GZH007Y 40/2

高等工程数学

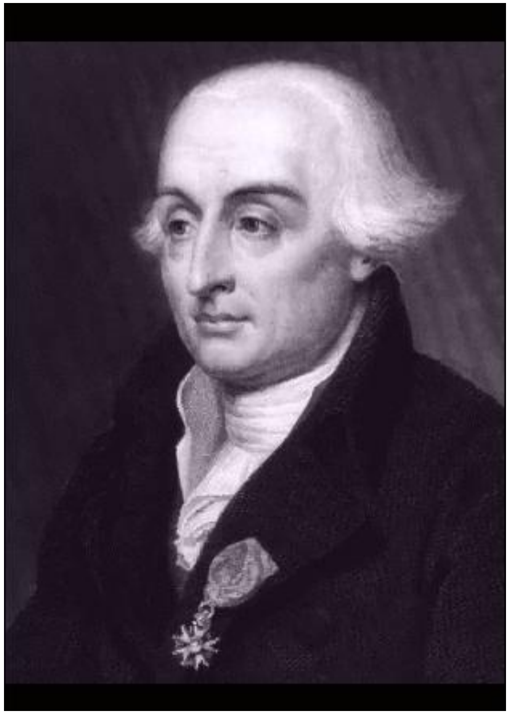
Advanced Engineering Mathematics

王 泳

中国科学院大学

2017.10.28

如果我继承可观的财产，我在数学上可能就没有多少价值了



— 拉格朗日 (J. L. Lagrange 1735-1813)

法国数学家、天体物理学家

数值分析

数值分析就是研究各种数学问题的数值计算的方法和理论的学科

数值分析绪论

线性代数方程组的解法

插值方法

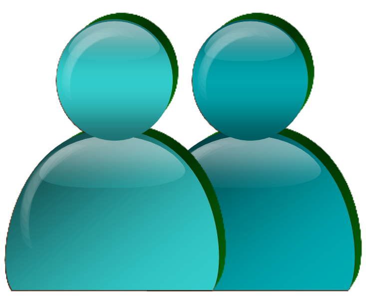
数值积分和数值微分公式

方程求根

常微分方程的数值解法

第七章：插值方法

1. 插值问题的基本概念
2. 拉格朗日（Lagrange）插值
3. 牛顿（Newton）插值多项式
4. 三次样条差值
5. 曲线拟合的最小二乘法

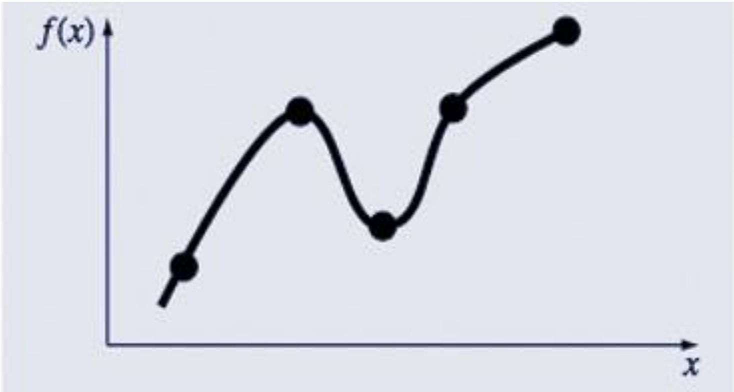


背景问题：曲线拟合

- 通过五个数据点的三种“最佳”曲线拟合

线性插值

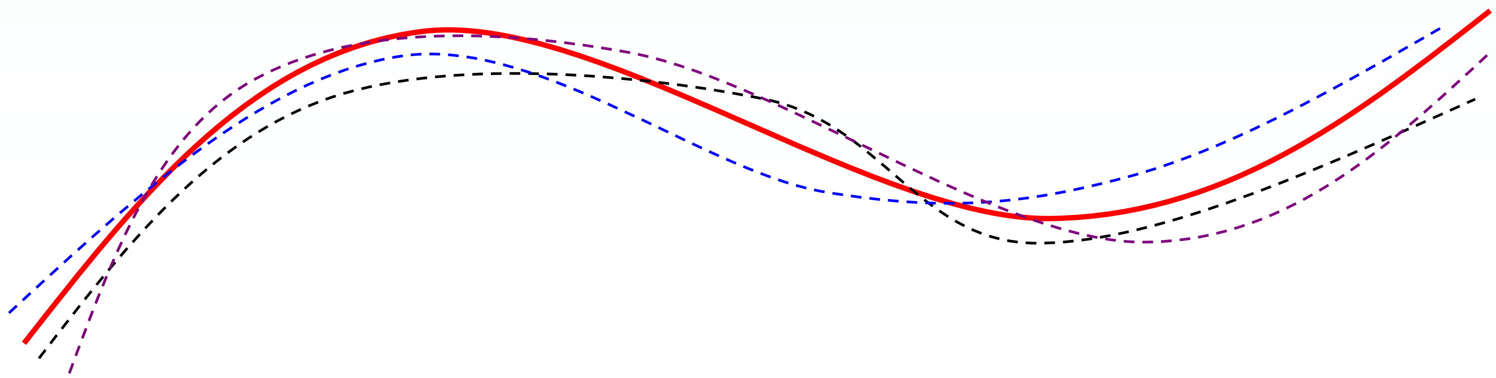
最小二乘回归



曲线插值

背景问题：曲线拟合

- 问题



如何用函数来逼近这条曲线？

- 问题

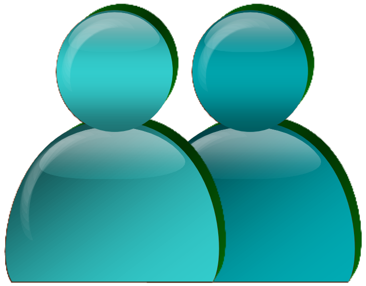
怎样计算 $e^{-2.1}$？

插值问题是计算函数值的一类近似处理方法。这些问题的产生，可能是已知函数太复杂，或者是已知函数表达式未知，而这两者都不便使用。这时，我们就希望通过已知函数的一些离散的值，按照一定的要求，构造出此函数的另外一个近似解析表达式。

一种常用的办法是从某个性质优良、便于计算的函数类$\{p(x)\}$中选出一个函数$p(x)$，如代数多项式。寻找$p(x)$的方法就是插值法。

插值问题的基本概念

1. 插值问题的基本概念
2. 拉格朗日（Lagrange）插值
3. 牛顿（Newton）插值多项式
4. 三次样条差值
5. 曲线拟合的最小二乘法



插值问题的基本概念

设函数 $y=f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 连续，给定 $n+1$ 个点 $a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$ ，已知 $f(x_i)=y_i$（$i=0,1,\cdots,n$），在函数类 $\{p(x)\}$ 中找到一函数 $p(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似表达式，使满足

$$p(x_i)=f(x_i) \quad (i=0,1,\cdots,n) \tag{7.1}$$

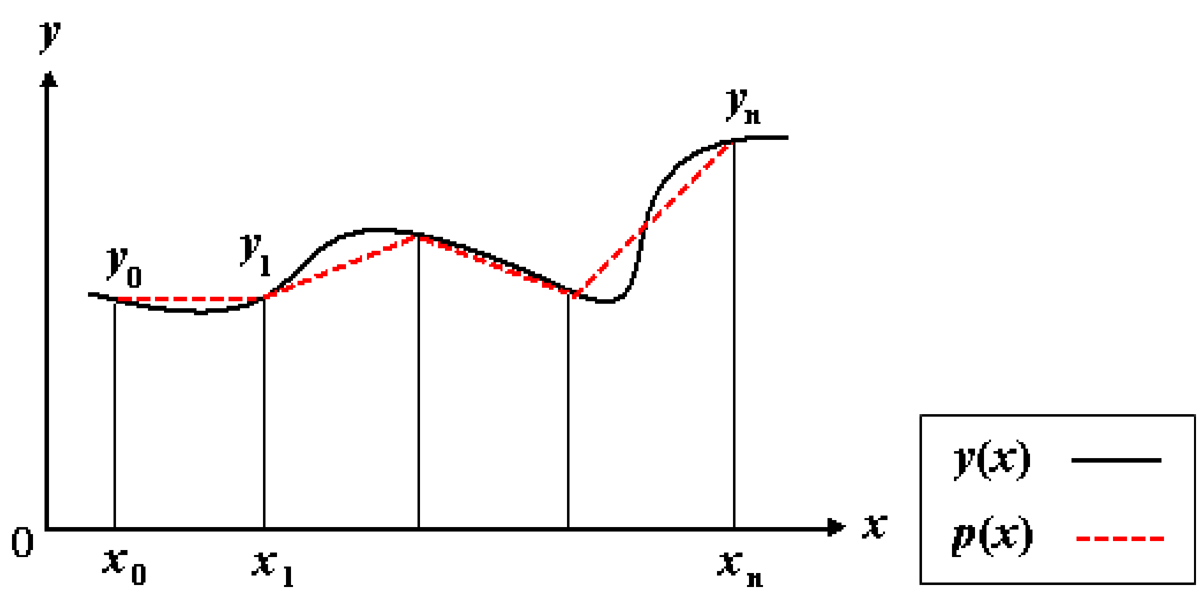
这时，称 $f(x)$ 为被插值函数，$p(x)$ 为插值函数，x_i 为插值节点，$[a,b]$ 为插值区间，式（7.1）为插值条件。求插值函数 $p(x)$ 的方法被称为插值方法。

在构造插值函数时，函数类 $\{p(x)\}$ 的不同选取，对应各种不同的插值方法，这里我们主要研究函数类 $\{p(x)\}$ 是代数多项式的情形，即多项式插值，或称代数插值。

插值问题的基本概念

代数插值有明确的几何意义，就是通过平面上给定的$n+1$个互异点(x_i, y_i)（$i=0,1,\cdots,n$）

作一条次数不超过n次的代数曲线$y=p(x)$近似地表示曲线$y=f(x)$



插值问题的基本概念

设 n 次多项式 $p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n$ 是函数 $y=f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个互不相同的节点 x_i（$i=0,1,\cdots,n$）上的插值多项式，则求 $p(x)$ 的问题就可以归结为求它的系数 a_i（$i=0,1,\cdots,n$）。

根据插值条件 $p(x_i)=f(x_i)$（$i=0,1,\cdots,n$）可以得到以系数 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 为未知元的 $n+1$ 阶线性代数方程组：

$$\begin{cases} a_0+a_1x_0+a_2x_0^2+\cdots+a_nx_0^n=y_0 \\ a_0+a_1x_1+a_2x_1^2+\cdots+a_nx_1^n=y_1 \\ \quad\vdots \\ a_0+a_1x_n+a_2x_n^2+\cdots+a_nx_n^n=y_n \end{cases} \tag{7.2}$$

其系数行列式就是范德蒙德（Vandermonde）行列式：

$$V(x_0,x_1,\cdots x_n)=\begin{vmatrix}1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ & & \vdots & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}=\prod_{0\le i<j\le n}^{n}(x_i-x_j) \qquad (7.3)$$

因为 x_i 互不相同，所以上式不为零。根据解线性方程组的克莱姆（Cramer）法则，方程组（7.2）的解 a_i 存在且唯一，从而 $p(x)$ 被唯一确定，这就说明了 n 次代数插值问题的解是存在且唯一的。

■ **定理 6.1**　n 次代数插值问题的解存在且唯一

上述定理的证明过程实际上已经提供了一种构造插值多项式 $p(x)$ 的方法，即可以通过求方程组（7.2）的解 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 得到。但相对来说计算较复杂。由于插值多项式的唯一性保证了无论用什么方法获得满足插值条件的多项式都是用一个多项式，因此，可以采用其它更简便的方法来确定多项式 $p(x)$。

$$
\begin{cases}
a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n = y_0 \\
a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n = y_1 \\
\qquad \vdots \\
a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n = y_n
\end{cases}
\qquad (7.2)
$$

拉格朗日（Lagrange）插值

1 插值问题的基本概念

2 拉格朗日（Lagrange）插值

3 牛顿（Newton）插值多项式

4 三次样条差值

5 曲线拟合的最小二乘法

■ 插值基函数

拉格朗日插值是多项式插值中最基础的一种。为了便于理解基函数的概念，我们从简单到一般情形来描述基函数及拉格朗日插值多项式。

线性插值：已知函数的两个点(x_0, y_0)，(x_1, y_1)，求满足插值条件$p_1(x_i)=y_i$（$i=0,1$）的插值多项式$p_1(x)$。

所求的$p_1(x)$为过(x_0, y_0)，(x_1, y_1)的直线，即

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

整理后得 $$p_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1$$

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

拉格朗日（Lagrange）插值

$$p_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1$$

上式中，$l_0(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}$，$l_1(x)=\frac{x-x_0}{x_1-x_0}$，这是两个一次函数，注意到它们的构造方法，

并可验证它们具有性质：

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

称 $l_0(x)$，$l_1(x)$ 为线性插值基函数。

拉格朗日（Lagrange）插值

当给定 $n+1$ 个插值点后，可以类似地定义 n 次插值基函数，并以此为基础构造 n 次拉格朗日插值多项式 $p_n(x)$。

为求一个 n 次插值多项式 $l_k(x)$，使它在各节点 x_i（$i=0,1,\cdots,n$）上的值为

$$l_k(x_i)=\begin{cases}1, & i=k\\0, & i\neq k\end{cases}\quad (i,k=0,1,2,\cdots,n) \tag{7.4}$$

由条件 $l_k(x_i)=0$（$i\neq k$），易知 x_0，x_1，…，$\boxed{x_{k-1}，x_{k+1}}$，…，x_n 都是 $l_k(x)$ 的零点，因此可设

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

其中，A_k 为待定系数。又由条件 $l_k(x_k)=1$ 且 x_i 互异可确定系数 A_k 为

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

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

于是得
$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$$
$$=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)} \qquad (7.5)$$

由（7.5）式所表示的 n 次多项式 $l_k(x)$（$k=0,1,2,\cdots,n$）被称为以 x_0，x_1，…，x_n 为节点的 n 次基本插值多项式或 n 次拉格朗日插值基函数。

- **拉格朗日插值多项式**

$$\boxed{p_1(x)=\frac{x-x_1}{x_0-x_1}y_0+\frac{x-x_0}{x_1-x_0}y_1=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1}$$

- **定理 7.2**

n 次代数插值问题的解可表示为

$$p_n(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+\cdots+l_n(x)y_n=\sum_{k=0}^{n}l_k(x)y_k \qquad (7.6)$$

■ **定理 7.2**

n 次代数插值问题的解可表示为

$$p_n(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+\cdots+l_n(x)y_n=\sum_{k=0}^{n}l_k(x)y_k \qquad (7.6)$$

证明：

由于 $l_k(x)$（$k=0,1,2,\cdots,n$）都是 n 次多项式，所以 $p_n(x)=\sum_{k=0}^{n}l_k(x)y_k$ 是次数不超过 n 次的多项式，

且由
$$l_k(x_i)=\delta_{ki}=\begin{cases}1, & i=k\\ 0, & i\neq k\end{cases} \qquad (i,k=0,1,2,\cdots,n)$$

得
$$p_n(x_i)=\sum_{k=0}^{n}l_k(x_i)y_k=\sum_{k=0}^{n}\delta_{ki}y_k=y_i \qquad (i=0,1,2,\cdots,n)$$

命题得证

所以（7.6）式就是满足要求的 n 次代数插值多项式。

拉格朗日（Lagrange）插值

我们称形如（7.6）式的插值多项式为拉格朗日插值多项式，并记为$L_n(x)$，即

$$L_n(x)=\sum_{k=0}^{n} l_k(x)\,y_k \tag{7.7}$$

$$\boxed{\begin{aligned} l_k(x)&=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} \\ &=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)} \end{aligned} \qquad (7.5)}$$

由定理 7.1 知，（7.7）式必定与解方程组（7.2）所确定的插值多项式相同。因而，它只是插值多项式的另一种表示形式。上述构造插值多项式的方法被称为基函数法。

例如，当$n=1$时，拉格朗日插值多项式（7.7）为

$$L_1(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1 \tag{7.8}$$

用$L_1(x)$近似代替$f(x)$被称为线性插值，（7.8）式被称为线性插值多项式或一次插值多项式。

当$n=2$时，拉格朗日插值多项式（7.7）为

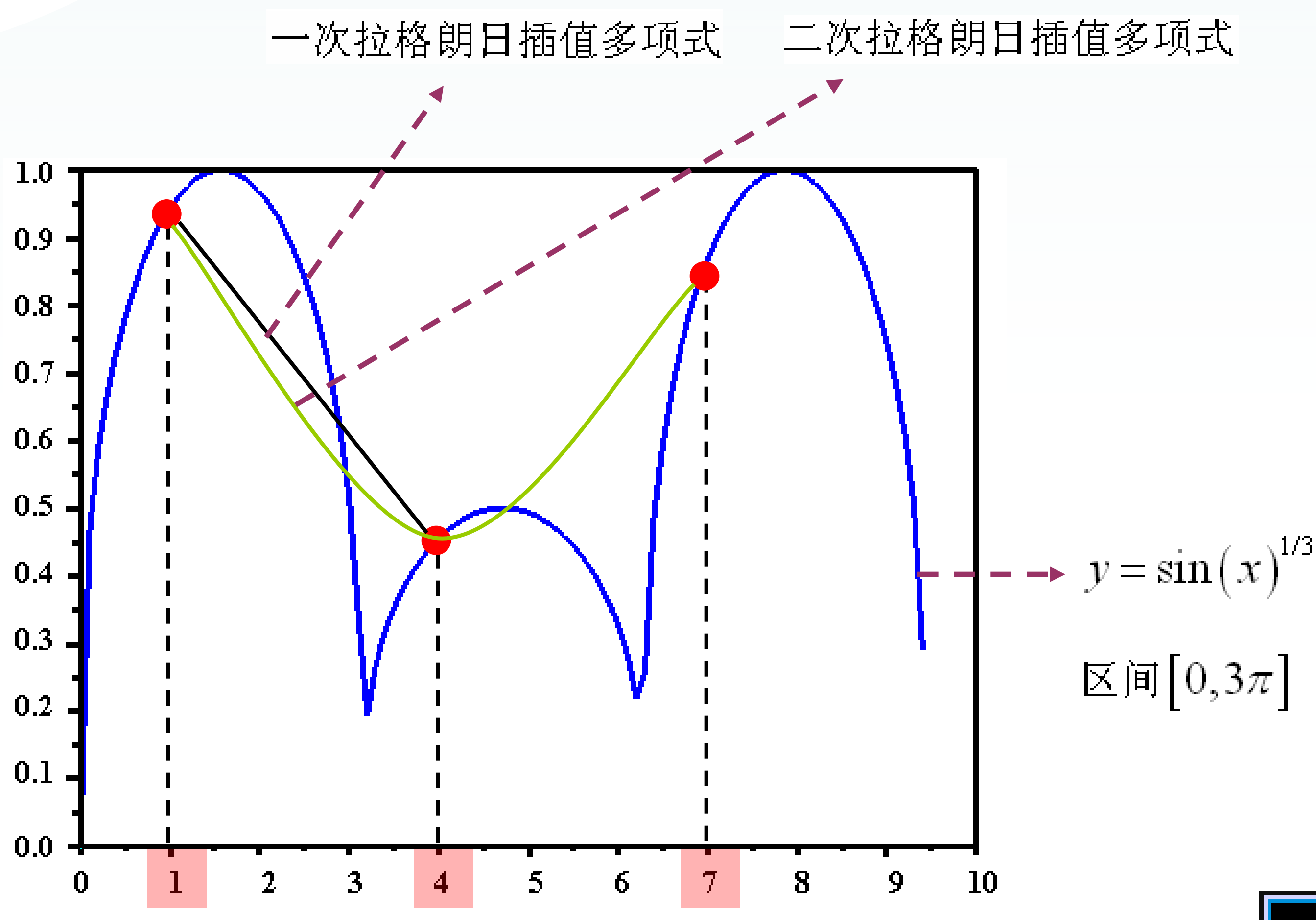
$$L_2(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2$$

即

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2 \tag{7.9}$$

用$L_2(x)$近似代替$f(x)$被称为二次插值或抛物线插值，（7.9）式被称为二次插值多项式。

拉格朗日（Lagrange）插值



插值点分别为$\left(1,\sin(1)^{1/3}\right)$，$\left(4,\sin(4)^{1/3}\right)$，$\left(7,\sin(7)^{1/3}\right)$

拉格朗日（Lagrange）插值

从（7.5）式可以看出，拉格朗日插值基函数 $l_k(x)$（$k=0,1,2,\cdots,n$）仅与节点有关，与被插值函数 $f(x)$ 无关。从（7.7）式则可以看出，拉格朗日插值多项式仅由数据 (x_i,y_i)（$i=0,1,\cdots,n$）确定，而与数据的排列次序无关。

$$\boxed{\begin{aligned} l_k(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} \\ &= \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq k}}^{n} \frac{(x-x_j)}{(x_k-x_j)} \qquad (7.5) \\ L_n(x) &= \sum_{k=0}^{n} l_k(x)\,y_k \qquad (7.7) \end{aligned}}$$

牛顿（Newton）插值多项式

1. 插值问题的基本概念
2. 拉格朗日（Lagrange）插值
3. 牛顿（Newton）插值多项式
4. 三次样条差值
5. 曲线拟合的最小二乘法

牛顿（Newton）插值多项式

拉格朗日插值多项式作为一种计算方案，公式简洁，理论分析也方便。

但缺点是当改变节点或增加节点时，必须全部重新计算。这在实际计算中是很不方便的。

为此，我们介绍另一种形式的插值多项式—牛顿（Newton）插值多项式。

差商是一个具体数值

■ 定义7.1 （差商）

设函数 $f(x)$ 在互异点 x_0， x_1， $\cdots$ 上的值为 $f(x_0)$， $f(x_1)$， $\cdots$。 定义

（1） $f(x)$ 在 x_i， x_j 上的一阶差商为 $$f[x_i,x_j]=\frac{f(x_j)-f(x_i)}{x_j-x_i}$$

（2） $f(x)$ 在 x_i， x_j， x_k 上的二阶差商为 $$f[x_i,x_j,x_k]=\frac{f[x_j,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_i}$$

（3）递推下去， $f(x)$ 在 x_0， x_1， $\cdots x_k$ 上的 k 阶差商为

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$

同时规定 $f(x)$ 在 x_i 上的零阶差商为 $f[x_i]=f(x_i)$

牛顿（Newton）插值多项式

$$\overline{w}'_{k+1}(x_j)=\prod_{\substack{i=0\\i\neq j}}^{k}(x_j-x_i)$$

■ 差商的性质

（1）k 阶差商可以表示成 $k+1$ 个节点上的函数值的线性组合，即

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

（2）差商对其节点具有对称性，即

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=f[x_{i_0},x_{i_1},\cdots,x_{i_k}]$$

其中 $x_{i_0},x_{i_1},\cdots,x_{i_k}$ 是 $x_0,x_1,\cdots,x_k$ 的任一排列。这一性质可根据性质（1）直接得到

（3）若 $f(x)$ 具有 k 阶连续导数，则

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

其中 ξ 在 $k+1$ 个节点之间。

牛顿（Newton）插值多项式

给定节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 和函数值 $f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n)$，可按下表逐次计算各阶差商值，下表被称为差商表。

差商表

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	$\cdots$	n 阶差商
x_0	$f(x_0)$				$\cdots$	
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0, x_1]$			$\cdots$	
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2]$		$\cdots$	
x_3	$f(x_3)$	$f[x_2, x_3]$	$f[x_1, x_2, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	$\cdots$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		
x_n	$f(x_n)$	$f[x_{n-1}, x_n]$	$f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$	$f[x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$	$\cdots$	$f[x_0, x_1, \cdots, x_n]$

牛顿（Newton）插值多项式

■ 牛顿插值多项式及其余项

由差商的定义，把 x 看成 $[a,b]$ 上一点，可得

$$f[x_i,x_j]=\frac{f(x_j)-f(x_i)}{x_j-x_i}$$

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

$$f[x_i,x_j,x_k]=\frac{f[x_j,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_i}$$

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

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

$$\vdots$$

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

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$

牛顿（Newton）插值多项式

只要把后一式代入前一式，就得到

$$f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]+(x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]+\cdots+$$
$$(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})f[x_0,x_1,\cdots,x_n]+(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]$$

若记

$$\begin{aligned}N_n(x)=&f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]+\\&(x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]+\cdots+\\&(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})f[x_0,x_1,\cdots,x_n]\end{aligned} \tag{7.12}$$

$$\begin{aligned}R_n(x)&=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]\\&=\overline{w}_{n+1}(x)f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]\end{aligned} \tag{7.13}$$

则有

$$f(x)=N_n(x)+R_n(x)$$

牛顿（Newton）插值多项式

易见，$N_n(x)$是n次多项式，而且满足$N_n(x_i)=f(x_i)$（$i=0,1,\cdots,n$）。由插值多项式的唯一性可知，$N_n(x)$是$f(x)$满足条件$N_n(x_i)=f(x_i)$（$i=0,1,\cdots,n$）的n次插值多项式，$N_n(x)$被称为n次牛顿（Newton）插值多项式。

再根据插值多项式的唯一性可知$N_n(x)=L_n(x)$，因此，$N_n(x)$的插值余项为

$$
\begin{aligned}
R_n(x)&=f(x)-N_n(x)=\underline{\bar{w}_{n+1}(x)f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]}\\
&=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)=\underline{\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\bar{w}_{n+1}(x)}
\end{aligned}
$$

从而有
$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

也就有 $f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\dfrac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$ ξ在$x_0,x_1,\cdots,x_n$之间，这也就是前述的性质（3）

牛顿（Newton）插值多项式

现在可以看到，如果插值过程中增加节点，如由 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 增加 x_{n+1}，即相当于增加插值条件 $N_{n+1}(x_{n+1}) = f(x_{n+1})$，这时只要在（7.12）式增加一项

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

即可满足插值条件，于是可得新的牛顿插值公式

$$N_{n+1}(x) = N_n(x) + \underline{\overline{w}_{n+1}(x)}\, f[x_0, x_1, \cdots, x_{n+1}]$$

$$\boxed{\begin{aligned} N_n(x) = {} & f(x_0) + (x-x_0) f[x_0, x_1] + \\ & (x-x_0)(x-x_1) f[x_0, x_1, x_2] + \cdots + \\ & (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \end{aligned} \qquad (7.12)}$$

■ 例7.2

给出函数 $y=f(x)$ 的函数表

x_i	-2	0	1	2
$f(x_i)$	17	1	2	17

写出 $f(x)$ 的差商表，并求 $f(x)$ 的节点为 x_0，x_1 的一次插值，x_0，x_1，x_2 的二次插值和 x_0，x_1，x_2，x_3 的三次插值。

牛顿（Newton）插值多项式

解： 差商表如下

x_k	$f(x_k)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
$x_0=-2$	17			
$x_1=0$	1	-8		
$x_2=1$	2	1	3	
$x_3=2$	17	15	7	1

因此

$$N_1(x)=17-8(x+2)=1-8x$$

$$N_2(x)=N_1(x)+3(x+2)(x-0)=3x^2-2x+1$$

$$N_3(x)=N_2(x)+1(x+2)(x-0)(x-1)=x^3+4x^2-4x+1$$

思考题　（15分）

已知 $y=\sin(x)$，其函数关系式见下表：

x	1.5	1.6	1.7
$\sin(x)$	0.997 49	0.999 57	0.991 66

试构造出差商表，利用二次牛顿插值公式计算 $\sin(1.609)$（保留 5 位小数）

三次样条插值

1. 插值问题的基本概念
2. 拉格朗日（Lagrange）插值
3. 牛顿（Newton）插值多项式
4. 三次样条差值
5. 曲线拟合的最小二乘法

分段插值法

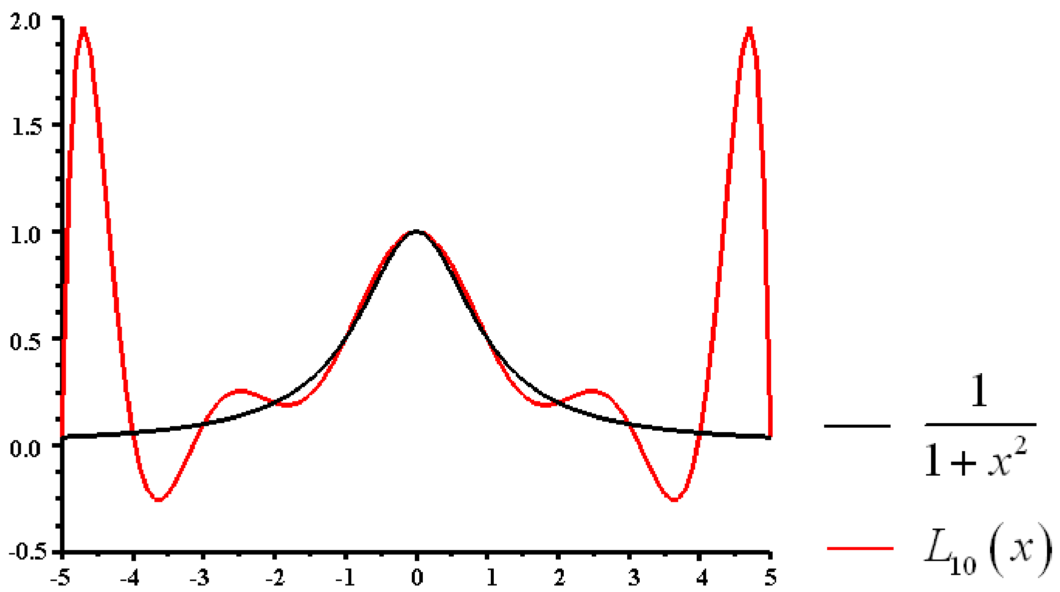
根据区间$[a,b]$上给出的节点可以得到函数$f(x)$的插值多项式，但并非插值多项式的次数越高，逼近函数$f(x)$的精度就越好。

主要原因是因为对任意的插值节点，当$n\to\infty$时，插值多项式$p_n(x)$不一定能收敛到$f(x)$。

1901 年龙格（Runge）就给出了下述等距节点插值多项式$L_n(x)$不收敛到$f(x)$的例子。

给定函数$f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$，它在$[-5,5]$上各阶导数均存在，但在$[-5,5]$上取$n+1$个等距节点$x_i=-5+10\dfrac{i}{n}$（$i=0,1,\cdots,n$）所做的拉格朗日插值多项式$L_n(x)$，当$n\to\infty$时，只在$|x|\le 3.63$内收敛，而在这个区间外是发散的。

下图给出了$n=10$时，$y=L_{10}(x)$（红色线条）与$f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$（黑色线条）的图像。从图中可见，在$x=\pm5$附件，$L_{10}(x)$与$f(x)$偏离很远。例如$L_{10}(4.8)=1.80483$，$f(4.8)=0.4160$。这种高次插值不准确的现象被称为龙格现象。



上述结果提醒我们，不能盲目地使用太多的插值节点去构造高次的插值多项式。实践表明，四次以上的插值已很少使用，为此人们往往采用分段插值的方法。即将插值区间分为若干个小区间，在每个小区间上运用前面介绍的插值方法构造低次插值多项式，常用的分段插值方法有分段线性插值、分段二次插值及分段三次厄米特插值。

■ 三次样条插值

分段插值法具有一致的收敛性，但它只保证插值函数的整体连续性，在各小段的连接处虽然左右导数均存在，但不一定相等，因而在连接处不光滑，不能够满足精密机械设计（如船体、飞机、汽车等的外形曲线设计）对函数光滑性的要求。

早期的工程技术人员在绘制经过给定点的曲线时使用一种有弹性的细长木条（或金属条），被称为样条（Spline），强迫它弯曲通过已知点，弹性力学理论指出样条的挠度曲线具有二阶连续的导函数。从数学上抽象就得到三次样条函数这一概念。

■ 定义 7.3 三次样条插值函数

设函数 $S(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上为二阶导数存在且连续的函数，且在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上是三次多项式，其中 $a=x_0<x_1<x<\cdots<x_n=b$ 是给定节点，则称 $S(x)$ 是节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 上的三次样条函数。若在节点 x_i 上给定函数值 $y_i=f(x_i)$（$i=0,1,\cdots,n$），并成立 $S(x_i)=y_i$（$i=0,1,\cdots,n$），则称 $S(x)$ 为三次样条插值函数。

由于 $S(x)$ 在每个小区间上为三次多项式，故总计有 $4n$ 个待定系数。而根据 $S(x)$ 在 $[a,b]$ 上二阶导数连续，那么在内节点 x_i（$i=1,2,\cdots,n-1$）处应满足连续性条件

$$\begin{cases} S(x_i-0)=S(x_i+0) \\ S'(x_i-0)=S'(x_i+0) \quad （i=1,2,\cdots,n-1） \\ S''(x_i-0)=S''(x_i+0) \end{cases}$$

这有 $3n-3$ 个条件，再加上插值条件 $S(x_i)=y_i$（$i=0,1,\cdots,n$），总共有 $4n-2$ 个条件。因此，还需要附加 2 个条件才可以确定三次样条插值函数 $S(x)$。

通常在区间$[a,b]$两个端点加上所谓边界条件，视具体情况而定。

常见的边界条件有以下几种：

（1） $S'(x_0)=y'_0$， $S'(x_n)=y'_n$；

（2） $S''(x_0)=y''_0$， $S''(x_n)=y''_n$；

（3）假定函数$y=f(x)$是以$b-a$为周期的周期函数，这时要求$S(x)$也是周期函数，即

$$\begin{cases} S(x_0+0)=S(x_n-0) \\ S'(x_0+0)=S'(x_n-0) \\ S''(x_0+0)=S''(x_n-0) \end{cases}$$

这时有$y_0=y_n$，这样确定的$S(x)$为周期样条函数。

三次样条插值

由于三次样条函数在每一个小区间$[x_i, x_{i+1}]$上是三次多项式，所以它的二阶导数是一次多项式。如果用M_i（$i=0,1,\cdots,n$）表示$S(x)$的二阶导数在点x_i上的值$S''(x_i)$，则$S''(x)$在$[x_i, x_{i+1}]$上可表示为

$$S''(x)=M_i\frac{x_{i+1}-x}{h_i}+M_{i+1}\frac{x-x_i}{h_i}$$

式中$h_i=x_{i+1}-x_i$

对$S''(x)$积分两次并利用$S(x_i)=y_i$及$S(x_{i+1})=y_{i+1}$，可求得$[x_i, x_{i+1}]$上的三次样条插值函数表达式：

$$S(x)=M_i\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^3}{6h_i}+\left(y_i-M_i\frac{h_i^2}{6}\right)\frac{x_{i+1}-x}{h_i}+\left(y_{i+1}-M_{i+1}\frac{h_i^2}{6}\right)\frac{x-x_i}{h_i} \tag{5.25}$$

$$S'(x)=-M_i\frac{(x_{i+1}-x)^2}{2h_i}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^2}{2h_i}+\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}-\frac{M_{i+1}-M_i}{6}h_i \tag{5.26}$$

至此，求解三次样条插值函数 $S(x)$ 只需要确定 $n+1$ 个未知参数 M_i（$i=0,1,\cdots,n$）

利用 $S'(x_i+0)=S'(x_i-0)$ 及

$$S'(x_i+0)=S'(x)|_{x=x_i}=-\frac{h_i}{3}M_i-\frac{h_i}{6}M_{i+1}+\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}\quad x\in[x_i,x_{i+1}]$$

$$S'(x_{i+1}-0)=S'(x)|_{x=x_{i+1}}=\frac{h_i}{6}M_i+\frac{h_i}{3}M_{i+1}+\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}\quad x\in[x_i,x_{i+1}]$$

$$\Rightarrow S'(x_i-0)=S'(x)|_{x=x_i}=\frac{h_{i-1}}{6}M_{i-1}+\frac{h_{i-1}}{3}M_i+\frac{y_i-y_{i-1}}{h_{i-1}}\quad x\in[x_{i-1},x_i]$$

可得
$$\mu_i M_{i-1}+2M_i+\lambda_i M_{i+1}=d_i\ （i=1,2,\cdots,n-1）\qquad (7.27)$$

其中
$$\mu_i=\frac{h_{i-1}}{h_{i-1}+h_i},\quad \lambda_i=\frac{h_i}{h_{i-1}+h_i},$$

$$d_i=6\frac{f[x_i,x_{i+1}]-f[x_{i-1},x_i]}{h_{i-1}+h_i}=6f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}]$$ （$i=0,1,\cdots,n$）（f 表示差商）

（7.27）式是关于M_i（$i=0,1,\cdots,n$）的线性方程组，共有$n-1$个方程，因而还需要两个方程才能唯一地确定$S(x)$，若加上适合的边界条件可给出所需要的两个方程，从而得到$n+1$个方程的线性方程组。

对第一种边界条件$S'(x_0)=y'_0$，$S'(x_n)=y'_n$，由（5.26）式可导出

$$\begin{cases} 2M_0+M_1=\dfrac{6}{h_0}\left(f[x_0,x_1]-y'_0\right) \\ M_{n-1}+2M_n=\dfrac{6}{h_{n-1}}\left(y'_n-f[x_{n-1},x_n]\right) \end{cases} \tag{7.28}$$

$$\boxed{S'(x)=-M_i\frac{(x_{i+1}-x)^2}{2h_i}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^2}{2h_i}+\frac{y_{i+1}-y_i}{h_i}-\frac{M_{i+1}-M_i}{6}h_i \qquad (5.26)}$$

于是（7.28）式与（7.27）式一起构成关于$M_0, M_1, \cdots, M_n$的线性方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix} \tag{7.29}$$

其中，$d_0 = \dfrac{6}{h_0}\left(f[x_0, x_1] - y'_0\right)$，$d_n = \dfrac{6}{h_{n-1}}\left(y'_n - f[x_{n-1}, x_n]\right)$。此线性方程组是三对角方程组，可用追赶法求其唯一解。

对于第二种边界条件，即 $S''(x_0)=y_0''$，$S''(x_n)=y_n''$，直接代入（7.27）式可得方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1-\mu_1 y_0'' \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1}-\lambda_{n-1} y_n'' \end{bmatrix} \qquad (7.30)$$

并且根据 M_i 的定义

$$M_0=y_0'', \quad M_n=y_n''$$

$$\boxed{\mu_i M_{i-1}+2M_i+\lambda_i M_{i+1}=d_i \quad (i=1,2,\cdots,n-1) \quad (7.27)}$$

对于第三种边界条件，即周期边界条件，可得两个方程

$$M_0 = M_n, \quad \lambda_n M_1 + \mu_n M_{n-1} + 2M_n = d_n$$

其中，$\lambda_n = \dfrac{h_0}{h_{n-1} + h_0}$，$\mu_n = 1 - \lambda_n = \dfrac{h_{n-1}}{h_{n-1} + h_0}$，$d_n = 6\dfrac{f[x_0, x_1] - f[x_{n-1}, x_n]}{h_0 + h_{n-1}}$

与方程（7.27）一起得方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \mu_1 \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ \lambda_n & & & \mu_n & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix} \qquad (7.31)$$

并且$M_0 = M_n$。

上述各线性方程组的系数矩阵是严格对角占优矩阵，都有唯一解。把解得的$M_0, M_1, \cdots, M_n$

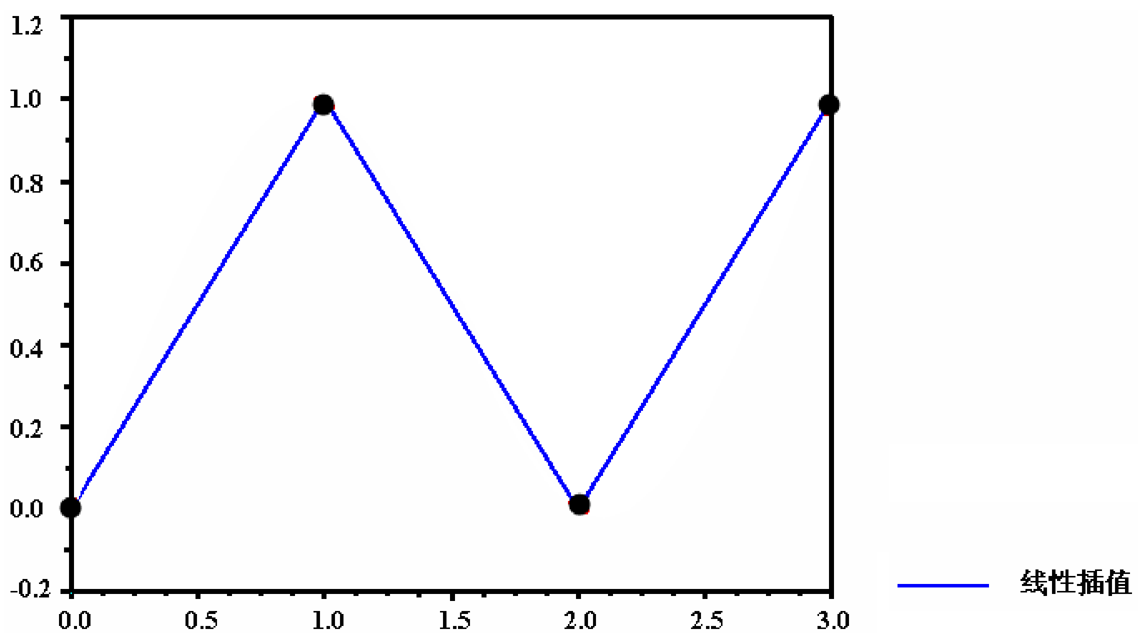
代入（7.25）式，便得到三次样条插值函数$S(x)$的分段表达式。

$$S(x) = M_i \frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i} + M_{i+1}\frac{(x-x_i)^3}{6h_i} + \left(y_i - M_i\frac{h_i^2}{6}\right)\frac{x_{i+1}-x}{h_i} + \left(y_{i+1} - M_{i+1}\frac{h_i^2}{6}\right)\frac{x-x_i}{h_i} \quad (5.25)$$

$$\mu_i = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1}+h_i}, \quad \lambda_i = \frac{h_i}{h_{i-1}+h_i}$$

例7.4

设 $f(0)=0$， $f(1)=1$， $f(2)=0$， $f(3)=1$， $f''(0)=1$， $f''(3)=0$，求 $f(x)$ 在区间 $[0,3]$ 的三次样条插值函数 $S(x)$。



解：

由边界条件 $y_0''=1$， $y_3''=0$， $h_0=h_1=h_2=1$，得

$$\lambda_1=\lambda_2=\mu_1=\mu_2=1/2,\quad d_1=-6,\quad d_2=6$$

由（7.30）式得

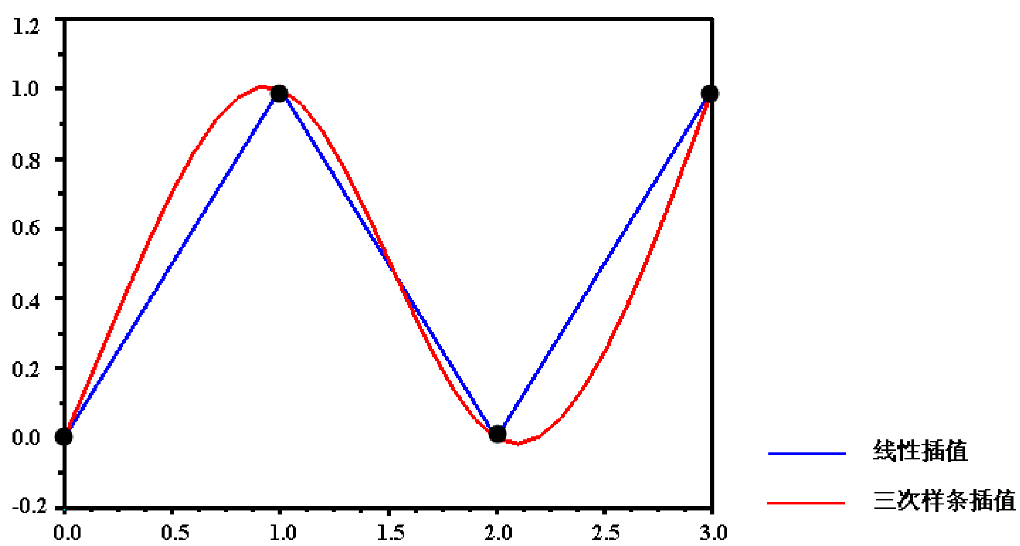
$$\begin{bmatrix} 2 & 1/2 \\ 1/2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -13/2 \\ 6 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1-\mu_1 y_0'' \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1}-\lambda_{n-1}y_n'' \end{bmatrix} \tag{7.30}$$

三次样条插值

解得$M_1=-64/15$，$M_2=61/15$。再根据边界条件$M_0=1$，$M_3=0$，由（7.25）式得

$$S(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{90}\left(-79x^3+45x^2+124x\right) & x\in[0,1]\\ \dfrac{1}{90}\left(125x^3-567x^2+736x-204\right) & x\in[1,2]\\ \dfrac{1}{90}\left(-61x^3+549x^2-1496x+1284\right) & x\in[2,3]\end{cases}$$



三次样条插值

对三次样条插值函数来说，当插值节点逐渐加密时，可以证明：

不但样条插值函数收敛于函数本身，而且其导数也收敛于函数的导数。

这也是三次样条插值函数的一个优点。

曲线拟合的最小二乘法

1 插值问题的基本概念

2 拉格朗日（Lagrange）插值

3 牛顿（Newton）插值多项式

4 三次样条差值

5 曲线拟合的最小二乘法

曲线拟合的最小二乘法

在各种科学实验中，常常需要通过一组实验数据 (x_i, y_i)（$i = 0,1,2,\cdots,n$）来估计函数 $y = f(x)$。

插值方法是处理这类问题的一种方法，但插值法严格要求插值曲线通过各个数据点，而实验数据经常带有误差。所以插值函数保留了一切测试误差，导致插值函数不能很好地反映数据集 (x_i, y_i)（$i = 0,1,2,\cdots,n$）的总体趋势。

因此，对于给定的数据，我们寻找一个简单合理的函数来进行拟合。所谓的曲线拟合就是从数据集 (x_i, y_i)（$i = 0,1,2,\cdots,n$）中找出总体规律，并构造一条能较好反映这种规律的曲线。这里不要求曲线严格通过数据点，但希望曲线 $P(x)$ 能尽量地靠近数据点，也就是误差 $\delta_i = P(x_i) - y_i$（$i = 0,1,2,\cdots,n$）按某种标准达到最小。

也就是说，对给定的一组数据 (x_i, y_i)（$i=0,1,2,\cdots,n$），在函数类 $\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_m(x)\}$ 中寻求一个函数 $P(x)$，使误差平方和

$$\sum_{i=0}^{n} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{n} \left[P(x_i) - y_i\right]^2 \qquad (7.32)$$

达到最小。

这种求逼近函数 $P(x)$ 的方法就被称为曲线拟合的最小二乘法。这里 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_m(x)$ 是 Φ 的一组线性无关的基函数，这时 $P(x) \in \Phi$ 为

$$P(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x) \quad (m < n) \qquad (7.33)$$

上式关于待定参数 $a_0, a_1, \cdots, a_m$ 是一次的，因此求误差平方和的最小值问题可转化为求下列多元函数

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

的极小点 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_m^*$

曲线拟合的最小二乘法

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

即令
$$\frac{\partial F}{\partial a_k}=0 \quad (k=0,1,2,\cdots,m) \tag{7.34}$$

由此可得
$$\sum_{i=0}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m}a_j\varphi_j(x_i)-y_i\right)\varphi_k(x_i)=0 \quad (k=0,1,2,\cdots,m) \tag{7.35}$$

记
$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{n}\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)$$

$$(f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{n}y_i\varphi_k(x_i)=d_k$$

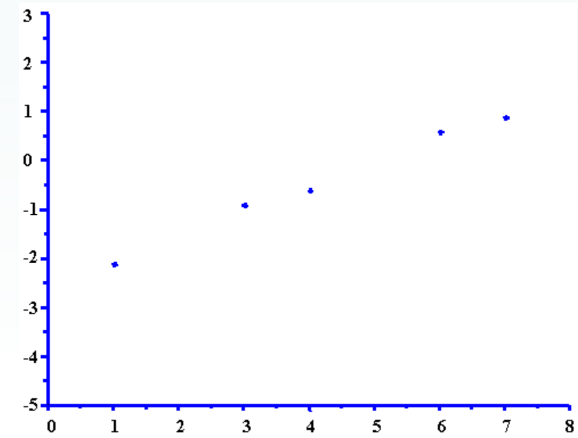
则（7.35）式可以写为

$$\sum_{j=0}^{m}(\varphi_k,\varphi_j)a_j=d_k \quad (k=0,1,2,\cdots,m)$$

把它改写成矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_m) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_m) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_m,\varphi_0) & (\varphi_m,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_m,\varphi_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix} \tag{7.36}$$

这是关于系数 a_j（$j=0,1,2,\cdots,m$）的线性方程组，被称为正则方程（组）。由于 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_m(x)$ 线性无关，故方程组（7.36）的系数矩阵行列式不为零，因此方程组（7.36）有唯一解 $a_0^*,a_1^*,\cdots,a_m^*$。



■ **例7.5**

已知一组实验数据如下表所示：

x_i	1	3	4	6	7
y_i	-2.1	-0.9	-0.6	0.6	0.9

求这组数据的最小二乘拟合曲线。

解：

在坐标平面上描出这些数据点，我们将看到各点在一条直线附件，故设拟合曲线为

$y = a_0 + a_1 x$，

这里

$$n = 4,\quad m = 1,\quad \varphi_0(x) = 1,\quad \varphi_1(x) = x$$

故

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{4}\varphi_0(x_i)\varphi_0(x_i)=5$$

$$(\varphi_0,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}\varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{4}x_i=21$$

$$(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{4}\varphi_1(x_i)\varphi_0(x_i)=\sum_{i=0}^{4}x_i=21$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}\varphi_1(x_i)\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{4}x_i^2=111$$

$$d_0=\sum_{i=0}^{4}y_i\varphi_0(x_i)=\sum_{i=0}^{4}y_i=-2.1$$

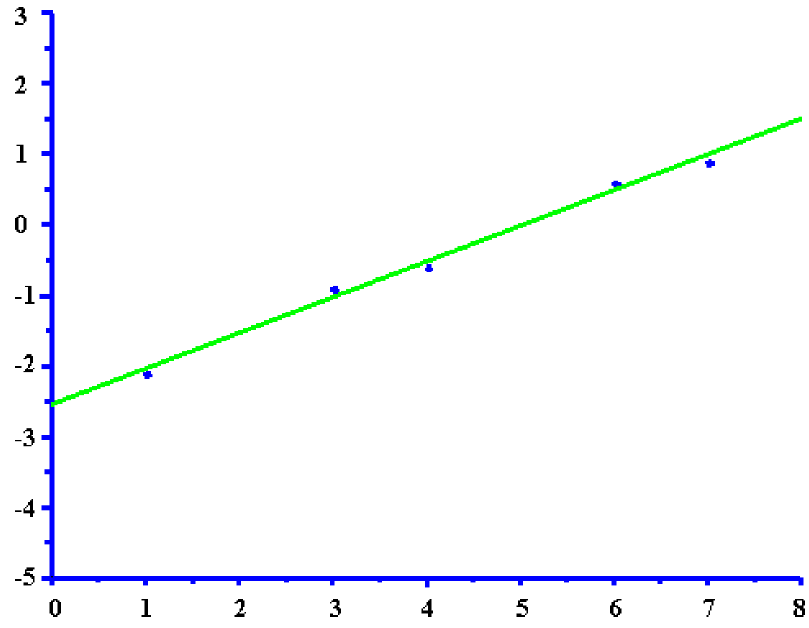
$$d_1=\sum_{i=0}^{4}y_i\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{4}y_ix_i=2.7$$

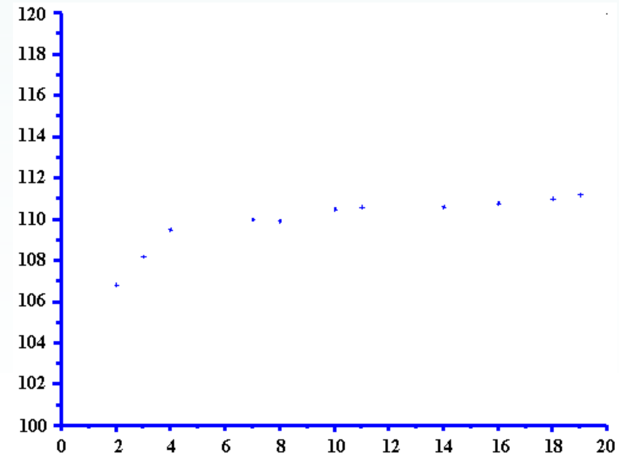
于是正则方程为

$$\begin{cases}5a_0+21a_1=-2.1\\21a_0+111a_1=2.7\end{cases}$$

解得 $a_0^* = -2.542$， $a_1^* = 0.5053$

于是所求拟合曲线为 $y = -2.542 + 0.5053x$





■ **例7.6**

已知一组实验数据如下表所示：

x_i	2	3	4	7	8	10	11	14	16	18	19
y_i	106.82	108.20	109.50	110.00	109.93	110.49	110.59	110.60	110.76	110.00	111.20

求这组数据的最小二乘拟合曲线。

解： 在坐标平面上描出这些数据点，并描出大致的曲线

观察这条曲线近似于何种函数类型。这里选取两种函数类型：

第一种取双曲线的函数 $$y = a_0 + \frac{a_1}{x}$$

这里 $n=10$， $m=1$， $\varphi_0(x)=1$， $\varphi_1(x)=\frac{1}{x}$

于是正则方程组为

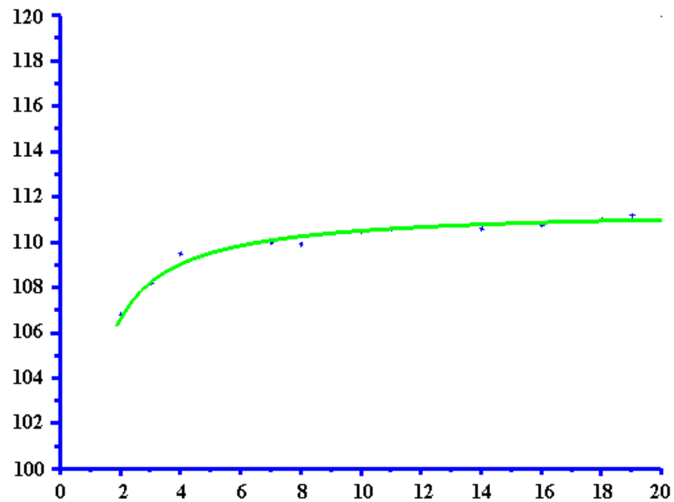
$$\begin{bmatrix} 11 & 1.7842 \\ 1.7842 & 0.49277 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1208.69 \\ 194.052 \end{bmatrix}$$

解得

$$a_0^*=111.476,\quad a_1^*=-9.83206$$

于是所求拟合曲线为

$$y=111.476-\frac{9.83206}{x}$$



第二种取指数型的函数 $y = a_0 e^{\frac{a_1}{x}}$

这时 y 关于 a_0，a_1 是非线性的，对上式两边取对数，得

$$\ln y = \ln a_0 + \frac{a_1}{x}$$

记 $u(x) = \ln y(x)$，$c_0 = \ln a_0$，$c_1 = a_1$，则有

$$u = c_0 + \frac{c_1}{x}$$

$u(x)$ 关于常数 c_0，c_1 是线性的，因此只需要把原数据 (x_i, y_i) 变为 $(x_i, \ln y_i)$，就可以得到关于 c_0，c_1 的正则方程组，变换以后的数据如下表所示：

x_i	2	3	4	7	8	10	11	14	16	18	19
$\ln y_i$	4.66739	4.48398	4.69592	4.70048	4.69984	4.70493	4.70583	4.70592	4.70737	4.70953	4.71133

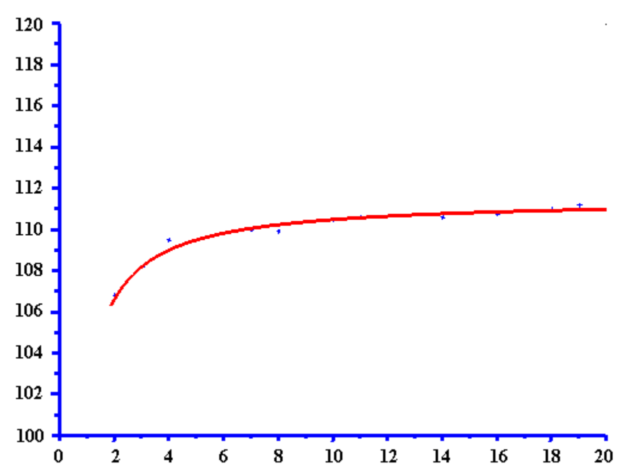
曲线拟合的最小二乘法

正则方程组为
$$\begin{bmatrix} 11 & 1.7842 \\ 1.7842 & 0.49277 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 51.6925 \\ 8.36623 \end{bmatrix}$$

解这个方程组得
$$c_0^* = 4.7140，\quad c_1^* = -0.090321$$

故
$$a_0^* = e^{c_0} = 111.494，\quad a_1^* = c_1 = -0.090321$$

于是所求指数模型拟合曲线为
$$y = 111.474e^{-0.090321/x}$$



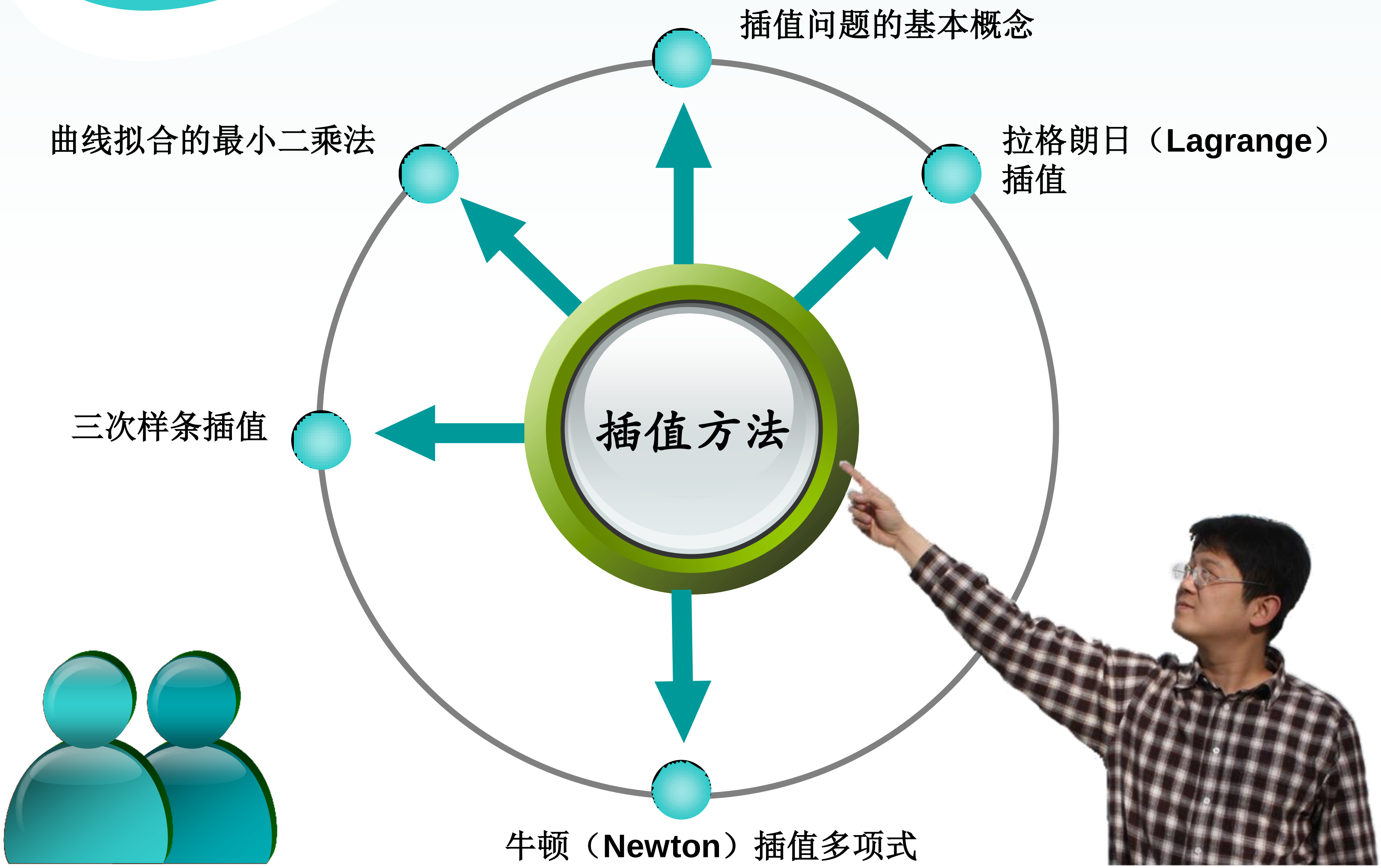
思考题 （15分）

已知一组实验数据如下表所示：

x_i	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8
y_i	0.9	1.9	2.8	3.3	4.2

求这组数据的最小二乘拟合曲线。

总结


插值问题的基本概念
曲线拟合的最小二乘法
拉格朗日（Lagrange）插值
插值方法
三次样条插值
牛顿（Newton）插值多项式

人民语录

人的双手总是处于有物和无物两种状态，总空着太闲，总拿着太累，若两手抓住某种东西不放，则失去获得其他东西的机会。所以，最高境界是处于拿得起放得下之间

To be continued…

wangyong@ucas.ac.cn
http://people.ucas.ac.cn/~wangyong

Thank you !