插值和逼近

本章介绍插值与逼近，即寻找某个逼近复杂函数$f(x)$的简单函数$p(x)$。

代数插值

代数插值共介绍了三种插值方法：**范德蒙矩阵方法、拉格朗日插值方法、牛顿插值方法**。三种插值方法代码实践写在了`Interpolation.py`中。其中范德蒙矩阵方法是最直接但计算量最大的方法，但是需要求解一组n次的线性方程组，n为插值点个数。拉格朗日插值方法易于理解，包括拉格朗日基+各个基对应的函数值，可以参考视频：[B站轩兔]，但是其缺陷在于若需要额外添加一个新的插值项，则需要重新计算所有的拉格朗日基。牛顿法避免了拉格朗日法的问题，需要通过函数的n阶差商作为系数，和牛顿基的形式完成插值。

范德蒙矩阵方法

给定$n+1$个插值点$(x_i, y_i = f(x_i))$，构造n次插值多项式$p_n(x)$逼近$f(x)$:

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

那么可以构建$n+1$个线性方程组:

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

通过求解上述线性方程组，从而确定系数$a_0 \cdots a_n$，从而构造$p_n(x)$的方法即为范德蒙矩阵方法。

拉格朗日插值法

拉格朗日插值法定义下述插值多项式$p_n(x)$:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)$$

其中$l_k(x)$称为拉格朗日Lagrange基函数，其表达形式为:

$$l_k(x_i) = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}$$

即除了插值的点x_k外，其与的插值点都为零的光滑函数，这个基函数可这样构造:

$$\prod_{j=0, j\neq k}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}$$

上述即为拉格朗日插值法。

牛顿插值法

牛顿插值法的多项式有以下的形式，这样的好处是多一个额外的插值点可以在原有的基础上增加一项，而不需要推倒重来：

$$P_n(x) = a_0\omega_0(x) + a_1\omega_1(x) + \cdots + a_n\omega_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i\omega_i(x)$$

其中$\omega_i(x)$为牛顿插值基函数，有：

$$\begin{cases} \omega_0 = 1 \\ \omega_n = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) = \prod_{j=0}^{n-1}(x-x_j) \end{cases}$$

式中的a_i为牛顿插值法的系数，通过差商的方法定义：

$$\begin{cases} a_0 = f(x_0) \\ a_k = f[x_0 \cdots x_k] \end{cases}$$

其中差商的定义：

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

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

三种插值余项

对于一个插值函数，其余项定义为$R_n(x) = f(x) - P_n(x)$

拉格朗日余项

这是由**罗尔定理**直接推算得到的形式，但是需要知道具体函数的形式并进行求导，在这里，ξ是插值区间内的未知点：

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

牛顿余项

若没有具体的函数或不可导，可以使用牛顿余项的差商形式表示：

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

后验估计余项

上述的情况必须要求知道函数的一些具体的信息，若只有某个未知函数的离散数据，我们可以在完成插值后，考虑替换或加密（变密集）原先的节点，得到新的某个节点$\tilde{x}_n$,然后重新进行插值得到$\tilde{P}_n(x)$:

$R_n(x) = \frac{x-x_n}{x-\tilde{x}_n}(P_n(x) - \tilde{P}_n(x))$

这个式子可以由拉格朗日余项简单推导得到，并考虑$\tilde{P}_n$和P_n的导数相同。

分段低次插值

在实际工程中，计算大量的n个节点构成的函数计算量较大，可以将原函数分段，然后使用例如二次低次插值等方法。分段低次插值获得了收敛性，但损失了光滑性。

Hermite插值

给定$n+1$个节点 $x_0 \cdots x_i$，并给定m个导数信息，构建不高于$m+n+1$的多项式：

$$H(x) = \sum_{j=0}^{m+n+1} a_j x^j$$

使其能够满足：

$$\begin{cases} H(x_i) = y_i \\ H'(x_{i_k}) = y'_{i_k} \end{cases}$$

上述即为Hermite多项式。

为了构造Hermite多项式，可以先用代数插值的方法求出满足函数位置条件的$p_n(x)$，然后这样构造：

$$H(x) = p_n(x) + q_m(x)\omega_{n+1}(x)$$

为了补充函数的导数信息，可以补充对上式求导，整理可以发现：

$$q_m(x_{j_k}) = \frac{y'_{j_k} - p'_n(x_{j_k})}{\omega'_{n+1}(x_{j_k})}$$

对于Hermite多项式的误差估计，有：

$$R(x) = \frac{f^{(n+m+2)}(\epsilon)}{(n+m+2)!}\omega_{n+1}(x)\prod_{k=0}^{m}(x - x_{i_k})$$

正交多项式

基本概念

权函数

对于区间(a, b)上的非负连续函数$f(x)$，若

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = 0$$

则在(a, b)上$f(x) \equiv 0$，$\rho(x)$即为区间上的权函数。

内积

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$$

为函数$f(x)$于$g(x)$在$[a, b]$上的内积。

正交多项式系

若 $(f, g) = 0$，则称$f(x)$与$g(x)$在区间$[a, b]$上带权正交。

若函数系$\{\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_n\}$满足:

$$(\phi_i, \phi_j) = \begin{cases} 0, i \neq j \\ a_i > 0, i = j \end{cases}$$

则称$\{\phi_k(x)\}$为$[a, b]$上带权$\rho(x)$的正交函数系。

常用的正交多项式系

勒让德Legendre多项式，在区间$[-1, 1]$上正交：

$$\begin{cases} L_0(x) = 1 \\ L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n] \end{cases}$$

注：学习轨道力学的非球形引力摄动中使用到了连带勒让德函数，其表达式为：

$$L_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \cdot \frac{d^m}{dx^m} P_n(x)$$

这是上述勒让德多项式的一个拓展，即$m = 0$时，$L_n^m(x) = L_n(x)$。

函数的最佳平方逼近

本节的概念与最小二乘法类似，不过用内积来定义最佳平方逼近元素，使用连续的函数$p(x)$逼近另外一个复杂的连续函数$f(x)$:

给定一组函数组作为基底，并张成线性空间$H_n = \mathrm{Span}\{\phi_0, \phi_1, \cdots \phi_i\}$

$$(f-p^*, f-p^*) = \min_{p \in H_n}(f-p, f-p)$$

则称$p^*(x)$为子空间H_n中对$f(x)$的最佳平方逼近元素。

为了求解$p^*(x)$对上述变型可以得到：

$$p^*(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k^*(\phi_k, \phi_j) = (f, \phi_j)$$

而我们实际上就要求解的即为上述式子中所有的c_k^*系数。

正则方程求解最佳平方逼近

以书中的例题为例，求解$H_1 = \mathrm{Span}\{1, x\}$中对于$f(x) = \sqrt{x}$的最佳平方逼近元素$p(x)$:

首先给出了这里的内积的定义方式：

$$(f, g) = \int_0^1 f(x)g(x)dx$$

然后求解所有项的内积：

$$\varphi_0(x)\equiv 1, \qquad \varphi_1(x)=x$$

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\int_0^1 \mathrm{d}x=1, \qquad (\varphi_1,\varphi_0)=\int_0^1 x\mathrm{d}x=\frac{1}{2}$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\int_0^1 x^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3}, \quad (\varphi_0,f)=\int_0^1 \sqrt{x}\mathrm{d}x=\frac{2}{3}$$

$$(\varphi_1,f)=\int_0^1 x\sqrt{x}\mathrm{d}x=\frac{2}{5}$$

最后形成一个这样的线性方程组：

$$\begin{bmatrix}(\phi_0,\phi_0) & (\phi_1,\phi_0)\\(\phi_0,\phi_1) & (\phi_1,\phi_1)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_0\\c_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\phi_0,f)\\(\phi_1,f)\end{bmatrix}$$

代入上述数字可以解得：$c_0=4/15, c_1=4/5$,因此：

$$p^*(x)=c_0\phi_0+c_1\phi_1=\frac{4}{15}+\frac{4}{5}x$$

利用正交函数系求解最佳平方逼近

在使用正则方法求解上述方程式若方程组较大则会病态，因此可以利用**正交函数系**求解最佳平方逼近避免这个问题。

以使用勒让德多项式求解为例，此时最佳平方逼近的系数可直接这样求解得到：

$$c_k^*=\frac{(f,L_k)}{L_k,L_k}$$

若给定的求解区间为一般的$[a,b]$而非$[-1,1]$,可以这样转化：

$$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$$

最小二乘法补充

先前学习过最小二乘法的一般表达式：

假设给定一组离散的观测值$\hat{\mathbf{y}}_{t\times n}$，需要使用函数$\mathbf{Ax}$逼近。其中$\mathbf{A}_{t\times p}$为基构成的矩阵，我们需要求解系数矩阵$\mathbf{x}_{p\times n}$完成最小二乘法，即：

$$\min_{\mathbf{x}}||\hat{\mathbf{y}}-\mathbf{Ax}||$$

若$\mathbf{A}$不为方阵，为了求解$\mathbf{x}$,需要用到伪逆的方法求解，注意这里需要满足矩阵$\mathbf{A}$满秩：

$$\mathbf{x}=\mathbf{A}^{\times}\hat{\mathbf{y}}=[(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T]\,\hat{\mathbf{y}}$$

实际上这个表达式也可写成：

$$\mathbf{A^{TAx}}=\mathbf{A}\hat{\mathbf{y}}$$

在部分情况下解题比较方便。