第二章 插值法与最小二乘法

2.1 函数逼近问题与插值法

背景 设有$y = f(x)$，其值是通过实验或观测得到的且解析表达式很复杂，不便分析。
函数逼近问题 构造一个较为简单的函数$P(x)$近似地表示$f(x)$
被逼近函数 $f(x)$ （未知） **逼近函数** $P(x)$
逼近方式 插值（观测值为真值，插值函数必通过数据点）和拟合（观测值有噪声，函数尽可能贴近数据点）

2.1.1 插值问题

条件 假设$y = f(x)$在点x_0, x_1, x_2 ...处有函数值分别为$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \dots\dots$，构造函数$p(x)$，使得
插值问题 $p(x_i) = y_i, (i = 0,1,2, \dots, n)$， 记为$\boldsymbol{y = f(x) \approx p(x)\ \forall x \in [a, b]}$
插值条件 $p(x_i) = y_i, (i = 0,1,2, \dots, n)$
插值函数 $p(x)$称为$f(x)$的插值函数
插值节点 $x_i\ (i = 0,1,2, \dots, n)$
插值区间 $[a, b]$
注意 ① $p(x)$和$f(x)$函数图形至少有$n+1$个交点（插值点计数从零开始，共$n+1$个插值节点）
② 插值函数类型包括代数多项式、三角函数、有理函数等
③ $p(x)$为多项式时，称为代数插值多项式

2.1.2 插值多项式的存在唯一性

插值问题研究目标 在给定$n+1$个点时，构造不超过$\boldsymbol{n}$**次**的多项式：$p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$
则有满足条件：$p_n(x_i) = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \cdots + a_nx_i^n = y_i$， $i = 0,1,2, \dots, n$
范德蒙德行列式 该线性方程组系数行列式为$n+1$阶范德蒙德行列式

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

由克莱姆法则知方程组有唯一解，故插值多项式唯一

注意 ① $n+1$个插值节点可构造n次插值多项式
② 但求解线性方程组计算量太大且舍入误差很大，不便计算，不具有实际意义

2.1.3 插值基函数与拉格朗日插值

一、简单情形

(1) $\boldsymbol{n = 1}$时．设$y_i = f(x_i)\ \ i = 0,1$ ，作直线方程可得$y = \frac{1}{x_1 - x_0}[y_0(x_1 - x_0) + y_1(x - x_0)]$

得到两点式插值/线性插值：$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}y_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}y_1$

例题：有$f(x) = \sqrt{x}$，已知有$(144,12), (169,13), (225,15)$，求$f(175)$的近似值。

则有选择13、15两个点，得到$L_1(x) = \frac{x-225}{169-225} \cdot 13 + \frac{x-169}{225-169} \cdot 15 = 13.214285$

(2) $\boldsymbol{n = 2}$时，设$y_i = f(x_i)\ \ i = 0,1,2$

同理可得：$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2$ 称其抛物插值。

构造$L_2(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2$,不难发现，需要满足条件：

$l_0(x_0) = 1,\ l_0(x_1) = 0,\ l_0(x_2) = 0 \quad l_1(x_0) = 0,\ l_1(x_1) = 1,\ l_1(x_2) = 0 \quad l_2(x_0) = 0,\ l_2(x_1) = 0,\ l_2(x_2) = 1$

二、推广

由此，发现如果要满足在插值节点上为精确值（仅该节点有值且系数为 1，其他节点处系数为 0），则 **分子不得有$(x-x_{本项})$，分母为分子代入$x_{本项}$时的结果**。

插值基函数 $$l_j(x)=\frac{(x-x_0)\dots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\dots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\dots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\dots(x_j-x_n)}=\prod_{\substack{i=1\\i\neq j}}^{n}\left(\frac{x-x_i}{x_j-x_i}\right)\quad(j=0,1,2,\dots,n)$$

称其为**n次多项式的拉格朗日插值基函数**

拉格朗日插值多项式 $$L_n(x)=\sum_{j=0}^{n}l_j(x)\cdot y_j=\sum_{j=0}^{n}\prod_{i=1\ and\ i\neq j}^{n}\frac{(x-x_i)}{(x_j-x_i)}\cdot y_j$$

注意 ① 可以记忆：$l_j(x_i)=\delta_{ij}=\begin{cases}0\,,i\neq j\\1\,,i=j\end{cases}\quad(i,j=0,1,2,\dots,n)$

② 一般地，称**线性无关**的代数多项式$\varphi_j(x)$为插值基函数，若$p_n(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)$满足插值条件，则称$p_n(x)$为基于基函数$\{\varphi_j(x)\}$的插值多项式。

③ 不同基函数可得不同的插值多项式，如 Lagrange，Newton，Hermite 等。但由插值多项式的唯一性知本质上是相同的

2.2 插值多项式的误差

定理 1.1 设f在$[a,b]$上$n+1$次可导，$p_n(x)$为f的n次插值多项式，则有$\boldsymbol{R_n(x)=f(x)-p_n(x)=\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)}$

其中$\omega_{n+1}(x)=\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)=(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$，$\xi\in(a,b)$ **依赖于x**

称$R_n(x)$为n次拉格朗日插值多项式与$f(x)$之间的截断误差。

证明 1.1 我们知道：$x_0,x_1,\dots,x_n$均为$R_n(x)$的零点，所以设$R_n(x)=K(x)(x-x_0)\dots(x-x_n)=K(x)\omega_{n+1}(x)$

如此我们做辅助函数：$F(t)=f(t)-p_n(t)-K(x)\omega_{n+1}(t)$ 注意：自变量为t，x为一个确定的已知数。

则$F(t)$有$n+2$个零点（包含$t=x_0\sim x_n$和$t=x$本身），在$[a,b]$上应用罗尔定理$n+1$次，

可得$F^{n+1}(t)$在(a,b)上至少有一个零点ξ。$F^{n+1}(\xi)=0\Rightarrow\ f^{n+1}(\xi)-K(x)(n+1)!\Rightarrow K(x)=\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}$

则得证$R_n(x)=K(x)\omega_n(x)=\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$

注意 ① 由于ξ未知，当$f^{n+1}(x)$有界时，可用$|f^{n+1}(x)|\le M_{n+1\,最大值}$，估算$|R_n(x)|\le\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|$

② 对于指定x，当节点数m大于插值点数时，应选取**靠近x的节点**构造插值多项式，以使$\omega_{n+1}(x)$中诸因子较小，从而$|R_n|$较小。

例题 1. 利用节点$x_0=2,x_1=2.75,x_2=4$，求$f(x)=1/x$ 的二次拉格朗日插值多项式。并利用其求$f(3)$的值。

计算插值基函数：$l_0(x)=\frac{(x-2.75)(x-4)}{(2-2.75)(2-4)}=\frac{2}{3}(x-2.75)(x-4)$ $l_1(x)=\frac{(x-2)(x-4)}{(2.75-2)(2.75-4)}=-\frac{16}{15}(x-2)(x-4)$

$l_2(x)=\frac{(x-2)(x-2.75)}{(4-2)(4-2.75)}=\frac{2}{5}(x-2)(x-2.75)$ 又已知$f(x_0)=\frac{1}{2},f(x_1)=\frac{4}{11},f(x_2)=\frac{1}{4}$

可得：$L_2(x)=\frac{1}{22}x^2-\frac{35}{88}x+\frac{49}{44}$，利用该式可计算$f(3)\approx L_2(3)\approx 0.32955$

2. 在上式基础上确定**插值余项**并估计该余项在区间[2,4]的**最大值**。

由于$f(x)=1/x$，故有$f'(x)=-\frac{1}{x^2},f''(x)=\frac{2}{x^3},f'''(x)=-\frac{6}{x^4}$。

因此$R_2(x)=\frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)=\boldsymbol{-\frac{1}{\xi^4}(x-2)(x-2.75)(x-4),\xi\in(2,4)}$

考虑$\frac{1}{\xi^4}$在区间上最大值为$1/16$，而函数$\omega_3(x)=(x-2)(x-2.75)(x-4)$的一阶导数为$\frac{1}{2}(3x-7)(2x-7)$

可见有极值点$x=\frac{7}{3},x=\frac{7}{2}$ 因此，有$|R_2(x)|$最大值为$x=\frac{7}{2}$时，值为$\frac{9}{256}\approx 0.03515625$

2.3 差商与牛顿插值

拉格朗日缺陷 每增加一个新的节点，需要全部重新计算$L_k(x)$，不具有信息的继承性。
且$L_{n+1}(x)$与$L_n(x)$之间缺乏递推关系

2.3.1 拉格朗日多项式递推形式

改写 L1/L2 有$L_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1=y_0+\frac{y_1-y_0}{x_1-x_0}(x-x_0)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)$

有$L_2(x)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_2)}{x_1-x_0}(x-x_0)+\frac{\frac{f(x_2)-f(x_0)}{x_2-x_0}-\frac{(f(x_1)-f(x_0))}{x_1-x_0}}{x_2-x_1}(x-x_0)(x-x_1)$

定义 记$f[x,y]=\frac{f(y)-f(x)}{y-x}$，$f[x,y,z]=\frac{f[x,z]-f[x,y]}{z-y}$（此处类似于导数的定义）

则有两点公式：$N_1(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)$

三点公式：$N_2(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$

类似这种形式的基函数：$1,(x-x_0),(x-x_0)(x-x_1)$ ...的系数称为**均差（差商）**

2.3.2 差商/均差

定义 2.1 设函数$y=f(x)$在节点x_i,x_j处函数值分别为$f(x_i),f(x_j)$，则称$\frac{f(x_j)-f(x_i)}{x_j-x_i}$为$f(x)$关于$x_i,x_j$的**一阶差商或均差**，记作$f[x_i,x_j]$

称一阶差商$f[x_j,x_k],f[x_i,x_j]$的差商为$f(x)$关于x_i,x_j,x_k的**二阶差商**，即$f[x_i,x_j,x_k]=\frac{f[x_i,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_j}$

一般地，称$n-1$阶差商的差商为n阶差商，即$f[x_0,x_1,\dots,x_n]=\frac{f[x_0,\dots,x_{n-2},x_n]-f[x_0,\dots,x_{n-1}]}{x_n-x_{n-1}}$为$f(x)$关于$x_0,x_1,\dots,x_n$的**$n$阶差商**

注意 ① 规定：$f[x_i]=f(x_i)$，称为**零阶差商**。

② 差商是导数的近似运算。

③ 可以证明：差商与节点的排列顺序无关。从而，$f(x_0,x_1,\dots,x_n)=\sum_{j=0}^{n}f_j(\prod_{\substack{i=0\\i\neq j}}^{n}\frac{1}{x_j-x_i})$

④ 差商即为**拉格朗日插值多项式系数**：$a_n=f[x_0,x_1,\dots,x_n]$

性质 2.1 k阶差商$f[x_0,x_1,\dots,x_k]$可以表示为函数值$f(x_0),f(x_1),\dots,f(x_k)$的线性组合，即为：

$$f[x_0,x_1,\dots,x_k]=\sum_{i=0}^{k}\frac{f(x_i)}{\prod\limits_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{k}(x_i-x_j)}$$

性质 2.2 差商具有对称性，交换节点顺序差商值不变。

性质 2.3 k阶差商与k阶导数有关系：$f[x_0,x_1,\dots,x_k]=\frac{f^k(\xi)}{k!}\quad \xi\in(x,x_k)$

性质 2.4 若函数$f(x)$是n次多项式，考虑k阶差商$f[x,x_0,x_1,\dots,x_{k-1}]$，当$k<n$时它是$n-k$次多项式，而当$k>0$时其值恒等于零。

差商计算 **表格法：差商表**

由任意两个值可算到下一阶

x_k	$f(x_k)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商
x_0	$f(x_0)$				
		$f[x_0,x_1]$			
			$f[x_0,x_1,x_2]$		
x_1	$f(x_1)$			$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$	
		$f[x_1,x_2]$			
			$f[x_1,x_2,x_3]$		$f[x_0,x_1,\cdots,x_4]$
x_2	$f(x_2)$				
		$f[x_2,x_3]$		$f[x_1,x_2,x_3,x_4]$	
			$f[x_2,x_3,x_4]$		
x_3	$f(x_3)$				
		$f[x_3,x_4]$			
x_4	$f(x_4)$				

差商计算示意

（后题）3. $f(x)=x^6+5x^4+3$，

求$f[1,\frac{1}{2},\frac{1}{2^2},\frac{1}{2^3}\dots,\frac{1}{2^6}]$

$$f\left[1,\frac{1}{2},\frac{1}{2^2},\frac{1}{2^3}\dots,\frac{1}{2^6}\right]=\frac{f^6(\xi)}{6!}=1$$

例题　1. 给定数据表$f(x)=\ln(x)$的数据表，请构造差商表。有表：

x_i	2.2	2.4	2.6	2.8	3
$f(x_i)$	0.78846	0.87547	0.95551	1.02962	1.09861

差商表为：

x_i	$f[x_i]$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商
2.2	0.78846	0.43505	−0.087375	0.0225	−0.00755
2.4	0.87547	0.40010	−0.073875	0.01646	
2.6	0.95551	0.37055	−0.064		
2.8	1.02962	0.34495			
3	1.09861				

由上图可推得**差商表**：

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	$f[x_0,x_1]$	$f[x_0,x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4]$
x_1	f_1	$f[x_1,x_2]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3,x_4]$	
x_2	f_2	$f[x_2,x_3]$	$f[x_2,x_3,x_4]$		
x_3	f_3	$f[x_3,x_4]$			
x_4	f_4				

可知，i阶差商最多有$n-i+1$个。

2.3.3 牛顿插值公式

本质　牛顿插值多项式就是拉格朗日插值多项式的递推式

推导　由$a_n=f[x_0,x_1,\dots,x_n]$与拉格朗日多项式递推关系得：$L_0(x)=a_0=f[x_0]$，$L_1(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)$

可推广到一般：$L_n(x)=L_{n-1}(x)+a_0(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})=$

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

公式　**牛顿插值多项式**　$\boldsymbol{N_n(x)=f[x_0]+f[x_0,x_1](x-x_0)+\cdots+f[x_0,x_1,\dots,x_n](x-x_0)\dots(x-x_{n-1})}$

原函数　$f(x)=\boldsymbol{f[x_0]}+\sum_{k=1}^{n}(f[x_0,x_1,\dots,x_k])\cdot\prod_{j=0}^{k-1}(x-x_j)+f[x_0,x_1,\dots,x_n]\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)\ \triangleq N_n(x)+R_n(x)$

插值余项　$\widetilde{R_n}(x)=f[x_0,x_1,\dots,x_n]\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)=f[x_0,x_1,\dots,x_n]\omega_{n+1}(x)$

增项情况　$N_{k+1}(x)=N_k(x)+f[x_0,x_1,\dots,x_k]\omega_{k+1}(x)$

关系　由**唯一性**知：$N_n(x)=L_n(x)$，故余项$\widetilde{R_n}(x)=f[x_0,x_1,\dots,x_n]\omega_{n+1}(x)=\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$

$\Rightarrow \boldsymbol{f[x_0,x_1,\dots,x_n]=\frac{f^n(\xi)}{n!}}$，$\xi\in(a,b)$　差商与导数的关系

例题：1. 有$f(x)=\mathrm{sh}(x)$，用**三次**牛顿插值计算$f(0.596)$，并估计误差。

有

x_i	0.4	0.55	0.65	0.8	0.9	1.05
$f(x_i)$	0.41075	0.57815	0.69675	0.88811	1.02652	1.25382

计算差商表：

x_i	$f(x_i)$	一阶	二阶	三阶	四阶	五阶
0.4	0.41075	1.116	0.28	0.19733	0.03123	0.000293
0.55	0.57815	1.186	0.3589	0.21295	0.03142	
0.65	0.69675	1.275733	0.43346	0.22866		
0.8	0.88811	1.3841	0.52493			
0.9	1.02652	1.51533				
1.05	1.25382					

① 故$N_3(0.596)=0.41075+1.116(x-0.4)+0.28(x-0.4)(x-0.55)+0.19733(x-0.4)(x-0.55)(x-0.65)\approx 0.631914$

且$R_3(0.596)=0.031238(x-0.4)(x-0.55)(x-0.65)(x-0.8)\approx 3.10256\times10^{-6}$

② $N_3(0.596)=0.57815+1.186(x-0.55)+0.3589(x-0.55)(x-0.65)+0.21295(x-0.55)(x-0.65)(x-0.8)\approx 0.631922$

$R_3(0.596)=0.03142(x-0.55)(x-0.65)(x-0.8)(x-0.90)\approx 4.8415\times10^{-6}$

2. 继续计算$\mathrm{sh}(0.955)$

有多项式：$N_3(x)=1.25382+1.51533(x-1.05)+0.52493(x-1.05)(x-0.9)+0.22866(x-1.05)(x-0.9)(x-0.8)$

故$\mathrm{sh}(0.955)\approx 1.106935365$，$|R_3|\le 7.76323\times10^{-6}$

2.4 差分与等距节点插值

提出 差商表计算涉及除法，且有时待求点在插值区间某一侧，需要对牛顿插值法进行改进。

2.4.1 差分及其性质

定义 2.2 给定**等距节点**$x_i = x_0 + ih, i = 1,2,3\dots,n$，其中$h = \frac{x_n - x_0}{n}$为**节点步长**

函数$y = f(x)$在这$n+1$个互异点处的函数值为$f_0, f_1, f_2, \dots, f_n$（$f_k = f(x_k)$）

定义

- **向前差分** $f_{k+1} - f_k$为x_k处以h为步长的一阶向前差分，记作$\Delta f_k = f_{k+1} - f_k$
- **向后差分** $f_k - f_{k-1}$为x_k处以h为步长的一阶向后差分，记作$\nabla f_k = f_k - f_{k-1}$
- **二阶向前差分** $\Delta^2 f_k = \Delta f_{k+1} - \Delta f_k = (f_{k+2} - f_{k+1}) - (f_{k+1} - f_k)$
- **m阶向前差分** $\Delta^m f_k = \Delta^{m-1} f_{k+1} - \Delta^{m-1} f_k$为$x_k$处的$m$阶向前差分
- **m阶向后差分** $\nabla^m f_k = \nabla^{m-1} f_k - \nabla^{m-1} f_{k-1}$为$x_k$处的$m$阶向后差分
- **零阶差分** $\Delta^0 f_k = f_k$

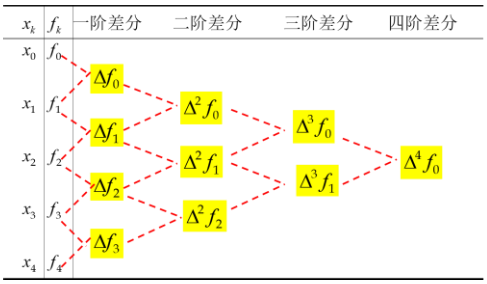
注意 ① 归纳法可证：$\Delta^m f_k = \nabla^m f_{k+m}$

② **差分与差商关系**：$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{\Delta^k f_0}{k! h^k} = \frac{\nabla^k f_k}{k! h^k}$（数学归纳法证明）

③ **差分与导数关系**：$\Delta^k f_0 = h^k f^{(k)}(\xi)$，$\xi \in (x_0, x_k)$

证明：$\Delta^k f_0 = k!\, h^k f[x_0, x_1, \dots, x_k] = k!\, h^k \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!} = h^k f^{(k)}(\xi)$

差分表 每两项相减可得后一项



2.4.2 等距节点的牛顿插值节点

将牛顿插值多项式中各阶差商分别用相应差分代替，可得等距节点的插值多项式

一、牛顿向前插值公式

条件 在区间$[x_0, x_n]$上，已知等距节点：$x_k = x_0 + kh$，$k = 0,1,2,\dots,n$

则插值点$x = x_0 + th$，$h = \frac{x_n - x_0}{n}$，$t = \frac{x - x_0}{h}$，则$x - x_k = (t-k)h$

一般项 根据差商与差分关系可得：

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

插值公式 $N_n(x) = N_n(x_0 + th) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{1} t + \frac{\Delta^2 f_0}{2!} t(t-1) + \cdots + \frac{\Delta^n f_0}{k!} t(t-1)\dots(t-k+1)$

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

余项 $R_n(x) = R_n(x_0 + th) = \frac{h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} t(t-1)\dots(t-n)$

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

二、牛顿向后插值公式

条件 在区间$[x_0,x_n]$上，已知等距节点：$x_{n-k}=x_n-kh\ ,k=0,1,2,\dots,n$

则插值点$x=x_n+th$，$h=\frac{x_n-x_0}{n}$，$t=\frac{x-x_n}{h}<0$，则$x-x_{n-k}=(t+k)h$

插值公式 $N_n(x)=N_n(x_n+th)=f_n+\frac{\nabla f_n}{1}t+\frac{\nabla^2 f_n}{2!}t(t+1)+\cdots+\frac{\nabla^n f_n}{k!}t(t+1)\dots(t+k-1)$

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

余项 $R_n(x)=R_n(x_n+th)=\frac{h^{n+1}f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}t(t+1)\dots(t+n)$

$$R_n(x_n+th)=\frac{\nabla^{n+1}f_n}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(t+j)$$

注意 ① 前插公式，首先要求出h，t．然后可确定$x=x_0+th$

② 后插公式，首先要求出h，t．然后可确定$x=x_n+th$

例题 1. 设$f(x)=\cos x$，求$\cos 0.048\ \cos 0.566$，并估计误差。

有差分表：

f_k	$\triangle f_k$	$\triangle^2 f_k$	$\triangle^3 f_k$	$\triangle^4 f_k$	$\triangle^5 f_k$
1	-0.005	-0.00993	0.00013	0.00012	-0.00002
0.995	-0.01493	-0.0098	0.00025	0.0001	-0.00001
0.98007	-0.02473	-0.00955	0.00035	0.00009	
0.95534	-0.03428	-0.0092	0.00044		
0.92106	-0.04348	-0.00876			
0.87758	-0.05224				
0.82534					

k	0	1	2	3	4	5	6
x_k	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
f_k	1	0.995	0.98007	0.95534	0.92106	0.87758	0.82534

，且可知$h=0.1$

① $x=0.048\rightarrow t=\frac{x-x_0}{h}=0.48$

$N_4(x_0+th)=f_0+\Delta f_0 t+\frac{\Delta^2 f_0}{2!}t(t-1)+\frac{\Delta^3 f_0}{3!}t(t-1)(t-2)+\frac{\Delta^4 f_0}{4!}t(t-1)(t-2)(t-3)$

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

$=1+0.48\left(-0.005-0.52\left(-\frac{0.00993}{2}-1.52\left(\frac{0.00013}{6}-2.52\frac{0.00012}{24}\right)\right)\right)\approx 0.99884$

$|R_4(0.048)|\le\left|\frac{M_5}{5!}t(t-1)(t-2)(t-3)(t-4)\right|h^5=1.5845\times10^{-7}$，其中$M_5=\max|(cosx)'|=|sin0.6|=0.565$

② $x=0.566\rightarrow t=\frac{x-x_n}{h}=-0.34$ 使用后插公式

$N_4(x_6+th)=0.84405$

$|R_4(0.566)|\le\left|\frac{M_5}{5!}t(t+1)(t+2)(t+3)(t+4)\right|h^5=1.7064\times10^{-7}$，其中$M_5=\max|(cosx)'|=|sin0.6|=0.565$

2.5 分段插值

2.5.1 高次插值多项式的龙格现象

龙格现象　插值多项式的次数越高，误差不一定越小。(在某个阈值内轻微波动，出阈值后有高阶震荡)

例如函数$f(x)=\frac{1}{1+x^2}$，取等距节点$x_k=-5+kh$，绘图可知多项式次数越高，其与被插函数的偏差反而越大。　截断时已有的方程已经有高阶项了，所以会出现高阶项。

启发　当插值节点很多时，通常不采用高次插值，采用分段低次插值（分段线性插值或分段二次插值等）

2.5.2 分段线性拉格朗日插值

条件　有插值点$x_0\sim x_n$，取相邻节点构成插值子区间$[x_k,x_{k+1}], h_k=x_{k+1}-x_k\ (k=0,1,\dots,n-1)$

方法　在子区间上应用两点公式：$L_n^{(k)}(x)=\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}y_k+\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}y_{k+1}$

结果

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

余项　$R_1(x)=f(x)-L_n(x)=f(x)-L_n^{(k)}(x)=\frac{f''(\xi)}{2}(x-x_k)(x-x_{k+1})$　　其中$\xi,x\in[x_k,x_{k+1}],\xi$依赖于$x$

$$\max_{x\in[x_k,x_{k+1}]}|R_1(x)|\ \le\frac{M_2}{2!}\max|x-x_k||x-x_{k+1}|\le\frac{M_2}{2!}\frac{(x_{k+1}-x_k)^2}{4}=\frac{M_2}{8}h_k^2\ \ (0\le k\le n-1)$$ （可知其上限）

其中$M_2=\max_{a\le x\le b}|f''(x)|$　（找到二阶导的最大值为M_2）（但这是做不到的）

$$\max_{x\in[x_k,x_{k+1}]}|R_1(x)|\le\frac{M_2}{8}\max_{0\le k\le n-1}h_k^2=\frac{M_2}{8}h^2\quad 其中h=\max_{0\le k\le n-1}(x_{k+1}-x_k)$$

注意　① 在节点处$L_n(x_i)=y_i$

② 图形为**一个折线**，不光滑，是线性的。

③ 可以证明，如果$f\in C[a,b]$，则$L_n(x)$于$[a,b]$上一致收敛于$f(x)$

2.5.3 分段二次插值

特点　① 子区间上的三次公式

② 分段插值

③ **不能保证连续性**

2.6 Hermite 插值

问题 分段低次插值无法保证插值函数在节点处的光滑性，希望得到光滑的插值函数，此即厄米特插值问题

条件 ① 已知$\begin{cases} y_i = f(x_i) \\ y_i' = f'(x_i) \end{cases}$，要求插值多项式$H(x)$满足：$\begin{cases} H(x_i) = y_i \\ H'(x_i) = y_i' \end{cases}$ 要求插值点值相等，且节点处导数相等

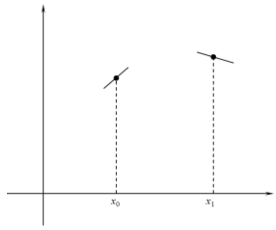
② 一般已知$\begin{cases} y_i = f(x_i) \\ y_i^{(k)} = f^{(k)}(x_i) \end{cases}$，求插值多项式$H(x)$满足：$\begin{cases} H(x_i) = y_i \\ H^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)} \end{cases}$ $(\boldsymbol{k} = 1,2,\dots,\boldsymbol{m}; \boldsymbol{i} = 0,1,\dots,\boldsymbol{n})$

含义 ① 该问题称为 hermite 插值，$H(x)$与$f(x)$的图形在$\boldsymbol{n+1}$**个节点处相切**.

② 最简情形中插值条件有$2(n+1)$个。故$H(x)$的次数$\leqq 2n+1$ 特别：$n=2$时，有3个节点，5次多项式

③ 由于高次插值的不稳定性，故采用分段插值

2.6.1 两点三次插值



结构 设有：

x	x_0	x_1
$f(x)$	y_0	y_1
$f'(x)$	y_0'	y_1'

令$H(x) = y_0\alpha_0(x) + y_0'\beta_0(x) + y_1\alpha_1(x) + y_1'\beta_1(x)$，

其中$\alpha_i(x), \beta_i(x)$为三次多项式，满足有 （当$\boldsymbol{x = x_0}$，需要满足$\boldsymbol{y = y_0}$，以此类推）

$$\alpha_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \qquad \beta_i'(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \qquad \alpha_i'(x_j) = \alpha_j'(x_i) = 0 \qquad \beta_i(x_i) = \beta_i(x_j) = 0$$

$$\text{即}\begin{cases} \alpha_0(x_0) = 1 \\ \alpha_0(x_1) = 0 \\ \alpha_0'(x_0) = 0 \\ \alpha_0'(x_1) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \alpha_1(x_0) = 0 \\ \alpha_1(x_1) = 1 \\ \alpha_1'(x_0) = 0 \\ \alpha_1'(x_1) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \beta_0(x_0) = 0 \\ \beta_0(x_1) = 0 \\ \beta_0'(x_0) = 1 \\ \beta_0'(x_1) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} \beta_1(x_0) = 0 \\ \beta_1(x_1) = 0 \\ \beta_1'(x_0) = 0 \\ \beta_1'(x_1) = 1 \end{cases}$$

易知$H(x)$满足厄米特插值条件

基函数 由$\alpha_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$，考虑$l_i(x)$：因为**二重零点（双重根）**，考虑$l_i^2(x)$，又因为三次多项式，

考虑$\alpha_i(x) = (ax+b)l_i^2(x) = (ax+b)\left(\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)^2$，其中$a$，$b$待定 （对于$\alpha$，只要解$a$、$b$就行了）

$$1 = \alpha_i(x_i) = ax_i + b \qquad \alpha_i'(x) = a\left(\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)^2 + 2(ax+b)\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\frac{1}{x_i-x_j} \Rightarrow 0 = \alpha_i'(x_i) = a + \frac{2}{x_i-x_j} \Rightarrow a = \frac{2}{x_j-x_i}$$

$b = 1 - ax_i = 1 - \frac{2x_i}{x_j-x_i} = 1 + \frac{2x_i}{x_i-x_j}$ 解得a, b，可得$\boldsymbol{\alpha_i(x)} = \left(\boldsymbol{1-2\frac{x-x_i}{x_i-x_j}}\right)\left(\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)^2$ $(i = 0,1)$

同理：$\boldsymbol{\beta_i(x) = (x-x_i)}\left(\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)^2$ $(i = 0,1)$

多项式 $\boldsymbol{H_3(x) = y_0\left(1-2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 + y_1\left(1-2\frac{x-x_1}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 + y_0'(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 + y_1'(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2}$

注意 ① $H_3 = \sum_{i=0}^{1}(y_i\alpha_i(x) + y_i'\beta_i(x))$

② 一般地，$n+1$个节点$2n+1$次厄米特插值公式：

$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}(y_i\alpha_i(x) + y_i'\beta_i(x))$，其中：

$$\begin{cases} \alpha_i(x) = \left(1 - 2(x-x_i)\sum\limits_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n}\frac{1}{x_i-x_j}\right)l_i^2(x) \\ \beta_i(x) = (x-x_i)l_i^2(x) \\ l_i(x) = \prod\limits_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n}\frac{x-x_k}{x_i-x_k} \qquad (i = 0,1,\dots,n) \end{cases}$$

余项 讨论$H_3(x)$的余项，记$R_3(x) = f(x) - H_3(x)$

定理 5.1 设$f^{(4)}$在$[x_0,x_1]$上连续，则$\forall x \in [x_0,x_1]$有$R_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2$ $\xi \in (x_0,x_1)$

例题　1. 已知有

x	1	2
f_i	2	3
f_i'	0	-1

，求$H_3(x)$

有$x_0=1, x_1=2, y_0=2, y_1=3, y_0'=0, y_1'=-1$

有$\alpha_0(x)=\left(1-2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2=(2x-1)(x-2)^2$　$\alpha_1(x)=\left(1-2\frac{x-x_1}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2=(5-2x)(x-1)^2$

有$\beta_0(x)=(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2=(x-1)(x-2)^2$　　$\beta_1(x)=(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2=(x-2)(x-1)^2$

故$H(x)=2\alpha_0(x)+3\alpha_1(x)-\beta_1(x)=-3x^3+13x^2-17x+9$

2.6.2 分段两点三次厄米特插值

条件　设$y_k=f(x_k), y_k'=f'(x_k)$, $(k=0,1,\dots,n)$

概念　若分段三次多项式$H_h(x)$满足：

① $H_h(x)$在$[x_k,x_{k+1}]$上为三次多项式

② $H_h(x)$在$[a,b]$上连续

③ $H_h(x_k)=y_k, H_h'(x_k)=y_k'$

则称$H_h(x)$为f在区间$[a,b]$上的分段三次厄米特插值多项式

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

则有$H_h^{(k)}(x)=\sum_{j=k}^{k+1}\left(y_j\alpha_j(x)+y_j'\beta_j(x)\right)=y_k\alpha_k(x)+y_k'\beta_k(x)+y_{k+1}\alpha_{k+1}(x)+y_{k+1}'\beta_{k+1}(x)$　$k=0,1,\dots,n-1$

注意：$H_h^{(k-1)}(x)$中的$\alpha_k(x)$与$H_h^{(k)}(x)$中的$\alpha_k(x)$不同。

若记$\overline{\alpha_k}(x)=\begin{cases}\left(1-2\frac{x-x_k}{x_k-x_{k-1}}\right)\left(\frac{x-x_{k-1}}{x_k-x_{k-1}}\right)^2 & x\in[x_{k-1},x_k] \quad k=0\text{ 时，略去} \\ \left(1-2\frac{x-x_k}{x_k-x_{k+1}}\right)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2 & x\in[x_k,x_{k+1}] \quad k=0\text{ 时，略去} \\ 0 & \text{其他}x\end{cases}$

$\overline{\beta_k}(x)=\begin{cases}(x-x_k)\left(\frac{x-x_{k-1}}{x_k-x_{k-1}}\right)^2 & x\in[x_{k-1},x_k] \quad k=0\text{ 时，略去} \\ (x-x_k)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2 & x\in[x_k,x_{k+1}] \quad k=n\text{时，略去} \\ 0 & \text{其他}x\end{cases}$

多项式　则$H_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\left(y_k\overline{\alpha_k}(x)+y_k'\overline{\beta_k}(x)\right)=\sum_{k=0}^{n}\left(y_k\alpha_k(x)+y_k'\beta_k(x)\right)$

例题　1. 设有

x_i	0	1	2	3	4	5
f_i	1	0.5	0.2	0.1	0.05882	0.03846
f_i'	0	-0.5	-0.16	-0.06	-0.02768	-0.01479

用分段三次厄米特插值多项式求 f(0.5), f(1.5), f(2.5), f(3.5), f(4.8)

以$f(1.5)$为例，$x_0=1, x_1=2, y_0=0.5, y_1=0.2, y_0'=-0.5, y_1'=-0.16$

有$\alpha_0(x)=\left(1-2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2=(2x-1)(x-2)^2$　$\alpha_1(x)=\left(1-2\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2=(5-2x)(x-1)^2$

有$\beta_0(x)=(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2=(x-1)(x-2)^2$　　$\beta_1(x)=(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2=(x-2)(x-1)^2$

有$H_3(x)=0.5\alpha_0(x)+0.2\alpha_1(x)-0.5\beta_0(x)-0.16\beta_1(x)=0.5*2*0.25+0.2*2*0.25-0.5*0.5*0.25+0.16*0.5*0.25=0.3075$

2. 求$f(x)=\sin x$在$[a,b]$上的分段厄米特插值多项式并估计误差

当$x\in[x_k,x_{k+1}]$时，$H_h^{(k)}(x)=y_k\alpha_k(x)+y_k'\beta_k(x)+y_{k+1}\alpha_{k+1}(x)+y_{k+1}'\beta_{k+1}(x)=\sin x_k\left(1-2\frac{x-x_k}{x_k-x_{k+1}}\right)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2+$ $\sin x_{k+1}\left(1-2\frac{x-x_{k+1}}{x_{k+1}-x_k}\right)\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2+\cos x_k\,(x-x_k)\left(\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}\right)^2+\cos x_{k+1}(x-x_{k+1})\left(\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}\right)^2$

有误差$|R_3(x)|\le\frac{1}{4!}(x-x_k)^2(x-x_{k+1})^2\le\frac{1}{24}\frac{(x_{k+1}-x_k)^4}{16}=\frac{h_k^4}{384}\le\frac{h^4}{384}$　　(考虑有$(x-a)(x-b)\le\frac{(b-a)^2}{4}$)

2.7 三次样条插值

概念 样条是指弹性均匀的细木条或钢条，工程师或描图员在制图或下料时强制样条通过一组离散的点，然后沿样条画出所需的模线（光滑连续）

由此发展起来的数学方法就是样条插值。它既保留了分段低次插值的各种优点，又提高了光滑度。

区别 与厄米特插值的区别：仅知f在节点上的值，不知f'导数的信息

2.7.1 三次样条函数

光滑度 定义：若$p^{(m)}(x)$在$[a,b]$上连续，则称p具有m阶光滑度

例子：厄米特插值多项式（简单情形）具一阶光滑度

三次样条函数 增加二阶光滑度

定义 6.1 若$S(x)$在$[a,b]$上满足有：① $S(x),S'(x),S''(x)$在$[a,b]$上连续 ② $S(x)$在$[x_k,x_{k+1}]$上为三次多项式

其中有$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$，则称$S(x)$为**三次样条函数**

若再满足③ $S(x_i)=f(x_i)=y_i, i=0,1,2,\dots,n$，则称$S(x)$为$f$在$[a,b]$上的**三次样条插值函数**

2.7.2 三次样条插值多项式

定义 若S为f的三次样条插值函数$S(x)=\begin{cases} S_0(x) & x\in[x_0,x_1] \\ S_1(x) & x\in[x_1,x_2] \\ \quad\cdots & \\ S_{n-1}(x) & x\in[x_{n-1},x_n]\end{cases}$ 其中$S_k(x)$在$[x_k,x_{k+1}]$上的三次多项式：

$S_k(x)=a_k+b_kx+c_kx^2+d_kx^3 \quad x\in[x_k,x_{k+1}]$ （待定系数有 **4n** 个，需要 **4n** 个条件，才能确定S）

对于每个区间，有三次多项式。

条件 ① $S_k(x_j)=y_j,\ \ j=1,2;k=0,1,\dots,n-1$ $\quad S$连续，插值条件$2n$个 对于每个区间，有端点 2 个方程

② $S_{k-1}'(x_k-0)=S_k'(x_k+0)$，$k=1,2,\dots,n-1$ 一阶导连续，$n-1$个 去掉最左边的

③ $S_{k-1}''(x_k-0)=S_k''(x_k+0)$，$k=1,2,\dots,n-1$ 二阶导连续，$n-1$个 去掉最左边的

共有$4n-2$个，还缺少2个

边界条件 ① **第一类边界条件** $\begin{cases}S'(x_0)=f_0' \\ S'(x_n)=f_n'\end{cases}$ 给定区间端点的一阶导数值。

特别的，$f_0'=f_n'=0$时，S在端点处呈现水平状态

② **第二类边界条件** $\begin{cases}S''(x_0)=f_0'' \\ S''(x_n)=f_n''\end{cases}$ 给定区间端点的二阶导数值

特别当，$f_0''=f_n''=0$时，两端不受力，称之为自然样条，自然边界

③ **第三类边界条件** $\begin{cases}S(x_0+0)=S(x_n-0) \\ S'(x_0+0)=S'(x_n-0) \\ S''(x_0+0)=S''(x_n-0)\end{cases}$ 头尾一致，给定f周期性

至此，理论上可通过$4n$个方程求得$4n$个待定系数，但这样计算量太大

转换 因为S在$[x_k,x_{k+1}]$上为三次多项式；所以可设为两点三次厄米特插值多项式

记为$h_k=x_{k+1}-x_k$，$m_k=S_k'(x)\ \ ,k=0,1,\dots,n$ （假设已知导数值，m是未知的）

原有的解系数问题转换为求解赫尔米特插值中求导数值的问题。（$4n$个未知量→$n+1$个未知量）

有$S_k(x)=\left(1-2\frac{x-x_k}{-h_k}\right)\left(\frac{x-x_{k+1}}{-h_k}\right)^2y_k+\left(1-2\frac{x-x_{k+1}}{h_k}\right)\left(\frac{x-x_k}{h_k}\right)^2y_{k+1}+(x-x_k)\left(\frac{x-x_{k+1}}{-h_k}\right)^2m_k+(x-x_{k+1})\left(\frac{x-x_k}{h_k}\right)^2m_{k+1}$

整理得$S_k(x)=\frac{h_k+2(x-x_k)}{h_k^3}(x-x_{k+1})^2y_k+\frac{h_k-2(x-x_{k+1})}{h_k^3}(x-x_k)^2y_{k+1}+\frac{(x-x_k)(x-x_{k+1})^2}{h_k^2}\boldsymbol{m_k}+\frac{(x-x_k)^2\,(x-x_{k+1})}{h_k^2}\boldsymbol{m_{k+1}}$

如果能求出m_k，就能求出S_k，从而求出$S(x)$

为了简化该式，考虑S''，即对上式两次求导，再利用条件 ③$S_{k-1}''(x_k-0)=S_k''(x_k+0)$

可得$S_k''(x)=\frac{6x-2x_k-4x_{k+1}}{h_k^2}m_k+\frac{6x-4x_k-2x_{k+1}}{h_k^2}m_{k+1}+\frac{6(x_k+x_{k+1}-2x)}{h_k^3}(y_{k+1}-y_k)$

$\Rightarrow S_k''(x_k+0)_{右极限}=-\frac{4}{h_k}m_k-\frac{2}{h_k}m_{k+1}+\frac{6}{h_k^2}(y_{k+1}-y_k)$，在上式中取$k-1$，得

$$S''_{k-1}(x_k-0)_{\text{左极限}}=\frac{2}{h_{k-1}}m_{k-1}+\frac{4}{h_{k-1}}m_k-\frac{6}{h_{k-1}^2}(y_k-y_{k-1})$$ 两极限值应当相等

因为$S''_k(x_k+0)=S''_{k-1}(x_k-0)$,所以$\frac{2}{h_{k-1}}m_{k-1}+\frac{4}{h_{k-1}}m_k-\frac{6}{h_{k-1}^2}(y_k-y_{k-1})=-\frac{4}{h_k}m_k-\frac{2}{h_k}m_{k+1}+\frac{6}{h_k^2}(y_{k+1}-y_k)$

即$\frac{1}{h_{k-1}}m_{k-1}+2\left(\frac{1}{h_{k-1}}+\frac{1}{h_k}\right)m_k+\frac{1}{h_k}m_{k+1}=3\left(\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k^2}+\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}^2}\right)$，两端同时乘$\frac{h_{k-1}h_k}{h_{k-1}+h_k}$（化简方便）

$$\Rightarrow \frac{h_k}{h_{k-1}+h_k}m_{k-1}+2m_k+\frac{h_{k-1}}{h_{k-1}+h_k}m_{k-1}=3\left(\frac{h_{k-1}}{h_{k-1}+h_k}\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}+\frac{h_k}{h_{k-1}+h_k}\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}}\right)$$

$$\Rightarrow \lambda_k m_{k-1}+2m_k+\mu_k m_{k+1}=3\left(\mu_k\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}+\lambda_k\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}}\right)$$，其中$\lambda_k=\frac{h_k}{h_{k-1}+h_k},\mu_k=\frac{h_{k-1}}{h_{k-1}+h_k}$

再令$g_k=3\left(\mu_k\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}+\lambda_k\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}}\right)$，　$k=1,2,\dots,n$

即$\begin{bmatrix}\lambda_1 & 2 & \mu_1 & & & & \\ & \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & & \\ & & \dots & \dots & \dots & & \\ & & & & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}m_0\\ m_1\\ \dots\\ m_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}g_1\\ g_2\\ \dots\\ g_{n-1}\end{bmatrix}$　基本方程组　$n-1$行（方程个数），$n+1$列（未知量）

注意　① 求S的问题转化为$n+1$个未知量，$n-1$个方程的方程组上式称为基本方程组

② 每个方程中都有三个节点的一阶导数值。称为三转角方程组

③ 还缺2个条件

增加条件　1. 假设 $S'(x_0)=f'_0=m_0$，$S'(x_n)=f'_n=m_n$　**减少了两个未知量**，基本方程组可变为：

$$\begin{bmatrix}2 & \mu_1 & & & & \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & & \\ & \dots & \dots & \dots & & \\ & & & \lambda_{n-3} & 2 & \mu_{n-2}\\ & & & & \lambda_{n-2} & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}m_1\\ m_2\\ \dots\\ m_{n-2}\\ m_{n-1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}g_1-\lambda_1 f'_0\\ g_2\\ \dots\\ g_{n-2}\\ g_{n-1}-\mu_{n-1}f'_n\end{bmatrix}$$　对角占优阵必有唯一解

2. 假设 $S''(x_0)=f''_0$，$S''(x_n)=f''_n$　**增加了两个已知量**，在本页上式中

取 k=0，可得 $S''(x_0)=-\frac{4}{h_0}m_0-\frac{2}{h_0}m_1+\frac{6}{h_0^2}(y_1-y_0)=f''_0\Rightarrow 2m_0+m_1=3\frac{y_1-y_0}{h_0}-\frac{h_0}{2}f''_0$

取 k=n 可得：$m_{n-1}+2m_n=3\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}+\frac{h_{n-1}}{2}f''_n$，可变换基本方程组：

$$\begin{pmatrix}2 & 1 & & & & \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & & \\ & \dots & \dots & \dots & & \\ & & & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1}\\ & & & & 1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}m_0\\ m_1\\ \dots\\ m_{n-1}\\ m_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\frac{y_1-y_0}{h_0}-\frac{h_0}{2}f''_0\\ g_1\\ \dots\\ g_{n-1}\\ 3\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}+\frac{h_{n-1}}{2}f''_n\end{pmatrix}$$

3. $S''(x_0+0)=S''(x_n-0)$，$S'(x_0+0)=S'(x_n-0)$　$m_0=m_n$ 可得

$$\begin{pmatrix}2 & \mu_1 & 0 & \dots & \dots & \lambda_1\\ \lambda_2 & 2 & & & & \\ & & \dots & \dots & & \\ & & & & 2 & \mu_{n-1}\\ \mu_0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}m_1\\ m_2\\ \dots\\ m_{n-1}\\ m_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}g_1\\ g_2\\ \dots\\ g_{n-1}\\ g_n\end{pmatrix}$$

其中原有$\lambda_1 m_0+2m_1+\mu_1 m_2=g_1$改为$2m_1+\mu_1 m_2+\lambda_1 m_n=g_1$

注意　上述这三种情况，**系数矩阵严格对角占优**，故可逆，即方程组由唯一解

x_k	1	2	4	5
f_k	1	3	4	2

例题 1. 设有 $\begin{array}{c|cccc} x_k & 1 & 2 & 4 & 5 \\ f_k & 1 & 3 & 4 & 2 \end{array}$ 求满足自然边界条件$S''(x_0)=S''(x_n)=0$的三次样条插值$S(x)$，计算$f(3)$的近似值

① 计算$h_k(k=0,1,2),\lambda_k(k=1,2),\mu_k(k=0,1,2)$ 有结果：

k	h_k	λ_k	μ_k	g_k
0	1			6
1	2	2/3	1/3	9/2
2	1	1/3	2/3	−7/2
3				−6

② 求m_0,m_1,m_2,m_3第二类边界条件。$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & \\ 2/3 & 2 & 1/3 & \\ & 1/3 & 2 & 2/3 \\ & & 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix}$ 解得$\begin{pmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 7/8 \\ 7/4 \\ -5/4 \\ -19/8 \end{pmatrix}$

③ 根据$S_k(x)$计算：$S(x)=\begin{cases} -\frac{1}{8}x^3+\frac{3}{8}x^2+\frac{7}{4}x-1 & 1\le x\le 2 \\ -\frac{1}{8}x^3+\frac{3}{8}x^2+\frac{7}{4}x-1 & 2\le x\le 4 \\ \frac{3}{8}x^3-\frac{45}{8}x^2+\frac{103}{4}x-33 & 4\le x\le 5 \end{cases}$ 从而$f(3)=S(3)=\frac{17}{4}$

2.7.3 三次样条插值函数的收敛性

描述 一般地，分段插值不光滑，高次插值发生震荡，故$y=P(x)$上有使$|P''(x)|$很大的点，而样条插值函数不会

定理 6.1 设$f\in C^2[a,b]$，$S(x)$为 f 的三次样条插值函数，$h_i=x_{i+1}-x_i$，$h=\max\limits_{0\le i\le n-1} h_i$，$\delta=\min\limits_{0\le i\le n-1} h_i$

当$\frac{h}{\delta}\le c<+\infty$时有 $S(x)\rightrightarrows f(x)$，$S'(x)\rightrightarrows f'(x)$ 表示无限逼近

2.8 数据拟合的最小二乘法

2.8.1 最小二乘法的基本概念

设有实验数据：(x_i, y_i)，$i = 0,1,2,\dots,m$ 带有**测量误差**，用插值法得到的表达式保留了这些误差，不符合原有规律

拟合 寻找函数$S(x)$,使其曲线不必经过已有实验点，但尽可能接近每个实验点。**$S(x)$称为拟合函数**。

偏差 称 $\delta_i = S(x_i) - y_i$ 为$S(x)$在x_i处的**偏差**(偏离大小) 误差服从正态分布

注：不要求$\delta_i = 0$，但希望**δ_i尽可能地小**。

评价标准 考虑$\sum_{i=0}^{m}|\delta_i|^2 = \sum_{i=0}^{m}(S(x_i) - y_i)^2$尽可能小（易处理）或者 $\sum_{i=0}^{m}\omega_i\delta_i^2$尽可能小，其中**$\omega$为权函数**。

绝对值约束（一范数）因为有正有负（稀疏，不好解），平方约束（二范数）可对大偏差更敏感（正则项）（好解，解释性不高），最大值约束一般不用。加权可针对不同数据点做不同处理。

最小二乘法 考虑**拟合函数$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots a_n\varphi_n(x)$**的结构可以是多项式，三角函数或其他

在函数基$\Phi = \mathrm{Span}\{\varphi_0(x), \varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)\}$中求函数$\boldsymbol{S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^*\varphi_j(x)}$ $n \le m$ 使得

$$\sum_{i=0}^{m}\omega_i(S^*(x_i) - y_i)^2 = \min_{S\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\omega_i(S^*(x_i) - y_i)^2$$

按该条件求$S^*(x)$的方法称为数据拟合的最小二乘法,简称最小二乘法,并称$S^*(x)$为最小二乘解

两个问题 ① 如何确定S^*基函数的构造：通过观察数据点的分布情况

② 如何求解S^*系数：解方程组

2.8.2 法方程组——先求 S*

问题 设$S(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x)$，记原方程为 （误差的加权平方和）

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

求最小二乘解，即求函数$\Psi(a_0, a_1, \dots, a_n)$的**极小值点**$(a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*)$

方法 取极值的必要条件 $\frac{\partial\Psi}{\partial a_k} = 0, (k = 0,1,2\dots, n) \Rightarrow 2\sum_{i=0}^{m}\omega_i\left(\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x_i) - y_i\right)\varphi_k(x_i) = 0 \ \ (k = 0, \dots, n)$

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{n}\left(\sum_{i=0}^{m}\boldsymbol{\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)}\right)a_j = \sum_{i=0}^{m}\boldsymbol{\omega_i y_i\varphi_k(x_i)} \quad (k = 0,1,\dots,n) \ \text{法方程组}$$

记作$\sum_{j=0}^{m}(\varphi_j, \varphi_k)\,a_j = (f, \varphi_k)$ $(k = 0,1,\dots,n)$ 称其为**函数系$\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$**在离散点$x_0, x_1, \dots, x_n$上的**法方程组**

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \dots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \dots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \dots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f,\varphi_0) \\ (f,\varphi_1) \\ \dots \\ (f,\varphi_2) \end{bmatrix}$$

其中：$\boldsymbol{(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)}$ $\boldsymbol{(f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k(x_i) = (\varphi_k, f)}$

注意： ① 由于$\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$是$\Phi = \mathrm{Span}\{\varphi_0(x), \varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)\}$的基函数，所以线性无关，可证明法方程组存在唯一解析解：$a_j = a_j^*$ $(j = 0,1,2,\dots,n)$ 此时，$S^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^*\varphi_j(x)$必为最小二乘解。

② 称$\|\delta_i\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m}(S^*(x_i) - y_i)^2$ 为最小二乘解的平方误差

称$\|\delta_i\|_2 = \sqrt{\sum_{i=0}^{m}(S^*(x_i) - y_i)^2}$ 为均方差 可以直接导出：$\boldsymbol{\|\delta_i\|_2^2 = \left|\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_j, f)\right|}$

③ 特别取$S(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$，则$(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^k x_i^j=\boldsymbol{\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{k+j}}$

$$(\varphi_k,f)=\boldsymbol{\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^k y_i}$$

相应地法方程组为：

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

最小二乘解$S^*(x)=a_0^*+a_1^*x+\cdots+a_n^*x^n=\sum_{j=0}^{n}a_j^*x^j$ 称为最小二乘多项式

④ 常用的**一次和二次**的应熟练。

如一次最小二乘多项式$S^*(x)=a_0+a_1x$，其法方程组为

$$\begin{bmatrix}\sum_{i=0}^{m}\omega_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i\\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i y_i\end{bmatrix}$$

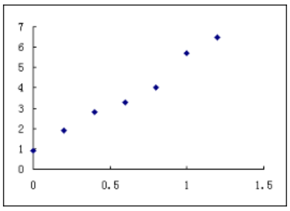
⑤ 基函数的选取通过描点，**观察获得**。

常用的函数图形包括三角函数、指数函数、对数函数和幂函数。

例题 1. 已知

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

，求x与y的经验公式。



① 做草图，选型：描点如图，选用一次多项式作拟合函数，取$\varphi_0=1,\varphi_1=x$

② $n=1,m=6,\omega_i=1$（无权重）

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i=7,\quad(\varphi_0,\varphi_1)=(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i x_i=4.2$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2=3.64$$

$$(\varphi_0,f)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i y_i=25.1,\ (\varphi_1,f)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i y_i=20.18$$

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

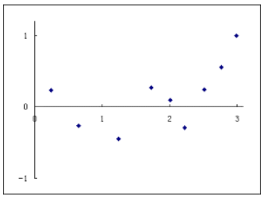
③ 解方程组得到$a_0=0.843$，$a_1=4.57$，从而$p_1(x)=0.843+4.57x$

平方误差$\|\delta_i\|_2^2=\left|\sum_{i=0}^{6}\omega_i y_i^2-\sum_{k=0}^{1}a_k(f,\varphi_k)\right|=0.5081$

2. 已知有

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	0.9	0.9

求x与y的经验公式。



① 描点选型，$S(x)=a\ln x+b\cos x+ce^x$，取$\varphi_0(x)=a\ln x,\varphi_1(x)=b\cos x,\varphi_2(x)=ce^x$

② $n=2,m=9$

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i(\ln x_i)^2=6.5651\qquad(\varphi_0,\varphi_1)=(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i\ln x_i\cos x_i=-5.1453$$

$$(\varphi_0,\varphi_2)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i\ln x_i\,e^{x_i}=59.407\quad(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i(\cos x_i)^2=4.8457$$

$$(\varphi_1,\varphi_2)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i\cos x_i\,e^{x_i}=-45.969\quad(\varphi_2,\varphi_2)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i e^{2x_i}=934.96$$

$$(\varphi_0,f)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i(\ln x_i)y_i=1.4481\qquad(\varphi_1,f)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i(\cos x_i)y_i=-2.0891$$

$(\varphi_2,f)=\sum_{i=0}^{9}\omega_i(e^{x_i})y_i=2.4619$ 法方程组为$\begin{bmatrix}6.5651 & -5.1453 & 59.407\\-5.1453 & 4.8457 & -45.969\\59.407 & -45.969 & 934.96\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\\c\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.4481\\-2.0891\\24.619\end{bmatrix}$

使用高斯列主元素消去法得：$a=-0.99480,b=-1.1957,c=0.030752$

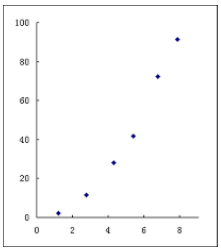
于是$S(x) = -0.9948\ln x - 1.1957\cos x + 0.030752\, e^{x}$

③ 平方误差

$$\|\delta_i\|_2^2 = \left|\sum_{i=0}^{9}\omega_i y_i^2 - a(f,\varphi_0) - b(f,\varphi_1) - c(f,\varphi_2)\right| = 2.6679 - a \times 1.4481 + b \times 2.0891 - c \times 24.619 = 0.86314$$

上述例子中拟合函数均为待定参数的线性函数，称为**线性拟合函数**。

也有例外——**非线性拟合函数**，如$S(x) = be^{ax}$或$S(x) = ax^b$等



3. 已知有

x_i	1.2	2.8	4.3	5.4	6.8	7.9
y_i	2.1	11.5	28.1	41.9	72.3	91.4

① 描点绘图，取幂函数$g(x) = ax^b$.直接求解不易，因为$\frac{\partial\psi}{\partial a_k} = 0$，不是线性方程组。

② 转换，两边**取对数**$y = ax^b \Rightarrow \lg y = \lg a + b\lg x \Rightarrow w = c + bz$

$(x_i,\ y_i) \Rightarrow (z_i, w_i) = (\lg x_i, \lg y_i)$，可得新数据表：

z_i	0.07918	0.44716	0.63347	0.73239	0.83251	0.89763
w_i	0.32222	1.06070	1.44871	1.62221	1.85914	1.96095

解出c, b，在转换为$a = 10^c$

2.8.3 利用正交多项式作最小二乘拟合

当法方程组阶数较高时，不易求解，且常为病态的，为避免此情况，常取**正交多项式**做最小二乘拟合。(正交可去相关性)

想法 若$\{\varphi_i\}_{i=0}^n$满足$(\varphi_i, \varphi_j) = \begin{cases} 0 & j \neq i \\ A_i & j = i \end{cases}$，则法方程组化为 （基与基之间没有任何干扰）

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & & & \\ & (\varphi_1,\varphi_1) & & \\ & & \cdots & \\ & & & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f,\varphi_0) \\ (f,\varphi_1) \\ \cdots \\ (f,\varphi_n) \end{bmatrix} \Rightarrow a_i = \frac{(f,\varphi_i)}{(\varphi_i,\varphi_i)}, i = 0,1,2,\dots,n$$

正交多项式

定义 7.1 设给定点$x_0, x_1, \dots, x_n$ 及各点的权系数$\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n$，若多项式族$\{P_0, P_1, \dots P_n\}$满足：

$$(P_k, P_j) = \sum_{i=0}^{n}\omega_i P_k(x_i) P_j(x_i) = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ A_k > 0 & j = k \end{cases}$$

则称$\{P_i\}$为关于点集$\{x_i\}$的带权$\{\omega_i\}$正交的多项式族。其中P_i为i次多项式。

性质 ① 正交多项式族，线性无关

② 每一正交多项式族$\{p_i\}$ 有如下递推关系：

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = x - \alpha_0 \\ \dots \\ P_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)P_k(x) - \beta_{k-1}P_{k-1}(x) \end{cases} \qquad \alpha_k = \frac{(xP_k, P_k)}{(P_k, P_k)}\ k = 0,1,2,\dots,n \qquad \beta_{k-1} = \frac{(P_k, P_k)}{(P_{k-1}, P_{k-1})}\ k = 1,2,\dots,n$$

关于正交多项式族的最小二乘解

推导 作拟合多项式$g_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k P_k(x)$，$\{P_i\}$为正交多项式族

其法方程组$\sum_{j=0}^{n}(\varphi_j, \varphi_k)a_j = (f, \varphi_k)$化为$(P_k, P_k)a_k = (f, P_k)$

即$\alpha_k = \frac{(xP_k,P_k)}{(P_k,P_k)}\ k = 0,1,2,\dots,n \Rightarrow g_n(x) = \sum_{k=0}^{n}\frac{(f,P_k)}{(P_k,P_k)} P_k(x)$

矛盾方程组 设$A = (a_{ij})_{m\times n}, m > n, x = (x_1, x_2, \dots, x_n), b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$，考虑$Ax = b$，即

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}$$

由代数知识知,若秩(A, b)=秩(A),则方程组有解,若秩(A, b) ≠秩(A),则**方程组无解**,此时称为**矛盾方程组**

矛盾方程组的解即**最小二乘解**，是指在**均方误差极小意义下的解**，即$\min\|Ax - b\|_2^2$

我们已经知道，用直线$p(x)=a_0+a_1x$拟合给定数据$(x_i,y_i),i=1,2,\dots,m$ 把数据代入直线方程得

$$\begin{cases} a_0+a_1x_1=y_1 \\ a_0+a_1x_2=y_2 \\ \dots \\ a_0+a_1x_m=y_m \end{cases} \quad or \quad \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix} \quad 令\ A=\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}, a=\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}, y=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix}，则Aa=y$$

考察方程组$A^TAa=A^Ty$，即$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix} m & \sum\limits_{i=1}^{m} x_i \\ \sum\limits_{i=1}^{m} x_i & \sum\limits_{i=1}^{m} x_i^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum\limits_{i=1}^{m} y_i \\ \sum\limits_{i=1}^{m} x_iy_i \end{bmatrix}$ 该式表明$A^TAa=A^Ty$的解$a=(a_0,a_1)^T$ 正是线性拟合中法方程的解，即为使$Q(a,b)=\sum\limits_{i=1}^{m}(p(x_i)-y_i)^2=\sum\limits_{i=1}^{m}(a_0+a_1x_i-y_i)^2$最小的解。

上述极小问题可以表述为$\min\|Aa-y\|_2^2$，其又是方程$Aa=y$的最小二乘解

定义 设$A=(a_{ij})_{m\times n}, m>n$，方程$A^TAx=A^Tb$称为矛盾方程组原问题$Ax=b$的**法方程**。

定理 ① 若秩$(A)=n$，则法方程恒有解。

② x 是$\min\|Ax-b\|_2^2$的解，当且仅当 x 是法方程的解。 $(A^Ta,b)=(a,Ab)$

注意 **定理告诉我们，求解拟合曲线的极小值问题与求解矛盾方程组的法方程等价。因此，求解拟合曲线的极小问题可以转化为求解法方程：$A^TAx=A^Tb$**

对于离散数据: $(x_i,y_i),i=1,2,\dots,m$，用 n 次多项式来拟合曲线。

设 $p(x)=a_0+a_1x+\dots+a_nx^n$，求解极小值问题

$$minQ(a_0,a_1,\dots,a_n)=\min\sum_{i=1}^{m}(p(x_i)-y_i)^2=\min\sum_{i=1}^{m}(a_0+a_1x+\dots+a_nx^n-y_i)^2$$

等价于求解矛盾方程组$Aa=y$的极小问题：$\min\|Aa-y\|_2^2=\min\sum_{i=1}^{m}(a_0+a_1x+\dots+a_nx^n-y_i)^2$

$$A=\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \dots & x_m^n \end{bmatrix}, a=\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix}, y=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix}$$，因此求$a_0,a_1,\dots,a_n$就是**求法方程$A^TAa=A^Ty$**

例题 1. 用给定数据，求经验公式 $f(x)=a+bx^3$

x	-3	-2	-1	2	4
y	14.3	8.3	4.7	8.3	22.7

约定$\sum=\sum_{i=1}^{5}$，直接计算得$\sum x_i^3=36,\sum x_i^6=4954,\sum y_i=58.3,\sum x_i^3y_i=1062.$

法方程$A^TA\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}=A^Ty$，有$A^TA=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1^3 & x_2^3 & x_3^3 & x_4^3 & x_5^3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & x_1^3 \\ 1 & x_2^3 \\ 1 & x_3^3 \\ 1 & x_4^3 \\ 1 & x_5^3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^3 & \sum x_i^6 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5 & 36 \\ 36 & 4954 \end{bmatrix}$

$$有A^Ty=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1^3 & x_2^3 & x_3^3 & x_4^3 & x_5^3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i^3y_i \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 58.3 \\ 1062 \end{bmatrix}$$

于是有$\begin{bmatrix} 5 & 36 \\ 36 & 4954 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 58.3 \\ 1062 \end{bmatrix}\Rightarrow\begin{cases} a=10.675 \\ b=0.137 \end{cases}$，则$f(x)=10.675+0.137x^3$