東北大學

Northeastern University

数值分析

理学院　　数学系

计算数学教研室

东北大学

第五章　插值与逼近

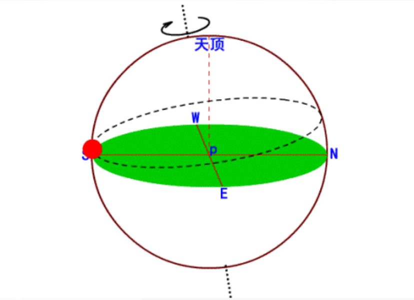
知识点

1. 插值问题
2. Lagrange插值
3. Newton插值
4. 分段低次插值
5. Hermite插值
6. 三次样条插值
7. 曲线拟合的最小二乘法

插值问题

插值方法的来历

插值法是一种古老的数学方法，早在一千多年前，我国科学家在研究历法上就应用了线性插值与二次插值。它的基本理论是在微积分产生以后才逐步完善的，特别是在电子计算机广泛使用以后，插值法在航空、造船、精密机械加工等实际工程问题上显得更为重要，其理论也得到了进一步发展，如样条插值等。



早在6世纪，中国的刘焯在对天文学进行深入研究时就曾利用等距二次插值较为精确地计算出岁差。

假定太阳视运动的出发点是春分点，一年后太阳并不能回到原来的春分点，而是差一小段距离，春分点遂渐西移的现象叫岁差。刘焯计算出春分点每75年在黄道上西移1度。而此前晋代天文学虞（于）喜算出的是50年差1度，与实际的71年又8个月差1度相比，刘焯的计算要精确的多。

插值问题

插值方法定义

设函数$y=f(x)$在区间$[a,b]$上连续，给定$n+1$个点

$$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b \qquad (1)$$

已知$f(x_k)=y_k(k=0,1,\ldots,n)$,在函数类$P$中寻找一函数$\varphi(x)$作为$f(x)$的近似表达式,使满足

$$\varphi(x_k)=f(x_k)=y_k \quad ,k=0,1,\ldots,n \qquad (2)$$

$y=f(x)$称为**被插值函数**；$\varphi(x)$称为**插值函数**;

$x_0, x_1, \ldots, x_n$称为**插值节点**; 式(2)称为**插值条件**;

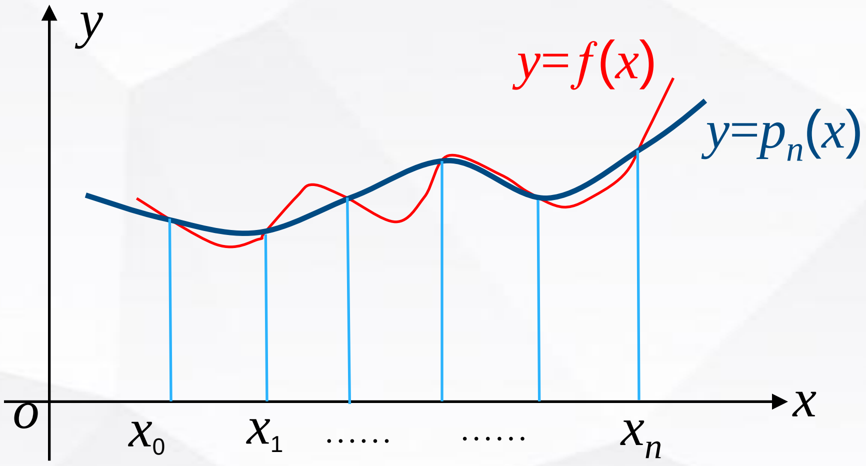
寻求插值函数$\varphi(x)$的方法称为**插值方法**.

插值问题

插值的几何意义

在构造插值函数时，函数类P的不同选取，对应不同的插值方法，这里主要讨论函数类P是代数多项式，即所谓的**多项式插值**。

多项式插值，从几何上看就是要求过n+1个点(x_k, y_k) $(k=0,1,\ldots,n)$的n次代数曲线$y=p_n(x)$作为$f(x)$的近似。



插值问题

定理1 给定$n+1$个互异节点$x_0,x_1,\ldots,x_n$上的函数值$y_0,y_1,\ldots,y_n$，则满足插值条件(2)的n次插值多项式$p_n(x)$是存在且唯一的。

证明： 用P_n表示所有次数不超过n的多项式函数类,若$p_n(x)\in P_n$，

则$p_n(x)=a_0+a_1x+\ldots+a_nx^n$是由$n+1$个系数唯一确定的。

若$p_n(x)$满足插值条件(2),则有关于$a_0, a_1, \ldots, a_n$线性方程组

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

插值问题

其系数行列式为

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

当所有节点$x_0,x_1,\ldots,x_n$两两互异时，系数行列式不为零，故上述方程组有唯一解，所以n次插值多项式$p_n(x)$是存在且唯一的。

Lagrange插值

上一节提到的插值法需要求解线性方程组，这里介绍更为简便实用的Lagrange插值法，由插值多项式唯一性定理可知无论用什么方法获得的满足相同插值条件的多项式都是同一个。

线性插值

首先讨论n=1的情况，已知被插值函数$y=f(x)$节点x_0,x_1处的函数值y_0, y_1，寻求一次多项式$L_1(x)$，使得满足插值条件$L_1(x_0)=y_0$，$L_1(x_1)=y_1$。

从几何上看，$L_1(x)$就是通过两点(x_0, y_0)和(x_1, y_1)的直线，于是根据两点式有

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

记 $l_0(x)=\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}, l_1(x)=\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}$，则有 $L_1(x)=y_0l_0(x)+y_1l_1(x)$

即$L_1(x)$可表示成$l_0(x)$，$l_1(x)$的线性组合，其中$l_0(x)$，$l_1(x)$ 是一次多项式，且满足：

Lagrange插值

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

称 $l_0(x)$，$l_1(x)$ 为线性插值基函数。 称$L_1(x)$为线性插值。

抛物插值

再讨论n=2的情况，给定被插值函数$y=f(x)$在节点x_0,x_1,x_2处的函数值y_0, y_1，y_2，寻求二次多项式$L_2(x)$满足插值条件$L_2(x_0)=y_0$， $L_2(x_1)=y_1$， $L_2(x_2)=y_2$。

可采用基函数的方法构造：

$$L_2(x)=y_0l_0(x)+y_1l_1(x)+y_2l_2(x)$$

基函数 $l_i(x)$ $_{i=1,2,3}$都是二次多项式，且满足条件：

$$\begin{array}{lll} l_0(x_0)=1 & l_0(x_1)=0 & l_0(x_2)=0 \\ l_1(x_0)=0 & l_1(x_1)=1 & l_1(x_2)=0 \\ l_2(x_0)=0 & l_2(x_1)=0 & l_2(x_2)=1 \end{array}$$

Lagrange插值

满足上述条件的基函数 $l_i(x)$ i=1,2,3是很容易求出的，

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)},\ l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)},\ l_2(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

由此可以求出二次插值多项式：

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

容易验证其满足插值条件$L_2(x_i)=y_i$ (i=1,2,3)，从几何上看$L_2(x)$就是通过点(x_0, y_0)，(x_1, y_1)和(x_2, y_2)的抛物线，所以也称$L_2(x)$为抛物线插值。

n次Lagrange插值

类似于线性插值和抛物线插值，下面来讨论n次Lagrange插值多项式。给定n+1个节点$x_0, x_1, \ldots, x_n$以及节点处$y=f(x)$的函数值$y_0, y_1, \ldots, y_n$，求n次多项式$L_n(x)$，使其满足插值条件$L_n(x_0)=y_0$，$L_n(x_1)=y_1, \ldots, L_n(x_n)=y_n$。

根据n=1和n=2的情况，用基函数的思想构造

$$L_n(x)=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+\ldots+l_n(x)y_n=\sum_{k=0}^{n} l_k(x)y_k$$

称$l_k(x)(k=0,1,\ldots,n)$为关于节点$x_k(k=0,1,\ldots,n)$的***n*次Lagrange插值基函数**，$L_n(x)$称为***n*次Lagrange插值多项式**.

Lagrange插值

要想使$L_n(x)$满足插值条件$L_n(x_0)=y_0$，$L_n(x_1)=y_1$，…，$L_n(x_n)=y_n$

基函数$l_k(x)$需要满足:$l_k(x_j)=0,(j=0,1,\ldots,k-1,k+1,\ldots,n)$，所以可设

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

还需满足$l_k(x_k)=1$,从而确定c，进而得到基函数

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

求出了基函数$l_k(x)$ $(k=0,1,\ldots,n)$，便可以确定n次Lagrange插值多项式$L_n(x)$。

Lagrange插值

若记$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$,则$l_k(x)$可写成

$$l_k(x)=\frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_k)\omega'_{n+1}(x_k)}$$

若取$f(x)=x^k\ (k=0,1,\ldots,n)$,由插值多项式的唯一性有

$$\sum_{i=0}^{n} l_i(x)x_i^k = x^k \qquad ,k=0,1,\cdots,n$$

特别当$k=0$时,有 $$\sum_{i=0}^{n} l_i(x)=1$$

Lagrange插值多项式结构对称简单而优雅，只要取定节点就可写出基函数，进而得到插值多项式，易于计算机上实现。

Lagrange插值

为了研究插值多项式的近似程度,

记 $R_n(x)=f(x)-L_n(x)$

称为**n次Lagrange插值余项。**

定理2设$f^{(n)}(x)$在$[a,b]$连续, $f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内存在,在节点$a\le x_0<x_1<\ldots<x_n\le b$上,满足插值条件(2)的插值多项式$L_n(x)$,对任一$x\in[a,b]$,插值余项为

$$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (3)$$

其中$\xi_x\in(a,b)$且与x有关。

Lagrange插值

证明 由于$R_n(x_i)=f(x_i)-L_n(x_i)=0(i=0,1,\ldots,n)$,所以

$$R_n(x)=C(x)\omega_{n+1}(x)$$

对于任一$x\in[a,b],x\neq x_i(i=0,1,2,\ldots,n)$,构造函数

$$\varphi(t)=f(t)-L_n(t)-C(x)\omega_{n+1}(t)$$

则有 $\varphi(x_i)=0$ $(i=0,1,2,\ldots,n)$, $\varphi(x)=0$，即$\varphi(t)$在$[a,b]$至少有$n+2$个零点。由Rolle定理可知$\varphi'(t)$在$[a,b]$至少有$n+1$个零点,反复应用Rolle定理知$\varphi(n+1)(t)$在$[a,b]$至少有1个零点ξx, 于是

$$0=\varphi^{(n+1)}(\xi_x)=f^{(n+1)}(\xi_x)-(n+1)!\,C(x)$$

因而有

$$C(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!},$$

所以

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

Lagrange插值

若$|f^{(n+1)}(x)|$在$[a,b]$有上界M_{n+1},则Lagrange插值余项也可写成

$$|R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|$$

例1 给定函数表

x	10	11	12	13
ln$x$	2.302585	2.397895	2.484907	2.564949

用二次插值计算ln11.25的近似值,并估计误差。

解 取节点x_0=10,x_1=11,x_2=12,作二次插值有

$$\ln 11.25 \approx L_2(11.25) = \frac{(11.25-11)(11.25-12)}{(10-11)(10-12)} \times 2.302585$$

$$+ \frac{(11.25-10)(11.25-12)}{(11-10)(11-12)} \times 2.397895 + \frac{(11.25-10)(11.25-11)}{(12-10)(12-11)} \times 2.484907$$

$$= 2.420426$$

Lagrange插值

在区间[10,12]上ln$x$的三阶导数的上限M_3=0.002,可得误差估计式

$$|R_2(11.25)| \le \frac{M_3}{3!}|(11.25-10)(11.25-11)(11.25-12)| < 0.00007$$

实际上,ln11.25=2.420368,|R_2(11.25)|=0.000058.

在被插值函数未知或无法估计其高阶导数界时,上述插值余项不能用来估计误差,下面介绍事后误差估计法.

记$L_n(x)$是$f(x)$以$x_0,x_1,\ldots,x_n$为节点的n次插值多项式,

而$L_n^{(1)}(x)$为$f(x)$以$x1,x2,\ldots,x_n,x_{n+1}$为节点的n次插值多项式,

故有 $$f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

$$f(x)-L_n^{(1)}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\bar{\xi}_x)}{(n+1)!}(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)(x-x_{n+1})$$

若 $f^{(n+1)}(\xi_x) \approx f^{(n+1)}(\bar{\xi}_x)$ 则有 $\dfrac{f(x)-L_n(x)}{f(x)-L_n^{(1)}(x)} \approx \dfrac{x-x_0}{x-x_{n+1}}$

从而得 $$f(x) \approx \frac{x-x_{n+1}}{x_0-x_{n+1}} L_n(x) + \frac{x-x_0}{x_{n+1}-x_0} L_n^{(1)}(x) \quad (4)$$

也有 $$f(x)-L_n(x) \approx \frac{x-x_0}{x_0-x_{n+1}} (L_n(x)-L_n^{(1)}(x)) \quad (5)$$

如在例3中,再以节点x_1=11,x_2=12,x_3=13作二次插值多项式$L_2^{(1)}(x)$,则 $L_2^{(1)}(11.25)$=2.420301,由(5)式得

$$R_2(x) \approx \frac{11.25-10}{10-13}(2.420426-2.420301) = -0.000052$$

由(4)式也可得到ln11.25的新的近似值

$$\ln 11.25 \approx \frac{11.25-13}{10-13} 2.420426 + \frac{11.25-10}{13-10} 2.420301 = 2.420374$$

实际上,(4)式右侧恰是$f(x)$以$x_0,x_1,\ldots,x_n,x_{n+1}$为节点的$n$+1次插值多项式。

差商的定义

称$f(x_j)$-$f(x_i)$与x_j-x_i(i≠j)的比值为$f(x)$关于点x_i,x_j的一阶差商,并记为$f[x_i,x_j]$,

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

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

为$f(x)$关于点x_i,x_j,x_k的二阶差商.

一般地,称
$$f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\frac{f[x_1,x_2,\cdots,x_k]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_0}$$

为$f(x)$关于点x_0,x_1,…,x_k的k阶差商。

以上定义中,点x_0,x_1,…x_k为互不相同的点。

NEWTON插值

差商的性质

(1)k阶差商$f[x_0,x_1,\ldots,x_k]$可以表示成 $f(x_0)$, $f(x_1)$,…,$f(x_k)$的线性组合

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

(2)差商对节点具有对称性,即

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

其中,$i_0,i_1,\ldots,i_k$是0,1,…,k的任一排列。

(3)n次多项式$f(x)$的k阶差商$f[x_0,x_1,\ldots,x_{k-1},x]$,当$k\le n$时是一个$n-k$次多项式;当$k>n$时恒等于0。

(4)若$f(x)$具有k阶连续导数,则 $f[x_0,x_1,\cdots,x_k]=\dfrac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$,

其中ξ在$k+1$个节点之间。

NEWTON插值

给出节点$x_0,x_1,\ldots,x_n$和函数值$f(x_0),f(x_1),\ldots,f(x_n)$,可按如下的差商表顺序逐次计算各阶差商值。

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

例2 给出函数y=f(x)的函数表

i	0	1	2	3
x_i	-2	-1	1	2
$f(x_i)$	5	3	17	21

写出函数y=f(x)的差商表.

解 差商表如下

i	x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
0	-2	5			
1	-1	3	-2		
2	1	17	7	3	
3	2	21	4	-1	-1

Newton插值多项式及其余项

由差商的定义可得

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

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

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

$$\vdots$$

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

所以有

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

NEWTON插值

记 $N_n(x)=f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]$
$+(x-x_0)(x-x_1)f[x_0,x_1,x_2]+\dots$
$+(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})f[x_0,x_1,\dots,x_n]$ ……………… （6）

$R_n(x)=(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)f[x_0,x_1,\dots,x_n,x]$

则有 $f(x)=N_n(x)+R_n(x)$

而且$N_n(x)$是n次多项式,且满足$N_n(x_i)=f(x_i)$(i=0,1,…,n),

称$N_n(x)$为**n次Newton插值多项式**,称$R_n(x)$为**n次Newton插值余项**。

由插值多项式的唯一性有

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

Newton插值的承袭性

由(6)式易见

$$N_{k+1}(x)=N_k(x)+\omega_{k+1}(x)f[x_0,x_1,\ldots,x_{k+1}] \qquad k=1,2,\ldots,n-1$$

例3 对例2中的$f(x)$,求节点为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的三次插值多项式。

解 由例2的差商表知$f[x_0,x_1]=-2$,$f[x_0,x_1,x_2]=3$, $f[x_0,x_1,x_2,x_3]=-1$,由承袭性得：

$$N_1(x)=5-2(x+2)=1-2x$$
$$N_2(x)=1-2x+3(x+2)(x+1)=3x^2+7x+7$$
$$N_3(x)=3x^2+7x+7-(x+2)(x+1)(x-1)=-x^3+x^2+8x+9$$

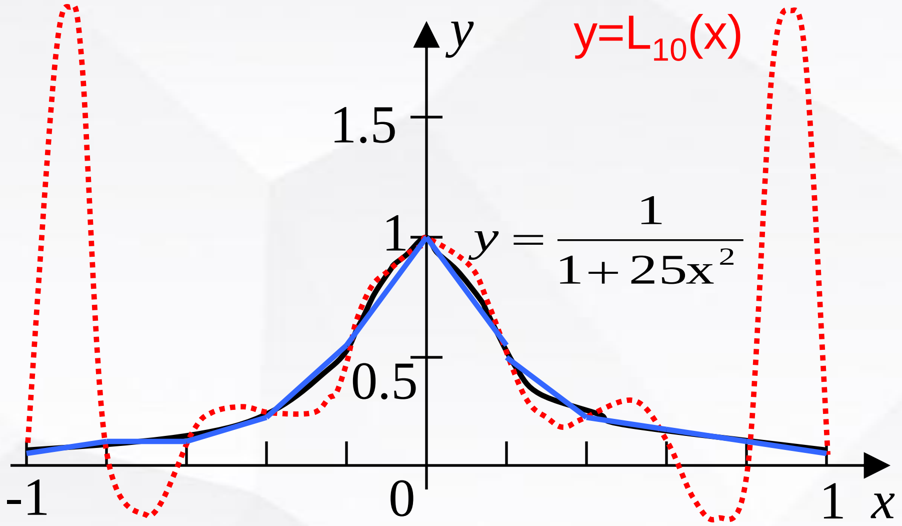
Runge现象

对$f(x)=(1+25x^2)^{-1}$,在区间[-1,1]上取等距节点

$x_i=-1+ih$, $i=0,1,\ldots,10$, $h=0.2$,

作$f(x)$关于节点$x_i(i=0,1,\ldots,10)$的10次插值多项式$L_{10}(x)$,

如图所示



这个现象被称为**Runge现象**，表明高次插值的不稳定性。实际上，很少采用高于7次的插值多项式。

分段线性插值

取节点$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$,$h_i = x_i - x_{i-1}$($i=1,2,\ldots,n$),插值条件$y_k = f(x_k)$,$k=0,1,\ldots,n$。设$S_1(x)$是满足插值条件的分段一次多项式,则有

$$S_1(x) = \frac{x_i - x}{h_i} y_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{h_i} y_i, \quad x \in [x_{i-1}, x_i] \qquad , i = 1,2,\cdots n$$

$S_1(x)$是平面上过点(x_i,y_i)($i=0,1,\ldots,n$)的折线。若$f(x) \in C^2[a,b]$,则当$x \in [x_{i-1},x_i]$时,有

$$f(x) - S_1(x) = \frac{f''(\xi_i)}{2!}(x - x_{i-1})(x - x_i)$$

若记 $M_2 = \max\limits_{a \le x \le b} |f''(x)|$ $\quad , h = \max\limits_{1 \le i \le n} |h_i|$,对任一$x \in [a,b]$都有

$$|f(x) - S_1(x)| \le \frac{M_2}{8} h^2$$

可见,当$h \to 0$时,分段线性插值$S_1(x)$收敛于$f(x)$。

分段二次插值

在每个小区间$[x_{i-1}, x_i]$内,取半节点 $x_{i-\frac{1}{2}}=\dfrac{x_{i-1}+x_i}{2}$,补充插值条件 $y_{i-\frac{1}{2}}=f(x_{i-\frac{1}{2}})$

($i=1,2,\ldots,n$),设$f(x)$满足插值条件的分段二次插值多项式为$S_2(x)$,则有

$$S_2(x)=\frac{(x-x_{i-\frac{1}{2}})(x-x_i)}{\frac{1}{2}h_i^2}y_{i-1}-\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{\frac{1}{4}h_i^2}y_{i-\frac{1}{2}}+\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i-\frac{1}{2}})}{\frac{1}{2}h_i^2}y_i$$

$$x\in[x_{i-1},x_i]\qquad ,i=1,2,\cdots n$$

若$f(x)\in C^3[a,b]$,则当$x\in[x_{i-1},x_i]$时,有

$$f(x)-S_2(x)=\frac{f'''(\xi_i)}{3!}(x-x_{i-1})(x-x_{i-\frac{1}{2}})(x-x_i)$$

若记 $M_3=\max\limits_{a\le x\le b}|f'''(x)|$, 则有 $|f(x)-S_2(x)|\le\dfrac{M_3}{72\sqrt{3}}h^3$

可见,$S_2(x)$是收敛的,而且$S_2(x)$在[a,b]是连续的,但不可导.

分段Hermite插值

设在节点$a\le x_0<x_1<\ldots<x_n\le b$,$h_i=x_i-x_{i-1}(i=1,2,\ldots,n)$上给出插值条件

$$y_k=f(x_k),y'_k=f'(x_k),k=0,1,\ldots,n.$$

此时,在小区间$[x_{i-1},x_i]$上有四个插值条件,故能构造一个三次多项式 $H_3^{(i)}(x)$,

只要令 $H_3^{(i)}(x)=\varphi_{i-1}(x)y_{i-1}+\varphi_i(x)y_i+\psi_{i-1}(x)y'_{i-1}+\psi_i(x)y'_i$

其中$\varphi_{i-1}(x),\varphi_i(x),\psi_{i-1}(x),\psi_i(x)$都是三次多项式,而且满足

$\varphi_{i-1}(x_{i-1})=1,\varphi_{i-1}(x_i)=0,\varphi'_{i-1}(x_{i-1})=0,\varphi'_{i-1}(x_i)=0$ $\psi_{i-1}(x_{i-1})=0,\psi_{i-1}(x_i)=0,\psi'_{i-1}(x_{i-1})=1,\psi'_{i-1}(x_i)=0$

$\varphi_i(x_{i-1})=0,\varphi_i(x_i)=1,\varphi'_i(x_{i-1})=0,\varphi'_i(x_i)=0$ $\psi_i(x_{i-1})=0,\psi_i(x_i)=0,\psi'_i(x_{i-1})=0,\psi'_i(x_i)=1$

则,$H_3^{(i)}(x)$就满足插值条件:$H_3^{(i)}(x_{i-1})=y_{i-1}$, $H_3^{(i)}(x_i)=y_i$, $H3(i)'(x_{i-1})=y'_{i-1}$, $H_3^{(i)}{}'(xi)=y'_i$

$\varphi_{i-1}(x),\varphi_i(x),\psi_{i-1}(x),\psi_i(x)$称为**三次Hermite插值基函数**。

下面来求基函数

因为$\varphi_{i-1}(x_i)=0,\varphi'_{i-1}(x_i)=0$,所以可将$\varphi_{i-1}(x)$写成

$$\varphi_{i-1}(x)=(ax+b)(x-x_i)^2$$

将$\varphi_{i-1}(x_{i-1})=1,\varphi'_{i-1}(x_{i-1})=0$带入可得

$$(ax_{i-1}+b)h_i^2=1\ ,\ ah_i^2-2h_i(ax_{i-1}+b)=0$$

解得 $a=2h_i^{-3},\quad b=(x_i-3x_{i-1})h_i^{-3}$

故得

$$\varphi_{i-1}(x)=\frac{1}{h_i^3}(2x+x_i-3x_{i-1})(x-x_i)^2$$

由对称性可得

$$\varphi_i(x)=\frac{1}{h_i^3}(3x_i-2x-x_{i-1})(x-x_{i-1})^2$$

HERMITE插值

因为$\psi_{i-1}(x_{i-1})=0, \psi_{i-1}(x_i)=0, \psi'_{i-1}(x_i)=0$，所以有

$$\psi_{i-1}(x)=C(x-x_{i-1})(x-x_i)^2$$

将$\psi'_{i-1}(x_{i-1})=1$带入得 $Ch_i^2=1$，即 $C=h_i^{-2}$

因此
$$\psi_{i-1}(x)=\frac{1}{h_i^2}(x-x_{i-1})(x-x_i)^2$$

由对称性可得
$$\psi_i(x)=\frac{1}{h_i^2}(x-x_{i-1})^2(x-x_i)$$

故求得区间$[x_{i-1},x_i]$上的三次Hermite插值多项式：

$$H_3^{(i)}(x)=\frac{1}{h_i^3}\left[(x_i+2x-3x_{i-1})(x-x_i)^2y_{i-1}+(3x_i-2x-x_i)(x-x_{i-1})^2y_i\right]$$
$$+\frac{1}{h_i^2}\left[(x-x_{i-1})(x-x_i)^2y'_{i-1}+(x-x_{i-1})^2(x-x_i)y'_i\right]$$

HERMITE插值

若$f(x)\in C^4[a,b]$,则当$x\in[x_{i-1},x_i]$时,有

$$f(x)-H_3^{(i)}(x)=\frac{f^{(4)}(\xi_i)}{4!}(x-x_{i-1})^2(x-x_i)^2 \quad ,\xi_i\in[x_{i-1},x_i]$$

满足插值条件$H_3(x_i)=y_i, H'_3(x_i)=y'_i(i=0,1,\ldots,n)$的分段三次多项式$H_3(x)$为

$$H_3(x)=H_3^{(i)}(x)\ ,\ x\in[x_{i-1},x_i]\ ,\ i=1,2,\ldots,n$$

而且,若$f(x)\in C^4[a,b]$,记 $M_4=\max\limits_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|$,

则有

$$f(x)-H_3(x)\le\frac{M_4}{4!}\frac{1}{16}h^4=\frac{M_4}{384}h^4$$

可见,$H_3(x)$是收敛的.而且由$H'_3(x_i+0)=H'_3(x_i-0)=y'_i$,知$H_3(x)$在$[a,b]$具有一阶连续导数。

例4 设$f(x)\in C^4[0,2]$，且$f(0)=1$,$f(1)=0$，$f(2)=3$, $f'(1)=0$,试求$f(x)$的三次插值多项式$H_3(x)$,并给出余项.

解 法1(基函数法): 设

$$H_3(x)=\varphi_0(x)y_0+\varphi_1(x)y_1+\varphi_2(x)y_2+\psi_1(x)y_1 \;=\varphi_0(x)+3\varphi_2(x)$$

,

$$\varphi_0(x)=c(x-1)^2(x-2) \;=-1/2(x-1)^2(x-2)$$

$$\varphi_2(x)=cx(x-1)^2 =1/2x(x-1)^2$$

所以 $H_3(x)=-1/2(x-1)^2(x-2)+3/2x(x-1)^2=1/2(x-1)^2[(2-x)+3x]$

$$=(x-1)^2(x+1)$$

法2(待定系数法): 设 $H_3(x)=(x-1)2(ax+b)$

由$H_3(0)=1$得:$b=1$,　　由$H_3(2)=3$得: $2a+b=3$

解得: $a=1$, $b=1$.

所以 $H_3(x)=(x-1)^2(x+1)$

记$R_3(x)=f(x)-H_3(x)$,则$R_3(0)=R_3(1)=R_3(2)=R_3'(1)=0$

于是, $R_3(x)=C(x)x(x-1)^2(x-2)$

对于任一$x\in[0,2]$,$x\neq 0,1,2$,构造函数:

$\varphi(t)=f(t)-H_3(t)-C(x)t(t-1)^2(t-2)$

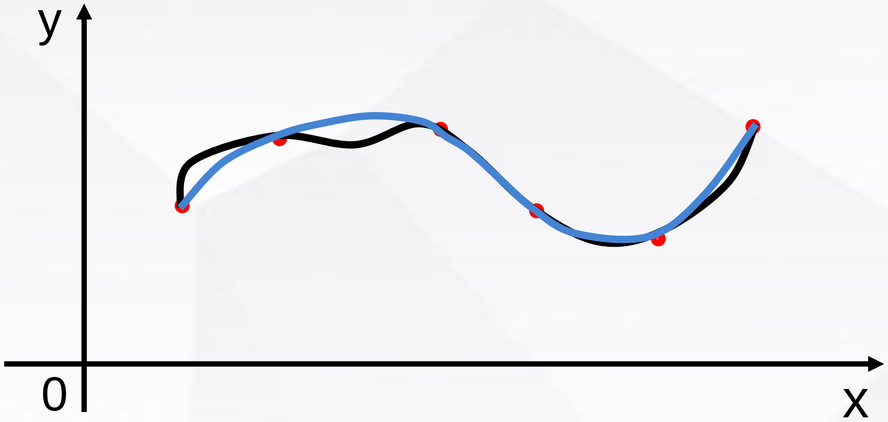
由于$\varphi(0)=\varphi(1)=\varphi(2)=\varphi'(1)=\varphi(x)=0$, 可得:

$$R_3(x)=f(x)-H_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi_x)}{4!}x(x-1)^2(x-2)$$

三次样条插值

三次样条插值定义

给定节点$a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$,及其上的函数值$y_k=f(x_k)$, $k=0, 1,\ldots,n$.就是给出平面上$n+1$个点(x_i,y_i),$i=0,1,\ldots,n$.



定义 给定节点$a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$,及其上的函数值$y_k=f(x_k)$,$k=0, 1,\ldots,n$.如果函数$S(x)$满足

(1) $S(x)$是一个分段的三次多项式且$S(x_k)=y_k$;

(2) $S(x)\in C^2[a,b]$.

则称$S(x)$是区间$[a,b]$上的**三次样条插值函数**.

三次样条插值

$S(x)$在区间$[x_{i-1},x_i]$上是三次多项式,$S(x)=a_ix^3+b_ix^2+c_ix+d_i$,有4个待定系数,要确定$S(x)$共有$4n$个待定系数.

由$S(xi)=y_i$,$i=0,1,\ldots,n$, 有$2n$个条件,

再由$S'(x_i-0)=S'(x_i+0)$,$i=1,2\ldots,n-1$, 有$n-1$个条件,

及$S''(x_i-0)=S''(x_i+0)$,$i=1,2\ldots,n-1$, 有$n-1$个条件,

共有$4n-2$个条件.为了得到唯一的三次样条函数,通常可在区间$[a,b]$的端点$x_0=a$,$x_n=b$上各加一个条件,称为**边界条件**.常用的边界条件有

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

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

(3) 假设$f(x)$是以$b-a$为周期的周期函数,这时要求

三次样条插值

$S(x_0+0)=S(x_n-0)$

$S'(x_0+0)=S'(x_n-0)$

$S''(x_0+0)=S''(x_n-0)$

这样确定的$S(x)$为**周期样条函数**.

若假设$S'(x_i)=m_i$,$i=0,1,\ldots,n$,利用分段Hermite插值多项式,当$x\in[x_{i-1},x_i]$时,有

$$S(x)=\frac{1}{h_i^3}\left[(x_i+2x-3x_{i-1})(x-x_i)^2 y_{i-1}+(3x_i-2x-x_i)(x-x_{i-1})^2 y_i\right]$$

$$+\frac{1}{h_i^2}\left[(x-x_{i-1})(x-x_i)^2 m_{i-1}+(x-x_{i-1})^2(x-x_i)m_i\right]$$

其中$h_i=x_i-x_{i-1}$.为了确定$S(x)$,只需确定m_i ,$i=0,1,\ldots,n$.可利用$S''(x_i-0)=S''(x_i+0)$来求出m_i .

三次样条插值

当$x\in[x_{i-1},x_i]$时,由于

$$S(x)=\frac{1}{h_i^3}\left[(x_i+2x-3x_{i-1})(x-x_i)^2y_{i-1}+(3x_i-2x-x_i)(x-x_{i-1})^2y_i\right]$$

$$+\frac{1}{h_i^2}\left[(x-x_{i-1})(x-x_i)^2m_{i-1}+(x-x_{i-1})^2(x-x_i)m_i\right]$$

所以 $$S'(x)=\frac{2}{h_i^3}\left\{\left[(x-x_i)^2+(x_i+2x-3x_{i-1})(x-x_i)\right]y_{i-1}\right.$$

$$\left.+\left[(3x_i-2x-x_i)(x-x_{i-1})-2(x-x_{i-1})^2\right]y_i\right\}$$

$$+\frac{1}{h_i^2}\left\{\left[(x-x_i)^2+2(x-x_{i-1})(x-x_i)\right]m_{i-1}\right.$$

$$\left.+\left[(x-x_{i-1})^2+2(x-x_{i-1})(x-x_i)\right]m_i\right\}$$

$$S''(x)=\frac{6}{h_i^3}(2x-x_{i-1}-x_i)(y_{i-1}-y_i)$$

$$+\frac{2}{h_i^2}\left[(3x-x_{i-1}-2x_i)m_{i-1}+(3x-2x_{i-1}-x_i)m_i\right]$$

三次样条插值

于是有 $$S''(x_i-0)=\frac{6}{h_i^2}(y_{i-1}-y_i)+\frac{2}{h_i}(m_{i-1}+2m_i)$$

$$S''(x_i+0)=\frac{6}{h_{i+1}^2}(y_{i+1}-y_i)-\frac{2}{h_{i+1}}(2m_i+m_{i+1})$$

由连续性条件$S''(x_i-0)=S''(x_i+0)$可得

$$\frac{1}{h_i}m_{i-1}+2\left(\frac{1}{h_i}+\frac{1}{h_{i+1}}\right)m_i+\frac{1}{h_{i+1}}m_{i+1}=3\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}^2}+\frac{y_i-y_{i-1}}{h_i^2}\right)$$

两侧同除以

$$\left(\frac{1}{h_i}+\frac{1}{h_{i+1}}\right),\text{并记}\ \frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}}=\lambda_i\quad,\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}=1-\lambda_i=\mu_i,$$

$3(\lambda_i f[x_{i-1},x_i]+\mu_i f[x_i,x_{i+1}])=g_i$,则有

$\lambda_i m_{i-1}+2m_i+\mu_i m_{i+1}=g_i$, $i=1,2,\ldots,n-1$.　(7)

三次样条插值

再结合不同的边界条件,可得关于m_i的方程.

若边界条件为:$m_0=y'_0$,$m_n=y'_n$,带入(7)式可得

$$\begin{pmatrix} 2 & \mu_1 & & & & \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \\ & & & & \lambda_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 - \lambda_1 y'_0 \\ g_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1} - \mu_{n-1} y'_n \end{pmatrix}$$

若边界条件为:$S''(x_0)=y''_0$,$S''(x_n)=y''_n$,则有

$$2m_0 + m_1 = 3f[x_0, x_1] - \tfrac{1}{2} h_1 y''_0 = g_0$$
$$m_{n-1} + 2m_n = 3f[x_{n-1}, x_n] + \tfrac{1}{2} h_n y''_n = g_n$$

连同(7)式一起,可得

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

若边界条件为周期性边界条件，由$S'(x_0+0)=S'(x_n-0)$,和$S''(x_0+0)=S''(x_n-0)$,有

$m_0=m_n$　和　$\lambda_n m_{n-1}+2m_n+\mu_n m_1=g_n$

其中

$$\lambda_n=\frac{h_1}{h_1+h_n},\ \mu_n=1-\lambda_n=\frac{h_n}{h_1+h_n},\ g_n=3(\lambda_n f[x_0,x_1]+\mu_n f[x_{n-1},x_n])$$

三次样条插值

于是有

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

对应不同的边界条件，只要求出相应的线性方程组的解，便得到三次样条函数在各区间$[x_{i-1},x_i]$上的表达式.

由于三个方程组的系数矩阵都是严格对角占优矩阵,所以都有唯一解,前两个方程组均可用追赶法求解,第三个方程组可用LU分解法或Gauss消元法求解.

例4 设$f(0)=1, f(1)=0, f(2)=-1, f(3)=0, f'(0)=1, f'(3)=0$,试求$f(x)$在区间[0,3]的三次样条插值函数S(x).

解 这里$h_1=h_2=h_3=1$, $y'_0=1$, $y'_3=0$,计算参数有

$\lambda_1=\lambda_2=\mu_1=\mu_2=1/2$, $g_1=-3, g_2=0$

于是有 $\begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -\frac{7}{2} \\ 0 \end{pmatrix}$, 解得 $m_1=-\dfrac{28}{15}, m_2=\dfrac{7}{15}$

故有

$$S(x)=\begin{cases} (x-1)\left(\dfrac{17}{15}x^2-2x-1\right) & x\in[0,1] \\ (x-1)\left(\dfrac{3}{5}x^2-\dfrac{14}{15}x-\dfrac{23}{15}\right) & x\in[1,2] \\ (x-3)^2\left(\dfrac{31}{15}-\dfrac{23}{15}x\right) & x\in[2,3] \end{cases}$$

三次样条插值

三次样条函数$S(x)$也可以利用在节点处的二阶导数为参数来表示,设

$S''(x_i)=M_i, i=0,1,\dots,n$,则对$x\in[x_{i-1},x_i]$有

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

连续积分两次,并利用$S(x_{i-1})=y_{i-1}$,$S(x_i)=y_i$,确定积分常数,可得

$$S(x)=\frac{1}{6h_i}\left[(x_i-x)^3M_{I-1}+(x-x_{i-1})^3M_i\right]$$

$$+\left(\frac{y_{i-1}}{h_i}-\frac{h_iM_{I-1}}{6}\right)(x_i-x)+\left(\frac{y_i}{h_i}-\frac{h_iM_i}{6}\right)(x-x_{i-1})$$

其中$h_i=x_i-x_{i-1}$.

为了确定$S(x)$,只需确定M_i ,$i=0,1,\dots,n$.可利用$S'(x_i-0)=S'(x_i+0)$来求出M_i .

三次样条插值

对上式求导易得:

$$S'(x)=\frac{1}{2h_i}\left[(x-x_{i-1})^2M_i-(x-x_i)^2M_{i-1}\right]+f[x_{i-1},x_i]+\frac{h_i}{6}(M_{i-1}-M_i)$$

于是有

$$S'(x_i-0)=\frac{h_i}{6}(M_{i-1}+2M_i)+f[x_{i-1},x_i]$$

$$S'(x_i+0)=-\frac{h_{i+1}}{6}(2M_i+M_{i+1})+f[x_i,x_{i+1}]$$

因此 $\frac{h_i}{6}M_{i-1}+\frac{h_i+h_{i+1}}{3}M_i+\frac{h_{i+1}}{6}M_{i+1}=f[x_i,x_{i+1}]-f[x_{i-1},x_i]$

若记 $\lambda_i=\frac{h_{i+1}}{h_i+h_{i+1}}$ ， $\mu_i=\frac{h_i}{h_i+h_{i+1}}$， $d_i=6f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}]$

则有 $\mu_iM_{i-1}+2M_i+\lambda_iM_{i+1}=d_i \qquad ,i=1,2,\ldots,n-1.$

三次样条插值

再结合不同的边界条件,可得关于M_i的方程.

若边界条件为:$M_0=y''_0$,$M_n=y''_n$,可得

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & & \mu_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 - \mu_1 y''_0 \\ d_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} - \lambda_{n-1} y''_n \end{pmatrix}$$

若边界条件为:$S'(x_0)=y'_0$,$S'(x_n)=y'_n$,则有

$$2M_0 + M_1 = \frac{6}{h_1}(f[x_0, x_1] - y'_0) = d_0$$

$$M_{n-1} + 2M_n = \frac{6}{h_n}(y'_n - f[x_{n-1}, x_n]) = d_n$$

三次样条插值

可得

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

若边界条件为周期性边界条件，由$S'(x_0+0)=S'(x_n-0)$,和$S''(x_0+0)=S''(x_n-0)$,有

$$M_0=M_n$$

和

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

其中

$$\lambda_n = \frac{h_1}{h_1+h_n}, \quad \mu_n = 1-\lambda_n = \frac{h_n}{h_1+h_n}, \quad d_n = 6f[x_0, x_1, x_{n-1}]$$

于是有

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

而且$\boldsymbol{M}_0=\boldsymbol{M}_n$.

例4 设$f(0)=0,f(1)=1$,$f(2)=0$,$f(3)=1$,$f''(0)=1$, $f''(3)=0$,试求$f(x)$在区间[0,3]的三次样条插值函数S(x).

解 这里$\boldsymbol{h}_1=\boldsymbol{h}_2=\boldsymbol{h}_3=1$,$y''_0=1$, $y''_3=0$,计算参数有

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

于是有

$$\begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{13}{2} \\ 6 \end{pmatrix},$$

解得

$$M_1 = -\frac{64}{15}, M_2 = \frac{61}{15}$$

故有

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

数据拟合的最小二乘法

数据拟合问题

经常由观察或测试可得到$y(x)$的一组离散数据:

x_i	x_0	x_1	x_2	…	x_m
y_i	y_0	y_1	y_2	…	y_m

需要在给定的函数类Φ上根据这组离散数据作出逼近曲线.要求逼近曲线在x_i处与离散数据尽可能接近.对函数$\varphi(x)\in\Phi$,要求以$\varphi(x)$在离散点的误差

$$\delta_0=\varphi(x_0)-y_0,\quad \delta_1=\varphi(x_1)-y_1\ ,\ldots,\quad \delta_m=\varphi(x_m)-y_m$$

为分量的误差向量$\delta=(\delta_0,\delta_1,\ldots,\delta_m)^T$,按某一向量范数$\|\delta\|$达到最小.对不同的范数,构造出不同意义下的拟合函数.

数据拟合的最小二乘法

函数类Φ通常取为:Φ=Span$\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$,其中函数系$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$在包含节点$\{x_i\}$的区间$[a,b]$上线性无关. Φ中任一函数$\varphi(x)$可以表示为

$$\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\ldots+a_n\varphi_n(x)$$

常用的函数系有幂函数系$\{x^j\}$，三角函数系$\{\sin jx\}$，$\{\cos jx\}$，指数函数系$\{e^{\lambda_j x}\}$，正交函数系等.最常用的是幂函数系$\{x^j\}$,即取Φ=P_n=Span$\{1,x,x^2,\ldots,x^n\}$,这时求得的拟合曲线称为**多项式拟合曲线**.

最小二乘法

为了便于计算,在求误差向量δ的范数时,宜采用向量的2-范数,这时对应的曲线拟合方法称为**最小二乘法**.

就是在函数类Φ=Span{$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$}中找一个函数$y=\varphi^*(x)$,使误差向量$\delta^*$的2-范数达到最小值,即

$$\|\boldsymbol{\delta}^*\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\delta_i^{*2}=\sum_{i=0}^{m}[\varphi^*(x_i)-y_i]^2=\min_{\varphi(x)\in\Phi}\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2$$

在实际问题中,考虑到数据的比重不同,常采用误差向量δ的加权范数形式

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\rho(x_i)[\varphi(x_i)-y_i]^2$$

其中$\rho(x)\geq 0$,是在[a,b]上的权函数.

把 $\varphi(x_i)=\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)$ 代入上式

$$G(a_0,a_1,\ldots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}\rho(x_i)[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i]^2$$

数据拟合的最小二乘法

寻求拟合曲线问题就转换为求多元函数$G(a_0,a_1,\dots,a_n)$的最小值问题.

令 $$\frac{\partial G}{\partial a_k}=2\sum_{i=0}^{m}\rho(x_i)[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i]\varphi_k(x_i)=0\quad,k=0,1,\dots,n$$

得到关于$a_0,a_1,\dots,a_n$的线性方程组:

$$\sum_{j=0}^{n}[\sum_{i=0}^{m}\rho(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)]a_j=\sum_{i=0}^{m}\rho(x_i)y_i\varphi_k(x_i),\quad k=0,1,\dots,n$$

引进向量

$$\varphi_j=(\varphi_j(x_0),\varphi_j(x_1),\dots,\varphi_j(x_m))^T,\ j=0,1,2,\dots,n,$$

$$f=(y_0,y_1,\dots,y_m)^T$$

且记向量内积

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

数据拟合的最小二乘法

于是有

$$\sum_{j=0}^{n}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k) \qquad k=0,1,\ldots,n$$

其矩阵形式为

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

称为(由最小二乘法导出的)正则方程组或法方程组.

如果向量组$\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_n$线性无关,则正则方程组的系数矩阵是对称正定矩阵,可由平方根法或SOR法求得唯一解$a_0^*,a_1^*,\ldots,a_n^*$,于是得到拟合函数:

$$\varphi^*(x)=p_n^*(x)=a_0^*\varphi_0(x)+a_1^*\varphi_1(x)+\ldots+a_n^*\varphi_n(x)$$

数据拟合的最小二乘法

若取函数类$\Phi=P_n=\mathrm{Span}\{1,x,x^2,\ldots,x^n\}$,正则方程组为

$$\begin{pmatrix} \sum\rho_i & \sum\rho_i x_i & \cdots & \sum\rho_i x_i^n \\ \sum\rho_i x_i & \sum\rho_i x_i^2 & \cdots & \sum\rho_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum\rho_i x_i^n & \sum\rho_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum\rho_i x_i^{2n} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum\rho_i y_i \\ \sum\rho_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum\rho_i x_i^n y_i \end{pmatrix}$$

其中$\rho_i=\rho(x_i)$, $\sum=\sum\limits_{i=0}^{m}$.此时拟合曲线为

$$\varphi^*(x)=p_n^*(x)=a_0^*+a_1^*x+\ldots+a_n^*x^n$$

若取$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$为正交函数系,即$(\varphi_i,\varphi_j)=0,(i\neq j)$,则正则方程组的系数矩阵为对角矩阵,易得

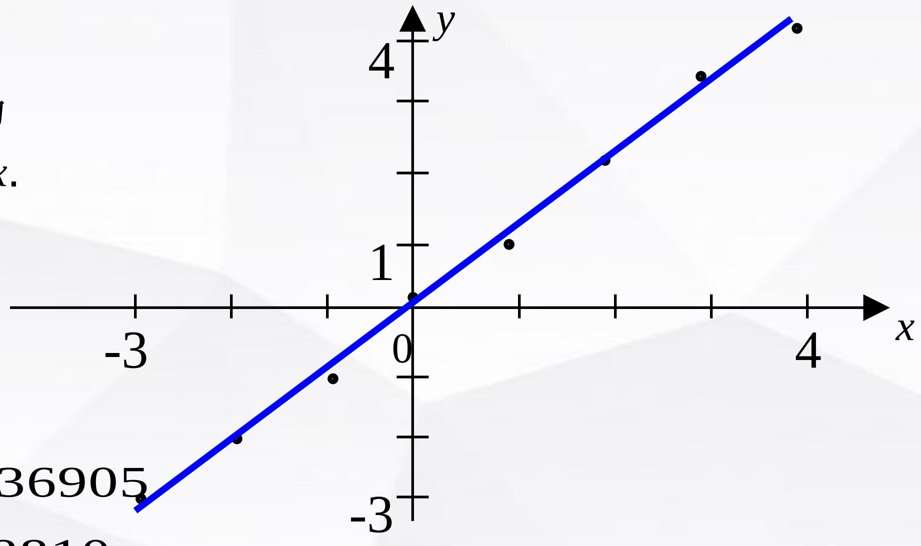
$$a_k^*=(f,\varphi_k)/(\varphi_k,\varphi_k)\quad ,k=0,1,2,\ldots,n$$

例4 给出如下离散数据

x_i	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
y_i	-3.2	-2.1	-1.2	0.1	0.9	2.1	3.3	4

试求$y(x)$的拟合曲线.

解 首先根据离散数据绘草图



从草图形状可以判断所求拟合曲线为线性拟合曲线, 故取函数系$\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x$.

权函数$\rho(x)=1$,则

$\varphi_0=(1,1,1,1,1,1,1,1)^T$,

$\varphi_1=(-3,-2,-1,0,1,2,3,4)^T$,

$f=(-3.2, -2.1, -1.2, 0.1, 0.9, 2.1, 3.3, 4)^T$.

$$\begin{cases} 8a_0+4a_1=3.9 \\ 4a_0+44a_1=46 \end{cases} \text{解得} \begin{cases} a_0^*=-0.036905 \\ a_1^*=1.048810 \end{cases}$$

所求拟合曲线为 $y=1.048810x-0.036905$

此时,拟合曲线的均方误差为 $\|\delta^*\|_2\approx0.329666$

例5 对下列数据求形如$y=ae^{bx}$的拟合曲线

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	15.3	20.5	27.4	36.6	49.1	65.6	87.8	117.6
z_i	2.72785	3.02042	3.31054	3.60005	3.89386	4.18358	4.47506	4.76729

解 设$z=\ln y$,则 $z=A+bx$, 其中$A=\ln a$, 由$z_i=\ln y_i$ 得

对$z(x)$作线性拟合曲线,取 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x$.权函数$\rho(x)=1$,则

$\varphi_0=(1,1,1,1,1,1,1,1)^T$， $\varphi_1=(1,2,3,4,5,6,7,8)^T$，

$z=(2.72785,\ 3.02042,\ 3.31054,\ 3.60005,\ 3.89386,\ 4.18358,\ 4.47506,\ 4.76729)^T$,得正则方程组

$$\begin{cases} 8A + 36b = 29.97865 \\ 36A + 204b = 147.13503 \end{cases}$$

解得 $A^*=2.43686$, $b^*=0.29122$, 于是有$a^*=e^{A^*}=11.43707$,拟合曲线为: $\varphi^*(x)=11.43707e^{0.29122x}$

例6 用最小二乘法求方程组

$$\begin{cases} 2x-2y=1 \\ 2x+y=2 \\ x-4y=-1 \\ 3x+2y=-3 \end{cases}$$

的近似解.

解 $G(x,y)=(3x-2y-1)^2+(2x+y-2)^2+(x-4y+1)^2+(3x+2y+3)^2$

令 $$\frac{\partial G}{\partial x}=\frac{\partial G}{\partial y}=0$$

则有 $$\begin{cases}6(3x-2y-1)+4(2x+y-2)+2(x-4y+1)+6(3x+2y+3)=0\\-4(3x-2y-1)+2(2x+y-2)-8(x-4y+1)+4(3x+2y+3)=0\end{cases}$$

即 $$\begin{cases}23x-2y=-3\\-2x+25y=-2\end{cases}$$

解得：x=-0.138354，y=-0.091068