

第二章 插值法与最小二乘法

2.1 函数逼近问题与插值法

设有 $y = f(x)$, 其值是通过实验或观测得到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) 和 **拟合**

2.1.1 插值问题

假设 $y = f(x)$ 在点 x_0, x_1, x_2, \dots 处有函数值分别为 $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \dots$, 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 $y = f(x) \approx p(x) \quad \forall x \in [a, b]$

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
 - 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 n 的多项式: $p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$
则有满足条件: $p_n(x_i) = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 + \dots + a_nx_i^n, i = 0, 1, 2, \dots, n$

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

$$V = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{0 \leq j < i \leq n} (x_i - x_j) \neq 0, \text{ 由克莱姆法则知方程组有唯一解, 故插值多项式唯一}$$

- 注意**
- ① $n + 1$ 个插值节点可构造 n 次插值多项式
 - ② 上述方法计算量太大且舍入误差很大, 不便计算

2.1.3 插值基函数与拉格朗日插值

一、简单情形

(1) $n = 1$ 时. 设 $y_i = f(x_i) \quad i = 0, 1$, 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) $n = 2$ 时, 设 $y_i = f(x_i) \quad i = 0, 1, 2$

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 $(x - x_{\text{本项}})$ ，分母为分子代入 $x_{\text{本项}}$ 时的结果。

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

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 $p_n(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x)$ 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 $R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x)$

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

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 $R_n(x) = K(x)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) = K(x)\omega_{n+1}(x)$ 如此我们做一个辅助函数： $F(t) = f(t) - p_n(t) - K(x)\omega_{n+1}(t)$ 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 $x_0 - x_n$ 与 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。 $F^{(n+1)}(\xi) = 0 \Rightarrow f^{(n+1)}(\xi) - K(x)(n+1)! \Rightarrow K(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$

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 如果 $f^{(n+1)}(x)$ 有界： $|f^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$ ，则有 $|R_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)|$

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 $f(x) = \frac{1}{x}$ 的二次拉格朗日插值多项式。并利用其求 $f(3)$ 的值。

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

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

可计算得： $L_2(x) = \frac{1}{22}x^2 - \frac{35}{88}x + \frac{49}{44}$ ，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 $f(x) = \frac{1}{x}$ ，故有 $f'(x) = -\frac{1}{x^2}, f''(x) = \frac{2}{x^3}, f'''(x) = -\frac{6}{x^4}$ ，因此有插值余项为 $R_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{3!}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) = -\frac{1}{\xi^4}(x-2)(x-2.75)(x-4), \xi \in (2, 4)$ 有 $\frac{1}{\xi^4}$ 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

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

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

定义

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

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: $1, (x-x_0), (x-x_0)(x-x_1) \dots$ 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， $f(x_0, x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=0}^n f_j \left(\prod_{i=0, i \neq j}^n \frac{1}{x_j-x_i} \right)$

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，即为上式

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

性质 2.2

插上具有对称性，**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: $f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$

性质 2.4

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

差商的计算 表格法: 差商表

由任意两个值可算到下一阶

(后题) 3. $f(x) = x^6 + 5x^4 + 3$,

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

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

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

例题 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
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				

差商表为：

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 阶均差最多有 $n - i + 1$ 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： $L_n(x) = L_{n-1}(x) + a_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) =$

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

公式 牛顿插值多项式

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

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

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

$$\widetilde{R}_n(x) = f[x_0, x_1, \dots, x_n] \omega_{n+1}(x) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x), \xi \in (a, b) \Rightarrow f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^n(\xi)}{n!}, \xi \in (a, b)$$

例题： 1. 有 $f(x) = \ln(x)$ ，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

	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	
计算差商表：	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 $R_3(0.596) = 0.03123(x - 0.4)(x - 0.55)(x - 0.65)(x - 0.8) \approx 3.10256 \times 10^{-6}$

② $N_3(0.596) = 0.57815 + 1.186(x - 0.55) + 0.3589(x - 0.55)(x - 0.65) + 0.21295(x - 0.55)(x - 0.65)(x - 0.8) \approx 0.631922$
 $R_3(0.596) = 0.03142(x - 0.55)(x - 0.65)(x - 0.8)(x - 0.9) \approx 4.8415 \times 10^{-6}$

2. 继续计算 $\ln(0.955)$

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 $\ln(0.955) \approx 1.106935365$, $|R_3| \leq 7.76323 \times 10^{-6}$

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

x_k	f_k	一阶差分	二阶差分	三阶差分	四阶差分
x_0	f_0	Δf_0			
x_1	f_1	Δf_1	$\Delta^2 f_0$		
x_2	f_2	Δf_2	$\Delta^2 f_1$	$\Delta^3 f_0$	
x_3	f_3	Δf_3	$\Delta^2 f_2$	$\Delta^3 f_1$	$\Delta^4 f_0$
x_4	f_4	Δf_4			

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

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

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

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

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。

f_k	Δf_k	$\Delta^2 f_k$	$\Delta^3 f_k$	$\Delta^4 f_k$	$\Delta^5 f_k$
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

有差分表: , 且可知 $h=0.1$

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

$$\begin{aligned} N_4(x_0 + th) &= f_0 + \Delta f_0 t + \frac{\Delta^2 f_0}{2!}t(t-1) + \frac{\Delta^3 f_0}{3!}t(t-1)(t-2) + \frac{\Delta^4 f_0}{4!}t(t-1)(t-2)(t-3) \\ &= f_0 + t \left(\Delta f_0 + (t-1) \left(\frac{\Delta^2 f_0}{2!} + (t-2) \left(\frac{\Delta^3 f_0}{3!} + (t-3) \frac{\Delta^4 f_0}{4!} \right) \right) \right) \\ &= 1 + 0.48 \left(-0.005 - 0.52 \left(-\frac{0.00993}{2} - 1.52 \left(\frac{0.00013}{6} - 2.52 \frac{0.00012}{24} \right) \right) \right) \approx 0.99884 \end{aligned}$$

$$|R_4(0.048)| \leq \left| \frac{M_5}{5!}t(t-1)(t-2)(t-3)(t-4) \right| h^5 = 1.5845 \times 10^{-7}, \text{ 其中 } M_5 = \max |(\cos x)'| = |\sin 0.6| = 0.565$$

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

$$N_4(x_6 + th) = 0.84405$$

$$|R_4(0.566)| \leq \left| \frac{M_5}{5!}t(t+1)(t+2)(t+3)(t+4) \right| h^5 = 1.7064 \times 10^{-7}, \text{ 其中 } M_5 = \max |(\cos x)'| = |\sin 0.6| = 0.565$$

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 $\xi, x \in [x_k, x_{k+1}]$, ξ 依赖于 x

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

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

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

- 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： $\begin{cases} H(x_i) = y_i \\ H^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)} \end{cases} \quad (k = 1, 2, \dots, m; i = 0, 1, \dots, n)$

含义 ① 该问题称为 hermite 插值， $H(x)$ 与 $f(x)$ 的图形在 $n+1$ 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 $\leq 2n+1$ 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： $\begin{matrix} x & | & x_0 & x_1 \\ f(x) & | & y_0 & y_1 \\ f'(x) & | & y'_0 & y'_1 \end{matrix}$ ，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 $x = x_0$ ，需要满足 $y = y_0$ ，以此类推）

$$\alpha_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad \beta_i(x_j) = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad \alpha'_i(x_j) = \alpha'_j(x_i) = 0 \quad \beta_i(x_i) = \beta_i(x_j) = 0$$

$$\begin{cases} \alpha_0(x_0) = 1 \\ \alpha_0(x_1) = 0 \\ \alpha'_0(x_0) = 0 \\ \alpha'_0(x_1) = 0 \end{cases} \begin{cases} \alpha_1(x_0) = 0 \\ \alpha_1(x_1) = 1 \\ \alpha'_1(x_0) = 0 \\ \alpha'_1(x_1) = 0 \end{cases} \begin{cases} \beta_0(x_0) = 0 \\ \beta_0(x_1) = 0 \\ \beta'_0(x_0) = 1 \\ \beta'_0(x_1) = 0 \end{cases} \begin{cases} \beta_1(x_0) = 0 \\ \beta_1(x_1) = 0 \\ \beta'_1(x_0) = 0 \\ \beta'_1(x_1) = 1 \end{cases}$$

即 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 a ，只要解 a, b 就行了）

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

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

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

多项式 $H_3(x) = y_0\left(1 - 2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 + y_1\left(1 - 2\frac{x-x_1}{x_1-x_0}\right)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 + y'_0(x-x_0)\left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 + y'_1(x-x_1)\left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2$

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：

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

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 $R_3(x) = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_0)^2(x-x_1)^2 \quad \xi \in (x_0, x_1)$

例题 1. 已知有 $\begin{matrix} x & 1 & 2 \\ f_i & 2 & 3 \\ f'_i & 0 & -1 \end{matrix}$, 求 $H_3(x)$

有 $x_0 = 1, x_1 = 2, y_0 = 2, y_1 = 3, y'_0 = 0, y'_1 = -1$

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

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

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

2.6.2 分段三次厄米特插值

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

$$\text{则有 } H_h^{(k)}(x) = \sum_{j=k}^{k+1} (y_j \alpha_j(x) + y'_j \beta_j(x)) = y_k \alpha_k(x) + y'_k \beta_k(x) + y_{k+1} \alpha_{k+1}(x) + y'_{k+1} \beta_{k+1}(x) \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

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

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

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

多项式 则 $H_n(x) = \sum_{k=0}^n (y_k \overline{\alpha}_k(x) + y'_k \overline{\beta}_k(x)) = \sum_{k=0}^n (y_k \alpha_k(x) + y'_k \beta_k(x))$

例题 1. 设有 $\begin{matrix} x_i & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ f_i & 1 & 0.5 & 0.2 & 0.1 & 0.05882 & 0.03846 \\ f'_i & 0 & -0.5 & -0.16 & -0.06 & -0.02768 & -0.01479 \end{matrix}$ 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, $x_0 = 1, x_1 = 2, y_0 = 0.5, y_1 = 0.2, y'_0 = -0.5, y'_1 = -0.16$

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

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

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

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

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

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

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 $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ ，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 $S(x) = \begin{cases} S_0(x) & x \in [x_0, x_1] \\ S_1(x) & x \in [x_1, x_2] \\ \dots \\ S_{n-1}(x) & x \in [x_{n-1}, x_n] \end{cases}$ 其中 $S_k(x)$ 在 $[x_k, x_{k+1}]$ 上的三次多项式：

$S_k(x) = a_k + b_k x + c_k x^2 + d_k x^3 \quad x \in [x_k, x_{k+1}]$ （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 $S_k(x_j) = y_j, j = 1, 2; k = 0, 1, \dots, n-1$ 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 $\rightarrow n+1$ 个未知量）

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

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

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 $S''_{k-1}(x_k - 0) = S''_k(x_k + 0)$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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：

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

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

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

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

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

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，即方程组有唯一解

例题 1. 设有 $\begin{array}{c|cccc} x_k & 1 & 2 & 4 & 5 \\ \hline f_k & 1 & 3 & 4 & 2 \end{array}$ 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

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

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

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: $S(x) = \begin{cases} -\frac{1}{8}x^3 + \frac{3}{8}x^2 + \frac{7}{4}x - 1 & 1 \leq x \leq 2 \\ -\frac{1}{8}x^3 + \frac{3}{8}x^2 + \frac{7}{4}x - 1 & 2 \leq x \leq 4 \\ \frac{3}{8}x^3 - \frac{45}{8}x^2 + \frac{103}{4}x - 33 & 4 \leq x \leq 5 \end{cases}$ 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, $h_i = x_{i+1} - x_i$, $h = \max_{0 \leq i \leq n-1} h_i$, $\delta = \min_{0 \leq i \leq n-1} h_i$

当 $\frac{h}{\delta} \leq c < +\infty$ 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 ω 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 S 的结构可以是多项式, 三角函数或其他

在函数类 $\Phi = \text{Span}\{\varphi_0(x), \varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)\}$ 中求函数 $S^*(x) = \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j(x)$ $n \leq m$ 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

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

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

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

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

记作 $\sum_{j=0}^n (\varphi_j, \varphi_k) a_j = (f, \varphi_k) \quad (k = 0, 1, \dots, n)$ 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, 即

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

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

注意: ① 由于 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 是 $\Phi = \text{Span}\{\varphi_0(x), \varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)\}$ 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: $\|\delta_i\|_2^2 = \left| \sum_{i=0}^m \omega_i y_i^2 - \sum_{j=0}^n a_j^* (\varphi_j, f) \right|$

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

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

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 $\begin{matrix} x_i & 0.0 & 0.2 & 0.4 & 0.6 & 0.8 & 1.0 & 1.2 \\ y_i & 0.9 & 1.9 & 2.8 & 3.3 & 4.0 & 5.7 & 6.5 \end{matrix}$, 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)

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

$$(\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=0}^6 \omega_i x_i^2 = 3.64$$

$$(\varphi_0, f) = \sum_{i=0}^6 \omega_i y_i = 25.1, \quad (\varphi_1, f) = \sum_{i=0}^6 \omega_i x_i y_i = 20.18 \quad \text{法方程组为} \quad \begin{bmatrix} 7 & 4.2 \\ 4.2 & 3.64 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25.1 \\ 20.18 \end{bmatrix}$$

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

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

2. 已知有 $\begin{matrix} x_i & 0.24 & 0.65 & 0.95 & 1.24 & 1.73 & 2.01 & 2.23 & 2.52 & 2.77 & 2.99 \\ y_i & 0.23 & -0.26 & -1.10 & -0.45 & 0.27 & 0.10 & -0.29 & 0.24 & 0.56 & 1.00 \\ \omega_i & 1 & 1 & 0.8 & 0.9 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0.9 & 0.9 \end{matrix}$ 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 $n = 2, m = 9$

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

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

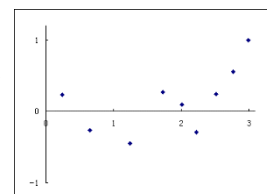
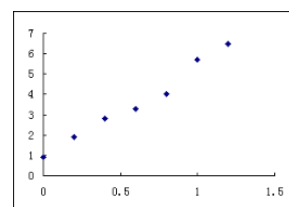
$$(\varphi_1, \varphi_2) = \sum_{i=0}^9 \omega_i \cos x_i e^{x_i} = -45.969 \quad (\varphi_2, \varphi_2) = \sum_{i=0}^9 \omega_i e^{2x_i} = 934.96$$

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

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

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

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



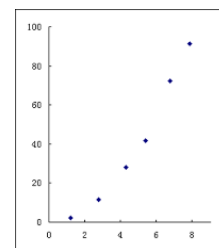
③ 平方误差

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

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 $\begin{array}{c|cccccc} x_i & 1.2 & 2.8 & 4.3 & 5.4 & 6.8 & 7.9 \\ \hline y_i & 2.1 & 11.5 & 28.1 & 41.9 & 72.3 & 91.4 \end{array}$



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：

解出 c, b ，在转换为 $a = 10^c$

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

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）

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

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：

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

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：

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

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 $(P_k, P_k) a_k = (f, P_k)$

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

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 $(A, b) = \text{秩}(A)$ ，则方程组有解；若秩 $(A, b) \neq \text{秩}(A)$ ，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

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_1 = y_1 \\ a_0 + a_1x_2 = y_2 \\ \dots \\ a_0 + a_1x_m = y_m \end{cases} \quad or \quad \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix}$$

$$\text{令 } A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_m \end{bmatrix}, a = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{bmatrix}, \text{ 则可得 } Aa = y$$

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

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{bmatrix} \quad \text{该式表明 } A^T Aa = A^T y \text{ 的解 } a = (a_0, a_1)^T \text{ 正是线性拟合中法方程}$$

的解, 即使得 $Q(a, b) = \sum_{i=1}^m (p(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i - y_i)^2$ 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 $A^T Ax = A^T b$ 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。 $(A^T a, b) = (a, Ab)$

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: $A^T Ax = A^T b$

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

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

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

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

例题

1. 用给定数据, 求经验公式 $f(x) = a + bx^3$ $x = -3 \quad -2 \quad -1 \quad 2 \quad 4$
 $y = 14.3 \quad 8.3 \quad 4.7 \quad 8.3 \quad 22.7$

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

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

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

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