]$		
		$f[x_3, x_4]$			
x_4	f_4				

Newton插值公式及其余项

设 $x \in [a, b], x \neq x_i, (i = 0, 1, \cdots, n)$, 则

$$f(x) = f(x_0) + f[x, x_0](x - x_0), \quad (x \neq x_0) \tag{3.7}$$

因

$$f[x, x_0, \cdots, x_k] = \frac{f[x, x_0, \cdots, x_{k-1}] - f[x_0, x_1, \cdots, x_k]}{x - x_k} \quad (k = 1, 2, \cdots, n)$$

得

$$f[x, x_0, \cdots, x_{k-1}] = f[x_0, x_1, \cdots, x_k] + f[x, x_0, \cdots, x_k](x - x_k) \tag{3.8}$$

利用 (3.8)，将 (3.7) 递推展开为

Newton插值公式及其余项

$$
\begin{aligned}
f(x) &= f(x_0) + \{f[x_0, x_1] + f[x, x_0, x_1](x - x_1)\}(x - x_0) \\
&= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x, x_0, x_1](x - x_1)(x - x_0) \\
&= \cdots \\
&= f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2]\prod_{j=0}^{1}(x - x_j) + \cdots \\
&\quad + f[x_0, x_1, \cdots, x_n]\prod_{j=0}^{n-1}(x - x_j) + f[x, x_0, \cdots, x_n]\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)
\end{aligned}
$$

即

$$
\begin{aligned}
f(x) &= f(x_0) + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \cdots, x_k]\prod_{j=0}^{k-1}(x - x_j) + f[x, x_0, \cdots, x_n]\prod_{j=0}^{n}(x - x_j) \\
&= N_n(x) + R_n(x)
\end{aligned}
$$

其中 $R_n(x_i) = f[x_i, x_0, \cdots, x_n]\prod_{j=0}^{n}(x_i - x_j) = 0$

Newton插值

因此

$$N_n(x_i) = f(x_i), \quad (i = 0, 1, \cdots, n)$$

$N_n(x)$ 满足插值条件, 称之为 $f(x)$ 的 n 次 Newton 插值多项式, 并称 $R_n(x)$ 为 $N_n(x)$ 的插值余项。

若 $f(x)$ 在 $[a, b]$上的 $n+1$ 阶导数存在，则余项

$$R_n(x) = f[x, x_0, \cdots, x_n]\,\omega_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

其中, $\xi \in (a, b)$ 且依赖于 x。同时得到均差与导数有如下关系

$$f[x, x_0, \cdots, x_n] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

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

Newton插值

当 k 阶均差接近于一个常数时，$k+1$ 阶均差就会接近于零，

$$f(x) \approx N_k(x)$$

且得到余项近似公式:

$$R_k(x) = f(x) - N_k(x) \approx f\left[x_0, x_1, \cdots, x_{k+1}\right] \prod_{j=0}^{k} (x - x_j)$$

注意事项

- 在Newton插值法中, 应避免使用高阶插值多项式。
- 在采用分段插值时, 应选择靠近插值点的节点作为分段插值公式中的节点。先判断插值点 x 所在的子区间, 结合插值多项式次数, 选择靠近 x 的节点。

Newton插值

当 x 位于表末: $x_{n-1} < x < x_n$ 时, 为提高精度, 应采用公式:

$$\begin{aligned}N_n(x) &= f(x_n) + f[x_n, x_{n-1}](x - x_n) + f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}](x - x_n)(x - x_{n-1}) \\ &\quad + \cdots + f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_0](x - x_n)(x - x_{n-1}) \cdots (x - x_1) \\ &= f(x_n) + \sum_{k=1}^{n} f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-k}] \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_{n-j})\end{aligned}$$

因

$$f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{n-k}] = f[x_{n-k}, \cdots, x_{n-1}, x_n]$$

故上式中的各阶均差都可在均差表中找到。

Newton 插值与 Lagrange 插值方法比较:
当增加一个节点时, Newton插值法的公式只需增加一项, 且前面计算结果可用, 因此更便于计算机上实现。

例题

例：已知 $f(x)$ 的函数表如下表所示，用分段三次 Newton 插值多项式计算 $f(0.596)$ 的近似值，并估计误差。

x_i	$f(x_i)$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+1}, x_{i+3}, x_{i+4}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}, x_{i+4}, x_{i+5}]$
0.40	0.41075					
		1.116				
0.55	0.57815		0.28			
		1.186		0.1973		
0.65	0.69675		0.35892		0.03146	
		1.27573		0.21303		-4.9231×10^{-4}
0.80	0.88811		0.43348		0.03114	
		1.38410		0.2286		
0.90	1.02652		0.52492			
		1.51533				
1.05	1.25382					

例题

解: 插值点 $x = 0.596$, 选择节点 $0.40, 0.55, 0.65, 0.80$:

$$\begin{gathered} N_3(x) = 0.41075 + 1.116(x - 0.4) + 0.28(x - 0.4)(x - 0.55) \\ +0.1973(x - 0.4)(x - 0.55)(x - 0.65) \\ f(0.596) \approx N_3(0.596) = 0.63191 \end{gathered}$$

截断误差 $|R_3(x)| \approx 0.03146|(x - 0.4)(x - 0.55)(x - 0.065)(x - 0.80)|$
故 $|R_3(0.596)| \leq 4.656 \times 10^{-6}$

如选择节点 $0.55, 0.65, 0.80, 0.90$:

$$\begin{gathered} N_3(x) = 0.57815 + 1.186(x - 0.55) + 0.35892(x - 0.55)(x - 0.65) \\ +0.21303(x - 0.55)(x - 0.65)(x - 0.80) \\ f(0.596) \approx N_3(0.596) = 0.63192 \end{gathered}$$

截断误差 $|R_3(x)| \approx 0.03114|(x - 0.55)(x - 0.065)(x - 0.80)(x - 0.90)|$
故 $|R_3(0.596)| \leq 4.7970 \times 10^{-6}$

差分

等距节点插值是常见的插值方法, 设有 $n+1$ 个等距的插值节点:

$$x_k = x_0 + kh, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

$h = (x_n - x_0)/n$ 为步长。

差分的定义

设 $f(x)$ 在等距节点 $x_k = x_0 + kh, (k = 0, 1, \cdots, n)$, 上的函数值为 f_k, 称

$$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$$
$$\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$$

分别为 $f(x)$ 在 $x = x_k$ 处的一阶向前和一阶向后差分。符号 Δ 和 ∇ 分别称为向前差分算子和向后差分算子。

差分

一般地, 称 $f(x)$ 在两个相邻节点 $x_k, x_{k+1}\,(x_{k-1})$ 上的 $m-1$ 阶向前（后）差分的差为 $f(x)$ 在 $x = x_k$ 处的 m 阶向前（后）差分, 记作

$$\Delta^m f_k = \Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k$$

和

$$\nabla^m f_k = \nabla^{m-1} f_k - \nabla^{m-1} f_{k-1}$$

向前、向后差分的关系

$$\Delta^m f_k = \nabla^m f_{k+m}, \quad m \text{ 为任意正整数}$$

均差的表示

当节点等距时, 均差 $f[x_0, x_1, \cdots, x_k]$ 可以用 k 阶差分表示:

$$f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{\Delta f_0}{h}$$

差分

$$f[x_0,x_1,x_2]=\frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}=\frac{\Delta f_1-\Delta f_0}{2h^2}=\frac{\Delta^2 f_0}{2h^2}$$

一般地

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\frac{\Delta^k f_0}{k!h^k},\quad (k=1,2,\cdots)$$

同时

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=f[x_k,x_{k-1},\cdots,x_0]=\frac{\nabla^k f_k}{k!h^k},\quad (k=1,2,\cdots)$$

差分与导数的关系为

$$\Delta^k f_0=h^k f^{(k)}(\xi),\quad \xi\in(x_0,x_k)$$

等距节点的Newton插值公式

设节点 $x_k = x_0 + kh, (k = 0, 1, \cdots, n)$。记 $x = x_0 + th, t > 0$, 则

$$x - x_k = (t-k)h, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

Newton向前（差分）插值公式

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j) = \frac{\Delta^k f_0}{k! h^k} t(t-1)\cdots(t-k+1)h^k$$

$$= \frac{\Delta^k f_0}{k!} \prod_{j=0}^{k-1} (t-j)$$

因此，Newton向前（差分）插值公式可简化为

$$N_n(x_0 + th) = f_0 + \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta^k f_0}{k!} \prod_{j=0}^{k-1} (t-j)$$

余项可表示为

$$R_n(x_0 + th) = \frac{\Delta^{n+1} f_0}{(n+1)!} t(t-1)\cdots(t-n)$$

等距节点的Newton插值公式

Newton向后 (差分) 插值公式

$$N_n(x_0 + th) = f_n + \sum_{k=1}^{n} \frac{\nabla^k f_n}{k!} \prod_{j=0}^{k-1} (t + j)$$

相应的余项可表示为

$$R_n(x_n + th) = \frac{\nabla^{n+1} f_n}{(n+1)!} t(t+1) \cdots (t+n)$$

差分表现以 $n = 4$ 为例 (见下页)

差分表

$f(x_k)$	Δf_k	$\Delta^2 f_k$	$\Delta^3 f_k$	$\Delta^4 f_k$
$f(x_0)$				
	Δf_0			
$f(x_1)$		$\Delta^2 f_0$		
	Δf_1		$\Delta^3 f_0$	
$f(x_2)$		$\Delta^2 f_1$		$\Delta^4 f_0$
	Δf_2		$\Delta^3 f_1$	
$f(x_3)$		$\Delta^2 f_2$		
	Δf_3			
$f(x_4)$				

例题

例：给定 $f(x) = \cos(x)$ 的函数表如下:

k	0	1	2	3	4	5	6
x_k	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
$f(x_k)$	1.0000	0.99500	0.98007	0.95534	0.92106	0.87758	0.82534

用Newton法计算 $\cos(0.048)$ 及 $\cos(0.566)$ 的近似值, 并估计误差。

例题

$f(x_k)$	Δf_k	$\Delta^2 f_k$	$\Delta^3 f_k$	$\Delta^4 f_k$	$\Delta^5 f_k$	$\Delta^6 f_k$
1.0000						
	-0.00500					
0.99500		-0.00993				
	-0.01493		0.00013			
0.98007		-0.00980		0.00012		
	-0.02473		0.00025		-0.00002	
0.95534		-0.00955		0.00010		0.00001
	-0.03428		0.00035		-0.00001	
0.92106		-0.00920		0.00009		
	-0.04348		0.00044			
0.87758		-0.00876				
	-0.05224					
0.82534						

例题

易知 $h=0.1$, 当 $x=0.048$ 时, $t=\frac{x-x_0}{h}=0.48$

$$N_4\left(x_0+th\right)=f_0+\Delta f_0 t+\frac{\Delta^2 f_0}{2!}t(t-1)+\frac{\Delta^3 f_0}{3!}t(t-1)(t-2)$$

$$+\frac{\Delta^4 f_0}{4!}t(t-1)(t-2)(t-3)$$

$$=f_0+t\left(\Delta f_0+(t-1)\left(\frac{\Delta^2 f_0}{2!}+(t-2)\left(\frac{\Delta^3 f_0}{3!}+(t-3)\left(\frac{\Delta^4 f_0}{4!}\right)\right)\right)\right)$$

$$=1.0+0.48\cdot\left(-0.005-0.52\left(\frac{-0.00993}{2}-1.52\left(\frac{0.00013}{6}-2.53\times\frac{0.00012}{24}\right)\right)\right)$$

$$=0.99884\approx\cos(0.048)$$

$$\left|R_4(0.0048)\right|\leq\left|\frac{M_5}{5!}t(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)\right|h^5=1.5845\times10^{-7}$$

其中 $M_5=|\sin 0.6|=0.565$

例题

当 $x=0.566$ 时, $t=\frac{x-x_6}{h}=-0.34$

$$N_4\left(x_0+th\right)=f_6+\nabla f_6 t+\frac{\nabla^2 f_6}{2!}t(t+1)+\frac{\nabla^3 f_6}{3!}t(t+1)(t+2)$$

$$+\frac{\nabla^4 f_6}{4!}t(t+1)(t+2)(t+3)$$

$$=f_6+t\left(\nabla f_6+(t+1)\left(\frac{\nabla^2 f_6}{2!}+(t+2)\left(\frac{\nabla^3 f_6}{3!}+(t+3)\frac{\nabla^4 f_6}{4!}\right)\right)\right)$$

$$=0.82534-0.34(-0.05224+0.66(\frac{-0.00876}{2}+1.66(\frac{0.00044}{6}+2.66\times\frac{0.00009}{24})))$$

$$=0.84405\approx\cos(0.566)$$

$$|R_4(0.566)|\leq\left|\frac{M_5}{5!}t(t+1)(t+2)(t+3)(t+4)\right|h^5=1.7064\times 10^{-7}$$

其中 $M_5=|\sin 0.6|=0.565$

数据拟合的最小二乘法

在实际生活中，往往需要从一组实验数据 (x_i, y_i) 中寻找出变量 x, y 之间的函数关系。由于观测数据不可避免出现误差，因此并不需要 $y = f(x)$ 一定要经过所有的点，而只要求在给定点 x_i 上误差 $\Delta i = f(x_i) - y_i$ 按某种标准达到最小。通常用欧式范数 $\|\Delta\|_2$ 作为误差量度的标准。这就是所谓的最小二乘法。

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \tag{3.9}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{n} \tag{3.10}$$

Remark: 数据拟合与插值的最大区别在于拟合需要给出一个曲线方程的具体解析形式，而插值只需求出该点的内插数值。

最小二乘法的基本概念

直线的一般形式

$$s(t)=at+b$$

其中, a, b 为参数。

思路: 利用数据 $(t_i, s_i)\,(i=0,1,\cdots,m)$, 在某种标准下确定 a, b, 使 $S(t)$ 尽可能靠近该组数据点。

标准

令 $\delta_i = s\left(t_i\right)-s_i$, 用 ω_i 表示测试数据 (t_i, s_i) 的重度, 称为权系数。权系数通常情况下都为 1。

利用

$$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m} \omega_i \delta_i^2=\sum_{i=0}^{m} \omega_i\left(S\left(t_i\right)-s_i\right)^2$$

作为衡量 $s(t)$ 与数据 $(t_i, s_i)\,(i=0,1,\cdots,m)$ 偏离大小的度量标准。

数据拟合的最小二乘法

问题的一般情形

设 $(x_i, y_i)\,(i=0,1,\cdots,m)$ 为给定的一组数据，$\omega_i > 0$ 为各点的权系数，要求在函数类

$$\begin{aligned}\Phi &= \operatorname{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\} \\ &= \{a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)\}\end{aligned}$$

中，求一函数

$$S^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x) \quad (n \le m)$$

满足

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(S^*(x_i) - y_i\right)^2 = \min_{S\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(S(x_i) - y_i\right)^2 \tag{3.11}$$

其中，$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$ 为 Φ 中任意函数。
根据 (3.11) 求函数的方法为数据拟合的最小二乘法，$S^*(x)$ 称为最小二乘解，$S(x)$ 为拟合函数。

法方程组

令

$$\phi(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(S(x_i) - y_i\right)^2$$
$$= \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i \right)^2$$

由极值的必要条件, 得

$$\frac{\partial \phi}{\partial a_k} = 0, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

即

$$\sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i \right) \cdot \varphi_k(x_i) = 0, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

数据拟合的最小二乘法

因此

$$\sum_{j=0}^{n}\left(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j\left(x_i\right)\varphi_k\left(x_i\right)\right)\cdot a_j=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k\left(x_i\right),\quad (k=0,1,\cdots,n)$$

记

$$\langle\boldsymbol{\varphi}_j,\boldsymbol{\varphi}_k\rangle=\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j\left(x_i\right)\varphi_k\left(x_i\right)$$

$$\langle\boldsymbol{f},\boldsymbol{\varphi}_k\rangle=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k\left(x_i\right)$$

其中

$$\boldsymbol{\varphi}_r=\left(\varphi_r\left(x_0\right),\varphi_r\left(x_1\right),\cdots,\varphi_r\left(x_n\right)\right),\quad (r=0,1,\cdots,n)$$

$$\boldsymbol{f}=\left(y_0,y_1,\cdots,y_m\right)$$

数据拟合的最小二乘法

则得法方程组

$$\sum_{j=0}^{n} \langle \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\varphi}_k \rangle a_j = \langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_k \rangle, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

称为函数系 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在离散点 $x_0, x_1, \cdots, x_m$ 上的法方程组, 其矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_0 \rangle & \langle \boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_n \rangle \\ \langle \boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_0 \rangle & \langle \boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_n \rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle \boldsymbol{\varphi}_n, \boldsymbol{\varphi}_0 \rangle & \langle \boldsymbol{\varphi}_n, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{\varphi}_n, \boldsymbol{\varphi}_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_0 \rangle \\ \langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle \\ \vdots \\ \langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_n \rangle \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

因 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是函数类 Φ 的基, 故线性无关。法方程组 (3.12) 的系数行列式称为基函数 $\{\varphi_j(x)\}_{j=0}^{n}$ 组成的 **Gram** 行列式, 为非零, 故 (3.12) 的解 $a_j = a_j^* \ (j = 0, 1, \cdots, n)$ 存在且唯一。

例题

例：基于线性拟合函数 $P_0(x) = a_0 + a_1 x$，求拟合下列数据的最小二乘解。

i	0	1	2	3	4	5	6
x_i	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2
y_i	0.9	1.9	2.8	3.3	4.0	5.7	6.5

例题

例：基于线性拟合函数 $P_0(x)=a_0+a_1x$, 求拟合下列数据的最小二乘解。

i	0	1	2	3	4	5	6
x_i	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2
y_i	0.9	1.9	2.8	3.3	4.0	5.7	6.5

解: 基函数为 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x$; 从数据可知, $n=1,m=6,\omega_i=1,(i=0,1,\cdots,6)$
建立法方程组:

$$\langle\boldsymbol{\varphi}_0,\boldsymbol{\varphi}_0\rangle=\sum_{i=0}^{6}\omega_i\varphi_0\left(x_i\right)\varphi_0\left(x_i\right)=7$$

$$\langle\boldsymbol{\varphi}_0,\boldsymbol{\varphi}_1\rangle=\langle\boldsymbol{\varphi}_1,\boldsymbol{\varphi}_0\rangle=\sum_{i=0}^{6}\omega_i\varphi_0\left(x_i\right)\varphi_1\left(x_i\right)=\sum_{i=0}^{6}\omega_ix_i=4.2$$

$$\langle\boldsymbol{\varphi}_1,\boldsymbol{\varphi}_1\rangle=\sum_{i=0}^{6}\omega_i\varphi_1\left(x_i\right)\varphi_1\left(x_i\right)=\sum_{i=0}^{6}\omega_ix_i^2=3.64$$

例题

$$\langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_0 \rangle = \sum_{i=0}^{6} \omega_i f(x_i)\, \varphi_0(x_i) = \sum_{i=0}^{6} \omega_i y_i = 25.1,$$

$$\langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle = \sum_{i=0}^{6} \omega_i f(x_i)\, \varphi_1(x_i) = \sum_{i=0}^{6} \omega_i x_i y_i = 20.18$$

因此, 法方程组为

$$\begin{bmatrix} 7 & 4.2 \\ 4.2 & 3.64 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25.1 \\ 20.18 \end{bmatrix}$$

用直接三角分解法, 得

$$a_0 = 0.843, \quad a_1 = 4.57$$

例题

例: 求拟合下列数据的最小二乘解

x_i	0.24	0.65	0.95	1.24	1.73	2.01	2.23	2.52	2.77	2.99
y_i	0.23	-0.26	-1.10	-0.45	0.27	0.10	-0.29	0.24	0.56	1.00
ω_i	1	1	0.8	0.9	1	1	1	1	1	1

基函数为 $y = \cos(x), y = \ln x, y = e^x$

解：设拟合函数和基函数为

$$S(x) = a\cos(x) + b\ln x + ce^x$$
$$\varphi_0(x) = \cos(x), \varphi_1(x) = \ln x, \quad \varphi_2(x) = e^x$$

例题

建立法方程组:

$$\begin{bmatrix} 6.5651 & -5.1453 & 59.407 \\ -5.1453 & 4.8457 & -45.969 \\ 59.407 & -45.969 & 934.96 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.4881 \\ -2.0891 \\ 24.619 \end{bmatrix}$$

解得 $a = -0.99480, b = -1.1957, c = 0.030752$
因此

$$S(x) = -0.99480 \ln x - 1.1957 \cos x + 0.030752 e^x$$

拟合函数是待定参量的线性函数，称为线性最小二乘拟合。议上述两个例子都是线性最小二乘拟合。

数据拟合的最小二乘法

常见线性最小二乘拟合所选的函数类还有多项式类: 以

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

为拟合函数, 基底为 $\varphi_j(x) = x^j (j = 0, 1, \cdots, n)$, 则

$$\langle \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\varphi}_k \rangle = \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^{j+k}, \quad (j, k = 0, 1, \cdots, n)$$

$$\langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{\varphi}_k \rangle = \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^k y_i, \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

因此, 法方程组为

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^m \omega_i & \sum_{i=0}^m \omega_i x & \cdots & \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^n \\ \sum_{i=0}^m \omega_i x_i & \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^n & \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^m \omega_i y_i \\ \sum_{i=0}^m \omega_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^m \omega_i x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

利用正交多项式作最小二乘拟合

正交多项式作基底:

定义: 设给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 及各点的权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$, 如果多项式族 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 满足:

$$\langle \boldsymbol{P}_k, \boldsymbol{P}_j \rangle = \sum_{i=0}^{m} \omega_i P_k(x_i) P_j(x_i) = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases}$$

则称 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 为关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 的正交多项式族。

定义: 设 $P_k(x)$ 是最高次项系数不为零的 k 次多项式, 如果多项式族$\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 满足:

$$\langle \boldsymbol{P}_k, \boldsymbol{P}_j \rangle = \int_a^b \rho(x) P_k(x) P_j(x) dx = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases}$$

则称 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 在 $[a, b]$ 上带权正交, $P_k(x)$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 k 次正交多项式。

利用正交多项式作最小二乘拟合

当取点集$\{x_i\}_{i=1}^m$带权$\{w_i\}_{i=1}^m$正交的多项式族, $P_0(x), P_1(x), \cdots, P_n(x)$ 作为拟合多项式的基底时, 其最小二乘解为 n 次多项式

$$g_n(x) = a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + \cdots + a_n P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k P_k(x)$$

其中, 当 $P_0(x), P_1(x), \cdots, P_n(x)$ 为关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 的正交多项式族时, 则有

$$a_k = (f, P_k) \,/\, (P_k, P_k) \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$