第5章 插 值 与 逼 近

5.1 引言

- 插值方法是数值分析中的一个简单而又重要的方法，利用该方法可以通过函数在有限个点处的函数值求出其近似函数，进而估算出函数在其它点处的值
- 插值方法在离散数据处理、函数的近似表示、数值微分、数值积分、曲线与曲面的生成等方面有重要的应用
- 本节主要介绍插值方法中的多项式插值方法

5.1.1 插值问题

设已知函数在$\boldsymbol{R}$上$\boldsymbol{n}$个互异点处的函数值和导数值

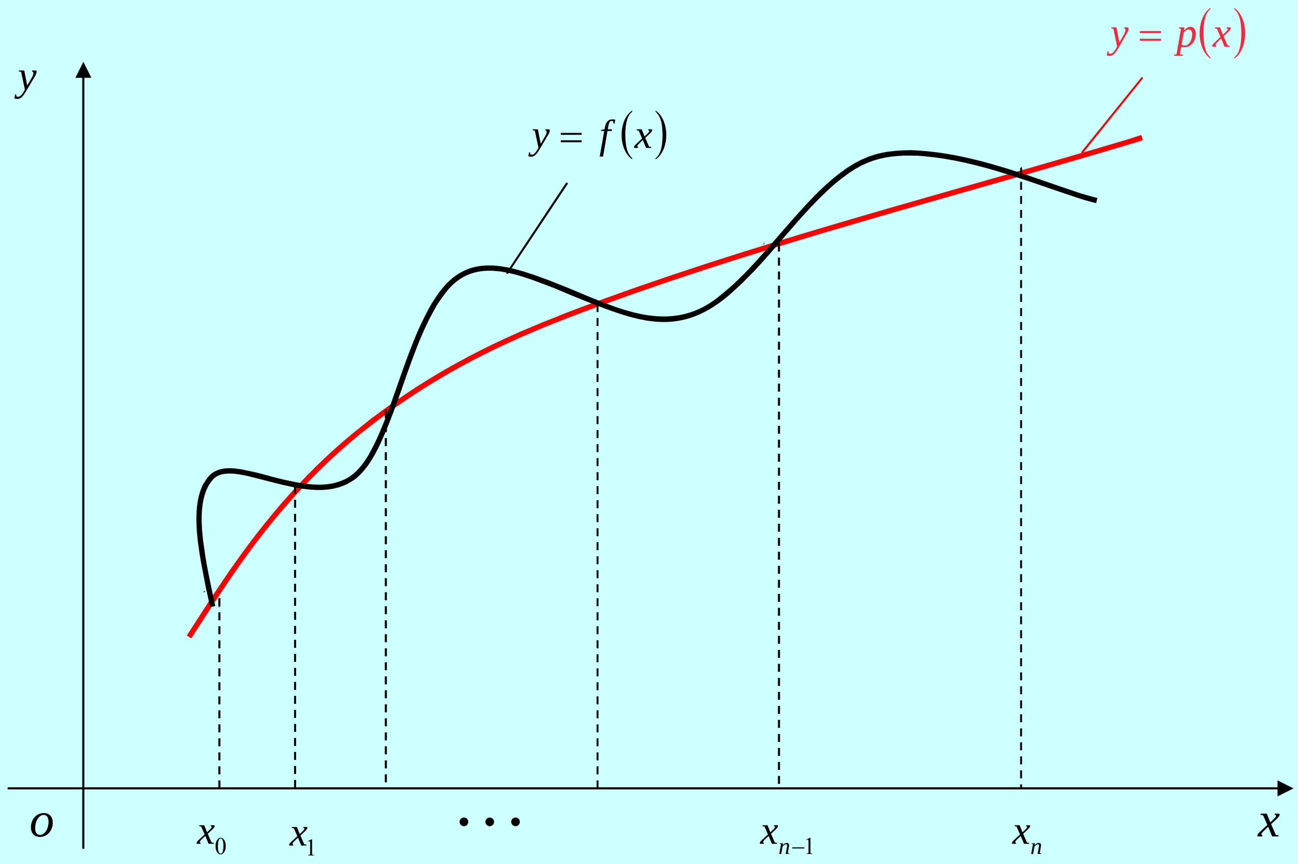
$$
\begin{aligned}
&f(x_1),\ f'(x_1),\cdots,\ f^{(\alpha_1-1)}(x_1);\\
&f(x_2),\ f'(x_2),\cdots,\ f^{(\alpha_2-1)}(x_2);\\
&\cdots\quad\cdots\\
&f(x_n),\ f'(x_n),\cdots,\ f^{(\alpha_n-1)}(x_n),
\end{aligned}
\tag{5-1}
$$

$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i$ 个条件

构造一个简单易算的函数，使其满足下述条件：

$$
p^{(\mu_i)}(x_i)=f^{(\mu_i)}(x_i),\quad i=1,2,\cdots,n;\quad \mu_i=0,1,\cdots,\alpha_i-1。
\tag{5-2}
$$

以上问题称作插值问题, $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 称为插值节点，$p(x)$ 称为 $f(x)$ 关于节点组 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的插值函数,（5-2）称为插值条件。


$y = p(x)$
y
$y = f(x)$
o
x_0
x_1
$\cdots$
x_{n-1}
x_n
x

在插值法中需考虑的问题：

- 简单函数类的选取问题
- 存在唯一性问题
- 余项估计问题
- 收敛性问题

如代数多项式，三角多项式，分段多项式，有理函数，样条函数等

5.1.2 插值函数的存在唯一性，插值基函数

假设 $f(x)$ 是定义在区间 $[a,b]$ 上的未知或复杂函数 $f(x)$，但已知该函数在互异点 $a \le x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$ 处的函数值 $f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_n)$

目标是在一个简单函数类 $S = \mathrm{span}(\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n) \subset C[a,b]$ 中找一个函数 $p(x) = \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x)$ ，使之满足条件

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 1, \cdots, n \qquad \textbf{(5-3)}$$

即在给定点 x_i 处，$p(x)$ 与 $f(x)$ 是相吻合的。

插值问题等价于求解方程组：

$$p(x_i)=\sum_{k=1}^{n}c_k\varphi_k(x_i)=f(x_i),\qquad i=1,\cdots,n$$

$$\begin{pmatrix}\varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1)\\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \cdots & \varphi_n(x_2)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \cdots & \varphi_n(x_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f(x_1)\\ f(x_2)\\ \vdots\\ f(x_n)\end{pmatrix}$$

定义5.1 设 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是[***a,b***]上的函数，且对[***a,b***]上的任意***n***个互异点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，行列式

$$D[x_1,x_2,\cdots,x_n]=\begin{vmatrix}\varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1)\\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \cdots & \varphi_n(x_2)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \cdots & \varphi_n(x_n)\end{vmatrix}\neq 0$$

则称 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ [***a,b***]上满足**Haar**条件。

定理5.1 设已知函数 $f(x)$ 在n个互异点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，处的函数值 $y_i=f(x_i)\ (i=1,\cdots,n)$，简单函数类S的基函数 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 在$[a,b]$上满足**Haar**条件，则存在唯一的 $p(x)=\sum_{k=1}^{n}c_k\varphi_k(x)\in S$，满足插值条件 $p(x_i)=y_i,\quad i=1,\cdots,n.$

推论5.1 S如定理4.1所设，则S中存在唯一的一组函数 $l_1(x),l_2(x),\cdots,l_n(x)$，满足

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

$l_k(x)\ (k=1,2,\ldots,n)$ 称为插值基函数。

易证 $l_1(x), l_2(x), \cdots, l_n(x)$ 也是S的一组基函数，且满足**Haar**条件。

$$\sum_{k=1}^{n} c_k l_k(x) = 0 \Rightarrow 0 = \sum_{k=1}^{n} c_k l_k(x_i) = c_i \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

利用插值函数的存在唯一性，则有

推论5. 2 在定理**5.1**的假设下，函数 $p(x) = \sum_{k=1}^{n} y_k l_k(x)$

是S中满足插值条件 $p(x_i) = y_i,\ i = 1, 2, \cdots, n$ 的唯一函数。

5.2 多项式插值和Hermite插值

例　$\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=x, \cdots, \varphi_n(x)=x^n$ 在 $[a,b]$ 上满足**Haar**条件，

因此在 $\boldsymbol{P_n}$（所有次数不超过 $\boldsymbol{n}$ 的实系数代数多项式空间）

中有唯一的多项式 $p(x)$ 满足 $p(x_i)=y_i,\ i=0,1,\cdots,n$

设　$p_n(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_{n-1}x^{n-1}+a_nx^n$ 由插值条件可得

$$\begin{cases} a_0+a_1x_0+\cdots+a_{n-1}x_0^{n-1}+a_nx_0^n=f(x_0) \\ a_0+a_1x_1+\cdots+a_{n-1}x_1^{n-1}+a_nx_1^n=f(x_1) \\ \quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots \\ a_0+a_1x_n+\cdots+a_{n-1}x_n^{n-1}+a_nx_n^n=f(x_n) \end{cases}$$

显然，其系数是满足Vandermonde（范德蒙）行列式

$$V_n[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\begin{vmatrix}1 & x_0 & \cdots & x_0^n\\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}=\prod_{i>j}\left(x_i-x_j\right)=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=0}^{i-1}\left(x_i-x_j\right)\neq 0$$

因此，在 $\mathbf{P}_n$（所有次数不超过 n 的实系数代数多项式的集合）中有唯一的多项式 $p(x)$，满足

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

这实际上就证明了代数多项式插值的存在唯一性。

5.2.1 Lagrange插值公式

考虑 $n=1$ 的情形，给定 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$且 $x_0 \neq x_1$

构造一次多项式$p_1(x)$ ，满足条件:$p_1(x_0)=y_0$，$p_1(x_1)=y_1$

由直线的两点式可知: $\dfrac{(y-y_0)}{(y_1-y_0)}=\dfrac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}$，解之，得

$$p_1(x)=y=\frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}y_0+\frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}y_1$$

进一步可改写成

$$p_1(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1$$

其中 $l_0(x)=\dfrac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}$, $l_1(x)=\dfrac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}$

分别称其为关于节点 x_0 和 x_1 的插值基函数。

并且具有性质：

$$l_0(x_0)=\frac{(x_0-x_1)}{(x_0-x_1)}=1,\quad l_0(x_1)=\frac{(x_1-x_1)}{(x_0-x_1)}=0,\quad l_1(x_0)=\frac{(x_0-x_0)}{(x_1-x_0)}=0,\quad l_1(x_1)=\frac{(x_1-x_0)}{(x_1-x_0)}=1$$

从而，$p_1(x)$ 满足插值条件： $p_1(x_1)=y_1 \quad p_1(x_0)=y_0$

故 $p_1(x)$ 即为满足条件的一次Lagrange**插值**多项式。

考虑 $n=2$ 的情形，给定 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$ 且 $x_0 \neq x_1 \neq x_2$

构造二次多项式 $p_2(x)$, 满足条件：

$$p_2(x_0)=y_0\,, \quad p_2(x_1)=y_1\,, \quad p_2(x_2)=y_2$$

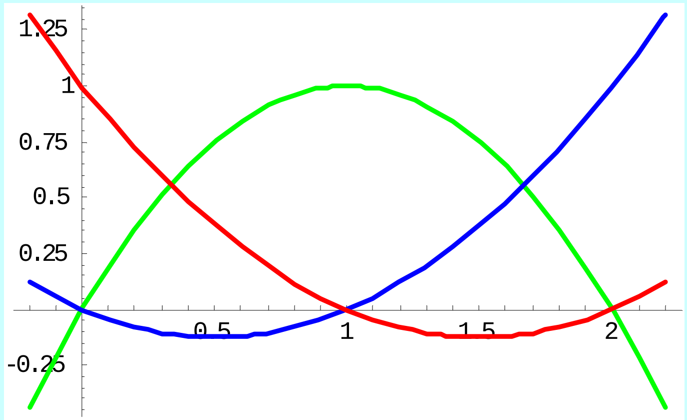
进一步写成 $p_2(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2$

其中 $l_i(x)$ $i=0,1,2$，均为二次的插值基函数多项式，且满足

$$l_0(x_0)=1 \qquad l_0(x_1)=0 \qquad l_0(x_2)=0$$

$$l_1(x_0)=0 \qquad l_1(x_1)=1 \qquad l_1(x_2)=0$$

$$l_2(x_0)=0 \qquad l_2(x_1)=0 \qquad l_2(x_2)=1$$



下面我们以 $l_0(x)$ 为例来确定出： $l_0(x)\,,\ l_1(x)\,,\ l_2(x)$

由条件 $l_0(x_1)=0$ $l_0(x_2)=0$ 可知，x_1，x_2 是 $l_0(x)$ 的两个根，从而

$$l_0(x)= A(x-x_1)(x-x_2)$$

其中**A**为待定系数。又由 $l_0(x_0)=1$，可得

$$1 = A(x_0-x_1)(x_0-x_2) \Rightarrow A=\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

从而，

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

同理，

$$l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \qquad l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

进而满足条件的二次**Lagrange**插值多项式为：

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_1)(x-x_0)}{(x_2-x_1)(x_2-x_0)}y_2$$

一般情况：

设 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个互异点，取

$$l_j(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)} \quad (5\text{-}6)$$

$$=\frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_j)w'_{n+1}(x_j)} \qquad j=0,1,\cdots,n.$$

其中 $w_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

显然 $$l_j(x_i)=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases} \qquad i,j=0,1,\cdots,n. \quad (5\text{-}7)$$

$l_j(x_i)(j=0,1,\cdots,n)$ 称为 n 次**Lagrange插值基函数.**

从而

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot l_i(x)$$

就是 多项式空间 $\mathbf{P}_n(x)$ 中满足插值条件

$$p_n(x_i) = y_i \quad (i = 0,1,\cdots,n)$$

的唯一的多项式，$p_n(x)$ 称为 n 次**Lagrange插值多项式.**

注意：

- 插值基函数的个数=插值节点的个数；
- 插值基函数的次数=插值节点的个数-1；
- 插值基函数决定着插值多项式满足插值条件；
- 插值基函数与插值节点的次序无关。

例1 已知函数 $f(x)$ 的如下函数值：

x_i	1	2	3
$y_i = f(x_i)$	-1	-1	1

求 $f(x)$ 的二次Lagrange插值多项式 $p_2(x)$，并利用 $p_2(x)$ 计算出 $f(1.5)$ 的近似值

解 首先计算插值基函数：

$$l_0(x)=\frac{(x-2)(x-3)}{(1-2)(1-3)}=\frac{1}{2}(x-2)(x-3)$$

$$l_1(x)=\frac{(x-1)(x-3)}{(2-1)(2-3)}=-(x-1)(x-3)$$

$$l_2(x)=\frac{(x-1)(x-2)}{(3-1)(3-2)}=\frac{1}{2}(x-1)(x-2)$$

$$p_2(x) = l_0(x)y_0 \ \ + l_1(x)y_1 \ \ + l_2(x)y_2$$

$$= \frac{1}{2}(x-2)(x-3)\times(-1) \ \ + [-(x-1)(x-3)\times(-1)] + \frac{1}{2}(x-1)(x-2)\times 1$$

$$= -\frac{1}{2}\times(x^2-5x+6) + (x^2-4x+3) + \frac{1}{2}\times(x^2-3x+2)$$

$$= x^2 - 3x + 1$$

于是 $f(1.5) \approx p_2(1.5) = \left(\frac{3}{2}\right)^2 - 3\times\frac{3}{2} + 1 = -1.25.$

5.2.2 Newton插值公式

在插值问题中，为了提高插值精度，有时需增加插值节点个数．插值节点个数发生变化后，所有的Lagrange插值基函数都会发生变化，从而整个Lagrange插值多项式的结构发生变化，这在计算实践中是不方便的．为了克服Lagrange插值多项式的缺点，能灵活地增加插值节点，使其具有“承袭性”，我们引进Newton插值公式。

设已知函数 $f(x)$在 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个互异插值节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的函数值 $f_0, f_1, \cdots, f_n$，将基函数取作：

$$\begin{cases} \varphi_0(x)=1, \\ \varphi_j(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})=\prod_{i=0}^{j-1}(x-x_i), \\ j=1,2,\cdots,n \end{cases} \tag{5-8}$$

则可将 n 次插值多项式写成如下形式：

$$\begin{aligned} p_n(x) &= \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) \\ &= a_0 + a_1(x-x_0) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned} \tag{5-9}$$

其中待定系数 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 由插值条件

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

来确定.

例如，$n=1$ 时，$p_1(x)=a_0+a_1(x-x_0)$，由插值条件：

$$p(x_0)=f_0 \qquad p(x_1)=f_1$$

可得，

$$p_1(x_0)=a_0=f_0$$

$$p_1(x_1)=f(x_0)+a_1(x_1-x_0)=f(x_1) \Rightarrow a_1=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

从而

$$p_1(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)$$

$n=2$ 时，应有

$$p_2(x)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)$$

由

$$p_2(x_2)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x_2-x_0)+a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1)=f(x_2)$$

得

$$a_2=\frac{\dfrac{f(x_2)-f(x_0)}{x_2-x_0}-\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{(x_2-x_1)}=\frac{\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}-\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{(x_2-x_0)}$$

即

$$p_2(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) + \frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{(x_2 - x_0)}(x - x_0)(x - x_1)$$

实际上，由于插值多项式的唯一性，Newton插值多项式只不过是Lagrange插值多项式的另一种表现形式，两者是可以互推的。为得到Newton插值多项式的一般表达式，即

$$a_j, \quad j = 1, \cdots, n$$

的一般表达式，我们给出均差的定义。

定义5.2 设函数 $f(x)$ 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

$$f[x_i, x_k] = \frac{f_k - f_i}{x_k - x_i} \quad k \neq i \tag{5-11}$$

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（差商）**。称

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f[x_0, \cdots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}} \tag{5-12}$$

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

均差有如下性质：

1° $f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\sum_{j=0}^{k}\frac{f(x_j)}{w'_{k+1}(x_j)}$，其中 $w_{k+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_k)$

2° 对称性，即在 $f[x_0,x_1,\cdots,x_k]$ 中任意调换 $x_0,x_1,\cdots,x_k$ 的位置时，均差的值不变, 即

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

显然，因为由**1°**，可以看出任何两个节点调换顺序，只是意味着上式求和的次序的改变，而其值不变。

3° 若 $f(x)=x^m$ m 为自然数，则

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\begin{cases}0, & k>m\\ 1, & k=m\\ \text{诸 } x_i \text{ 的}\boldsymbol{m\text{-}k}\text{次齐次函数}, & k<m\end{cases}$$

4° 设 $f(x)$ 在包含 $x_0, x_1, \cdots, x_k$ 的区间 (a,b) 内 k 次可微，则

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

此处 $\min(x_0, x_1, \cdots, x_k) < \xi < \max(x_0, x_1, \cdots, x_k)$。

练习， 若 $f(x) = -3x^4 + 5x^3 - 2x^2 + 1$，求 $f[2^0, 2^1, \cdots, 2^4]$ 和 $f[e^0, e^1, \cdots, e^5]$

解： $$f[2^0, 2^1, \cdots, 2^4] = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} = \frac{-3 \times 4!}{4!} = -3$$

$$f[e^0, e^1, \cdots, e^5] = \frac{f^{(5)}(\xi)}{5!} = 0。$$

从而我们可以构造出 n 次Newton插值多项式公式：

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

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

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

为了便于计算均差，常利用如下形式生成均差表：

x	$f(x)$	一阶均差	二阶均差	三阶均差	…
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	$f(x_3)$	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$	

注意：$p_n(x) = f(x_0) + f[x_0,x_1](x-x_0) + f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$

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

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

Taylor多项式

例2 已知 $f(0)=2,\ f(1)=-3,\ f(2)=-6,\ f(3)=11$,求 $f(x)$ 关于上述节点组的三次插值多项式 $p_3(x)$。

解 首先利用均差表计算均差

x	$f(x)$	一阶均差	二阶均差	三阶均差
0	2			
		$\frac{-3-2}{1-0}=-5$		
1	-3		$\frac{-3+5}{2-0}=1$	
		$\frac{-6+3}{2-1}=-3$		$\frac{10-1}{3-0}=3$
2	-6		$\frac{17+3}{3-1}=10$	
		$\frac{11+6}{3-2}=17$		
3	11			

由上面的均差表可知, $f[0,1]=-5$, $f[0,1,2]=1$, $f[0,1,2,3]=3$,

故所求的插值多项式为:

$$p_3(x)=2-5x+x(x-1)+3x(x-1)(x-2)=3x^3-8x^2+2$$

例 3 已知 $f(-2)=-5$, $f(-1)=-2$, $f(0)=3$, $f(1)=10$, $f(2)=19$, $f(3)=30$，求 $f(x)$ 关于上述节点组的插值多项式 $p(x)$。

解 首先利用均差表计算均差

x	$f(x)$	一阶均差	二阶均差	三阶均差	$\cdots$
-2	-5				
		$\frac{-2+5}{-1+2}=3$			
-1	-2		$\frac{5-3}{0+2}=1$		
		$\frac{3+2}{0+1}=5$		$\frac{1-1}{1+2}=0$	
0	3		$\frac{7-5}{1+1}=1$		$\cdots$
		$\frac{10-3}{1-0}=7$		$\frac{1-1}{2+1}=0$	
1	10		$\frac{9-7}{2-0}=1$		$\cdots$
		$\frac{19-10}{2-1}=9$		$\frac{1-1}{3-0}=0$	
2	19		$\frac{11-9}{3-1}=1$		
		$\frac{30-19}{3-2}=11$			
3	30				

由上面的均差表可知，

$f[-2,-1]=3$， $f[-2,-1,0]=1$， $f[-2,-1,0,1]=0$，

故所求的插值多项式为：

$$p_3(x) = -5 + 3(x+2) + (x+1)(x+2)$$

$$= x^2 + 6x + 3$$

5.2.3 插值余项

性质4的证明 $p_k(x) = f(x_0) + f[x_0,x_1](x-x_0) + f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1) + \cdots + f[x_0,x_1,\cdots,x_k](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})$

是 $f(x)$ 关于节点组 $x_0,x_1,\cdots,x_k$ 的***k***次插值多项式，则余项

$r_k(x) = f(x) - p_k(x)$ 至少有***k*+1**个互异零点 $x_0,x_1,\cdots,x_k$

反复利用**Rolle**定理，可知存在 $\min(x_0,x_1,\cdots,x_k) < \xi < \max(x_0,x_1,\cdots,x_k)$。

使得 $r_k^{(k)}(\xi) = f^{(k)}(\xi) - p_k^{(k)}(\xi) = 0$

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

定理5.2 若 $f(x)$ 在包含着插值节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的区间 $[a,b]$ 上 $n+1$ 次可微，则对任意 $x \in [a,b]$，存在与 x 有关的 ξ $(a<\xi<b)$，使得

$$r_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\,\omega_{n+1}(x) \tag{5-14}$$

其中 $\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$

证明 任取 $x \in [a,b]$，当 $x = x_0, x_1, \cdots, x_n$ 时，(5-14)显然成立.

设 $x \neq x_i$ $(i=0,1,\ldots,n)$ 视 $\boldsymbol{x}$ 为一个节点，

$$f[x,x_0] = \frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \quad \Rightarrow f(x) = f(x_0) + f[x,x_0](x-x_0)$$

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

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

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

$$r_n(x) = f(x) - p_n(x)$$

$$= f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$$

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

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

$$\min(x, x_0, x_1, \cdots, x_n) < \xi < \max(x, x_0, x_1, \cdots, x_n)$$

$$\xrightarrow{x_0 = \cdots = x_n} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

Taylor展式的Lagrange余项

练习 取节点 $x_0=1, x_2=4, x_3=9$ ，求函数 $y=\sqrt{x}$ 在区间 $[1,9]$ 上的插值多项式 $p_2(x)$ ，进一步求出 $y(3)$ 的近似值，并估计误差。

解:

$$\sqrt{3} \approx p_2(3) = \frac{(3-4)(3-9)}{(1-4)(1-9)} \times 1 + \frac{(3-1)(3-9)}{(4-1)(4-9)} \times 2 + \frac{(3-1)(3-4)}{(9-1)(9-4)} \times 3$$

$$= \frac{(-1)\times(-6)}{(-3)(-8)} \times 1 + \frac{2\times(-6)}{3\times(-5)} \times 2 + \frac{2\times(-1)}{8\times 5} \times 3 = \frac{1}{4} + \frac{24}{15} - \frac{1}{20} = 1.70000$$

从而

$$r_2(3) = \sqrt{3} - p_2(3) = \frac{\left(\sqrt{x}\right)^{(3)}\Big|_{x=\xi}}{(2+1)!}(3-1)\cdot(3-4)\cdot(3-9)$$

$$\left|\sqrt{3} - p_2(3)\right| \le \frac{1}{6} \times \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} \times \frac{3}{2} \times 2 \times 6 = \frac{36}{48} = 0.75$$

5.2.4 Hermite插 值

理论和应用中提出的某些插值问题，要求插值函数$p(x)$具有一定的光滑度，即在插值节点处满足一定的导数条件，这类插值问题称为**Hermite**插值问题。

设已知函数 $f(x)$ 在 s 个互异点 $x_1, x_2, \ldots, x_s$ 处的函数值和导数值：

$$
\begin{aligned}
&f(x_1),\ f'(x_1),\cdots,\ f^{(\alpha_1-1)}(x_1);\\
&f(x_2),\ f'(x_2),\cdots,\ f^{(\alpha_2-1)}(x_2);\\
&\cdots\qquad\cdots\qquad\cdots\\
&f(x_s),\ f'(x_s),\cdots,\ f^{(\alpha_s-1)}(x_s),
\end{aligned}
$$

其中 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_s$ 为正整数，记 $\alpha_1+\alpha_2+\cdots+\alpha_s=n+1$，构造一个$n$次多项式$p_n(x)$，使其满足插值条件：

$$p_n^{(\mu_i)}(x_i)=f^{(\mu_i)}(x_i)=y_i^{(\mu_i)},\quad i=1,2,\cdots,s;\quad \mu_i=0,1,\cdots,\alpha_i-1。\qquad \textbf{(5-18)}$$

可以采用类似于构造**Lagrange**插值基函数$l_j(x)$的方法来解决Hermite插值问题。先构造一批n次多项式

$$L_{i,k}(x),\ i=1,2,\cdots,s;\ k=0,1,\cdots,\alpha_i-1,$$

使这些多项式满足条件：

$$L_{i,k}^{(h)}(x_m)=0,\quad m\neq i,\quad h=0,1,\cdots,\alpha_m-1; \tag{5-19}$$

$$L_{i,k}^{(h)}(x_i)=\begin{cases}0, & h\neq k,\\ 1, & h=k。\end{cases} \tag{5-20}$$

只要上述问题一解决，则n次多项式

$$p_n(x)=\sum_{i=1}^{s}\sum_{k=0}^{\alpha_i-1}y_i^{(k)}L_{i,k}(x) \tag{5-21}$$

$$=\sum_{i=1}^{s}[y_iL_{i,0}(x)+y_i^{(1)}L_{i,1}(x)+\cdots y_i^{(\alpha_i-1)}L_{i,\alpha_i-1}(x)]$$

必满足插值条件（5-18）。

例3 $\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_s = 1$ 的情形。

$$L_{i,0}(x) = \frac{A(x)}{A'(x_i)(x - x_i)} \qquad A(x) = (x - x_1)\cdots(x - x_s)$$

此时相应的插值问题就是通常的**Lagrange**插值，插值多项式就是以 $x_1, x_2, \cdots, x_s$ 为节点的不超过s-1次**Lagrange**插值多项式

$$p_{s-1}(x) = \sum_{i=1}^{s} y_i \frac{A(x)}{(x - x_i)A'(x_i)}。$$

例4 $S=1, x_1=a$的情形。

设 $p_{\alpha-1}(x)=b_0+b_1(x-a)+b_2(x-a)^2+\cdots+b_{\alpha-1}(x-a)^{\alpha-1}$

解

$$p_{\alpha-1}(a)=f(a) \quad \Rightarrow b_0=f(a)$$

$$p'_{\alpha-1}(a)=f'(a) \quad \Rightarrow b_1=f'(a)$$

$$p''_{\alpha-1}(a)=f''(a) \quad \Rightarrow b_2=\frac{f''(a)}{2!}$$

$$\cdots$$

$$p^{(\alpha-1)}_{\alpha-1}(a)=f^{\alpha-1}(a) \Rightarrow b_{\alpha-1}=\frac{f^{(\alpha-1)}(a)}{(\alpha-1)!}$$

所求的插值多项式

$$p_{\alpha\text{-}1}(x)=\sum_{i=0}^{\alpha-1} f^{(i)}(a)L_{1,k}(x)=\sum_{i=0}^{\alpha-1}\frac{f^{(i)}(a)}{i!}(x-a)^i$$

恰为$f(x)$在$x=a$附近的**Taylor**多项式。

例5 $\alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_s=2$ 的情形。

记 $\sigma(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_s)$

求 $H(x)=\sum_{i=1}^{s} f(x_i)A_i(x)+\sum_{i=1}^{s} f'(x_i)B_i(x) \quad A_i(x),B_i(x)\in \boldsymbol{P}_{2s-1}$

满足

$$A_i(x_i)=1,\quad A_i'(x_i)=0,$$
$$A_i(x_j)=0,\quad A_i'(x_j)=0,\qquad i,j=1,2,..,s,$$

$$B_i(x_i)=0,\quad B_i'(x_i)=1,$$
$$B_i(x_j)=0,\quad B_i'(x_j)=0,\qquad i,j=1,2,..,s,$$

因为 $B_i(x_i)=0,\quad B_i'(x_i)=1,$

$B_i(x_j)=0,\quad B_i'(x_j)=0,\qquad i,j=1,2,..,s,$

所以， x_i 是单根， x_j $(j\neq i)$ 是二重根。

$$\Rightarrow B_i(x)=\beta_i(x-x_i)(x-x_1)^2\cdots(x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2\cdots(x-x_s)^2$$

$$1=B_i'(x_i)=\beta_i(x_i-x_1)^2\cdots(x_i-x_{i-1})^2(x_i-x_{i+1})^2\cdots(x_i-x_s)^2$$

$$=\beta_i(\sigma'(x_i))^2$$

$$\Rightarrow \beta_i=1/(\sigma'(x_i))^2$$

$$\Rightarrow B_i(x)=\frac{\sigma^2(x)}{(x-x_i)(\sigma'(x_i))^2}=\left(\frac{\sigma(x)}{(x-x_i)\sigma'(x_i)}\right)^2(x-x_i)$$

再由 $A_i(x_i)=1,\quad A_i'(x_i)=0,$

$A_i(x_j)=0,\quad A_i'(x_j)=0,$ $\quad i,j=1,2,..,s,$

所以，$x_j\ (j\neq i)$ 是二重根。

$$\Rightarrow A_i(x)=\beta_i(ax+b)(x-x_1)^2\cdots(x-x_{i-1})^2(x-x_{i+1})^2\cdots(x-x_s)^2$$

$$\beta_i=\frac{1}{(x_i-x_1)^2\cdots(x_i-x_{i-1})^2(x_i-x_{i+1})^2\cdots(x_i-x_s)^2}=\frac{1}{(\sigma'(x_i))^2}$$

$$\begin{cases} ax_i+b=1 \\ a+(ax_i+b)\sum_{j\neq i}\dfrac{2}{(x_i-x_j)}=0 \end{cases}\Rightarrow\begin{cases} a=-\sum_{j\neq i}\dfrac{2}{x_i-x_j}=-\dfrac{\sigma''(x_i)}{\sigma'(x_i)} \\ b=1+x_i\sum_{j\neq i}\dfrac{2}{x_i-x_j} \end{cases}$$

$$\Rightarrow A_i(x)=\left(\frac{\sigma(x)}{(x-x_i)\sigma'(x_i)}\right)^2\left(1-(x-x_i)\sum_{j\neq i}\frac{2}{x_i-x_j}\right)$$

例6 S=2且$\mathbf{a}_1=\mathbf{a}_2=2$ 情形

此时有不超过3次插值多项式:

$$p_3(x)=f(x_1)\left(1-2\frac{x-x_1}{x_1-x_2}\right)\left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\right)^2+f'(x_1)(x-x_1)\left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\right)^2$$

$$+f(x_2)\left(1-2\frac{x-x_2}{x_2-x_1}\right)\left(\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)^2+f'(x_2)(x-x_2)\left(\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)^2$$

这就是二点三次**Hermite**插值多项式，插值条件为:

$$H_3(x_k)=f(x_k)\quad H_3'(x_k)=f'(x_k)$$

$$(k=0,1)$$

下面给出例5类型的**Hermite**插值公式的误差估计。

定理5.4 **设**$f(x)\in \mathbf{C}^{2s-1}[a,b]$**，在（**$a,b$**）内**$2s$**阶可导，又设** $a\le x_1<x_2<\cdots<x_s\le b$，则由例5确定的**Hermite**插值多项式$p_{2s-1}$有如下的误差估计式：

$$f(x)-p_{2s-1}(x)=\frac{f^{(2s)}(\xi)}{(2s)!}[\sigma(x)]^2,\quad x\in[a,b] \qquad \textbf{(5-24)}$$

其中 $\min(x_1,x_2\cdots x_s)<\xi<\max(x_1,x_2\cdots x_s)$。

证 **若**x**为** $x_1, x_2, \ldots, x_s$ **中的某一个，则（5-24）显然成立。**以下假设 $x\neq x_i$ $(i=1,2,\ldots,s)$，设

$$f(x)-p_{2s-1}(x)=(x-x_1)^2\cdots(x-x_s)^2K(x)=[\sigma(x)]^2K(x),$$

对上述给定的 x，引进辅助函数:

$$\varphi(t)=f(t)-p_{2s-1}(t)-K(x)(t-x_1)^2\cdots(t-x_s)^2,$$

$$\varphi(t) = f(t) - p_{2s-1}(t) - K(x)(t-x_1)^2 \cdots (t-x_s)^2$$

显然

$$\varphi(x_i) = \varphi'(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, s, \quad \varphi(x) = 0 。$$

即f(t)有s个二重零点 $x_1, x_2, \ldots, x_s$ 和一个单重零点x。

反复运用Rolle定理可证，存在

$$\min(x, x_1, \cdots x_s) < \xi < \max(x, x_1, \cdots, x_s)$$

使得 $$\varphi^{(2s)}(\xi) = f^{(2s)}(\xi) - 0 - K(x) \cdot (2s)! = 0,$$

于是，得

$$K(x) = \frac{f^{(2s)}(\xi)}{(2s)!}$$

代入（5-25）即知（5-24）成立。

定理5. 4’设$f(x)\in \mathbf{C}^3[a,b]$**，在（**$a,b$**）内4阶可导，又设** $a\le x_1<x_2\le b$，则两点三次**Hermite**插值多项式 $p_3(x)$有如下的误差估计式：

$$f(x)-p_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-x_1)^2(x-x_2)^2,\quad x\in[a,b]$$

其中 $\min(x_1,x_2)<\xi<\max(x_1,x_2)$。

5.2.5 分段低次插值

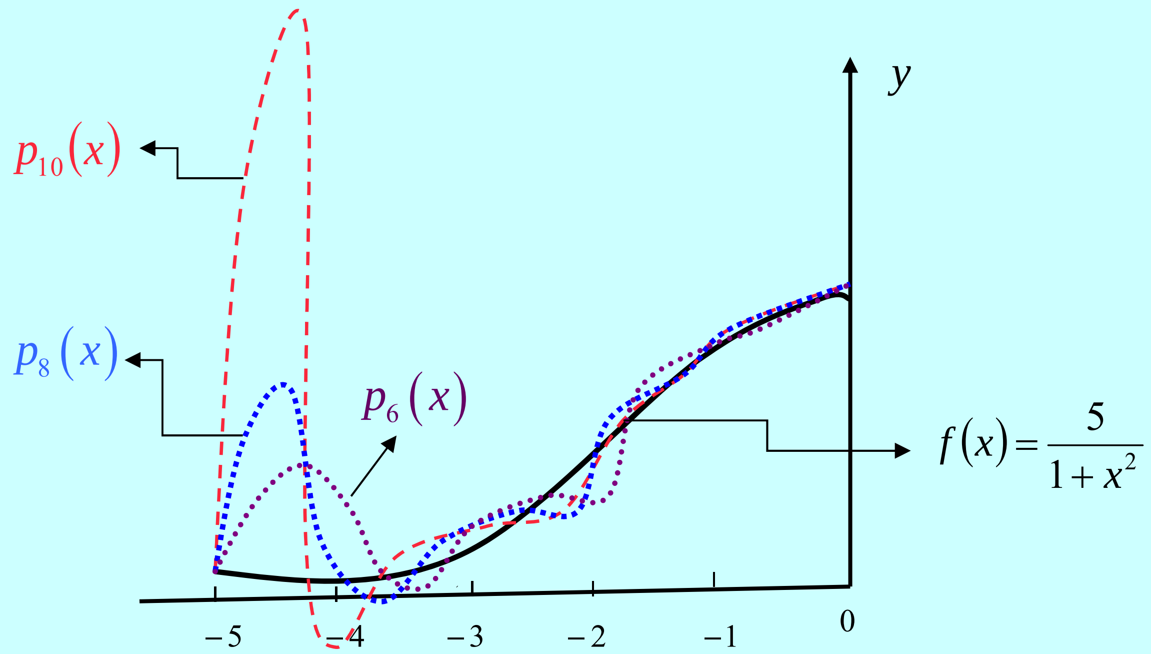
利用插值法构造近似函数时，为了提高逼近精度，经常需要增加插值节点，加密插值节点会使插值函数与被插值函数在更多节点上的取值相同，那么误差是否会随之减小呢？

答案是否定的。原因在于插值节点增多导致插值多项式的次数增高，而高次多项式的振荡次数增多有可能使插值多项式在非节点处的误差变得很大。

例如，对于函数 $f(x)=\dfrac{5}{1+x^2}$ 在$[-5,5]$上构造等距节点：

$$x_k=-5+\frac{10}{n}k \qquad (k=0,1,\cdots,n)。$$

分别取 n=6、n=8 和 n=10作出插值多项式$p_n(x)$逼近$f(x)$。



等距节点高次插值多项式的Runge现象

$f_i = \bar{f}_i + \delta_i$ 插值函数的稳定性的分析，得到插值函数的舍入误差项为：

$$e_n = \max_{a\le x\le b}\left|I_n(f,x)-I_n(\bar{f},x)\right| \le \max_{a\le x\le b}\left[\sum_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right|\right]\max_{1\le i\le n}\left|f_i-\bar{f}_i\right| = \eta_n \max_{1\le i\le n}\left|f_i-\bar{f}_i\right|$$

其中 $\eta_n = \max_{a\le x\le b}\left(\sum_{i=0}^{n}\left|l_i(x)\right|\right)$，$I_n(f,x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x) f_i$，$I_n(\bar{f},x)=\sum_{i=0}^{n} l_i(x)\bar{f}_i$。

显然，对等距节点的高次的**Largrange**多项式插值 η_n是随着n增长的，

故得出结论：**Runge**现象对等距节点的高次插值多项式是典型的。

为了克服高次插值多项式的上述弊端，通常采用分段低次插值的方法，即以插值节点为分点，将$[a, b]$分成若干个小区间，并在每个小区间上进行低次的多项式插值。

一、分段线性Lagrange插值

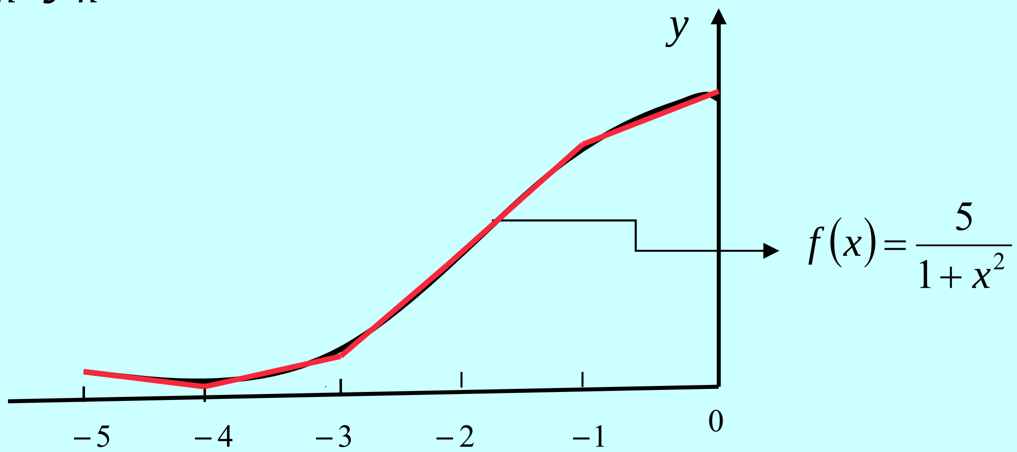
设插值节点 $x_0, x_1, \cdots$， x_n满足$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$,在每一个区间$[x_k, x_{k+1}]$ $(k=0, 1, \cdots, n-1)$上做线性插值多项式

$$L_h^{(k)}(x) = y_k \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + y_{k+1} \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}, \quad x \in [x_k, x_{k+1}]。 \qquad (5\text{-}26)$$

令

$$L_h(x)=\begin{cases} L_h^{(0)}(x), & x\in[x_0,x_1],\\ L_h^{(1)}(x), & x\in[x_1,x_2],\\ \vdots & \vdots\\ L_h^{(n-1)}(x), & x\in[x_{n-1},x_n], \end{cases} \tag{5-27}$$

显然 $L_h(x_i)=y_i$ (i=0, 1, ⋯,n), $L_h(x)$称为$f(x)$在$[a, b]$上的分段线性插值多项式。$y=L_h(x)$的图形是平面上连接点(x_0,y_0)、(x_1,y_1)、⋯、(x_n, y_n)的一条折线（如图）。



由插值余项定理，当 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上二次可微时，对任意 $x\in[x_k, x_{k+1}]$，余项为：

$$R_1(x) = f(x) - L_h^{(k)}(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x-x_k)(x-x_{k+1}), \qquad (5\text{-}28)$$

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

其中 $$M_2 = \max_{a\le x\le b}|f''(x)|, h = \max_{0\le k\le n-1} h_k,\ h_k = x_{k+1} - x_k \qquad (5\text{-}29)$$

易证，当 $f(x)\in C[a,b]$ 时，$\lim\limits_{h\to 0} L_h(x) = f(x)$ 在 $[a,b]$ 上一致成立。对 $x\in[a,\boldsymbol{b}]$，若 $x\in[x_k, x_{k+1}]$，则以 $L_h^{(k)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值；

若 $x\leqslant x_0$，则以 $L_h^{(0)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值；若 $x\ge x_n$，则以 $L_h^{(n-1)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值。

二、分段二次Lagrange插值

当给定的函数表中节点的个数远多于3的时候，为了提高计算精度，或根据实际问题需要，有时采取分段二次插值法。

对于$x\in[a, b]$，应选择靠近x的三个节点做二次插值多项式：

（1）当$x\in[x_k, x_{k+1}]$，且x偏向x_k时，选择x_{k-1}, x_k, x_{k+1}作为插值节点；

（2）当$x\in[x_k, x_{k+1}]$，且x偏向x_{k+1}时，选择x_k, x_{k+1}, x_{k+2}作为插值节点；

（3）当$x\in[x_0, x_1)$，或$x<x_0$时，选择x_0, x_1, x_2作为插值节点；

（4）当$x\in(x_{n-1}, x_n]$，或$x>x_n$时，选择x_{n-2}, x_{n-1}, x_n作为插值节点；

根据实际问题的需要，还可采用分段**Hermite**插值或样条插值方法。

约瑟夫·路易·拉格朗日

(Joseph Louis Lagrange，1736～1813）, 法国数学家、物理学家

18世纪最伟大的科学家之一。在数学、力学和天文学三个学科领域中都有历史性的贡献，其中尤以数学方面的成就最为突出。他是参议员，帝国伯爵，并被授予帝国大十字勋章。

1755年拉格朗日发表第一篇论文“极大和极小的方法研究”，发展了欧拉所开创的变分法，为变分法奠定了理论基础。1756年，受欧拉的举荐，拉格朗日被任命为普鲁士科学院通讯院士。1783年，被任命为都灵科学院名誉院长。出任法国米制委员会主任。制定了被世界公认的长度、面积、体积、质量的单位，拉格朗日为此做出了巨大的努力。1791年，拉格朗日被选为英国皇家学会会员，又先后在巴黎高等师范学院和巴黎综合工科学校任数学教授。1795年建立了法国最高学术机构——法兰西研究院后，拉格朗日被选为科学院数理委员会主席。他自己的一系列研究工作包括，编写了一批重要著作：《论任意阶数值方程的解法》、《解析函数论》和《函数计算讲义》。

拉格朗日科学研究所涉及的领域极其广泛。他在数学上最突出的贡献是使数学分析与几何与力学脱离开来，使数学的独立性更为清楚，从此数学不再仅仅是其他学科的工具。

拉格朗日在代数方程和超越方程的解法上，作出了有价值的贡献，推动了代数学的发展。最终解决了高于四次的一般方程为何不能用代数方法求解的问题。因而也可以说拉格朗日是群论的先驱。

在《解析函数论》以及他早在1772年的一篇论文中，他用幂级数表示函数的处理方法对分析学的发展产生了影响，成为实变函数论的起点。

拉格朗日也是分析力学的创立者。拉格朗日在其名著《分析力学》中，在总结历史上各种力学基本原理的基础上，发展达朗贝尔、欧拉等人研究成果，引入了势和等势面的概念，建立了拉格朗日方程，把力学体系的运动方程从以力为基本概念的牛顿形式，改变为以能量为基本概念的分析力学形式，奠定了分析力学的基础，为把力学理论推广应用到物理学其他领域开辟了道路。

拉格朗日用自己在分析力学中的原理和公式，建立起各类天体的运动方程。在天体运动方程的解法中，拉格朗日发现了三体问题运动方程的五个特解，即拉格朗日平动解。此外，他还研究彗星和小行星的摄动问题，提出了彗星起源假说等。

近百余年来，数学领域的许多新成就都可以直接或间接地溯源于拉格朗日的工作。所以他在数学史上被认为是对分析数学的发展产生全面影响的数学家之一。

5.3 三次样条插值

多项式**Lagrange**插值:

整体性强, 光滑性好 (无穷阶连续), 但不一定收敛

分段多项式(**Lagrange**)插值:

局部性好, 光滑性差 (C^0连续), 收敛性保证

分段多项式(**Hermite**)插值:

局部性好, 满足一定光滑性, 收敛性保证,

但需要导数值信息

样条插值: 样条函数: 满足一定光滑性的分段多项式

局部性好, 满足一定光滑性, 收敛性保证,

只需要函数值信息

样条函数是一个重要的逼近工具，在插值、数值微分、曲线拟合等方面有着广泛的应用.

定义5.3 对区间$(-\infty, +\infty)$的一个分割：

$$\Delta: -\infty < x_1 < x_2 < \cdots < x_n < +\infty,$$

若分段函数$s(x)$满足条件：

（1）在每个区间$(-\infty, x_1]$，$[x_j, x_{j+1}]$，（$j=1, 2, \cdots, n-1$）和$[x_n, +\infty)$上，$s(x)$是一个次数不超过m的实系数代数多项式；

（2）$s(x)$在区间$(-\infty, +\infty)$上具有直至$m-1$阶的连续微商，

则称$y=s(x)$为对应于分割Δ的m次样条函数， $x_1, x_2, \cdots, x_n$称为样条节点，以$x_1, x_2, \ldots, x_n$为节点的m次样条函数的全体记为：$\mathbf{S}_m(x_1, x_2, \ldots, x_n)$。

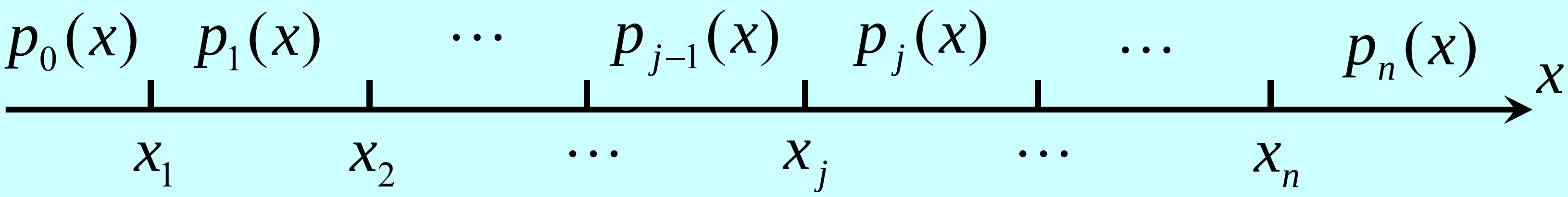
m=1时，样条函数是分段线性函数；

m=2时，是分段1阶连续的二次函数

显然, m次样条函数比一般的m次分段插值多项式的光滑性好。

问题: 如何判断一个分段的多项式函数是样条函数?

$$s(x)=\begin{cases} p_0(x), & x\le x_1 \\ p_1(x), & x_1\le x\le x_2 \\ \vdots & \\ p_j(x), & x_j\le x\le x_{j+1} \\ \vdots & \\ p_n(x), & x_n\le x \end{cases} \qquad p_j(x)\in \boldsymbol{P}_m\,(j=0,1,\ldots,n)$$



$$p_{j-1}^{(i)}(x_j) = p_j^{(i)}(x_j), \quad i = 0,1,\ldots,m-1$$

令 $q_j(x) = p_j(x) - p_{j-1}(x) \in \boldsymbol{P}_m$

x_j是$q_j(x)$的m重根

$$\Rightarrow q_j^{(i)}(x_j) = p_{j-1}^{(i)}(x_j) - p_j^{(i)}(x_j) = 0, \quad i = 0,1,\ldots,m-1$$

$$\Rightarrow q_j(x) = c_j(x - x_j)^m$$

光滑因子

$$\Rightarrow p_j(x) = p_{j-1}(x) + c_j(x - x_j)^m \qquad j = 1,2,\ldots,n$$

$$s(x)=\begin{cases} p_0(x), & x\le x_1 \\ p_1(x), & x_1\le x\le x_2 \\ \vdots & \\ p_j(x), & x_j\le x\le x_{j+1} \\ \vdots & \\ p_n(x), & x_n\le x \end{cases} \qquad p_j(x)\in \boldsymbol{P}_m(j=0,1,\dots,n)$$

于是**$s(x)$**是**m**次样条的充要条件是

$$p_0(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_mx^m,$$

$$p_1(x)=p_0(x)+c_1(x-x_1)^m,$$

$$p_2(x)=p_1(x)+c_2(x-x_2)^m=p_0(x)+c_1(x-x_1)^m+c_2(x-x_2)^m,$$

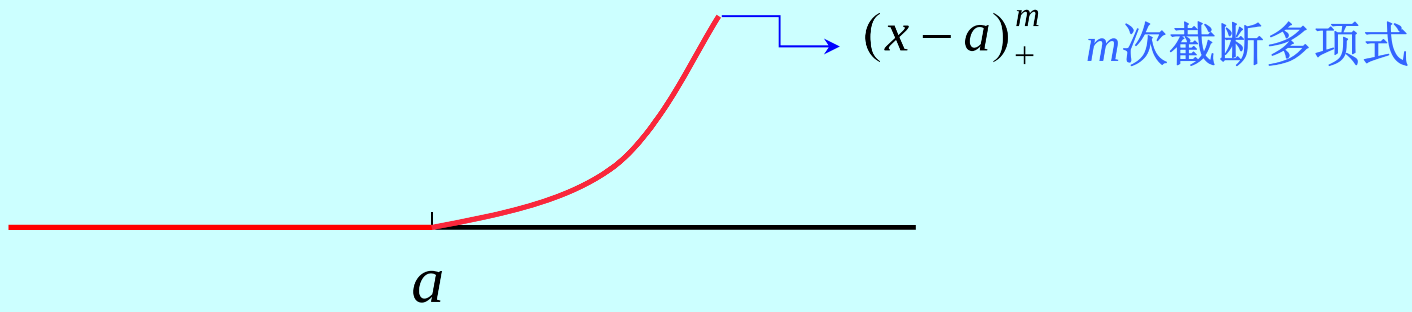
$$\cdots$$

$$p_n(x)=p_{n-1}(x)+c_n(x-x_n)^m=p_0(x)+\sum_{j=1}^{n}c_j(x-x_j)^m$$

为了便于表示分段信息, 引进截断多项式:

$$(x-a)_+^m = \begin{cases} (x-a)^m, & x \ge a, \\ 0, & x < a, \end{cases} \tag{5-30}$$

易见 $(x-a)_+^m$ 是$C^{m-1}(-\infty, +\infty)$ （表示$(-\infty,+\infty)$上$m-1$次连续可微函数的集合）类的分段m次多项式。



定理5.4 任意$s(x)\in \mathbf{S}_m(x_1, x_2, \cdots, x_n)$均可唯一地表示为

$$s(x)=p_m(x)+\sum_{j=1}^{n}c_j(x-x_j)_+^m,\quad -\infty<x<+\infty \qquad \textbf{(5-31)}$$

其中$p_m(x)\in \mathbf{P}_m$，$c_j(j=1, 2, \cdots, n)$为实数。

定理5.5 为使$s(x)\in \mathbf{S}_m(x_1,x_2,\ldots,x_n)$，必须且只须存在$p_m(x)\in \mathbf{P}_m$和$n$个实数$c_1, c_2, \cdots, c_n$，使得

$$s(x)=p_m(x)+\sum_{j=1}^{n}c_j(x-x_j)_+^m,\ -\infty<x<+\infty$$

结论

$$S_m(x_1,x_2,\ldots,x_n)=span\{1,x,\ldots,x^m,(x-x_1)_+^m,(x-x_2)_+^m,\ldots,(x-x_n)_+^m\}$$

$$\dim S_m(x_1,x_2,\ldots,x_n)=m+n+1$$

例**1** 验证分片多项式是三次样条函数.

$$S(x)=\begin{cases}1-2x & x<-3\\ 28+25x+9x^2+x^3 & -3\le x<-1\\ 26+19x+3x^2-x^3 & -1\le x<0\\ 26+19x+3x^2 & 0\le x\end{cases}$$

解 利用上面的定理**(**光滑因子**)**验证.

$$(28+25x+9x^2+x^3)-(1-2x)=(x+3)^3,$$

$$(26+19x+3x^2-x^3)-(28+25x+9x^2+x^3)=-2(x+1)^3,$$

$$(26+19x+3x^2)-(26+19x+3x^2-x^3)=x^3,$$

所以由定理**5.5**可知该函数为三次样条函数.

5.3.2 三次样条插值及其收敛性

有些实际问题中提出的插值问题，要求插值曲线具有较高的光滑性和几何光顺性．样条插值适用于这类问题．例如，在船体放样时，模线员用压铁压在样条（弹性均匀的窄木条）的一批点上，强迫样条通过这组离散的型值点．当样条取得合适的形状后，再沿着样条画出所需的曲线．在小挠度的情形下，该曲线可以由三次样条函数表示．由于样条函数插值不仅具有较好的收敛性和稳定性，而且其光滑性也较高，因此，样条函数成为了重要的插值工具．其中应用较多的是三次样条插值．

设给定节点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$, 及节点上的函数值

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

样条节点为插值节点

三次样条问题就是构造 $s(x) \in S_3(x_1, x_2, \cdots, x_{n-1})$ 满足

$$s(x_i) = y_i, \quad i = 0,1,\cdots,n.$$

维数为n+3

利用两点三次**Hermite**插值公式, 设

$$s'(x_k) = m_k\,(k = 0,1,\cdots,n), h_k = x_{k+1} - x_k\,(k = 0,1,\cdots,n-1)$$

当$x \in [x_k, x_{k+1}]$时，

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

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

$$s(x)=\frac{h_k+2(x-x_k)}{h_k^3}(x-x_{k+1})^2 y_k+\frac{h_k-2(x-x_{k+1})}{h_k^3}(x-x_k)^2 y_{k+1}$$

$$+\frac{(x-x_k)(x-x_{k+1})^2}{h_k^2}m_k+\frac{(x-x_{k+1})(x-x_k)^2}{h_k^2}m_{k+1}.$$

求$s(x)$的关键在于确定$n+1$个常数$m_0,m_1,\ldots,m_n$. 对$s(x)$求二阶导数

$$s''(x)=\frac{6x-2x_k-4x_{k+1}}{h_k^2}m_k+\frac{6x-4x_k-2x_{k+1}}{h_k^2}m_{k+1}$$

$$+\frac{6(x_k+x_{k+1}-2x)}{h_k^3}(y_{k+1}-y_k),\quad x\in[x_k,x_{k+1}],$$

$$\lim_{x\to x_k^+}s''(x)=-\frac{4}{h_k}m_k-\frac{2}{h_k}m_{k+1}+\frac{6}{h_k^2}(y_{k+1}-y_k).$$

$$\lim_{x\to x_k^-}s''(x)=\frac{2}{h_{k-1}}m_{k-1}+\frac{4}{h_{k-1}}m_k-\frac{6}{h_{k-1}^2}(y_k-y_{k-1}).$$

DUT 大连理工大学 DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

由三次样条函数的二次连续条件

$$\lim_{x\to x_k^+} s''(x) = \lim_{x\to x_k^-} s''(x) \quad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

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

等式两端除以 $\dfrac{h_k+h_{k-1}}{h_{k-1}h_k}$ ，化简得到基本方程组

$$\lambda_k m_{k-1} + 2m_k + \mu_k m_{k+1} = g_k, \quad (k=1,2,\cdots,n-1)$$

$$\lambda_k = \frac{h_k}{h_k+h_{k-1}}, \quad \mu_k = \frac{h_{k-1}}{h_k+h_{k-1}} = 1-\lambda_k,$$

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

n-1个方程
n+1个未知量

我们考虑下面三类边界条件.

第一类边界条件

$$\begin{cases} s'(x_0) = f'_0, \\ s'(x_n) = f'_n, \end{cases} \Leftrightarrow m_0 = f'_0, m_n = f'_n$$

$$\begin{cases} 2m_1 + \mu_1 m_2 = g_1 - \lambda_1 f'_0, \\ \lambda_k m_{k-1} + 2m_k + \mu_k m_{k+1} = g_k, \qquad (k = 2,3,\cdots,n-2) \\ \lambda_{n-1} m_{n-2} + 2m_{n-1} = g_{n-1} - \mu_{n-1} f'_n, \end{cases}$$

三对角
严格对角占优

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & & & & \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & & \\ & \lambda_3 & 2 & \mu_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \mu_{n-2} \\ & & & & \lambda_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 - \lambda_1 f'_0 \\ g_2 \\ g_3 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1} - \mu_{n-1} f'_n \end{bmatrix}$$

第二类边界条件

$$\begin{cases} s''(x_0) = f_0'', \\ s''(x_n) = f_n'', \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2m_0 + m_1 = \dfrac{3(y_1 - y_0)}{h_0} - \dfrac{h_0}{2} f_0'', \\ m_{n-1} + 2m_n = \dfrac{3(y_n - y_{n-1})}{h_{n-1}} + \dfrac{h_{n-1}}{2} f_n''. \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} g_0 = 3\dfrac{y_1 - y_0}{h_0} - \dfrac{h_0}{2} f_0'', \\ g_n = 3\dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} + \dfrac{h_{n-1}}{2} f_n''. \end{cases}$$

三对角
严格对角占优

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & & \\ & \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-1} \\ g_n \end{bmatrix}$$

第三类边界条件(周期性条件)

$$\lim_{x \to x_0^+} s^{(p)}(x) = \lim_{x \to x_n^-} s^{(p)}(x), \quad (p = 0,1,2)$$

$$\lim_{x \to x_0^+} s''(x) = -\frac{4}{h_0} m_0 - \frac{2}{h_0} m_1 + \frac{6}{h_0^2}(y_1 - y_0),$$

$$\lim_{x \to x_n^-} s''(x) = \frac{2}{h_{n-1}} m_{n-1} + \frac{4}{h_{n-1}} m_n - \frac{6}{h_{n-1}^2}(y_n - y_{n-1}),$$

由边界条件，$m_0 = m_n$，所以

$$\frac{1}{h_0} m_1 + \frac{1}{h_{n-1}} m_{n-1} + 2\left(\frac{1}{h_0} + \frac{1}{h_{n-1}}\right) m_n = 3\left(\frac{y_1 - y_0}{h_0^2} + \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}^2}\right),$$

简写为 $\mu_n m_1 + \lambda_n m_{n-1} + 2m_n = g_n,$

$$\begin{cases} \mu_n = \dfrac{h_{n-1}}{h_0 + h_{n-1}}, \quad \lambda_n = \dfrac{h_0}{h_0 + h_{n-1}}, \\ g_n = 3\left(\mu_n \dfrac{y_1 - y_0}{h_0} + \lambda_n \dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \right). \end{cases}$$

严格对角占优

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & & & \lambda_1 \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1} \\ \mu_n & & & \lambda_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-1} \\ m_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-1} \\ g_n \end{bmatrix}$$

例2 给定插值条件

x_i	0	1	2	3
y_i	0	0	0	0

以及第一类边界条件 $m_0=1, m_3=0$ 求三次样条插值函数.

解: $\lambda_k=\dfrac{h_k}{h_{k-1}+h_k}=\dfrac{1}{2}$, $\mu_k=\dfrac{h_{k-1}}{h_{k-1}+h_k}=\dfrac{1}{2}$, $g_k=0$, $k=1,2.$

$$\lambda_k m_{k-1}+2m_k+\mu_k m_{k+1}=g_k, \qquad (k=1,2)$$

$$\Leftrightarrow\begin{cases}\dfrac{1}{2}m_0+2m_1+\dfrac{1}{2}m_2=0\\ \dfrac{1}{2}m_1+2m_2+\dfrac{1}{2}m_3=0\end{cases}$$

再由边界条件 $m_0=1, m_3=0 \quad \Rightarrow m_1=-\dfrac{4}{15}, m_2=\dfrac{1}{15}.$

代入**(4-35)**

$$s(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{15}x(1-x)(15-11x), & x\in[0,1]\\ \dfrac{1}{15}(x-1)(x-2)(7-3x), & x\in[1,2]\\ \dfrac{1}{15}(x-3)^2(x-2), & x\in[2,3].\end{cases}$$

例3 已知正弦函数表

x_i	0.5	0.7	0.9	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9
f_i	0.4794	0.6442	0.7833	0.8912	0.9636	0.9975	0.9917	0.9463

以及边界条件 $s''(0.5)=-0.4794,\ s''(1.9)=-0.9463$

用三次样条插值函数$s(x)$计算诸节点中点处的函数值，并将计算结果与$\sin x$在相应点处的函数值相比较.

解 利用在第二类边界条件中介绍的方法，计算结果列表如下：

x	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
$s(x)$	0.56462	0.71733	0.84144	0.93206	0.98547	0.99959	0.97386
$\sin x$	0.56464	0.71736	0.84147	0.93204	0.98545	0.99957	0.97385

上述结果表明，三次样条插值的逼近效果较好.
下面的定理说明了三次样条插值函数的收敛性

定理**5.6** 设$f(x)\in C^2[a,b]$，$s(x)$是以$a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$为节点，

满足三种边界条件中的任何一种的三次样条插值函数，

记 $h=\max\limits_{0\le i\le n-1}(x_{i+1}-x_i)$ ，则当 $h\to 0$时，$s(x)$和 $s'(x)$ 在$[a,b]$上

分别一致收敛于 $f(x)$和 $f'(x)$.

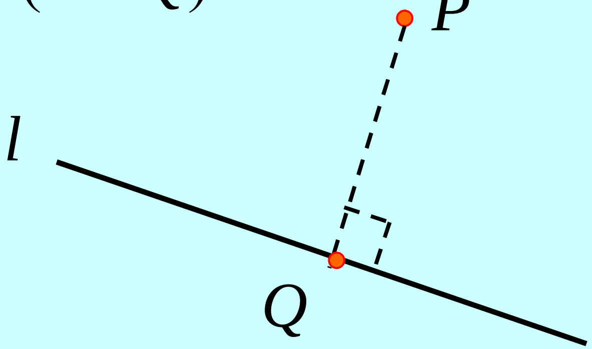
5.5　正交函数族在逼近中的应用

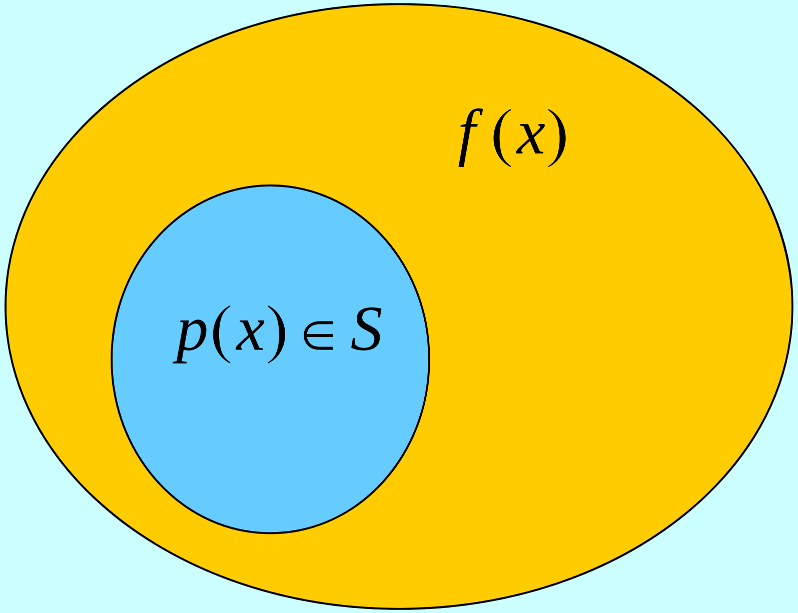
- 为什么要引入正交函数的概念?

最佳逼近问题

求直线***l*** 上距离直线外一点 **P**最近的点**Q**?

$(P-Q)\perp l$

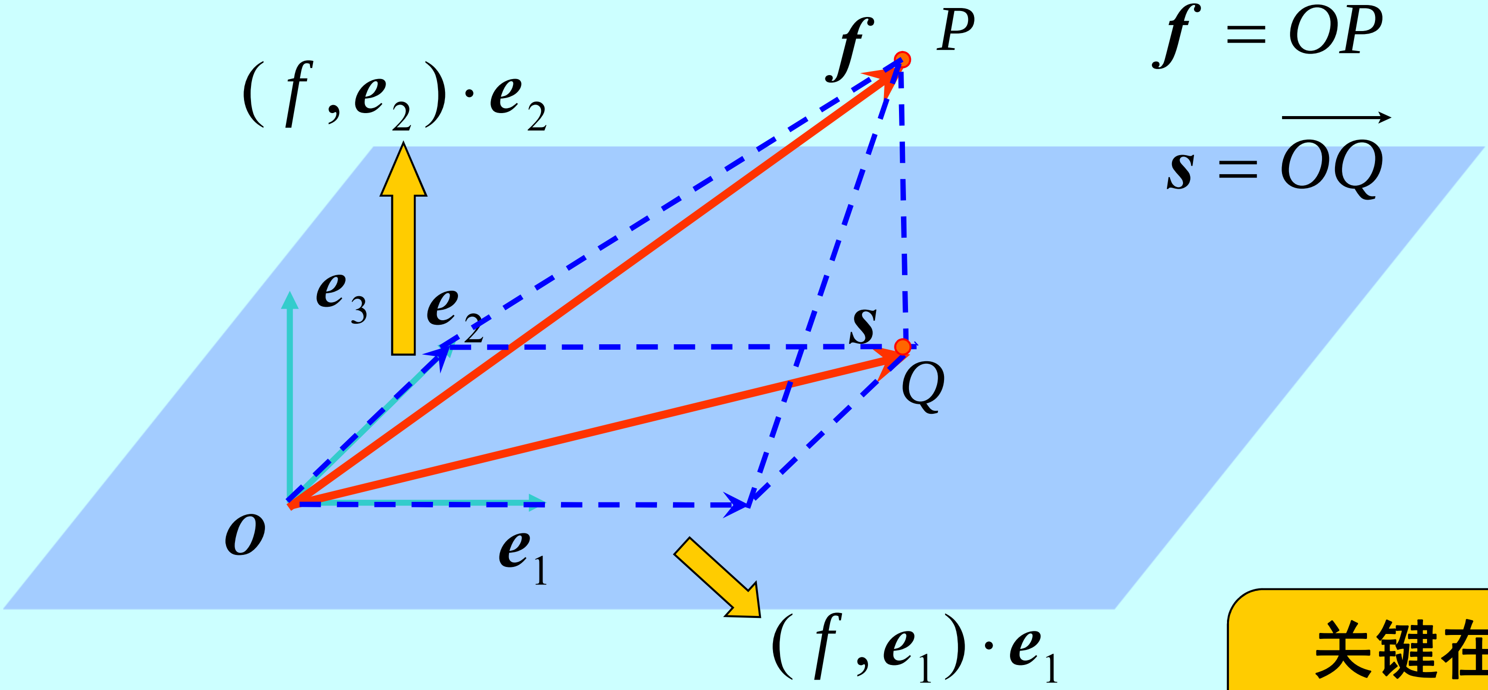




求函数类S中距离函数**f(x)**最近的函数**p(x)**?　$(f(x)-p(x))\perp S$

- 如何利用正交的概念求解最佳逼近问题？

例 求平面内距离平面外一点 **P**最近的点**Q**？



$$\boldsymbol{f}=\overrightarrow{OP}$$

$$\boldsymbol{s}=\overrightarrow{OQ}$$

于是有 $\boldsymbol{s}=(\boldsymbol{f},\boldsymbol{e}_1)\cdot\boldsymbol{e}_1+(\boldsymbol{f},\boldsymbol{e}_2)\cdot\boldsymbol{e}_2$

关键在于
标准正交基

另外 $\boldsymbol{s}=(\boldsymbol{s},\boldsymbol{e}_1)\cdot\boldsymbol{e}_1+(\boldsymbol{s},\boldsymbol{e}_2)\cdot\boldsymbol{e}_2$

- 如何引入正交函数的概念?

回忆向量正交（垂直）的定义

$$f=(f_1,f_2,\dots,f_n),\quad g=(g_1,g_2,\dots,g_n)$$

$$f\perp g\Leftrightarrow (f,g)=0$$

内积

$$(f,g)=\sum_{i=1}^{n} f_i g_i$$

$$f_i=f(x_i)$$
$$g_i=g(x_i)$$

$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i)g(x_i)\cdot\Delta x_i$$

对n取极限

$$\int_{x_1}^{x_n} f(x)g(x)dx$$

向量（离散）内积的性质

（1）$(f,f)\geq 0$，当且仅当 $f\equiv 0$ 时，$(f,f)=0$；

（2）$(f,g)=(g,f)$；

（3）$(\lambda f,g)=\lambda\cdot(f,g)$；

（4）$(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$。

4.5.1 正交多项式简介

对于[*a*,*b*]上的连续函数 ***f*(*x*), *g*(*x*)**，定义连续型内积：

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

其中可积函数***ρ*(*x*)≥0**（***x***∈[***a***,***b***]）是权函数。

$\|f\|^2 := (f,f)$

连续函数 $f(x)$、$g(x)$ 和 $h(x)$ 的内积满足：

（1） $(f,f)\ge 0$，当且仅当 $f\equiv 0$ 时，$(f,f)=0$；

（2） $(f,g)=(g,f)$；

（3） $(\lambda f,g)=\lambda\cdot(f,g)$；

（4） $(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$。

注意，不是曲线“正交”

若 $(f,g)=0$，则称 $f(x)$ 和 $g(x)$在[*a*,*b*]上关于权函数 $\rho(x)$ **正交**

将线性无关的函数组 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$ 通过**Schmidt**正交化：

令

$$\phi_0(x)=\varphi_0(x),$$

$$\phi_1(x)=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & \varphi_0(x)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & \varphi_1(x)\end{vmatrix}=(\varphi_0,\varphi_0)\varphi_1(x)-(\varphi_1,\varphi_0)\varphi_0(x),$$

$$\phi_i(x)=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_{i-1}) & \varphi_0(x)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_{i-1}) & \varphi_1(x)\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ (\varphi_i,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_{i-1}) & \varphi_i(x)\end{vmatrix},\quad i=1,2,\ldots,n.$$

按最后一列展开

$$=g_0\varphi_0(x)+g_1\varphi_1(x)+\cdots+g_i\varphi_i(x)$$

$$(\phi_1(x),\varphi_0(x))=((\varphi_0,\varphi_0)\varphi_1(x)-(\varphi_1,\varphi_0)\varphi_0(x)\ ,\varphi_0(x))$$

$$=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_0)\\(\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_0)\end{vmatrix}=0$$

$$(\phi_1(x),\varphi_1(x))=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1)\\(\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1)\end{vmatrix}=\Delta_1>0$$

$$(\phi_i,\varphi_j)=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_{i-1}) & (\varphi_0,\varphi_j)\\(\varphi_1,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_{i-1}) & (\varphi_1,\varphi_j)\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\(\varphi_i,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_{i-1}) & (\varphi_i,\varphi_j)\end{vmatrix}$$

最后一列
做内积

于是 $$(\phi_i(x),\varphi_j(x))=\begin{cases}0, & j<i\\ \Delta_i, & j=i\end{cases}$$

$$(\phi_i,\phi_j)=0, i\neq j$$

$$\phi_0(x),\phi_1(x),\ldots,\phi_n(x)$$

两两正交

其中

$$\Delta_i=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_{i-1}) & (\varphi_0,\varphi_i)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_{i-1}) & (\varphi_1,\varphi_i)\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ (\varphi_i,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_{i-1}) & (\varphi_i,\varphi_i)\end{vmatrix},\quad i=0,1,\ldots,n.$$

再由 $$\phi_i(x)=g_0\varphi_0(x)+g_1\varphi_1(x)+\cdots+g_i\varphi_i(x)$$

$$\Rightarrow(\phi_i(x),\phi_i(x))=g_0(\varphi_0,\phi_i)+g_1(\varphi_1,\phi_i)+\cdots+g_i(\varphi_i,\phi_i)$$

$$=\Delta_{i-1}(\varphi_i,\phi_i)\ =\Delta_{i-1}\Delta_i\ >0$$

$$\Rightarrow\Delta_i>0$$

进一步令

$$\begin{cases} \psi_0(x) = \dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{(\phi_0,\phi_0)}} = \dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{\Delta_0}}, \\ \psi_i(x) = \dfrac{\phi_i(x)}{\sqrt{(\phi_i,\phi_i)}} = \dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}, \quad i = 1,2,\ldots,n. \end{cases}$$

于是有

$$(\psi_i,\psi_j) = \delta_{i,j} = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$$

则 $\psi_0(x),\psi_1(x),\ldots,\psi_n(x)$ 成为标准正交函数系.

正交多项式系

通过**Schmidt**正交化构造正交多项式,具体作法如下：

特别取多项式系 $1, x, \cdots, x^n, \cdots$ 进行正交化即得正交多项式系：令

$$\mu_m = \int_a^b \rho(x) \cdot x^m dx, \quad m = 0, 1, \cdots;$$

取

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_i(x) = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{i-1} & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_i & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i-1} & x^i \end{vmatrix} \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

则 $\phi_0(x), \quad \phi_i(x), \quad i = 1, 2, \cdots,$ 构成正交多项式系。

令

$$\Delta_i = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_i \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_{i+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i} \end{vmatrix}, \qquad i = 0,1,\ldots$$

$$\begin{cases} \psi_0(x) = \dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{(\phi_0,\phi_0)}} = \dfrac{1}{\sqrt{\Delta_0}}, \\ \psi_i(x) = \dfrac{\phi_i(x)}{\sqrt{(\phi_i,\phi_i)}} = \dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}, \quad i = 0,1,\ldots \end{cases}$$

则 $\psi_0(x), \psi_1(x), \ldots, \psi_n(x)$成为标准正交多项式系

例1 令 $T_0(x)=1,\quad T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad x\in[-1,1]$

称 $\boldsymbol{T_n(x)}$ 为 $\boldsymbol{n}$ 次**Chebyshev多项式.**

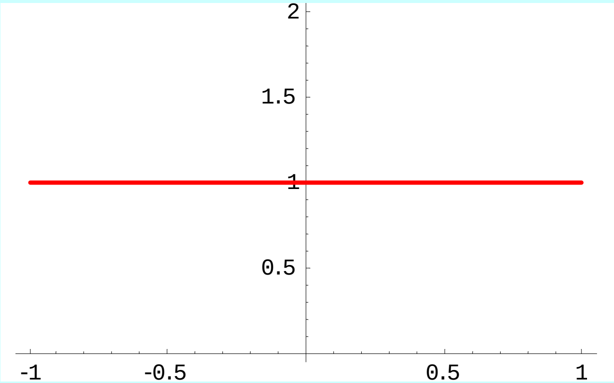
$$T_1(x)=x,$$

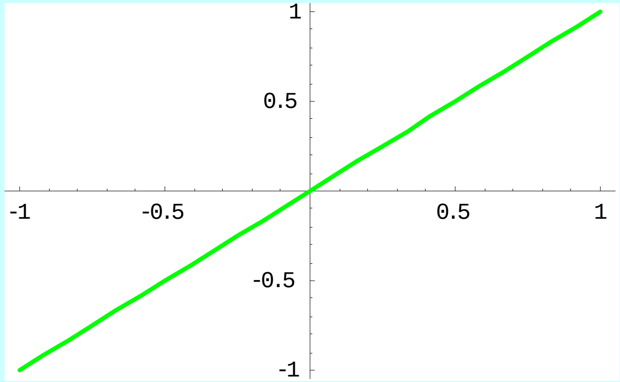
$$T_2(x)=2x^2-1,$$

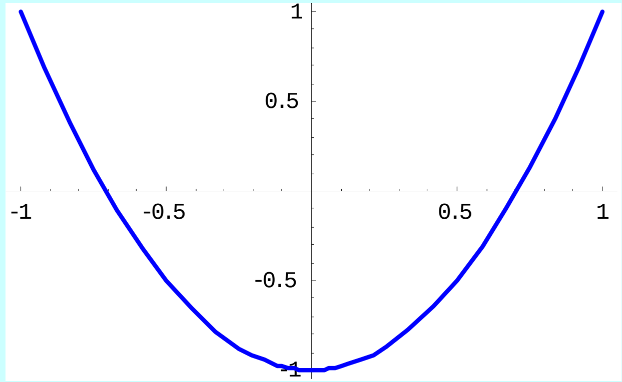
$$T_3(x)=4x^3-3x,$$

$$T_4(x)=8x^4-8x^2+1,$$

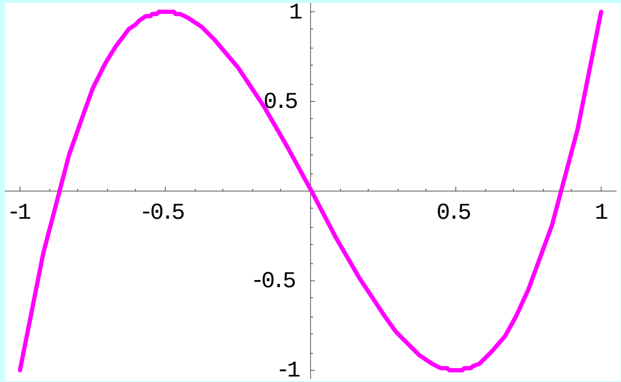
$$T_5(x)=16x^5-20x^3+5x,$$

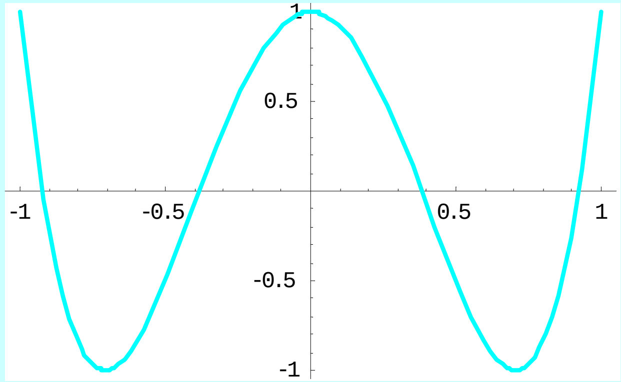


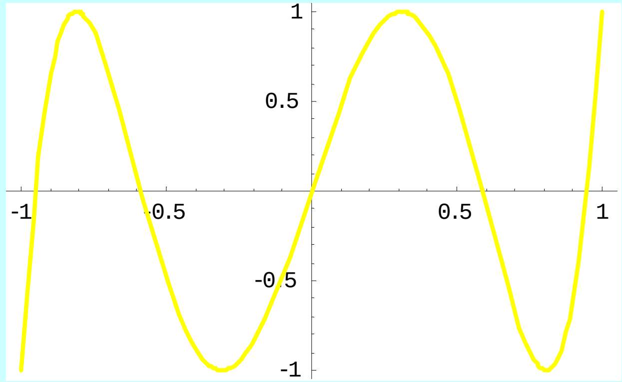




$$T_0(x) = 1, \qquad T_1(x) = x, \qquad T_2(x) = 2x^2 - 1,$$







$$T_3(x) = 4x^3 - 3x, \qquad T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1, \qquad T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x,$$

由三角恒等式 $\cos(n+1)\theta+\cos(n-1)\theta=2\cos n\theta\cdot\cos\theta,$

得三项递推式 $T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x),\quad n=1,2,\ldots$

知 $\boldsymbol{T_n(x)}$ 是$\boldsymbol{n}$次多项式，其零点落在**(-1,1)**中

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi,\quad k=1,2,\ldots,n$$

并且

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}T_i(x)T_j(x)dx=0,\ \ i\neq j$$

即 $\boldsymbol{T_n(x)}$ 是**[-1,1]** 上以 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 为权函数的正交多项式系

$\widetilde{T}_n(x)=\dfrac{1}{2^{n-1}}T_n(x)\ (n\geq 1)$ 首项系数为**1**的**n**次**Chebyshev**多项式系

例2 求 $[-1,1]$上关于 $\rho(x)=1$ 二次正交多项式族。

解 取 $\phi_0(x)=\mu_0=\int_{-1}^{1} 1\,dx=2$

$$\mu_1=\int_{-1}^{1} x^1\,dx=0 \qquad \mu_2=\int_{-1}^{1} x^2\,dx=\frac{2}{3} \qquad \mu_3=\int_{-1}^{1} x^3\,dx=0$$

$$\phi_1(x)=\begin{vmatrix} \mu_0 & 1 \\ \mu_1 & x \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 0 & x \end{vmatrix}=2x$$

$$\phi_2(x)=\begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & x \\ \mu_2 & \mu_3 & x^2 \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{2}{3} & x \\ \frac{2}{3} & 0 & x^2 \end{vmatrix}=\frac{4}{3}x^2-\frac{4}{9}=\frac{4}{9}\left(3x^2-1\right)$$

下面验证$\phi_0(x)$、$\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$ 俩俩相互正交。

事实上，

$$(\phi_0,\phi_1)=\int_{-1}^{1}2\cdot 2x\,dx\ =0$$

$$(\phi_0,\phi_2)=\int_{-1}^{1}2\cdot\frac{4}{9}\left(3x^2-1\right)dx=\frac{8}{9}\int_{-1}^{1}\left(3x^2-1\right)dx$$

$$=\frac{8}{9}\left(\int_{-1}^{1}3x^2dx-2\right)=0$$

$$(\phi_1,\phi_2)=\int_{-1}^{1}2x\cdot\frac{4}{9}\left(3x^2-1\right)dx=\frac{8}{9}\int_{-1}^{1}\left(3x^3-x\right)dx=0$$

Legendre多项式是[-1,1] 上以$\rho(x)=1$ 为权函数的正交多项式系

n次Legendre多项式的一般表达式为

$$L_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\cdot\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n],\quad n=0,1,2,\ldots$$

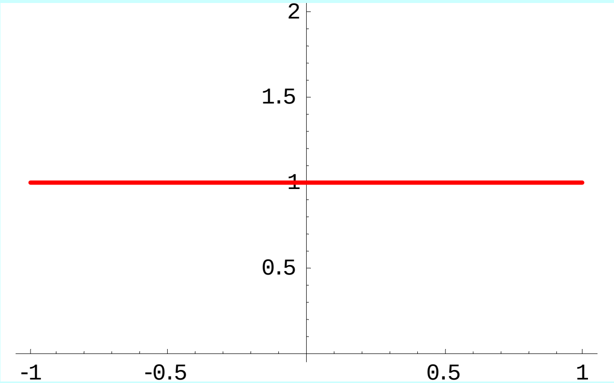
$$L_0(x)=1,\qquad L_1(x)=x,\quad L_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),$$

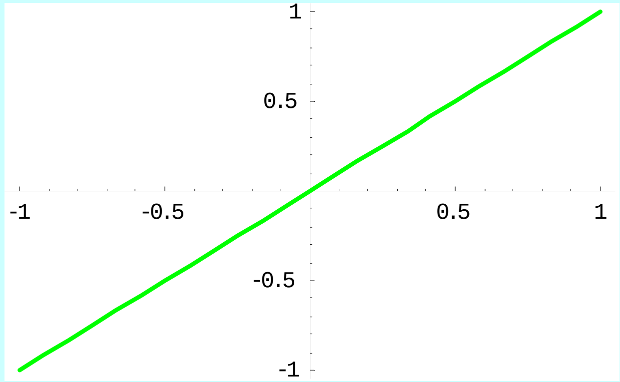
$$L_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x),\quad L_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3),$$

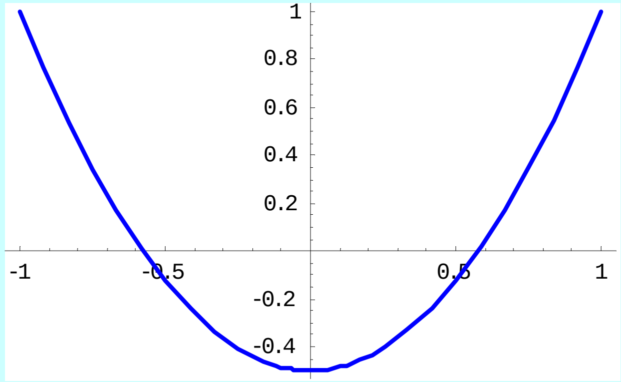
$$L_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x),$$

三项递推式

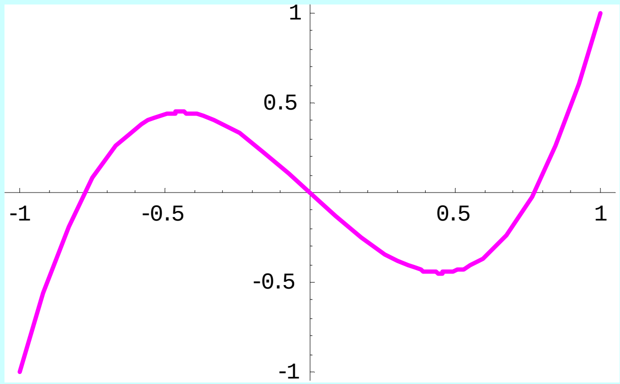
$$L_n(x)=\frac{2n-1}{n}xL_{n-1}(x)-\frac{n-1}{n}L_{n-2}(x),\quad n=2,3,\ldots$$

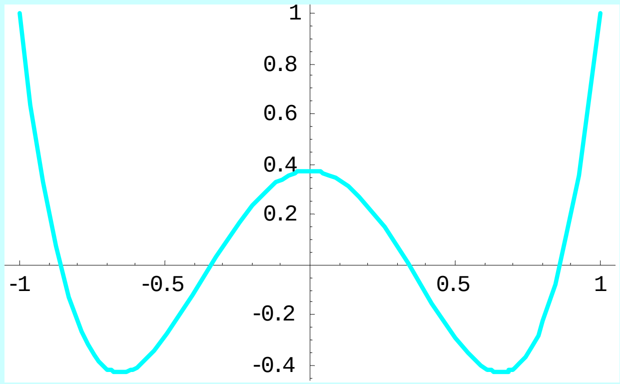


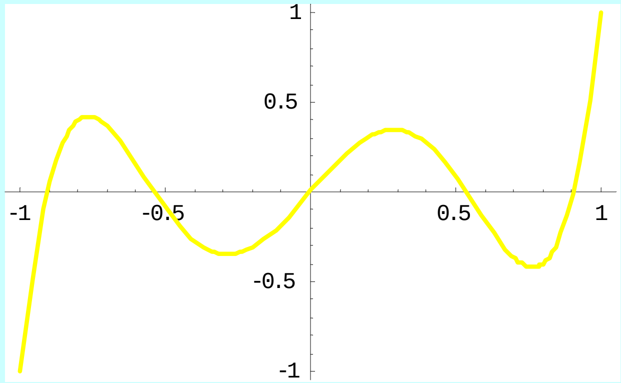




$$L_0(x)=1,\qquad L_1(x)=x,\qquad L_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),$$







$$L_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x),\ L_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3),\ L_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x),$$

例3 求 $[-1,1]$上关于 $\rho(x)=|x|$ 二次正交多项式族。

解 取 $\phi_0(x)=\mu_0=\int_{-1}^{1}|x|\,dx=1$

$$\mu_1=\int_{-1}^{1}|x|\cdot x^1\,dx=0 \quad \mu_2=\int_{-1}^{1}|x|\cdot x^2\,dx=\frac{1}{2} \quad \mu_3=\int_{-1}^{1}|x|\cdot x^3\,dx=0$$

$$\phi_1(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & 1\\ \mu_1 & x\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 1\\ 0 & x\end{vmatrix}=x$$

$$\phi_2(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & \mu_1 & 1\\ \mu_1 & \mu_2 & x\\ \mu_2 & \mu_3 & x^2\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & \frac{1}{2} & x\\ \frac{1}{2} & 0 & x^2\end{vmatrix}=\frac{1}{2}x^2-\frac{1}{4}=\frac{1}{4}\left(2x^2-1\right)$$

正交多项式的一些重要性质

性质 1 $\phi_n(x)$ 恰好是n次多项式，$\phi_0(x)$，$\phi_1(x)$，$\cdots$，$\phi_n(x)$ 是 $\mathbf{P}_n$ 的一组基底函数。

由(5-73)

性质 2 $\phi_n(x)$与次数低于 n 次的所有多项式正交。

由(5-68)

性质 3 $\phi_n(x)$ 在 (a,b) 内恰有 n 个互异零点。

性质2和性质3是构造Gauss型求积公式的重要依据

性质 3 $\phi_n(x)$ 在 (a,b) 内恰有 n 个互异零点。

证明 由 $\phi_0(x)$ 为非零常数，$\phi_n(x)$ 为n次正交多项式

$$(\phi_0,\phi_n) = \int_a^b \rho(x)\phi_0(x)\phi_n(x)dx = \phi_0(x)\int_a^b \rho(x)\phi_n(x)dx = 0$$

$\Rightarrow \int_a^b \rho(x)\phi_n(x)dx = 0$ 则被积函数在积分开区间上必然变号

而权函数在区间**[a,b]**上是非负的 $\rho(x)\ge 0, x\in[a,b]$

于是 $\phi_n(x)$ 在区间**(a,b)**上必然变号

则 $\phi_n(x)$ 在区间**(a,b)**上一定存在奇数重零点

设 $\phi_n(x)$ 在区间**(a,b)**上有***r*** 个奇数重零点

$$\xi_1,\dots,\xi_r \in (a,b)$$

令***r*** 次多项式 $q(x)=(x-\xi_1)\cdots(x-\xi_r)$

如果***r*<*n***，则由***n***次正交多项式的性质2

$$(q,\phi_n)=\int_a^b \rho(x)q(x)\phi_n(x)dx=0$$

则被积函数在积分开区间上必然变号

而 $q(x)\phi_n(x)$ 没有奇重零点，矛盾！ $\Rightarrow r=n$

$\phi_n(x)$ 在 (a,b) 内恰有 n 个互异零点。

5. 5. 2 函数的最佳平方逼近

已知 $f(x) \in L^2[a,b]$ **([a,b]**上平方可积函数的集合**)** 和

$$S = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), ..., \varphi_n(x)\} \subset C[a,b]$$

若存在 $s^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* \varphi_k(x) \in S$ 使得

$$\left\| f(x) - s^*(x) \right\|_2 = \min_{s(x)\in S} \left\| f(x) - s\ \ (x) \right\|_2$$

$$= \min_{s(x)\in S} \left(\int_a^b \rho(x)[f(x) - s\ \ (x)]^2 dx \right)^{1/2}$$

则称 $s^*(x)$ 是**f(x)**在**S**中的最佳平方逼近函数，

$\left\| f(x) - s^*(x) \right\|_2$ 称为均方误差。

求解 $s^*(x)$ 等价于求多元函数

$$E(a_0,a_1,\dots,a_n) = \int_a^b \rho(x)[f(x)-s(x)]^2 dx$$

$$= \int_a^b \rho(x)[f(x)-\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x)]^2 dx$$

的最小值点 $(a_0^*,a_1^*,\dots,a_n^*)$ 利用多元函数求极值的必要条件

$$\nabla E(a_0,a_1,\dots,a_n)=0 \quad \Leftrightarrow \frac{\partial E}{\partial a_i}=0,\ i=0,1,\dots,n$$

$$\Leftrightarrow 2\int_a^b \rho(x)[f(x)-\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x)]\varphi_i(x)dx=0$$

法方程组

利用内积符号

$$\Leftrightarrow \sum_{k=0}^{n}(\varphi_k,\varphi_i)a_k=(f,\varphi_i),\quad i=0,1,\dots,n$$

法方程组

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\varphi_0) \\ (f,\varphi_1) \\ \vdots \\ (f,\varphi_n) \end{pmatrix}$$

系数矩阵非奇异等价于 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$ 线性无关

但该系数矩阵经常是满的病态矩阵，使得解失真。

解决方法

准对角矩阵

其一，利用局部支集的基函数，如**B**样条方法

其二，利用正交的基函数，如正交多项式

对角矩阵

设 $\phi_0(x),\phi_1(x),\ldots,\phi_n(x)$ 是S的正交基函数

则法方程组的系数矩阵为非奇异的对角阵，且解为

$$a_k^* = \frac{(f,\phi_k)}{(\phi_k,\phi_k)},\quad k=0,1,\ldots,n$$

于是 $$s^*(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\phi_k)}{(\phi_k,\phi_k)}\phi_k(x)$$

若 $\psi_0(x),\psi_1(x),\ldots,\psi_n(x)$ 成为标准正交基

则 $$s^*(x)=\sum_{k=0}^{n}(f,\psi_k)\psi_k(x)$$

勾股定理

$$\left\|s^*\right\|^2=(s^*,s^*)=(\sum_{k=0}^{n}a_k^*\psi_k,\sum_{j=0}^{n}a_j^*\psi_j)=\sum_{k=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}a_k^*a_j^*(\psi_k,\psi_j)=\sum_{k=0}^{n}a_k^{*2}$$

5.5.3 数据拟合的最小二乘法

假设有变量 x, y 的一组数据

$$(x_i, y_i) \quad (i = 0, 1, \cdots, m)$$

这些数据往往带有随机的误差，如果利用这些数据按插值法求函数关系

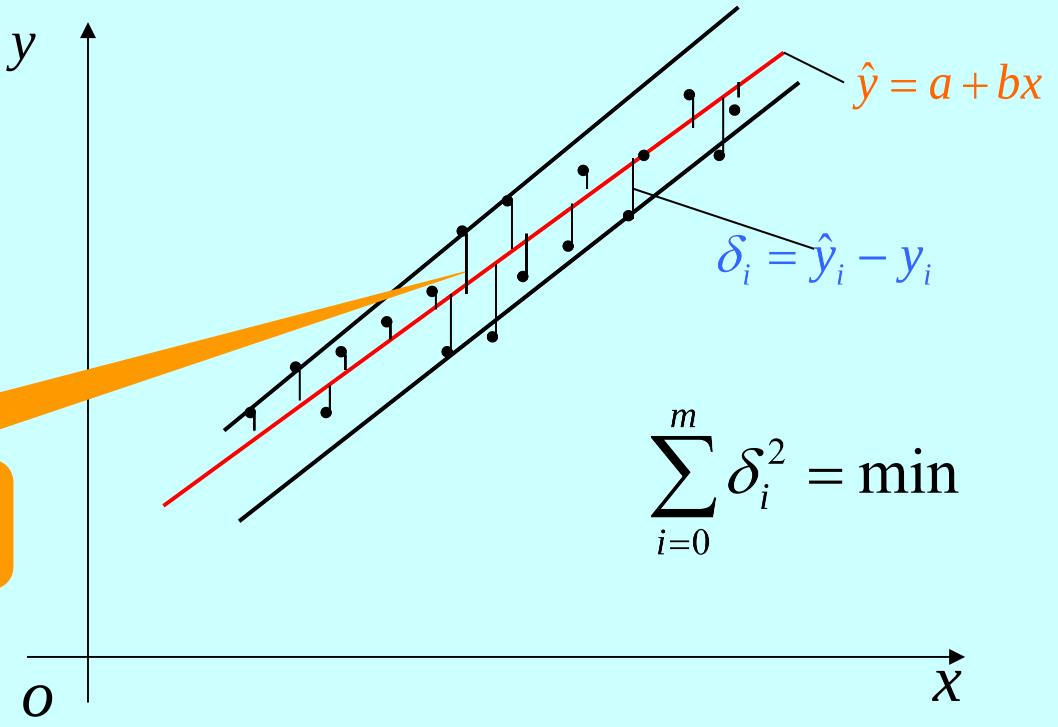
$$y = f(x)$$

的近似表达式，必然将误差带入函数关系式中，甚至可能得到与实际不符的结果。

例如，假设 x, y 满足线性关系

$$y = a + bx$$

而在***xOy***坐标平面上将以这组数据为坐标的点描出来（所得图形称为散点图）时，这些点可能并不共线（但这些点又必然在直线 $y=a+bx$ 的周围），因此插值多项式不会是线性函数．只能另选办法确定关系式 $y=a+bx$ **最小二乘法**是处理这类数据拟合问题的好方法。



最小二乘法的几何意义

设 $(x_i, y_i)\ (i=0,1,\cdots,m)$ 为给定的一组数据求一个函数

$$\hat{y} = a + bx$$

使其满足

$$\min = \sum_{i=0}^{m} (\hat{y}(x_i) - y_i)^2$$

则称按上述条件求 $\hat{y}(x)$ 的方法为离散数据 $\{x_i, y_i\}_{i=0}^{m}$ 拟合的最小二乘法简称**最小二乘法**，并称 $\hat{y}(x)$ 为**最小二乘解**。

显然，求解 $\hat{y}(x)$ 等价于求多元数

$$E(a,b) = \sum_{i=0}^{m} (\hat{y}(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^{m} ((a + bx_i) - y_i)^2$$

的最小值点 (a^*, b^*)

令 $\dfrac{\partial E(a,b)}{\partial a}=0$, $\dfrac{\partial E(a,b)}{\partial b}=0$, 得

$$\sum_{i=0}^{m} 2\cdot[(a+bx_i)-y_i]\cdot 1=0, \quad \sum_{i=0}^{m} 2\cdot[(a+bx_i)-y_i]\cdot x_i=0,$$

即

$$\sum_{i=0}^{m}[(a+bx_i)-y_i]=0, \quad \sum_{i=0}^{m}[(a+bx_i)\cdot x_i-x_i\cdot y_i]=0$$

进一步有，

$$\left(\sum_{i=0}^{m}1\right)a+\left(\sum_{i=0}^{m}x_i\right)b=\sum_{i=0}^{m}y_i$$

$$\left(\sum_{i=0}^{m}x_i\right)a+\left(\sum_{i=0}^{m}x_i^2\right)b=\sum_{i=0}^{m}x_i\cdot y_i$$

写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^{m} x_i \\ \sum_{i=0}^{m} x_i & \sum_{i=0}^{m} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{m} y_i \\ \sum_{i=0}^{m} x_i \cdot y_i \end{pmatrix}$$

称此方程组为**法方程组**。可由**Gramer**法则求解该方程组，即得

$$a = \frac{\left(\sum_{i=0}^{m} x_i^2\right) \cdot \left(\sum_{i=0}^{m} y_i\right) - \left(\sum_{i=0}^{m} x_i\right) \cdot \left(\sum_{i=0}^{m} x_i \cdot y_i\right)}{(m+1) \cdot \left(\sum_{i=0}^{m} \cdot x_i^2\right) - \left(\sum_{i=0}^{m} \cdot x_i\right)^2}$$

$$b = \frac{(m+1) \cdot \left(\sum_{i=0}^{m} x_i \cdot y_i\right) - \left(\sum_{i=0}^{m} x_i\right) \cdot \left(\sum_{i=0}^{m} y_i\right)}{(m+1) \cdot \left(\sum_{i=0}^{m} \cdot x_i^2\right) - \left(\sum_{i=0}^{m} \cdot x_i\right)^2}$$

一般情况

设 $(x_i, y_i)(i=0,1,\dots,m)$ 为给定数据，$\omega_i > 0$ 为各点的权系数

函数空间 $S = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\}$

求一个 $s^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* \varphi_k(x) \in S$ 使得

$$\sum_{i=0}^{m} \omega_i (s^*(x_i) - y_i)^2 = \min_{s(x)\in S} \sum_{i=0}^{m} \omega_i (s(x_i) - y_i)^2 \qquad \textbf{(5-83)}$$

称按条件**(5-83)**求函数 $s^*(x)$ 的方法为数据拟合的最小二乘法

并称 $s^*(x)$ 为最小二乘解。

求解 $s^*(x)$ 等价于求多元函数

$$E(a_0,a_1,\dots,a_n) = \sum_{i=0}^{m}\omega_i(s(x_i)-y_i)^2 = \sum_{i=0}^{m}\omega_i(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i)^2$$

的最小值点 $(a_0^*,a_1^*,\dots,a_n^*)$ 利用多元函数求极值的必要条件

$$\frac{\partial E}{\partial a_j}=0,\ \ j=0,1,\dots,n \quad \Leftrightarrow 2\sum_{i=0}^{m}\omega_i(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i)\varphi_j(x_i)=0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=0}^{n}(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i))a_k = \sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_j(x_i)$$

法方程组

定义函数的离散型内积

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

则法方程组可写为 $$\sum_{k=0}^{n}(\varphi_k,\varphi_j)a_k=(f,\varphi_j),\quad j=0,1,\dots,n$$

与连续型内积一致

矩阵形式为

$$\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\ (f,\varphi_1)\\ \vdots\\ (f,\varphi_n)\end{pmatrix}$$

系数矩阵非奇异等价于 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\dots,\varphi_n(x)$ 线性无关

$$(s^*-f,s^*-f)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s^*(x_i)-f(x_i))^2$$

称为最小二乘解 $s^*(x)$ 的平方误差， $\sqrt{\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s^*(x_i)-f(x_i))^2}$

称为均方误差。

用最小二乘法做数据拟合问题的步骤是：

- 根据散点图中散点的分布情况或根据经验确定拟合的曲线的类型；
- 建立并求解法方程组。

例3 求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y = a + bx$。

x_i	0	1	2	3	4
y_i	-2.1	-0.9	-0.1	1.1	1.9

解 法方程组为:

$$\begin{pmatrix} 5 & \sum_{i=1}^{5} x_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i & \sum_{i=1}^{5} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{5} y_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot y_i \end{pmatrix}$$

即

$$\begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 9.8 \end{pmatrix}$$

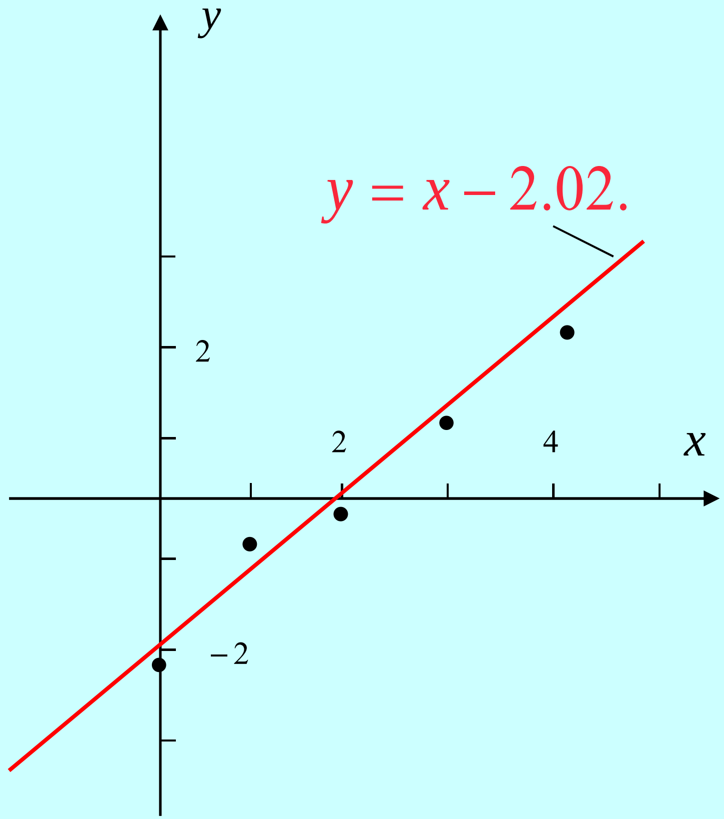
解得

$$a = \frac{30\times(-0.1)-10\times 9.8}{5\times 30-10^2} = -2.02$$

$$b = \frac{5\times 9.8-10\times(-0.1)}{5\times 30-10^2} = 1$$

故所求直线方程是 $y = x - 2.02.$

拟合数据的最小二乘曲线示意图



要拟合数据表

x_i	0	1	2	3	4
y_i	−2.1	−0.9	−0.1	1.1	1.9

$y = x - 2.02$为最小二乘曲线

以上讨论的是线性最小二乘拟合问题，即拟合函数是待定参量的线性函数，法方程组是线性方程组。但有时也会遇到非线性情形。

例如，已知拟合曲线方程的形式为

$$y = ce^{bx} \quad \text{或} \quad y = cx^{b}$$

此时法方程组是非线性方程组（求解比较困难）：

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{m} c\left(e^{bx_i}\right)^2 - y_i e^{bx_i} = 0 \\ \sum_{i=0}^{m} c^2 \cdot x_i \cdot \left(e^{bx_i}\right)^2 - c \cdot x_i \cdot y_i e^{bx_i} = 0 \end{cases} \quad \text{和} \quad \begin{cases} \sum_{i=0}^{m} c\left(x_i^b\right)^2 - y_i \cdot x_i^b = 0 \\ \sum_{i=0}^{m} c^2 \cdot \left(x_i^b\right)^2 \cdot \ln x_i - c \cdot x_i^b \cdot y_i \cdot \ln x_i = 0 \end{cases}$$

我们可按如下方式将非线性问题转为线性问题：

$$y = cx^{b} \quad \text{或} \qquad y = ce^{bx}$$

取　$\ln y = b \cdot \ln x + \ln c$ ，记　$z = \ln y$, $t = \ln x$, $a = \ln c$;

取　$\ln y = bx + \ln c$ ，记　$z = \ln y$,　$a = \ln c$;

则上述非线性问题就变为由观测数据

(t_i, z_i)　$(i = 0, 1, \cdots, m)$　其中　$z_i = \ln y_i$　$t_i = \ln x_i$

或

(x_i, z_i)　$(i = 0, 1, \cdots, m)$　其中　$z_i = \ln y_i$

求最小二乘拟合曲线 $z = a + bt$ 或 $z = a + bx$ 这是个线性问题。

例4 求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y = ce^{bx}$

x_i	1.00 +	1.25 +	1.50 +	1.75 +	2.00	= 7.50
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46	
$\ln y_i$	1.629 +	1.756 +	1.876 +	2.008 +	2.135	= 9.404

解 取 $\ln y = bx + \ln c$, 令 $z = \ln y$, $a = \ln c$ 则上述问题化为求最小二乘拟合曲线，$z = a + bx$ 。那么 $z_i = \ln y_i$ 相应的值如表中所示。

$$\begin{pmatrix} 5 & \sum_{i=1}^{5} x_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i & \sum_{i=1}^{5} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{5} \ln y_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot \ln y_i \end{pmatrix} \quad \text{即} \quad \begin{pmatrix} 5 & 7.50 \\ 7.50 & 11.875 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.404 \\ 14.422 \end{pmatrix}$$

解得

$$b=\frac{14.422\times 5-7.5\times 9.404}{5\times 11.875-7.5^2}=0.5056$$

$$a=\frac{9.404\times 11.875-7.5\times 14.422}{5\times 11.875-7.5^2}=1.122$$

又

$c=e^a=e^{1.122}\approx 3.071$，故所求最小二乘曲线是

$$y=3.071e^{0.5056x}$$

又例如，拟合曲线方程的形式为

$$y=\frac{1}{a+bx} \quad \text{或} \quad y=a+\frac{b}{x}$$

可设

$$Y=\frac{1}{y}\text{，则得}\quad Y=a+bx$$

又设

$$X=\frac{1}{x}\text{，则得}\quad y=a+bX$$

法方程组的系数矩阵经常是病态矩阵，在实际应用中，采用**S**的（离散）正交（多项式）基.

定义5.5 设给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 以及各点权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$ ，如果多项式族 $\{p_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 满足

$$(p_k, p_j) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i p_k(x_i) p_j(x_i) = \begin{cases} 0, & j \neq k, \\ A_k > 0, & j = k. \end{cases}$$

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

利用正交多项式作基底时，法方程组的系数矩阵是非奇异的对角阵。

补充：（最高项系数为1的）正交多项式三项递推式的证明

令 $p_0(x)=1,\quad p_1(x)=(x-\alpha_0)p_0(x)=x-\alpha_0$

由 $(p_0,p_1)\ =(p_0,x-\alpha_0)\ =(p_0,xp_0-\alpha_0p_0)$

$$=(p_0,xp_0)-\alpha_0(p_0,p_0)\ =0\ \Rightarrow\alpha_0=\frac{(xp_0,p_0)}{(p_0,p_0)}$$

利用归纳法，一般情况，由正交多项式的性质

$$xp_k\ =c_0p_0+\cdots+c_{k-1}p_{k-1}+c_kp_k+c_{k+1}p_{k+1}$$

由首项系数为1，知 $c_{k+1}=1$

当$i<k-1$时 $(xp_k,p_i)=(p_k,xp_i)\ =0\ =c_i(p_i,p_i)\Rightarrow c_i=0\ (i<k-1)$

$$=c_0(p_0,p_i)+\cdots+c_{k-1}(p_{k-1},p_i)+c_k(p_k,p_i)+c_{k+1}(p_{k+1},p_i)$$

于是
$$xp_k=\beta_{k-1}p_{k-1}+\alpha_k p_k+p_{k+1}$$

$$\Leftrightarrow p_{k+1}=(x-\alpha_k)p_k-\beta_{k-1}p_{k-1} \qquad \textbf{(5-93)}$$

由 $(xp_k,p_k)=\alpha_k(p_k,p_k)$

$$\Rightarrow \alpha_k=\frac{(xp_k,p_k)}{(p_k,p_k)} \qquad (k=0,1,2,\ldots) \qquad \textbf{(5-94)}$$

再由 $(xp_k,p_{k+1})=(p_{k+1},p_{k+1}) \quad \Rightarrow (xp_{k-1},p_k)=(p_k,p_k)$

$$(xp_k,p_{k-1})=(p_k,xp_{k-1})=(p_k,p_k)=\beta_{k-1}(p_{k-1},p_{k-1})$$

$$\Rightarrow \beta_{k-1}=\frac{(p_k,p_k)}{(p_{k-1},p_{k-1})} \qquad (k=0,1,2,\ldots) \qquad \textbf{(5-95)}$$