高等工程數學 (14)

厦門大學
XIAMEN UNIVERSITY
信息学院
（国家示范性软件学院）
School of Informatics
黃 煒
博士，副教授
Dr. Wei Huang

函数插值与最佳平方逼近

数值分析（14）

厦門大學
XIAMEN UNIVERSITY
信息学院
（国家示范性软件学院）
School of Informatics
黄 炜
博士·副教授
Dr. Wei Huang

5 函数插值与最佳平方逼近

用简单函数 $y(x)$ 近似替代某个函数 $f(x)$ 称为**函数逼近**，$f(x)$ 称为**被逼近函数**，而 $y(x)$ 称为**逼近函数**. 两者的差 $R(x)=f(x)-y(x)$ 称为逼近的**误差**或**余项**. 所谓简单函数，在数值计算中主要指可以用四则运算进行计算的函数. 这种函数的一般形式是有理函数，即分子与分母都是多项式的分式函数，但最常用的逼近函数是多项式或分段多项式.

如何衡量逼近的"好"或"坏"呢？这与逼近误差的度量标准有关. 常用的标准有两种：一种是

$$\| f(x)-y(x) \|_\infty = \max_{x\in[a,b]} | f(x)-y(x) |,$$

在这种度量意义下的函数逼近称为**一致逼近**，因为若 $\| f(x)-y(x) \|_\infty \leqslant \varepsilon$，则用 $y(x)$ 替代 $f(x)$ 时，$[a,b]$ 上任一点 x 处的逼近误差之绝对值都不大于 ε；另一种是

$$\| f(x)-y(x) \|_2 = \sqrt{\int_a^b | f(x)-y(x) |^2 \mathrm{d}x},$$

在这种度量意义下的函数逼近称为**平方逼近**，因为即使 $\| f(x)-y(x) \|_2 \leqslant \varepsilon$，并不能保证 $[a,b]$ 上任一点 x 处的逼近误差之绝对值不大于 ε，但它们之差的平均平方误差不大于 $\dfrac{\varepsilon^2}{b-a}$.

特别地，如果知道被逼近函数 $f(x)$ 在一些离散点 $x_i(i=0,1,\cdots,n)$ 处的值，而要求逼近函数 $y(x)$ 在这些点处与被逼近函数 $f(x)$ 在对应点处的值相等，甚至直到某阶导数值都要相等，那么，这类问题称为**函数插值**. 这类问题也可以看成是，在一些离散点 x_i 处给定被逼近函数 $f(x)$ 的值 $f(x_i)$，要求逼近函数 $y(x)$ 满足

5 函数插值与最佳平方逼近

$$\max_{0\le i\le n}|f(x_i)-y(x_i)|=0.$$

如果要求

$$\sum_{i=0}^{n}|f(x_i)-y(x_i)|^2$$

达到最小值，则称为**数据拟合或曲线拟合**问题.

函数插值和函数逼近来源于实际问题的需要. 实际问题中出现的函数，常常依赖于实验和观测，所以通常只能得到某个区间内的一些离散点上的值，并没有明确的数学表达式. 因此希望对这样的函数用简单的数学表达式近似地给出其整体的描述，也就是说，用简单函数为离散数据建立连续模型. 另一方面，尽管可能明确函数的表达式，但过于复杂，不便于计算和应用，如计算函数的值，求导数，求积分等，这时也需要用简单函数近似地替代它们.

无论是函数插值还是函数逼近，首先要确定简单函数的类型. 一般是选取一组线性无关的简单的已知函数

$$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x),$$

并利用它们所有的线性组合来张成一个线性空间

$$\mathscr{Y}=\mathrm{Span}(\varphi_0(\cdot),\varphi_1(\cdot),\cdots,\varphi_n(\cdot))$$

作为插值或逼近的函数类，亦即利用形如

$$y(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)$$

的函数来插值或逼近. 于是，问题归结为确定其中的待定系数 $a_0,a_1,\cdots,a_n$，使有关的误差度量达到最小. 这样的已知函数 $\varphi_0(\cdot),\varphi_1(\cdot),\cdots,\varphi_n(\cdot)$ 称为线性空间 $\mathscr{Y}$ 的**基函数**.

5.1 多项式插值

设 $f(x)$ 是 $[a,b]$ 上的实值函数，$x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个互异的点，$f_0, f_1, \cdots, f_n$ 是相应的函数值，即

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

问题是在次数不大于 n 的多项式集合中求一个多项式 $p_n(x)$，使其满足

$$p_n(x_i) = f_i, \quad i = 0,1,\cdots,n. \tag{5.1-1}$$

点 $x_i (i=0,1,\cdots,n)$ 称为**插值节点或简称节点**，$[a,b]$ 称为**插值区间**，条件(5.1-1)称为**插值条件**，满足插值条件(5.1-1)式的多项式 $p_n(x)$ 称为**插值多项式**.

多项式插值的几何意义是，在次数不大于 n 的多项式集合中找一个多项式 $p_n(x)$，使其几何曲线通过给定的 $n+1$ 个数据点 $(x_i, f_i)(i=0,1,\cdots,n)$，如图 5.1-1 所示.

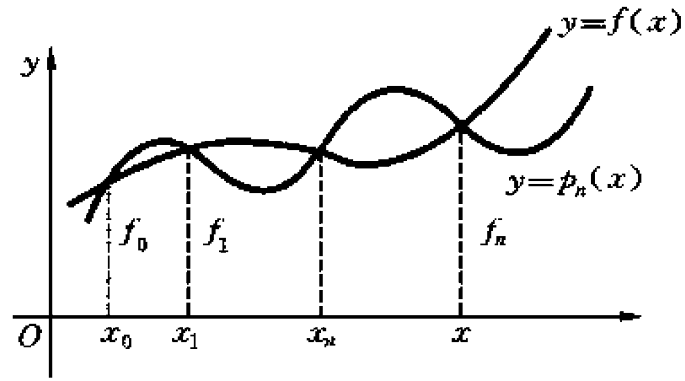

图 5.1-1

我们将证明，满足插值条件(5.1-1)的次数不大于 n 的插值多项式存在且唯一，但其表达式的形式是多种多样的，依赖于基函数的选择.

定理 5.1-1 存在唯一的 $p_n(x) \in P_n[x]$，满足插值条件(5.1-1).

证 取 $P_n[x]$ 的一个基为 $\{1, x, \cdots, x^n\}$，则 $p_n(x) \in P_n[x]$ 可表示为

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n. \tag{5.1-2}$$

5.1 多项式插值

如果 $p_n(x)$ 是插值多项式，则应满足条件(5.1-1)式，从而 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 应满足方程组

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = f_0, \\ a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = f_1, \\ \qquad\qquad\qquad \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = f_n. \end{cases} \tag{5.1-3}$$

(5.1-3)式是线性方程组，其系数行列式是 Vander-monde 行列式：

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

因此，当 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 互异时，$V_n(x_0, x_1, \cdots, x_n) \neq 0$，从而线性方程组(5.1-3) 存在唯一解，亦即存在唯一的 $p_n(x) \in P_n[x]$满足条件(5.1-1). ∎

例 1 给定以下数据：

x_i	-1	1	2	5
f_i	-7	7	-4	35

求次数不高于 3 的插值多项式 $p_3(x)$.

5.1 多项式插值

证 (5.1-3)式给出

$$
\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 5 & 25 & 125 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} -7 \\ 7 \\ -4 \\ 35 \end{bmatrix},
$$

解此方程组得 $a_0=10, a_1=5, a_2=-10, a_3=2$.

因此，所求的插值多项式为

$$p_3(x)=10+5x-10x^2+2x^3. \qquad \blacksquare$$

用解线性方程组(5.1-3)的办法求得插值多项式有严重的缺点.一是计算工作量大，二是系数矩阵，即 Vandermonde 矩阵的条件数很大，因而算出的解的精度不高.例如，例 1 的系数矩阵的条件数约是 215.因此，这个办法是不可取的.

求插值多项式的一些比较方便的方法，是通过适当选择基函数，使插值多项式具有特殊的形式，并且这些形式中所含的待定系数是可以直接由插值条件确定的.

1. Lagrange 插值

由于

$$
\begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}
= f_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
+ f_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}
+ \cdots + f_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix},
$$

5.1 多项式插值

所以先考虑特殊的插值问题，即求次数不大于 n 的多项式 $l_i(x)(i=0,1,\cdots,n)$，满足条件

$$l_i(x_j)=\delta_{ij}=\begin{cases}1, & j=i,\\ 0, & j\neq i.\end{cases} \tag{5.1-4}$$

根据定理 5.1-1，$l_i(x)$存在且唯一．由条件式(5.1-4)知，$x_0,x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n$ 都是 $l_i(x)$的零点，而 $l_i(x)$的次数又不高于 n，故可设

$$l_i(x)=b_i(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n).$$

还有一个条件 $l_i(x_i)=1$ 恰好用来确定 b_i，即

$$l_i(x_i)=b_i(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)=1,$$

由此得 $$b_i=\frac{1}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}.$$

于是，$$l_i(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}. \tag{5.1-5}$$

容易验证，$[l_0(x),l_1(x),\cdots,l_n(x)]$是 $n+1$ 维线性空间 $P_n[x]$的一个基(见习题 5 的第 3 题)，因此，$l_i(x)(i=0,1,\cdots,n)$称为以 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 为节点的 Lagrange **插值基函数**.

若令 $n+1$ 次多项式 $\omega_{n+1}(x)$为 $$\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i), \tag{5.1-6}$$

则 $\omega'_{n+1}(x_i)=(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)$，从而(5.1-5)式可改写为

$$l_i(x)=\frac{\omega_{n+1}(x)}{\omega'_{n+1}(x_i)(x-x_i)}. \tag{5.1-7}$$

5.1 多项式插值

利用 Lagrange 插值基函数，便可以将满足插值条件(5.1-1)的插值多项式 $p_n(x)$ 表示为它们的一个简单的线性组合：

$$p_n(x)=\sum_{i=0}^{n}f_il_i(x)=\sum_{i=0}^{n}f_i\frac{\omega_{n+1}(x)}{\omega'_{n+1}(x_i)(x-x_i)}. \tag{5.1-8}$$

事实上，(5.1-8)式所表示的 $p_n(x)$ 是次数不大于 n 的多项式，且有

$$p_n(x_j)=\sum_{i=0}^{n}f_il_i(x_j)=f_j \quad (j=0,1,\cdots,n).$$

故根据定理 5.1-1，$p_n(x)$ 就是所求的插值多项式.

形如(5.1-8)式的插值多项式称为 Lagrange **插值多项式.**

例 2 已知离散数据如下：

x_i	-2	-1	0	1	2
f_i	0.25	0.5	1	2	4

(1) 求以 $x_2=0, x_3=1$ 为节点的线性插值多项式，并预测 $x=0.3$ 时 f 的近似值；

(2) 求以 $x_1=-1, x_2=0, x_3=1$ 为节点的二次插值多项式，并预测 $x=0.3$ 时 f 的近似值.

解 (1) 线性插值多项式是

$$p_1(x)=f_2\frac{x-x_3}{x_2-x_3}+f_3\frac{x-x_2}{x_3-x_2}=1\times\frac{x-1}{0-1}+2\times\frac{x-0}{1-0}$$

5.1 多项式插值

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

由于 $p_1(0.3)=0.3+1=1.3$，所以当 $x=0.3$ 时，f 的近似值为1.3.

(2) 二次插值多项式是

$$p_2(x) = 0.5\frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)} + 1\frac{(x-(-1))(x-1)}{(0-(-1))(0-1)} + 2\frac{(x-(-1))(x-0)}{(1-(-1))(1-0)}$$

$$= 0.25x(x-1) - (x^2-1) + x(x+1)$$

$$= 0.25x^2 + 0.75x + 1.$$

由于 $p_2(0.3)=0.25\times(0.3)^2+0.75\times0.3+1=1.2475$，所以当 $x=0.3$ 时，f 的近似值为 1.2475. ∎

2. Newton 插值

Lagrange 插值的一个缺点是，当增加一个新的节点和对应函数值时，Lagrange 插值基函数要重新计算. 因而提出一个问题，能否充分利用原有的插值多项式，只要用修正的办法增加一项来得到新的插值多项式？亦即用递推形式给出插值多项式. Newton 插值多项式便是其中常用的一种形式.

为了充分利用原有的结果，基函数应随着节点的增加而增加. 因此，选取下述特殊的基函数：

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1, \\ \varphi_{i+1}(x) = (x-x_i)\varphi_i(x), \quad i = 0,1,\cdots,n-1. \end{cases} \tag{5.1-9}$$

5.1 多项式插值

从而次数不大于 n 次的多项式 $p_n(x)$ 可表示为

$$p_n(x)=c_0\cdot 1+c_1(x-x_0)+c_2(x-x_1)(x-x_0)+\cdots+c_n\prod_{i=0}^{n-1}(x-x_i).\quad(5.1\text{-}10)$$

显然，采用这种形式的基函数所得出的(5.1-10)式，在增加一个新节点 x_{n+1} 时，只须增加一个新项 $c_{n+1}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$.

(5.1-10)式中的待定系数 $c_0,c_1,c_2,\cdots,c_n$ 可由插值条件式(5.1-1)确定. 事实上，在(5.1-10)式中令 $x=x_0$，得

$$c_0=p_n(x_0)=f_0.$$

再在(5.1-10)式中令 $x=x_1$，得

$$c_0+c_1(x_1-x_0)=p_n(x_1)=f_1.$$

从而

$$c_1=\frac{f_1-c_0}{x_1-x_0}=\frac{f_1-f_0}{x_1-x_0}.$$

记 $f[x_0,x_1]=\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}=\dfrac{f_1-f_0}{x_1-x_0}$，则它表示函数 $f(x)$ 在节点 x_0,x_1 的函数值差与自变量差的比值，称它为**一阶差商**. 又在(5.1-10)式中令 $x=x_2$，则得

$$c_0+c_1(x_2-x_0)+c_2(x_2-x_0)(x_2-x_1)=p_n(x_2)=f_2.$$

由此解出 c_2，得

$$c_2=\frac{f_2-c_0-c_1(x_2-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}=\frac{\dfrac{f_2-f_0}{x_2-x_0}-f[x_0,x_1]}{x_2-x_1}=\frac{f[x_0,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_1}.$$

5.1 多项式插值

记 $f[x_0,x_1,x_2]=\dfrac{f[x_0,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_1}$，则它表示一阶差商的差商，自然称它为**二阶差商**.

如此依次定出系数 $c_0,c_1,c_2,\cdots,c_n$. 一般地，

$$c_i=\frac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{i-2},x_i]-f[x_0,x_1,\cdots,x_{i-2},x_{i-1}]}{x_i-x_{i-1}}=f[x_0,x_1,\cdots,x_i]\quad(i=1,\cdots,n),$$

它是 $i-1$ 阶差商的差商，故称为 **i 阶差商**.

于是，Newton 插值多项式（仍记为 $p_n(x)$）是

$$\begin{aligned}p_n(x)=&f_0+f[x_0,x_1](x-x_0)+\cdots\\&+f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}).\end{aligned}\tag{5.1-11}$$

差商的基本性质如下.

1) i 阶差商 $f[x_0,x_1,\cdots,x_i]$ 可以表示为 $f(x_0),f(x_1),\cdots,f(x_i)$ 的线性组合. 例如

$$\begin{aligned}f[x_0,x_1,x_2]=&\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{1}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)\\&+\frac{1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).\end{aligned}$$

2) 差商具有对称性，即差商与它所含节点的排列顺序无关. 例如 $f[x_0,x_1,x_2]=f[x_1,x_0,x_2]=f[x_1,x_2,x_0]=f[x_2,x_1,x_0]=f[x_2,x_0,x_1]=f[x_0,x_2,x_1]$.

3) 若 $f(x)$ 是 m 次多项式，则 $f(x)$ 关于 $x_0,\cdots,x_{i-1},x$ 的 i 阶差商 $f[x_0,\cdots,x_{i-1},x]$，当 $i\leqslant m$ 时，它是 $m-i$ 次多项式，而当 $i>m$ 时恒为零.

5.1 多项式插值

从(5.1-11)式看出，建立 Newton 插值多项式为结为计算差商. 而差商的计算可按表 5.1-1 逐行地进行，表中加横线的各阶差商是 Newton 插值多项式的系数.

表 5.1-1

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

例 3 已知数据表

x_i	1.0	2.7	3.2	4.8	5.6
f_i	14.2	17.8	22.0	38.2	51.7

求(1) 次数不大于 3 的插值多项式 $p_3(x)$ 通过前四个数据点.

(2) 次数不大于 4 的插值多项式 $p_4(x)$ 通过所给五个数据点，并计算 $f(4.0)$ 的近似值.

解 差商的计算结果如表 5.1-2 所示.

5.1 多项式插值

表 5.1-2

x_i	f_i	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商
1.0	14.2				
2.7	17.8	2.118			
3.2	22.0	8.400	2.855		
4.8	38.2	10.125	0.821	−0.535	
5.6	51.7	16.875	2.813	0.687	0.266

(1) 通过前四个数据点的插值多项式是

$$p_3(x)=14.2+2.118(x-1.0)+2.855(x-1.0)(x-2.7)$$
$$-0.535(x-1.0)(x-2.7)(x-3.2).$$

(2) 通过所给五个数据点的插值多项式是

$$p_4(x)=p_3(x)+0.266(x-1.0)(x-2.7)(x-3.2)(x-4.8)$$
$$=14.2+2.118(x-1.0)+2.855(x-1.0)(x-2.7)$$
$$-0.535(x-1.0)(x-2.7)(x-3.2)$$
$$+0.266(x-1.0)(x-2.7)(x-3.2)(x-4.8),$$

$$f(4.0)\approx p_4(4.0)=\{[[0.266(4.0-4.8)-0.535](4.0-3.2)$$
$$+2.855](4.0-2.7)+2.118\}(4.0-1.0)+14.2=29.355.$$

5.1 多项式插值

3. 插值余项

如果不考虑计算中的舍入误差，那么无论哪一种形式的插值多项式都准确地满足条件式(5.1-1)，也就是说在节点处不存在误差. 但在节点之外的点处可能有误差，问题是如何估计这些误差？为此，考虑插值余项

$$R_n(x)=f(x)-p_n(x).$$

定理 5.1-2 设 $f(x)$在含节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的区间$[a,b]$上存在 $n+1$ 阶导数，则对任意 $x\in[a,b]$，存在与 x 有关的 $\xi=\xi(x)\in(a,b)$，使

$$R_n(x)=f(x)-p_n(x)=\frac{f^{(n+1)}_{(\xi)}}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x). \tag{5.1-12}$$

证 显然，在节点 $x_i(i=0,1,\cdots,n)$处有 $R_n(x_i)=f(x_i)-p_n(x_i)=f_i-f_i=0$，故 $R_n(x)$至少有 $n+1$ 个零点，从而可设

$$R_n(x)=K(x)(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n), \tag{5.1-13}$$

其中 $K(x)$为待定函数. 为了确定 $K(x)$，将 x 看成$[a,b]$上异于节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 的一固定点，引进辅助函数

$$\psi(t)=f(t)-p_n(t)-K(x)(t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_n),$$

这里 $K(x)$因 x 固定而作为常数出现. 容易看出，$\psi(t)$在$[a,b]$上具有 $n+1$ 阶导数，且至少有 $n+2$ 个互异的零点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 及 x. 因此，依次对函数 $\psi(t),\psi'(t),\cdots,\psi^n(t)$应用 Rolle 定理知，$\psi'(t),\psi''(t),\cdots,\psi^{(n+1)}(t)$依次至少有 $n+1,n,\cdots,1$ 个相异零点. 因此存在 $\xi\in(a,b)$使

5.1 多项式插值

$$\psi^{(n+1)}(\xi)=f^{(n+1)}(\xi)-p_n^{(n+1)}(\xi)-K(x)\omega_{n+1}^{(n+1)}(\xi)=0$$

注意到 $p_n^{(n+1)}(t)=0,\omega_{n+1}^{(n+1)}(t)=(n+1)!$，由上式得

$$f^{(n+1)}(\xi)-K(x)\cdot(n+1)!=0,$$

即

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

将此代入(5.1-13)式便得(5.1-12)式. ▮

一般来说，插值余项表达式(5.1-12)中的 ξ 的准确值是无法知道的，但 $|f^{(n+1)}(x)|$ 在 $[a,b]$ 上的上界往往可以估计，所以实际应用时，总是估计 $|R_n(x)|$ 的上界作为插值多项式 $p_n(x)$ 的绝对误差限. 记

$$M_{n+1}=\max_{x\in[a,b]}|f^{(n+1)}(x)|,$$

则由(5.1-12)式可知

$$|R_n(x)|\leqslant\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|. \tag{5.1-14}$$

如果要估计 $|R_n(x)|$ 在 $[a,b]$ 上的最大值，则还须计算 $\max\limits_{x\in[a,b]}|\omega_{n+1}(x)|$，并且有

$$\max_{x\in[a,b]}|R_n(x)|\leqslant\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\max_{x\in[a,b]}|\omega_{n+1}(x)|. \tag{5.1-15}$$

从(5.1-14)式可以看出，$|R_n(x)|$ 的大小与 M_{n+1} 及 $|\omega_{n+1}(x)|$ 的大小有关. 当给定节点的个数 N 比 $n+1$ 大得多时，对于指定的点 x，应该选取靠近 x 的 $n+1$ 个节点作插值，以使诸 $|x-x_i|$ 都较小，从而 $|\omega_{n+1}(x)|$ 也较小.

5.1 多项式插值

例 4 设 $f(x)=e^x$，给出了 $f(x)$ 在 $[0,1]$ 上 $n+1$ 个等距节点 $x_i=\frac{i}{n}(i=0,1,\cdots,n)$ 处的函数值表.

(1) 如果按所给函数值表用线性插值求 $e^x(0\leqslant x\leqslant 1)$ 的近似值，使它们的绝对误差限不大于 $\frac{1}{2}\times 10^{-6}$，问 n 应取多大？

(2) 每个表值 $f(x_i)$ 应取几位有效数字？

解 (1) 由于 $x\in[0,1]$，故必有一个 $i(1\leqslant i\leqslant n)$ 使得 $x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i$. 如果 $p_1(x)$ 是 $f(x)$ 在 $[x_{i-1},x_i]$ 上的线性插值多项式，且用 $p_1(x)$ 的值作为 $f(x)=e^x$ 的近似值，则由 (5.1-15) 式及

$$\max_{0\leqslant x\leqslant 1}|f''(x)|=\max_{0\leqslant x\leqslant 1}e^x\leqslant e,$$

$$\max_{x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i}|(x-x_{i-1})(x-x_i)|\leqslant\frac{1}{4}(x_i-x_{i-1})^2,$$

得到

$$|R_1(x)|\leqslant\frac{1}{2!}\cdot\frac{1}{4}(x_i-x_{i-1})^2e=\frac{e}{8n^2}.$$

于是，欲使绝对误差限不大于 $\frac{1}{2}\times 10^{-6}$，只要 $\frac{e}{8n^2}\leqslant\frac{1}{2}\times 10^{-6}$ 即可，由此可得 $n>824$. 造表时一个合适的选取是 $n=1000$. 这时节点间距（也称为步长）$h=x_i-x_{i-1}=0.001$.

(2) 因 $0\leqslant x\leqslant 1$ 时，$1\leqslant e^x\leqslant e$，故由有效数字的概念知，每个表值 $f(x_i)$ 至少应有 7 位有效数字. ∎

5.1 多项式插值

但在实际计算时，$f(x)$并不知道，因而 $f^{(n+1)}(\xi)$无法估计. 下面介绍另一种估计余项大小的办法.

在插值区间$[a,b]$上给出了 $n+2$ 个互异的节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n,x_{n+1}$，在这些节点中任选 $n+1$ 个节点，例如 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 作一个次数不大于 n 的插值多项式，记它为 $p_n^{(1)}(x)$；再另选 $n+1$ 个节点(与上述的 $n+1$ 个节点至少有一个点不同)，如 $x_1,\cdots,x_n,x_{n+1}$再作一个次数不大于 n 的插值多项式，记为 $p_n^{(2)}(x)$. 根据定理5.1-2，有

$$f(x)-p_n^{(1)}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n),$$

$$f(x)-p_n^{(2)}(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_2)}{(n+1)!}(x-x_1)\cdots(x-x_n)(x-x_{n+1}),$$

其中 $\xi_1,\xi_2\in(a,b)$. 如果 $f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内连续且变化很小，那么可以认为 $f^{(n+1)}(\xi_1)\approx f^{(n+1)}(\xi_2)$，从而有

$$\frac{f(x)-p_n^{(2)}(x)}{f(x)-p_n^{(1)}(x)}\approx\frac{x-x_{n+1}}{x-x_0}.$$

于是得到

$$\begin{cases} f(x)-p_n^{(2)}(x)\approx\dfrac{x-x_{n+1}}{x_{n+1}-x_0}(p_n^{(2)}(x)-p_n^{(1)}(x)), \\ f(x)\approx p_n^{(2)}(x)+\dfrac{x-x_{n+1}}{x_{n+1}-x_0}(p_n^{(2)}(x)-p_n^{(1)}(x)). \end{cases} \tag{5.1-16}$$

5.1 多项式插值

(5.1-16)式中第一式表明，插值多项式 $p_n^{(2)}(x)$ 与函数 $f(x)$ 之差可以通过两个插值多项式之差 $p_n^{(2)}(x)-p_n^{(1)}(x)$ 来估计. 这种用计算的结果来估计的办法，通常称为**事后估计**，这是数值计算中常用的估计误差的方法. (5.1-16)式中的第二式表明，用 $p_n^{(2)}(x)+\frac{x-x_{n+1}}{x_{n+1}-x_0}(p_n^{(2)}(x)-p_n^{(1)}(x))$ 作为 $f(x)$ 的近似比 $p_n^{(2)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似更好，因为它考虑了误差补偿，即用 $\frac{x-x_{n+1}}{x_{n+1}-x_0}(p_n^{(2)}(x)-p_n^{(1)}(x))$ 修正 $p_n^{(2)}(x)$，从而使误差更小.

现在讨论 Newton 插值的余项表达式. 这时，除了 $n+1$ 个插值数据 $(x_i,f_i)(i=0,1,\cdots,n)$ 外，再加上第 $n+2$ 个数据 $(x,f(x))$（暂且将 x 看成与 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 相异的节点）. 于是，按 Newton 插值公式(5.1-11)得到次数不大于 $n+1$ 的插值多项式

$$\begin{aligned}p_{n+1}(t)= & f_0+f[x_0,x_1](t-x_0)+\cdots\\ & +f[x_0,x_1,\cdots,x_n](t-x_0)(t-x_1)\cdots(t-x_{n-1})\\ & +f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x](t-x_0)(t-x_1)\cdots\\ & \cdot(t-x_{n-1})(t-x_n).\end{aligned}$$

在上式中令 $t=x$，则由插值条件 $p_{n+1}(x)=f(x)$ 知，

$$\begin{aligned}f(x)= & f_0+f[x_0,x_1](x-x_0)+\cdots+f[x_0,\cdots,x_n]\prod_{i=0}^{n-1}(x-x_i)\\ & +f[x_0,\cdots,x_n,x]\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\end{aligned}$$

5.1 多项式插值

$$= p_n(x) + f[x_0, \cdots, x_n, x] \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

因此，

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x]\omega_{n+1}(x). \qquad (5.1\text{-}17)$$

将(5.1-17)式与(5.1-12)式比较，得知

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x] = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}. \qquad (5.1\text{-}18)$$

这就是说，若 $f(x)$在含有互异节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的最小闭区间$[a,b]$上有 $n+1$ 阶导数，则存在与 x 有关的$\xi = \xi(x) \in (a,b)$，使(5.1-18)式成立.(5.1-18)式表明了差商与导数之间的关系，据此可以定义重节点差商公式. 事实上，在(5.1-18)式中令 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 都趋向于 x，由于 ξ 位于包含 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的最小闭区间$[a,b]$内，故 ξ 也趋向于 x，从而对任意正整数 k，有重节点差商公式

$$f\,[\underbrace{x, x, \cdots, x}_{k+1}] = \lim_{x_0, x_1, \cdots, x_{k-1} \to x} f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}, x] = \frac{f^{(k)}(x)}{k!}. \qquad (5.1\text{-}19)$$

有了重节点差商公式，就可以由数据来判断 $f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内变化很小这件事了. 由(5.1-19)式知，要求 $f^{(n+1)}(x)$在(a,b)内变化很小，也就是要求 $f(x)$的 $n+1$ 阶差商变化很小.

4. Hermite 插值

5.1 多项式插值

利用(5.1-19)式,可以构造 Hermite 插值多项式. Hermite 插值问题是求一个最低次多项式,使其与被插值函数在某些或所有节点处不仅有相同的函数值,而且还要有相同的直到某阶导数的导数值. 具体提法如下.

设函数 $f(x)$在节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 处的函数值与直到某阶导数值为

$$f(x_i)=f_i,\ f'(x_i)=f'_i,\ \cdots,\ f^{(m_i-1)}(x_i)=f_i^{(m_i-1)},\quad i=0,1,\cdots,n,$$

寻求一个次数尽可能低的多项式 $H(x)$,使满足条件

$$H^{(j)}(x_i)=f_i^{(j)},\quad j=0,1,\cdots,m_i-1,\quad i=0,1,\cdots,n. \tag{5.1-20}$$

可以证明,存在唯一的满足插值条件(5.1-20)的次数不大于 $m=\sum\limits_{i=0}^{n}m_i-1$ 的多项式 $H_m(x)$,$H_m(x)$ 称为 Hermite **插值多项式.**

如果 $f(x)$在$[a,b]$上存在 $m+1$ 阶导数,节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n\in[a,b]$,而 $H_m(x)$是 $f(x)$的 Hermite 插值多项式,则可以按定理 5.1-2 的推证证明余项 $R_{m+1}(x)$的表达式为

$$R_{m+1}(x)=f(x)-H_m(x)=\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)^{m_i}, \tag{5.1-21}$$

其中 $\xi\in(a,b)$且依赖于 x.

例 5 求一个次数最低的 Hermite 插值多项式 $H(x)$,使 $x=0$ 时,$H(0)=-1$,$H'(0)=-2$,而 $x=1$ 时,$H(1)=0$,$H'(1)=10$,$H''(1)=40$,并给出插值余项的表达式.

解 由于 $x=0$ 处有一阶导数值的插值条件,所以它是"二重节点";而在 $x=1$ 处有直到二阶导数值的插值条件,所以 $x=1$ 是"三重节点". 因此,利用重节点差商公式

5.1 多项式插值

(5.1-19)可以作出差商表 5.1-3.

表 5.1-3

x_i	f_i	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商
0	$\underline{-1}$				
0	-1	$\underline{-2}$			
1	0	1	$\underline{3}$		
1	0	10	9	$\underline{6}$	
1	0	10	$\frac{40}{2!}=20$	11	$\underline{5}$

根据 Newton 插值公式知，Hermite 插值多项式为

$$H(x)=-1-2x+3x^2+6x^2(x-1)+5x^2(x-1)^2,$$

且插值余项为

$$R(x)=f(x)-H(x)=\frac{1}{5!}f^{(5)}(\xi)x^2(x-1)^3,\quad 0<\xi<1.$$

用一个例子说明舍入误差对插值的影响.

例 6 考察中学用的四位对数表，求线性插值的误差.

解 设 $f(x)=\lg x$，则 $f''(x)=-\dfrac{\lg e}{x^2}$，而 $\lg e<0.4343$. 当 x 介于 x_0 与 x_1 之间，$1\leqslant x_0<x_1\leqslant 10$，那么按线性插值的余项公式，有

5.1 多项式插值

$$R_1(x)=-\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2}\cdot\frac{\lg e}{\xi^2},\quad x_0<\xi<x_1.$$

由此得到 $|R_1(x)|\leqslant\frac{\lg e}{2x_0^2}|(x-x_0)(x-x_1)|.$

记表距 $h=x_1-x_0$，则有 $\max\limits_{x_0\leqslant x\leqslant x_1}|(x-x_0)(x-x_1)|=\frac{h^2}{4}$，

因而 $|\lg x-p_1(x)|=|R_1(x)|\leqslant\frac{0.4343}{8x_0^2}h^2\leqslant 0.05429h^2.$

对于一张四位数表，$h=0.01$，故有

$$|\lg x-p_1(x)|\leqslant 5.429\times10^{-6},\quad 1\leqslant x_0\leqslant x\leqslant x_1=10,$$

因而插值给出的四位数字是足够精确的，因为它们的绝对误差限是 $\frac{1}{2}\times10^{-4}=5\times10^{-5}$.

但是，由于舍入误差的影响，实际误差比上述的截断误差要大. 事实上，如果考虑表值有舍入误差，使 f_0、f_1 并不是真正的函数值，而只是表值，那么

$$f(x_0)=f_0+\varepsilon_0,\quad f(x_1)=f_1+\varepsilon_1,$$

其中 ε_0、ε_1 是舍入误差，从而

$$|f(x_0)-f_0|=|\varepsilon_0|\leqslant\varepsilon,\quad |f(x_1)-f_1|=|\varepsilon_1|\leqslant\varepsilon,$$

这里 ε 是已知的，例如，对于四位对数表，$\varepsilon=\frac{1}{2}\times10^{-4}=5\times10^{-5}$.

若不考虑计算 $p_1(x)$ 中引入新的舍入误差，则用表值 f_0、f_1 作线性插值的总的误差是

5.1 多项式插值

$$
\begin{aligned}
e_1(x) &= f(x) - \frac{(x_1 - x)f_0 + (x - x_0)f_1}{x_1 - x_0} \\
&= f(x) - \frac{(x_1 - x)f(x_0) + (x - x_0)f(x_1)}{x_1 - x_0} + \frac{(x_1 - x)\varepsilon_0 + (x - x_0)\varepsilon_1}{x_1 - x_0} \\
&= R_1(x) + \delta_1(x), \quad x_0 \leqslant x \leqslant x_1,
\end{aligned}
$$

其中 $R_1(x) = f(x) - \dfrac{(x_1 - x)f(x_0) + (x - x_0)f(x_1)}{x_1 - x_0}$ 是截断误差，而 $\delta_1(x) = \dfrac{(x_1 - x)\varepsilon_0 + (x - x_0)\varepsilon_1}{x_1 - x_0}$ 是舍入误差 ε_0、ε_1 对线性插值的影响. 因为 x 介于 x_0 与 x_1 之间，所以

$$
\begin{aligned}
|\delta_1(x)| &= \frac{|(x_1 - x)\varepsilon_0 + (x - x_0)\varepsilon_1|}{|x_1 - x_0|} \leqslant \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0}|\varepsilon_0| + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}|\varepsilon_1| \\
&\leqslant \frac{(x_1 - x) + (x - x_0)}{x_1 - x_0}\max\{|\varepsilon_0|; |\varepsilon_1|\} \leqslant \varepsilon.
\end{aligned}
$$

由于对四位对数表有 $\varepsilon = 5 \times 10^{-5}$，所以舍入误差对线性插值的影响比截断误差 5.429×10^{-6} 约大 10 倍.

线性插值的总的误差为

$$
\begin{aligned}
|e_1(x)| &= |R_1(x) + \delta_1(x)| \leqslant |R_1(x)| + |\delta_1(x)| \\
&\leqslant 5.429 \times 10^{-6} + 5 \times 10^{-5} \approx 5.5 \times 10^{-5}. \quad \blacksquare
\end{aligned}
$$

5.1 多项式插值

上述的舍入误差对线性插值的影响之分析可以推广到高次多项式插值的情况，只不过估计 $\max|\delta(x)|$ 较为复杂，这里 $\delta(x)$ 是舍入误差对该高次插值多项式的影响.

下面给出 Newton 插值中各阶差商 $f[x_0,x_1]$, $f[x_0,x_1,x_2]$, $\cdots$, $f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$ 的算法，以及对任给的点 z，用(5.1-11)式计算 Newton 插值多项式 $p_n(x)$ 在点 z 处的值的算法.

给定 $n+1$ 个数据 $(x_i,f_i)(i=0,1,\cdots,n)$，将各阶差商 $f[x_0]=f(x_0)$（零阶微商），$f[x_0,x_1]$, $\cdots$, $f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$ 依次存于 $f_0,f_1,\cdots,f_n$ 中.

差商的算法

1) 对于 $i=1,2,\cdots,n$ 做 2)；

2) 对于 $j=n,n-1,\cdots,i$，$(f_j-f_{j-1})/(x_j-x_{j-i})\Rightarrow f_j$. ∎

Newton 插值多项式求值的算法

先调用计算差商的算法，将各阶差商依次存于 $f_0,f_1,\cdots,f_n$ 中，再用秦九韶法的简单变形计算 $p_n(z)$ 的值，存于 p.

1) $f_n\Rightarrow p$.

2) 对于 $i=n-1,n-2,\cdots,0$，做 $p(z-x_i)+f_i\Rightarrow p$. ∎

5.2 样条插值

为使插值更准确，插值节点之间的间距应该较小，而这使节点个数很多. 这时如果采用整体(一个多项式)插值，那么插值多项式的次数很高，称为**高次插值**. 高次多项式所具有的振荡特性使得高次插值的效果反而不好，出现所谓 **Runge 现象**.

例如，考虑 $f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$ 在区间$[-5,5]$上的等距节点 $x_i=-5+10\times\dfrac{i}{n}(i=0,1,\cdots,n)$，相应的 Lagrange 插值多项式是 $p_n(x)=\sum\limits_{i=0}^{n}\dfrac{1}{1+x_i^2}\dfrac{\omega_{n+1}(x)}{\omega'_{n+1}(x_i)(x-x_i)}$.

当 $n\to+\infty$时，$p_n(x)$只在$[-3.63,3.63]$上收敛，而此区间之外，特别在 $x=\pm5$ 附近误差很大. 比如 $n=10$ 时，$p_{10}(4.8)\approx1.80438$，$f(4.8)\approx0.04160$，从而

$$|f(4.8)-p_n(4.8)|\approx1.7628.$$

图 5.2-1 给出了 $y=p_{10}(x)$和 $y=f(x)$的图形.

Runge 现象说明，即使光滑性很好的函数，其插值多项式的次数逐渐增高并不能保证收敛于该函数. 此外，高次插值的数值稳定性不好，计算的舍入误差可能产生很大的插值误差，函数值 $f(x_i)$的微小变化会使高阶差商有很大的变动.

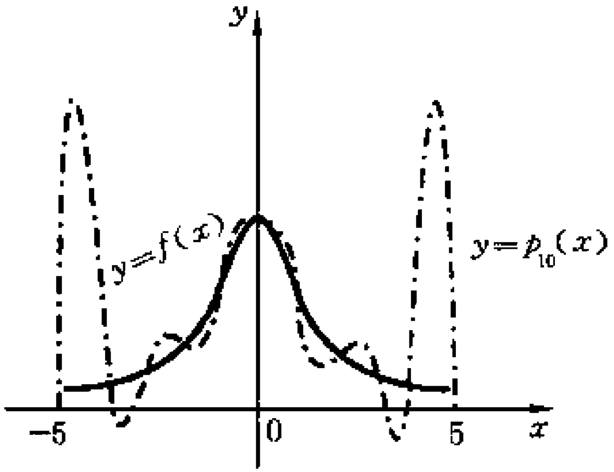

图 5.2-1

那么，当插值区间较大，如何解决既要满足插值条件，又希望用不太高次(例如 3 次)的插值多项式这一问题呢？这就需要将插值区间分为若干个小区间，而

5.2 样条插值

在每个小区间上采用低次多项式插值．这就是分段多项式插值．

若采用一般的分段多项式插值，则在节点处就有可能不是光滑地连接，例如分段线性插值就会出现尖点．因此提出这样的问题，能否在只给出节点处函数值的情况下，在每个小区间上是不大于 3 次的插值多项式，而整个区间上是具有二阶连续导数的分段三次多项式插值呢？三次样条插值肯定性地回答了这个问题．

如前，给出了 $n+1$ 个数据点 $(x_i, f_i)(i=0,1,\cdots,n)$，要求构造一个三次样条函数 $S(x)$，满足下列条件：

1) $S(x_i)=f_i, i=0,1,\cdots,n$;

2) 在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上是 3 次多项式；

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

由于三次样条函数在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上是 3 次多项式，所以它的二阶导数必是一次多项式．如果用 $M_i(i=0,1,\cdots,n)$ 表示 $S(x)$ 的二阶导数在点 x_i 处的值 $S''(x_i)$，那么在小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上，$S''(x)$ 的表达式是

$$S''(x) = M_i \frac{x_{i+1}-x}{h_i} + M_{i+1} \frac{x-x_i}{h_i}, \tag{5.2-1}$$

其中 $h_i = x_{i+1}-x_i$．将(5.2-1)式积分两次得

$$S(x) = M_i \frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i} + M_{i+1} \frac{(x-x_i)^3}{6h_i} + \varphi(x),$$

其中 $\varphi(x)$ 是一次多项式，可以设为

5.2 样条插值

$$\varphi(x)=c_i\frac{x_{i+1}-x}{h_i}+c_{i+1}\frac{x-x_i}{h_i}.$$

由插值条件 $S(x_i)=f_i, S(x_{i+1})=f_{i+1}$ 得

$$c_i=f_i-M_i\frac{h_i^2}{6},\quad c_{i+1}=f_{i+1}-M_{i+1}\frac{h_i^2}{6}.$$

从而在小区间$[x_i,x_{i+1}]$上有

$$S(x)=M_i\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^3}{6h_i}+\left(f_i-M_i\frac{h_i^2}{6}\right)\cdot\frac{x_{i+1}-x}{h_i}+\left(f_{i+1}-M_{i+1}\frac{h_i^2}{6}\right)\frac{x-x_i}{h_i}\qquad(5.2\text{-}2)$$

且在(x_i,x_{i+1})内，其一阶导数 $S'(x)$为

$$S'(x)=-M_i\frac{(x_{i+1}-x)^2}{2h_i}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^2}{2h_i}+\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-\frac{M_{i+1}-M_i}{6}h_i.\qquad(5.2\text{-}3)$$

因而，三次样条函数 $S(x)$有 $n+1$ 个未知参数 $M_i(i=0,1,\cdots,n)$需要加以确定. 从上述推导过程可知，$S(x)$已满足了插值条件，且在$[a,b]$上连续. 如果 $S'(x)$在$[a,b]$上连续，那么由于 $M_i=S''(x_i)(i=0,1,\cdots,n)$，所以 $S''(x)$在$[a,b]$上连续，即 $S(x)\in C^2[a,b]$[①]. 因此，只要 $S'(x_i-0)=S'(x_i+0)(i=1,2,\cdots,n-1)$，便有 $S''(x)\in C^2[a,b]$.

在(5.2-3)式中，令 $x\to x_i$ 得

$$S'(x_i+0)=-\frac{1}{2}M_ih_i+\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-\frac{M_{i+1}-M_i}{6}h_i;$$

5.2 样条插值

而令 $x \to x_{i+1}$，则得 $S'(x_{i+1}-0)=\frac{1}{2}M_{i+1}h_i+\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-\frac{M_{i+1}-M_i}{6}h_i$，

由上式可知 $S'(x_i-0)=\frac{1}{2}M_ih_{i-1}+\frac{f_i-f_{i-1}}{h_{i-1}}-\frac{M_i-M_{i-1}}{6}h_{i-1}$.

于是，$S(x)\in C^2[a,b]$意味着

$$\frac{1}{2}M_ih_{i-1}+\frac{f_i-f_{i-1}}{h_{i-1}}-\frac{M_i-M_{i-1}}{6}h_{i-1}=-\frac{1}{2}M_ih_i+\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-\frac{M_{i+1}-M_i}{6}h_i,$$

经整理后得

$$\frac{h_{i-1}}{6}M_{i-1}+\frac{h_{i-1}+h_i}{3}M_i+\frac{h_i}{6}M_{i+1}=\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-\frac{f_i-f_{i-1}}{h_{i-1}},$$

$$i=1,2,\cdots,n-1. \qquad (5.2\text{-}4)$$

记 $\lambda_i=\frac{h_i}{h_{i-1}+h_i}$，$\mu_i=1-\lambda_i=\frac{h_{i-1}}{h_{i-1}+h_i}$，并用差商记号将

$$\frac{\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-\frac{f_i-f_{i-1}}{h_{i-1}}}{(h_{i-1}+h_i)}=\frac{\frac{f_{i+1}-f_i}{x_{i+1}-x_i}-\frac{f_i-f_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}}{x_{i+1}-x_{i-1}}$$

表示为二阶差商 $f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}]$，则(5.2-4)式可以表示为

$$\mu_iM_{i-1}+2M_i+\lambda_iM_{i+1}=6f[x_{i-1},x_i,x_{i+1}],\quad i=1,2,\cdots,n-1. \qquad (5.2\text{-}5)$$

(5.2-5)式是关于 $M_i(i=0,1,\cdots,n)$ 的线性方程组，共有 $n-1$ 个方程，比未知参数 $n+1$ 少 2，因而还需要两个方程才可能唯一地确定 $S(x)$。一般通过对边界附加适当的条件，即用边界条件给出所需要的两个方程。常用的有下列三种边界条件：

5.2 样条插值

(1) 已知 $S''(x_0)=M_0$ 和 $S''(x_n)=M_n$

这时，由(5.2-5)式得到关于 $M_1,M_2,\cdots,M_{n-1}$ 的线性方程组

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6f[x_0,x_1,x_2]-\mu_1 M_0 \\ 6f[x_1,x_2,x_3] \\ \vdots \\ 6f[x_{n-3},x_{n-2},x_{n-1}] \\ 6f[x_{n-2},x_{n-1},x_n]-\lambda_{n-1}M_n \end{bmatrix} \tag{5.2-6}$$

(2) 已知 $S'(x_0)=m_0$ 和 $S'(x_n)=m_n$

由(5.2-3)式可知

$$\begin{cases} S'(x_0)=m_0=-\dfrac{1}{2}M_0h_0+\dfrac{f_1-f_0}{h_0}-\dfrac{M_1-M_0}{6}h_0, \\ S'(x_n)=m_n=\dfrac{1}{2}M_nh_{n-1}+\dfrac{f_n-f_{n-1}}{h_{n-1}}-\dfrac{M_n-M_{n-1}}{6}h_{n-1}. \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} 2M_0+M_1=\dfrac{6}{h_0}(f[x_0,x_1]-m_0), \\ M_{n-1}+2M_n=\dfrac{6}{h_{n-1}}(m_n-f[x_{n-1},x_n]). \end{cases} \tag{5.2-7}$$

于是(5.2-7)式与(5.2-5)式一起构成了关于 $M_0,M_1,\cdots,M_n$ 的线性方程组

5.2 样条插值

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{6}{h_0}(f[x_0,x_1]-m_0) \\ 6f[x_0,x_1,x_2] \\ \vdots \\ 6f[x_{n-2},x_{n-1},x_n] \\ \frac{6}{h_{n-1}}(m_n-f[x_{n-1},x_n]) \end{bmatrix} \qquad (5.2\text{-}8)$$

(3) $S(x)$是以 $b-a$ 为周期的周期函数

这是由于 $f(x)$是周期为 $b-a$ 的周期函数，或数据所反映的规律具有周期性而决定的。这时的边界条件是 $S^{(k)}(x_0+0)=S^{(k)}(x_n-0)(k=0,1,2)$，即 $f_0=f_n, m_0=m_n, M_0=M_n$. 从而独立的未知参数有 n 个。若令 $h_{-1}=h_{n-1}, M_{-1}=M_{n-1}$，则(5.2-4)式对 $i=0$ 也成立，从而(5.2-5)式对 $i=0$ 也成立。于是得到关于 $M_0, M_1, \cdots, M_{n-1}$的线性方程组。

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_0 & & & \mu_0 \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ \lambda_{n-1} & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6f[x_{-1},x_0,x_1] \\ 6f[x_0,x_1,x_2] \\ \vdots \\ 6f[x_{n-3},x_{n-2},x_{n-1}] \\ 6f[x_{n-2},x_{n-1},x_n] \end{bmatrix}, \qquad (5.2\text{-}9)$$

其中

5.2 样条插值

$$\lambda_0=\frac{h_0}{h_{-1}+h_0}=\frac{h_0}{h_0+h_{n-1}},\quad \mu_0=1-\lambda_0=\frac{h_{n-1}}{h_0+h_{n-1}},$$

$$f[x_{-1},x_0,x_1]=\frac{1}{h_{-1}+h_0}\left(\frac{f_1-f_0}{h_0}-\frac{f_0-f_{-1}}{h_{n-1}}\right)=\frac{1}{h_0+h_{n-1}}\left(\frac{f_1-f_0}{h_0}-\frac{f_n-f_{n-1}}{h_{n-1}}\right).$$

由于线性方程组(5.2-6)、(5.2-8)及(5.2-9)的系数矩阵都是按行严格对角占优的，且对角元素均为 2，非对角元素之和小于或等于 1，所以它们都存在唯一解，因此各得到唯一的三次样条函数 $S(x)$. 线性方程组(5.2-6)和(5.2-8)还是三对角线方程组，因而可用追赶法求解. 对于线性方程组(5.2-9)，我们可用类似于三对角线方程组的处理方法，先将其系数矩阵进行 LR 分解，不过 L、R 不再是带状单位下三角矩阵和上三角矩阵. 其分解形式如下.

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_0 & & & \mu_0 \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-2} \\ \lambda_{n-1} & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \alpha_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ s_1 & \cdots & s_{n-2} & \alpha_n+s_{n-1} & 1 \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & t_1 \\ & \beta_2 & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & t_{n-2} \\ & & & \ddots & \gamma_{n-1}+t_{n-1} \\ & & & & \beta_n \end{bmatrix},$$

进而可以得出求解方程组(5.2-9)的一般公式(请读者自己完成).

例 1 已知数据表

x_i	1	2	4	5
f_i	1	3	4	2

5.2 样条插值

求满足自然边界条件 $S''(1)=S''(5)=0$ 的三次样条插值函数 $S(x)$，并计算 $f(3)$ 的近似值.

解 作差商表 5.2-1.

表 5.2-1

x_i	f_i	一阶差商 $f[x_i,x_{i+1}]$	二阶差商 $f[x_i,x_{i+1},x_{i+2}]$
1	1		
2	3	2	
4	4	0.5	−0.5
5	2	−2	−0.833333

由自然边界条件得，$M_0=M_3=0$，故(5.2-6)式给出关于 M_1、M_2 的线性方程组为

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 \\ \mu_2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -3 \\ -4.999998 \end{bmatrix},$$

其中 $\lambda_1=\dfrac{h_1}{h_0+h_1}=\dfrac{2}{1+2}=0.666667$， $\mu_2=\dfrac{h_1}{h_1+h_2}=\dfrac{2}{2+1}=0.666667.$

解此方程组，得 $M_1=-0.750001$，$M_2=-2.249999$.

由于 $3\in[2,4]$，所以由(5.2-2)式得到 $S(x)$ 在区间 $[2,4]$ 上的表达式为

$$S(x)=M_1\frac{(x_2-x)^3}{6h_2}+M_2\frac{(x-x_1)^3}{6h_1}+\left(f_1-M_1\frac{h_1^2}{6}\right)\frac{x_2-x}{h_1}+\left(f_2-M_2\frac{h_1^2}{6}\right)\frac{x-x_1}{h_1}$$

5.2 样条插值

$$=-0.750001\times\frac{(4-x)^3}{12}-2.249999\times\frac{(x-2)^3}{12}$$

$$+3.500001\times\frac{4-x}{2}+5.499999\times\frac{x-2}{2}.$$

在上式中令 $x=3$，得到 $f(3)\approx S(3)=4.250000$.

例 2 已知数据表

x_i	0	0.15	0.30	0.45	0.60
f_i	1	0.97800	0.91743	0.83160	0.73529

求满足边界条件 $S'(0)=0, S'(0.60)=-0.64879$ 的三次样条插值函数.

解 按已知数据作差商表 5.2-2.

表 5.2-2

x_i	f_i	一阶差商 $f[x_i,x_{i+1}]$	二阶差商 $f[x_i,x_{i+1},x_{i+2}]$
0	1		
0.15	0.97800	−0.14667	
0.30	0.91743	−0.40380	−0.85710
0.45	0.83160	−0.57220	−0.56133
0.60	0.73529	−0.64207	−0.23290

5.2 样条插值

由于是等距节点，所以有 $h_i=0.15$，$\lambda_i=0.5$，$\mu_i=1-\lambda_i=0.5$，$i=1,2,3$. 并且 $m_0=0$，$m_4=-0.64879$. 因此，(5.2-8)式给出关于 $M_0,M_1,\cdots,M_4$ 的线性方程组是

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & \\ 0.5 & 2 & 0.5 & & \\ & 0.5 & 2 & 0.5 & \\ & & 0.5 & 2 & 0.5 \\ & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5.86680 \\ -5.14260 \\ -3.36798 \\ -1.39740 \\ -0.26880 \end{bmatrix}.$$

解此方程组，得 $M_0=-2.04462$，$M_1=-1.77757$，$M_2=-1.13031$，

$$M_3=-0.43716,\quad M_4=0.08418.$$

因此，由(5.2-2)式得到三次样条插值函数

$$S(x)=\begin{cases} 0.29672x^3-1.02231x^2+1, & x\in[0,0.15] \\ 0.71918x^3-1.21242x^2+0.02851x+0.99858, & x\in[0.15,0.30] \\ 0.77017x^3-1.25831x^2+0.04228x+0.99720, & x\in[0.30,0.45] \\ 0.57927x^3-1.00059x^2-0.07370x+1.01461, & x\in[0.45,0.60] \end{cases}$$ ∎

下面给出关于三次样条插值的误差界与收敛性的定理，其证明可参阅 J. Stoer and R. Bulirsch,《Introduction to nurnerical crnalysis》, Springer-Verlag, 1980.

定理 5.2-1 设 $f(x)\in C^4[a,b]$、$S(x)$ 是第一种或第二种边界条件的三次样条插值多项式，记 $h=\max\limits_{0\leqslant i\leqslant n-1} h_i$，则有估计式

5.2 样条插值

$$\| f^{(k)}(x) - S^{(k)}(x) \|_\infty \leqslant c_k \| f^{(4)}(x) \|_\infty h^{4-k} \quad (k=0,1,2,3), \quad (5.2\text{-}10)$$

其中 c_0, c_1, c_2 都是与 $f(\cdot)$ 及 h 无关的正常数，而 c_3 只与 $\beta = \max\limits_{0\leqslant i\leqslant n-1} \frac{h}{h_i}$（称为分划比）有关.

由这个定理可知，当 $h\to 0$（即 $n\to +\infty$）时，样条插值多项式 $S(x)$ 及其一阶导数 $S'(x)$、二阶导数 $S''(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上分别一致收敛于 $f(x), f'(x), f''(x)$. 如果在分划加密过程中保证分划比满足 $0<m\leqslant\beta\leqslant M$，这里 m, M 是常数，那么还有 $S'''(x)$ 一致收敛于 $f'''(x)$.

5.3 数值的最小二乘拟合

在科学实验及统计分析中，常常需要从一组实验的观测数据来确定变量之间的一个近似解析表达式。由于实验所得的数据很多，而且观测数据本身就有误差，所以用插值方法求近似的解析表达式是不可行的。一般采用拟合方法，即在确定的函数类

$$\Phi = \mathrm{Span}(\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x))$$

中，求一个函数 $\varphi(x) \in \Phi$“最佳”地拟合已知的数据 $(x_i, y_i)(i=0,1,\cdots,N)$。所谓“最佳”的标准是要求 $\varphi(x_i)$ 与 y_i 之间的差 $\varphi(x_i)-y_i$ 的平方和

$$\delta^2 = \sum_{i=0}^{N}(\varphi(x_i) - y_i)^2 \tag{5.3-1}$$

取得最小值。按这种标准确定的拟合函数 $\varphi(x)$，称为**最小二乘拟合函数**。

更一般地，考虑到有些数据比较重要，因而要求它们的拟合误差要小，而某些数据比较次要，它们的拟合误差可以相对大些，这就引入**加权的最小二乘拟合**，这时问题是求 $\varphi(x) \in \Phi$，使

$$\delta^2 = \sum_{i=0}^{N} w_i(\varphi(x_i) - y_i)^2 \tag{5.3-1$'$}$$

取得最小值，其中 $w_i > 0(i=0,1,\cdots,N)$ 是给定的常数，称为**权**，它表示数据 (x_i, y_i) 的比重。

设 $\varphi_0(\cdot), \varphi_1(\cdot), \cdots, \varphi_n(\cdot)$ 线性无关，那么对于任意 $\varphi(\cdot) \in \Phi$，都可用 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ 线性表示 $\varphi(x)$，即有

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

5.3 数值的最小二乘拟合

于是，问题化为求出这样的 $a_0, a_1, \cdots, a_n$，使(5.3-1)式或(5.3-1′)式取得最小值.

如果利用矩阵记号，令

$$\boldsymbol{y} = [y_0, y_1, \cdots, y_N]^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^{N+1}, \quad \boldsymbol{a} = [a_0, a_1, \cdots, a_n]^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^{n+1},$$

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_0(x_N) & \varphi_1(x_N) & \cdots & \varphi_n(x_N) \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{(N+1)\times(n+1)},$$

那么(5.3-1)式可写成 $$\delta^2 = (\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{y}), \tag{5.3-2}$$

而(5.3-1′)式可写成 $$\delta^2 = (\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{y}), \tag{5.3-2′}$$

其中 $\boldsymbol{W} = \mathrm{diag}(w_0, w_1, \cdots, w_N)$ 是 $N+1$ 阶对角矩阵.

这样就把数据的最小二乘拟合归结为使 δ^2 取得最小值的最小二乘问题. 可以验证，$\boldsymbol{a}$ 是最小二乘问题(5.3-2)的解的充要条件是，它满足正规方程组

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ga} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}. \tag{5.3-3}$$

$\boldsymbol{a}$ 是加权最小二乘问题(5.3-2′)式的解的充要条件是，它满足加权正规方程组

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{WGa} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Wy}. \tag{5.3-3′}$$

一般有 $N \geqslant n$，且 $\varphi_0(\cdot), \varphi_1(\cdot), \cdots, \varphi_n(\cdot)$ 线性无关，故线性方程组(5.3-3)或(5.3-3′)的系数矩阵是可逆的，从而它们的解存在且唯一，即存在唯一的一个最小二乘拟合函数.

5.3　数值的最小二乘拟合

解决数据的最小二乘拟合函数的关键，是建立并求解正规方程组，而这又取决于基函数 $\varphi_i(\cdot)(i=0,1,\cdots,n)$ 的选取. 那么如何选取基函数呢？通常是在坐标平面上点出已知数据点，并描出大致的曲线，再据此确定这条曲线近似于什么类型的函数，例如是多项式还是指数函数或对数函数等，然后在这类函数中选取基函数.

例 1　已知数据如下：

x	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8
y	0.9	1.9	2.8	3.3	4.2

用最小二乘法求拟合这组数据的曲线.

解　在坐标平面上描出已知数据点，可见这些点大致位于一条直线附近，如图 5.3-1 所示，故选择

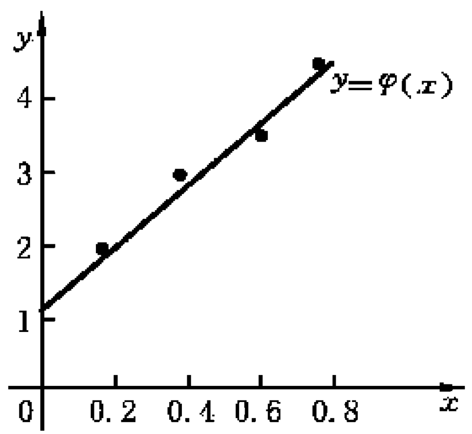

图 5.3-1

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x$$

作为拟合函数. 这时，$\varphi_0(x)=1$，$\varphi_1(x)=x$ 为基函数，且

$$\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}0.9\\1.9\\2.8\\3.3\\4.2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}a_0\\a_1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}1 & 0.0\\1 & 0.2\\1 & 0.4\\1 & 0.6\\1 & 0.8\end{bmatrix}.$$

因此，由(5.3-3)式得到正规方程组为

5.3 数值的最小二乘拟合

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 1.2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13.1 \\ 6.84 \end{bmatrix},$$

解得 $a_0=1.02, a_1=4$. 于是 $\varphi(x) = 1.04 + 4x$

为所求的拟合函数.

例 2 已知一组实验数据如下所示：

x	2	3	4	7	8	10
y	106.42	108.20	109.50	110.00	109.93	110.49
x	11	14	16	18	19	
y	110.59	110.60	110.76	111.00	111.20	

求这组数据的最小二乘拟合函数.

解 在坐标平面上点出这些数据点，并描出大致的曲线，如图 5.3-2 所示. 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.

第一种取双曲线型的函数：

$$\varphi(x) = a_0 + \frac{a_1}{x}.$$

这时，$\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=\dfrac{1}{x}$ 为基函数.

正规方程组(5.3-3)为

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

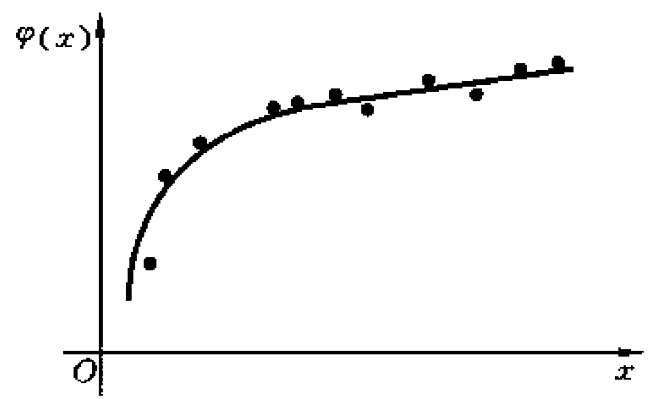

图 5.3-2

解得 $a_0=111.4738, a_1=-9.8206$. 于是拟合函数是

5.3 数值的最小二乘拟合

$$\varphi(x)=111.4738-\frac{9.8206}{x}.$$

其拟合误差的平方和为

$$\begin{aligned}\delta^2&=(\boldsymbol{Ga}-\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Ga}-\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{Ga})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Ga}-\boldsymbol{y})-\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Ga}-\boldsymbol{y})\\&=\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Ga}-\boldsymbol{y})+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{Ga}).\end{aligned}$$

由(5.3-3)式知 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Ga}-\boldsymbol{y})=\boldsymbol{0}$，故有

$$\delta^2=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{Ga})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}-(\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}=0.5169.$$

第二种取指数类型的函数

$$\varphi(x)=a_0\mathrm{e}^{a_1/x}.$$

这时，$\varphi(x)$关于 a_0、a_1 是非线性的. 但对上式两边取对数，得

$$\ln\varphi(x)=\ln a_0+\frac{a_1}{x}.$$

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

$$u(x)=c_0+\frac{c_1}{x}.$$

$u(x)$关于参数 c_0、c_1 是线性的，因此只需把原数据(x_i,y_i)变换为$(x_i,\ln y_i)$就可以得到关于 c_0、c_1 的正规方程组.

变换后的数据为

5.3 数值的最小二乘拟合

x	2	3	4	7	8	10
$\ln y$	4.66739	4.68398	4.69592	4.70048	4.69984	4.70493
x	11	14	16	18	19	
$\ln y$	4.70583	4.70592	4.70737	4.70953	4.71133	

正规方程组的系数矩阵与前相同，而右端项为$[51.6925, 8.36623]^T$. 于是，求解方程组

$$\begin{bmatrix} 11 & 1.7842 \\ 1.7842 & 0.49277 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 51.6925 \\ 8.36623 \end{bmatrix}$$

得 $c_0=4.7139$，$c_1=-0.08995$. 由此得到

$$a_0 = e^{c_0} = 111.487, \quad a_1 = c_1 = -0.08995,$$

从而所求的指数类型拟合函数为

$$\varphi(x) = 111.487e^{-\frac{0.08995}{x}}.$$

它对于数据 $y_i\ (i=0,1,\cdots,10)$ 的误差平方和为

$$\delta^2 = \sum_{i=0}^{10}[\varphi(x_i) - y_i]^2 = 0.4719.$$

5.3 数值的最小二乘拟合

例 3 给定一组实验数据如下：

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

求最小二乘拟合函数.

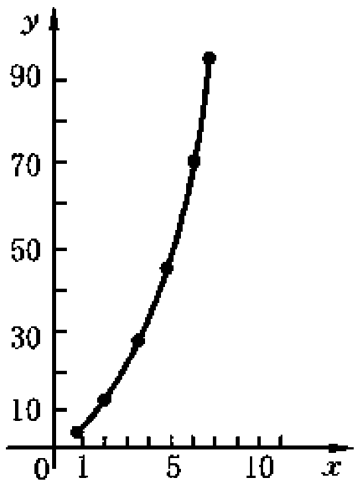

图 5.3-3

解 在坐标平面上点出这些数据点，并描出大致的曲线，如图 5.3-3 所示. 观察这条曲线可知，取幂函数 $\varphi(x)=ax^b$ 作拟合函数.

对 $\varphi(x)=ax^b$ 两边取对数，则有

$$\lg\varphi(x) = \lg a + b\lg x.$$

记 $u(x)=\lg\varphi(x)$，$c_0=\lg a$，$c_1=b$，得

$$u(x) = c_0 + c_1\lg x.$$

由 (x_i, y_i) 可得到相应的 $(\lg x_i, \lg y_i)$，故变换后的数据为

$\lg x_i$	0.0792	0.4472	0.6335	0.7324	0.8325	0.8976
$\lg y_i$	0.3222	1.0607	1.4487	1.6222	1.8591	1.9609

这时，$\varphi_0(x)=1$，$\varphi_1(x)=\lg x$ 为基函数. 正规方程组(5.3-3)为

$$\begin{bmatrix} 6 & 3.6224 \\ 3.6224 & 2.6427 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.2738 \\ 5.9135 \end{bmatrix},$$

解之得 $c_0=0.1624$，$c_1=2.0150$. 从而 $a=10^{c_0}=1.4534$，$b=c_1=2.0150$. 所求的最小二乘

5.3 数值的最小二乘拟合

拟合函数为

$$\varphi(x)=1.4534x^{2.0150}.$$

比较拟合值与实验值，并算出各点的拟合误差如表 5.3-1 所示.

表 5.3-1

x_i	1.2	2.8	4.3	5.4	6.8	7.9
y_i	2.1	11.5	28.1	41.9	72.3	91.4
$\varphi(x_i)$	2.099	11.574	27.472	43.473	69.175	93.576
$\delta_i=\varphi(x_i)-y_i$	−0.001	0.074	−0.628	1.573	−3.125	2.176

拟合误差的平方和为

$$\delta^2=\sum_{i=0}^{5}\delta_i^2=17.375.$$

∎

一般来说，针对给定的一组数据，可以选择不同的拟合函数类型来进行最小二乘拟合，最终应选取拟合误差平方和较小的最小二乘拟合函数.

用解正规方程组来求最小二乘拟合问题的解，有较大的缺点：一是计算工作量大，当 $N\gg n$ 时，其计算量约为 Nn^2 量级；二是正规方程组系数矩阵的条件数一般较大，从而舍入误差的影响严重. 例如，设 $\boldsymbol{G}$ 为以下 6×5 矩阵时

5.3 数值的最小二乘拟合

$$G = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon & & & & \\ & \varepsilon & & & \\ & & \varepsilon & & \\ & & & \varepsilon & \\ & & & & \varepsilon \end{bmatrix},$$

则

$$G^{\mathrm{T}}G = \begin{bmatrix} 1+\varepsilon^2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1+\varepsilon^2 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1+\varepsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1+\varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1+\varepsilon^2 \end{bmatrix}.$$

如果 $\varepsilon=\frac{1}{2}\times10^{-5}$，那么 $\varepsilon^2=0.25\times10^{-10}$，故在 10 位数字运算中，$\varepsilon^2$ 舍去. 于是，舍入后的 $fl(G^{\mathrm{T}}G)$ 是所有元素都为 1 的方阵，因而正规方程组无法求解.

解最小二乘问题的较好方法是 QR 算法，即利用一系列 Householder 变换将 G 化为如下的形式：

$$QG = \begin{bmatrix} R \\ \cdots\cdots \\ O \end{bmatrix},$$

5.3 数值的最小二乘拟合

其中 $\boldsymbol{Q}$ 是一些 Householder 矩阵的乘积，故它是正交矩阵，$\boldsymbol{R}$ 是 $n+1$ 阶可逆的上三角矩阵. $\boldsymbol{Q}$ 把 $\boldsymbol{y}$ 化为

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{h} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{h}_1 \\ \cdots\cdots \\ \boldsymbol{h}_2 \end{bmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{h}_1 \in \mathbf{R}^{n+1}$，$\boldsymbol{h}_2 \in \mathbf{R}^{N-n}$.

由于 $\|\boldsymbol{Q}\|_2 = 1$ 及 $\|\boldsymbol{QX}\|_2 = \|\boldsymbol{X}\|_2$，所以有

$$\|\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{Y}\|_2 = \|\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{Y})\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} \boldsymbol{Ra} - \boldsymbol{h}_1 \\ \cdots\cdots\cdots \\ -\boldsymbol{h}_2 \end{bmatrix} \right\|_2.$$

因此，当 $\boldsymbol{Ra} - \boldsymbol{h}_1 = \boldsymbol{O}$，即

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{h}_1 \tag{5.3-4}$$

时，$\|\boldsymbol{Ga} - \boldsymbol{Y}\|_2$ 取得最小值 $\|\boldsymbol{h}_2\|_2$. 也就是说，(5.3-4)式给出的 $\boldsymbol{a}$ 是最小二乘问题的解.

5.4 函数的最佳平方逼近

函数的最佳平方逼近又称最小二乘逼近.

设 $f(x)\in C[a,b]$，$\Phi=\mathrm{Span}(\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x))\subseteq C[a,b]$是用于逼近 $f(x)$的函数类. 所谓 $f(x)$在$[a,b]$上的最佳平方逼近，是在 Φ 中求一个函数 $\varphi(x)$，使

$$\|\varphi(x)-f(x)\|_2^2=\int_a^b\rho(x)[\varphi(x)-f(x)]^2\mathrm{d}x$$

取得最小值，其中 $\rho(x)\geqslant 0$ 是给定的权函数.

由于 $\varphi(x)$可表示为 $$\varphi(x)=\sum_{i=0}^n a_i\varphi_i(x),$$

所以在 Φ 中求 $f(x)$的最佳平方逼近函数 $\varphi(x)$，归结为求这样的 $a_0,a_1,\cdots,a_n$，使

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\int_a^b\rho(x)\Big[\sum_{i=0}^n a_i\varphi_i(x)-f(x)\Big]^2\mathrm{d}x \tag{5.4-1}$$

取得最小值.

由高等数学知，如果多元函数 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$在点$(a_0,a_1,\cdots,a_n)$处具有偏函数，且在点$(a_0,a_1,\cdots,a_n)$处有极值，则它在该点的偏导数必为零：$\frac{\partial I}{\partial a_i}=0$，$i=0,1,\cdots,n$，即

$$\int_a^b\rho(x)\Big[\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)-f(x)\Big]\varphi_i(x)\mathrm{d}x=0, \tag{5.4-2}$$

亦即 $$\sum_{j=0}^n\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle a_j=\langle\varphi_j,f\rangle,\quad i=0,1,\cdots,n, \tag{5.4-2'}$$

其中 $$\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle=\int_a^b\rho(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x,\quad \langle\varphi_i,f\rangle=\int_a^b\rho(x)\varphi_i(x)f(x)\mathrm{d}x.$$

5.4 函数的最佳平方逼近

用矩阵记号，(5.4-2′)式可以写成

$$\begin{bmatrix} \langle\varphi_0,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_0,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_0,\varphi_n\rangle \\ \langle\varphi_1,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_1,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_1,\varphi_n\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \langle\varphi_n,\varphi_0\rangle & \langle\varphi_n,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\varphi_0,f\rangle \\ \langle\varphi_1,f\rangle \\ \vdots \\ \langle\varphi_n,f\rangle \end{bmatrix}. \tag{5.4-3}$$

(5.4-3)式是关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的线性方程组，其系数矩阵是函数组 $\varphi_0(\cdot),\varphi_1(\cdot),\cdots,\varphi_n(\cdot)$的 Gram 矩阵. 当它们线性无关时，Gram 矩阵 $\boldsymbol{G}(\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n)$可逆，故方程组(5.4-3)存在唯一解，所以存在唯一的一个最佳平方逼近函数.

容易验证，(5.4-3)式也是充分条件，因为当 $\varphi_0(\cdot),\varphi_1(\cdot),\cdots,\varphi_n(\cdot)$线性无关时，$\boldsymbol{G}(\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n)$是对称正定矩阵，所以$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$取得最小值.

令 $\delta(x)=\varphi(x)-f(x)$，其中 $\varphi(x)$是最佳平方逼近函数，则由(5.4-2)式得

$$\langle\varphi-f,\varphi_i\rangle=0,\quad i=0,1,\cdots,n,$$

从而有

$$\langle\varphi-f,\varphi\rangle=0.$$

于是，用 $\varphi(x)$逼近 $f(x)$的误差 $\delta(x)$的 2-范数是

$$\begin{aligned} \|\delta(x)\|_2 &= \sqrt{\langle\delta(x),\delta(x)\rangle} = \sqrt{\langle\varphi-f,\varphi-f\rangle} \\ &= \sqrt{\langle\varphi-f,\varphi\rangle-\langle\varphi-f,f\rangle} = \sqrt{-\langle f,\varphi-f\rangle} \\ &= \sqrt{\langle f,f\rangle-\langle f,\varphi\rangle} = \sqrt{\langle f,f\rangle-\langle\varphi,f\rangle}. \end{aligned} \tag{5.4-4}$$

例 1 求 $f(x)=e^x$ 在[0,1]上的二次最佳平方逼近多项式，$\rho(x)=1$.

5.4 函数的最佳平方逼近

解 由于二次多项式的一般形式是

$$\varphi(x)=a_0+a_1x+a_2x^2,$$

所以可取 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x,\varphi_2(x)=x^2$，即 $\Phi=\mathrm{Span}(1,x,x^2)$，从而有

$$\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle=\int_0^1 1\cdot\varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x=\int_0^1 x^{i+j}\mathrm{d}x=\frac{1}{i+j+1},$$

$$\langle\varphi_i,f\rangle=\int_0^1 1\cdot x^i\mathrm{e}^x\mathrm{d}x=d_i,$$

其中

$$d_0=\int_0^1\mathrm{e}^x\mathrm{d}x=\mathrm{e}-1\approx 1.71828,$$

$$d_1=\int_0^1 x\mathrm{e}^x\mathrm{d}x=(x\mathrm{e}^x-\mathrm{e}^x)\Big|_0^1=1,$$

$$d_2=\int_0^1 x^2\mathrm{e}^x\mathrm{d}x=(x^2\mathrm{e}^x-2x\mathrm{e}^x+2\mathrm{e}^x)\Big|_0^1=\mathrm{e}-2\approx 0.71828.$$

将它们代入方程组(5.4-3)式，得

$$\begin{bmatrix}1 & 0.5 & 0.33333\\ 0.5 & 0.33333 & 0.25\\ 0.33333 & 0.25 & 0.2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\\ a_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.71828\\ 1\\ 0.71828\end{bmatrix}.$$

解之得 $a_0=1.01299,\quad a_1=0.85112,\quad a_2=0.83918.$

于是，所求的二次最佳平方逼近多项式

$$\varphi(x)=1.01299+0.85112x+0.83918x^2.$$

而由(5.4-4)式知，用 $\varphi(x)$ 逼近 $f(x)$ 的误差 $\delta(x)$ 的 2-范数是

5.4 函数的最佳平方逼近

$$\|\delta(x)\|_2=\sqrt{\langle f,f\rangle-\langle\varphi,f\rangle}=\sqrt{\int_0^1 e^{2x}\,dx-\sum_{i=0}^{2}a_i d_i}$$

$$=\sqrt{\frac{1}{2}(e^2-1)-3.19449}\approx 0.6168\times 10^{-2}.$$ $\blacksquare$

例 2 设 $f(x)=\sin(\pi x)$，求 $f(x)$ 在 $[0,1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式，$\rho(x)=1$.

解 $\Phi=\mathrm{Span}(1,x,x^2)$，即 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x,\varphi_2(x)=x^2$. 从而

$$\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle=\frac{1}{i+j+1},$$

$$\langle\varphi_0,f\rangle=\int_0^1\sin(\pi x)\,dx=\frac{2}{\pi}\approx 0.63662,$$

$$\langle\varphi_1,f\rangle=\int_0^1 x\sin(\pi x)\,dx=\left[-\frac{x}{\pi}\cos(\pi x)+\frac{1}{\pi^2}\sin(\pi x)\right]\Bigg|_0^1=\frac{1}{\pi}\approx 0.31831,$$

$$\langle\varphi_2,f\rangle=\int_0^1 x^2\sin(\pi x)\,dx=\left[-\frac{x^2}{\pi}\cos(\pi x)+\frac{2x}{\pi^2}\sin(\pi x)+\frac{2}{\pi^3}\cos(\pi x)\right]\Bigg|_0^1$$

$$=\frac{1}{\pi}-\frac{4}{\pi^3}\approx 0.18930.$$

于是，正规方程组(5.4-3)为
$$\begin{bmatrix}1 & 0.5 & 0.33333\\ 0.5 & 0.33333 & 0.25\\ 0.33333 & 0.25 & 0.2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\\ a_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.63662\\ 0.31831\\ 0.18930\end{bmatrix},$$

解之得

5.4 函数的最佳平方逼近

$$a_0 = -0.50465 \times 10^{-1}, \quad a_1 = -a_2 = 4.12251.$$

因此,所求的二次最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x) = -0.50465 \times 10^{-1} + 4.12251x - 4.12251x^2.$$

$y=\varphi(x)$的图形与 $y=\sin(\pi x)$的图形在图 5.4-1 中分别用实线与虚线表示. ∎

从这两个例子看出,在[0,1]上取 $\Phi=\mathrm{Span}(1,x,\cdots,x^n)$求最佳平方逼近多项式时,所得正规方程组的系数矩阵是 Hilbert 矩阵 $\boldsymbol{H}_{n+1}$:

$$\boldsymbol{H}_{n+1} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n} & \frac{1}{2n+1} \end{bmatrix}.$$

5.4 函数的最佳平方逼近

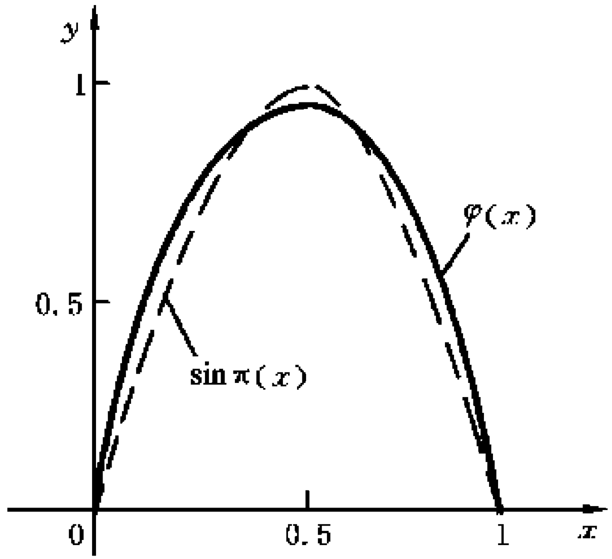

图 5.4-1

计算表明，随着 n 的增大，$\mathrm{Cond}_\infty(\boldsymbol{H}_{n+1})$ 迅速增大，例如 $\mathrm{Cond}_\infty(\boldsymbol{H}_3)=748$，而 $\mathrm{Cond}_\infty(\boldsymbol{H}_6)=2.9\times10^6$，所以当 n 较大时，$\boldsymbol{H}_{n+1}$ 是高度病态的. 如果改用正交多项式作基函数，则可以避免求解病态的正规方程组，同时方程组(5.4-3)简化为对角形，计算工作量也大大减少.

设 $\{\varphi_i(x)\}(i=0,1,\cdots,n)$ 是区间 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式组，那么当 $i\neq j$ 时 $\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle=0$，因此由正规方程组(5.4-3)看出，其系数矩阵是对角矩阵. 容易解此方程组得

$$a_i=\frac{\langle\varphi_i,f\rangle}{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle},\quad i=0,1,\cdots,n. \tag{5.4-5}$$

于是，最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x)=\sum_{i=0}^{n}\frac{\langle\varphi_i,f\rangle}{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle}\varphi_i(x),$$

且由(5.4-4)式推得逼近误差的 2-范数是

$$\|\delta(x)\|_2=\sqrt{\langle f,f\rangle-\langle\varphi,f\rangle}=\sqrt{\langle f,f\rangle-\sum_{i=0}^{n}\frac{\langle\varphi_i,f\rangle}{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle}\langle\varphi_i,f\rangle}$$

$$=\sqrt{\langle f,f\rangle-\sum_{i=0}^{n}a_i^2\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle}. \tag{5.4-6}$$

下面简略地介绍有关正交多项式系的一些性质.

5.4 函数的最佳平方逼近

设$\{\varphi_i(x)\}(i=0,1,\cdots)$是区间$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式系，其中$\varphi_i(x)$是$i$次多项式，那么该正交多项式系具有下列性质：

1）$\{\varphi_i(x),i=0,1,\cdots\}$是线性无关的；

2）若$\varphi_i(x)$是首一多项式，则有下述递推关系：

$$\begin{cases}\varphi_0(x)=1,\\ \varphi_{i+1}(x)=(x-\alpha_{i+1})\varphi_i(x)-\beta_i\varphi_{i-1}(x),i=0,1,\cdots,\end{cases}\tag{5.4-7}$$

式中

$$\begin{cases}\alpha_{i+1}=\dfrac{\langle x\varphi_i,\varphi_i\rangle}{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle}, & i=0,1,\cdots,\\ \beta_0=0,\beta_i=\dfrac{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle}{\langle\varphi_{i-1},\varphi_{i-1}\rangle}, & i=1,2,\cdots.\end{cases}\tag{5.4-8}$$

证 由于$\varphi_{i+1}(x)$是$i+1$次首一多项式，所以$\varphi_{i+1}(x)-x\varphi_i(x)$是次数不大于$i$次的多项式，故有

$$\varphi_{i+1}(x)-x\varphi_i(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_i\varphi_i(x),\tag{5.4-9}$$

其中$c_0,c_1,\cdots,c_i$为待定常数.上式两边乘以$\rho(x)\varphi_j(x)(j=0,1,\cdots,i-2)$积分，得

$$\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)\varphi_{i+1}(x)\mathrm{d}x-\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)x\varphi_i(x)\mathrm{d}x=\sum_{k=0}^{i}c_k\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x.$$

当$j=0,1,\cdots,i-2$时，由于$x\varphi_j(x)$的次数不大于$i-1$，故$x\varphi_j(x)$可用$\varphi_0(x)$，$\varphi_1(x),\cdots,\varphi_{i-1}(x)$线性表出，从而$\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)x\varphi_i(x)\mathrm{d}x=0$，因此上式左边的两个积分均为零，故有

5.4 函数的最佳平方逼近

$$\sum_{k=0}^{i} c_k \int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)\mathrm{d}x = 0.$$

令 $j=0$，由上式及正交性得

$$c_0 \int_a^b \rho(x)\varphi_0(x)\varphi_0(x)\mathrm{d}x = 0,$$

但 $\int_a^b \rho(x)[\varphi_0(x)]^2\mathrm{d}x \neq 0$，故 $c_0=0$.

同理，令 $j=1,2,\cdots,i-2$，可推出

$$c_1 = c_2 = \cdots = c_{i-2} = 0.$$

于是(5.4-9)式化为

$$\varphi_{i+1}(x) - x\varphi_i(x) = c_{i-1}\varphi_{i-1}(x) + c_i\varphi_i(x).$$

令 $c_{i-1}=-\beta_i$，$c_i=-\alpha_{i+1}$，即得(5.4-7)式.

在(5.4-7)式两边乘以 $\rho(x)\varphi_i(x)$ 积分，得

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_{i+1}(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)(x-\alpha_{i+1})\varphi_i(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x$$
$$-\beta_i \int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_{i-1}(x)\mathrm{d}x. \qquad (5.4\text{-}10)$$

从而由正交性知，$\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_{i+1}(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_{i-1}(x)\mathrm{d}x = 0$，故(5.4-10)式给出

$$\alpha_{i+1}\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)x\varphi_i(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x,$$

5.4　函数的最佳平方逼近

即 $\alpha_{i+1}\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle=\langle x\varphi_i,\varphi_i\rangle$，亦即

$$\alpha_{i+1}=\frac{\langle x\varphi_i,\varphi_i\rangle}{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle},\quad i=0,1,\cdots.$$

在(5.4-7)式中，令 $i=0$，则由于 $\varphi_0(x)=1$ 及 $\varphi_1(x)$ 是 1 次首一多项式，故显然有 $\beta_0=0$. (5.4-7)式两边乘以 $\rho(x)\varphi_{i-1}(x)$ 积分，得

$$\int_a^b\rho(x)\varphi_{i-1}(x)\varphi_{i+1}(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\rho(x)(x-\alpha_{i+1})\varphi_{i-1}(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x$$
$$-\beta_i\int_a^b\rho(x)\varphi_{i-1}(x)\varphi_{i-1}(x)\mathrm{d}x.\qquad(5.4\text{-}11)$$

由正交性知 $\int_a^b\rho(x)\varphi_{i-1}(x)\varphi_{i+1}(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\rho(x)\varphi_{i-1}(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=0$，从而(5.4-11)式给出

$$\beta_i\int_a^b\rho(x)\varphi_{i-1}(x)\varphi_{i-1}(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\rho(x)x\varphi_{i-1}(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x.\qquad(5.4\text{-}12)$$

又因 $x\varphi_{i-1}(x)$ 是 i 次首一多项式，可用 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_i(x)$ 线性表示它，故 $\int_a^b\rho(x)x\varphi_{i-1}(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=\int_a^b\rho(x)\varphi_i(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x$. 于是有

$$\beta_i\langle\varphi_{i-1},\varphi_{i-1}\rangle=\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle,$$

即

$$\beta_i=\frac{\langle\varphi_i,\varphi_i\rangle}{\langle\varphi_{i-1},\varphi_{i-1}\rangle},\quad i=1,2,\cdots.$$

3) 当 $i\geqslant1$ 时，$\varphi_i(x)$ 有 i 个互异实零点，且都在 (a,b) 内.

5.4 函数的最佳平方逼近

证 首先证明 $\varphi_i(x)(i\geqslant 1)$ 在 (a,b) 内至少有一个实零点. 假设相反, 则 $\varphi_i(x)$ 在 (a,b) 内不变号, 不妨设为恒大于零, 从而有

$$0<\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_0(x)\mathrm{d}x=0.$$

但这是不可能的. 因此, $\varphi_i(x)$ 在 (a,b) 内至少有一个实零点.

其次证明若 x_1 是 $\varphi_i(x)$ 的实零点, 则 x_1 必为单重零点. 假设相反, 则 $\dfrac{\varphi_i(x)}{(x-x_1)^2}$ 是 $i-2$ 次多项式. 从而由正交性得

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\frac{\varphi_i(x)}{(x-x_1)^2}\mathrm{d}x=\int_a^b \rho(x)\left[\frac{\varphi_i(x)}{x-x_1}\right]^2\mathrm{d}x=0,$$

但这是不可能的. 因此, x_1 只能是 $\varphi_i(x)$ 的单重零点.

最后证明 $\varphi_i(x)$ 在 (a,b) 内恰有 i 个单重零点. 假设 $\varphi_i(x)$ 在 (a,b) 内只有 k 个单重零点, $k<i$, 那么存在 $i-k$ 次多项式 $g(x)$, 使

$$\varphi_i(x)=(x-x_1)\cdots(x-x_k)g(x),$$

其中 $g(x)$ 在 (a,b) 内不变号, 从而

$$\varphi_i(x)(x-x_1)\cdots(x-x_k)=(x-x_1)^2\cdots(x-x_k)^2g(x)$$

在 (a,b) 内也不变号. 上式两边乘以 $\rho(x)$ 积分, 得

$$0=\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)(x-x_1)\cdots(x-x_k)\mathrm{d}x=\int_a^b \rho(x)(x-x_1)^2\cdots(x-x_k)^2g(x)\mathrm{d}x.$$

5.4 函数的最佳平方逼近

由于上式右边的被积函数在(a,b)内不变号,故其积分不为零,从而得出矛盾.因此$k=i$.

综合上述证明,知当$i\geqslant 1$时,$\varphi_i(x)$在(a,b)内恰有i个互异的实零点.

定理 5.4-1 设$\varphi_i(x)(i=0,1,\cdots)$是$i$次多项式,则多项式系$\{\varphi_i(x),i=0,1,\cdots\}$是区间$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式系的充要条件是,对任何次数不大于$i-1$的多项式$p(x)$,都有

$$\int_a^b \rho(x)p(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=0 \quad (i=1,2,\cdots), \tag{5.4-13}$$

即$\varphi_i(x)$与任何次数不大于$i-1$的多项式$p(x)$在区间$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交.

证 必要性:任何次数不大于$i-1$的多项式$p(x)$可表示为$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_{i-1}(x)$的线性组合: $p(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_{i-1}\varphi_{i-1}(x)$,

从而有 $$\int_a^b \rho(x)p(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^{i-1}c_j\int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=0.$$

充分性:由于$\varphi_i(x)$与任何次数不大于$i-1$的多项式在区间$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交,所以对于任意$i\geqslant 1$,当$0\leqslant j\leqslant i-1$时,有

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_i(x)\mathrm{d}x=0 \quad (i=1,2,\cdots;\ j=0,1,\cdots,i-1),$$

故$\{\varphi_i(x),i=0,1,\cdots\}$是正交多项式系. ∎

例 3 设权函数$\rho(x)=1+x^2$,求区间$[-1,1]$上带权$\rho(x)$的首一正交多项式$\varphi_i(x)$,$i=0,1,2,3$.

5.4 函数的最佳平方逼近

解　显然 $\varphi_0(x)=1$.

设 $\varphi_1(x)=x+a$,则由

$$\int_{-1}^{1}(1+x^2)\cdot 1\cdot(x+a)\mathrm{d}x=0$$

得

$$a\int_{-1}^{1}(1+x^2)\mathrm{d}x=0,$$

由于 $\int_{-1}^{1}(1+x^2)\mathrm{d}x=\frac{8}{3}\neq 0$,所以 $a=0$,故有 $\varphi_1(x)=x$.

设 $\varphi_2(x)=x^2+b_1x+b_0$,则由

$$\int_{-1}^{1}(1+x^2)\cdot 1\cdot(x^2+b_1x+b_0)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-1}^{1}(1+x^2)\cdot x\cdot(x^2+b_1x+b_0)\mathrm{d}x=0$$

得

$$\begin{cases}\frac{8}{3}b_0+\frac{16}{15}=0,\\ b_1=0,\end{cases}\quad 即\quad \begin{cases}b_0=-\frac{2}{5},\\ b_1=0.\end{cases}$$

因此,$\varphi_2(x)=x^2-\frac{2}{5}$.

设 $\varphi_3(x)=x^3+c_2x^2+c_1x+c_0$,则由

$$\int_{-1}^{1}(1+x^2)\cdot 1\cdot(x^3+c_2x^2+c_1x+c_0)\mathrm{d}x$$

5.4　函数的最佳平方逼近

$$= \int_{-1}^{1} (1+x^2) \cdot x \cdot (x^3 + c_2 x^2 + c_1 x + c_0) \mathrm{d}x$$

$$= \int_{-1}^{1} (1+x^2) \cdot x^2 \cdot (x^3 + c_2 x^2 + c_1 x + c_0) \mathrm{d}x = 0$$

得

$$\begin{cases} \frac{16}{15} c_2 + \frac{8}{3} c_0 = 0, \\ \frac{16}{15} c_1 = -\frac{24}{35}, \\ \frac{24}{35} c_2 + \frac{16}{15} c_0 = 0, \end{cases} \quad 即 \quad \begin{cases} c_2 = 0, \\ c_1 = -\frac{9}{14}, \\ c_0 = 0. \end{cases}$$

因此，$\varphi_3(x) = x^3 - \frac{9}{14} x$. ∎

应用矩阵论中的 Schmidt 正交化方法，可以将 Φ 的一个基化为正交基或标准正交基，从而得到 Φ 的正交基或标准正交基. 特别地，可以把$[1, x, \cdots, x^n]$用 Schmidt 正交化方法化为内积空间 $P_n[x]$的正交多项式基.

例 4　在 $P_2[x]$中定义多项式 $p(x)$、$q(x)$的内积为

$$\langle p(x), q(x) \rangle = \int_0^1 x p(x) q(x) \mathrm{d}x,$$

用基$[1, x, x^2]$求 $P_2[x]$的一个首一正交多项式基.

5.4 函数的最佳平方逼近

解 $\varphi_0(x)=1;$

$$\varphi_1(x)=x-\frac{\langle x,\varphi_0(x)\rangle}{\langle\varphi_0(x),\varphi_0(x)\rangle}\varphi_0(x)=x-\frac{\int_0^1 x\cdot x\cdot 1\mathrm{d}x}{\int_0^1 x\cdot 1\cdot 1\mathrm{d}x}=x-\frac{2}{3};$$

$$\varphi_2(x)=x^2-\frac{\langle x^2,\varphi_0(x)\rangle}{\langle\varphi_0(x),\varphi_0(x)\rangle}\varphi_0(x)-\frac{\langle x^2,\varphi_1(x)\rangle}{\langle\varphi_1(x),\varphi_1(x)\rangle}\varphi_1(x)$$

$$=x^2-\frac{\int_0^1 x\cdot x^2\cdot 1\mathrm{d}x}{\int_0^1 x\cdot 1\cdot 1\mathrm{d}x}-\frac{\int_0^1 x\cdot x^2\left(x-\frac{2}{3}\right)\mathrm{d}x}{\int_0^1 x\cdot\left(x-\frac{2}{3}\right)^2\mathrm{d}x}\left(x-\frac{2}{3}\right)$$

$$=x^2-\frac{1}{2}-\frac{6}{5}\left(x-\frac{2}{3}\right)=x^2-\frac{6}{5}x+\frac{3}{10}.$$

也就是说，区间[0,1]上带权 x 的首一正交多项式系中的前三个正交多项式为

$$\varphi_0(x)=1,\quad \varphi_1(x)=x-\frac{2}{3},\quad \varphi_2(x)=x^2-\frac{6}{5}x+\frac{3}{10}.$$

典型的正交多项式的区间、权函数、记号及名称如表 5.4-1 所示.

5.4 函数的最佳平方逼近

表 5.4-1

区间	权函数	记号	名称
$[-1,1]$	1	$L_n(x)$	Legendre
$[0,+\infty)$	e^{-x}	$U_n(x)$	Laguerre
$(-\infty,+\infty)$	e^{-x^2}	$H_n(x)$	Hermite
$[-1,1]$	$(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}$	$T_n(x)$	Чебышев 第一类
$[-1,1]$	$(1-x^2)^{\frac{1}{2}}$	$\tilde{T}_n(x)$	Чебышев 第二类
$[-1,1]$	$(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta},\alpha,\beta>-1$	$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$	Jacobi
$[0,+\infty)$	$x^{\alpha}e^{-x},\alpha>-1$	$U_n^{(\alpha)}(x)$	广义 Laguerre

1. Legendre 多项式

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

$$\int_{-1}^{1}L_m(x)L_n(x)dx=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ \dfrac{2}{2n+1}, & m=n.\end{cases}\tag{5.4-14}$$

(5.4-14)式的证明如下. 不妨设 $m\leqslant n$，则

$$\int_{-1}^{1}L_m(x)L_n(x)dx=\frac{(-1)^{m+n}}{2^{m+n}\cdot m!n!}\int_{-1}^{1}\frac{d^m}{dx^m}[(1-x^2)^m]\frac{d^n}{dx^n}[(1-x^2)^n]dx.$$

5.4 函数的最佳平方逼近

由于

$$\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}[(1-x^2)^m]\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(1-x^2)^n]\mathrm{d}x=\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}[(1-x^2)^m]\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}}[(1-x^2)^n]\Big|_{-1}^{1}$$
$$-\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^{m+1}}{\mathrm{d}x^{m+1}}[(1-x^2)^m]\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}}[(1-x^2)^n]\mathrm{d}x, \quad (5.4\text{-}15)$$

且 $\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}}[(1-x^2)^n]=\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}}[(1-x)^n(1+x)^n]$ 在 $x=\pm1$ 处为零，所以(5.4-15)式化为

$$\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}[(1-x^2)^m]\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(1-x^2)^n]\mathrm{d}x=-\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^{m+1}}{\mathrm{d}x^{m+1}}[(1-x^2)^m]\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}x^{n-1}}[(1-x^2)^n]\mathrm{d}x.$$

同理，由逐次分部积分直至得到

$$\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}[(1-x^2)^m]\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(1-x^2)^n]\mathrm{d}x=(-1)^n\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^{m+n}}{\mathrm{d}x^{m+n}}[(1-x^2)^m]\cdot(1-x^2)^n\mathrm{d}x.$$

于是，当 $m<n$ 时，由于 $\frac{\mathrm{d}^{m+n}}{\mathrm{d}x^{m+n}}[(1-x^2)^m]=0$，故有

$$\int_{-1}^{1}L_m(x)L_n(x)\mathrm{d}x=0.$$

而当 $m=n$ 时，由于 $\frac{\mathrm{d}^{m+n}}{\mathrm{d}x^{m+n}}[(1-x^2)^m]=\frac{\mathrm{d}^{2n}}{\mathrm{d}x^{2n}}[(1-x^2)^n]=(-1)^n(2n)!$，故有

$$\int_{-1}^{1}L_n^2(x)\mathrm{d}x=\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{1}(1-x^2)^n\mathrm{d}x$$

5.4 函数的最佳平方逼近

$$= \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2} \frac{2(2n)\cdot 2(n-1)\cdots 2}{(2n+1)\cdot(2n-1)\cdots 3} = \frac{2}{2n+1}.$$

递推关系式为

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1)xL_n(x) - nL_{n-1}(x),$$

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x.$$

2. Laguerre **多项式**

$$U_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \quad (n = 0, 1, \cdots);$$

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} U_m(x) U_n(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ (n!)^2, & m = n. \end{cases} \tag{5.4-16}$$

递推关系式为

$$U_{n+1}(x) = (2n+1-x)U_n(x) - n^2 U_{n-1}(x),$$

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 1 - x.$$

3. Hermite **多项式**

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2}) \quad (n = 0, 1, \cdots);$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{x^2} H_m(x) H_n(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & m = n. \end{cases} \tag{5.4-17}$$

递推关系式为

5.4 函数的最佳平方逼近

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x),$$

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x.$$

4. Чебыщев 第一类多项式

$$T_n(x) = \cos(n\arccos x) \quad (n = 0, 1, \cdots),$$

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{-\frac{1}{2}}T_m(x)T_n(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \dfrac{\pi}{2}, & m = n \neq 0, \\ \pi, & m = n = 0. \end{cases} \tag{5.4-18}$$

递推关系式为

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x),$$

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$$

5. Чебыщев 第二类多项式

$$\widetilde{T}_n(x) = \frac{T'_{n+1}(x)}{n+1} = \frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}};$$

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^{\frac{1}{2}}\,\widetilde{T}_m(x)\,\widetilde{T}_n(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \dfrac{\pi}{2}, & m = n. \end{cases} \tag{5.4-19}$$

递推关系式为

5.4 函数的最佳平方逼近

$$\widetilde{T}_{n+1}(x)=2x\widetilde{T}_n(x)-\widetilde{T}_{n-1}(x),$$

$$\widetilde{T}_0(x)=1,\quad \widetilde{T}_1(x)=2x.$$

6. Jacobi 多项式

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=\frac{(-1)^n}{2^n n!(1-x)^\alpha(1+x)^\beta}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(1-x)^{n+\alpha}(1+x)^{n+\beta}]\quad (n=0,1,\cdots);$$

$$\int_{-1}^{1}(1-x)^\alpha(1+x)^\beta P_m^{(\alpha,\beta)}(x)P_n^{(\alpha,\beta)}(x)\mathrm{d}x$$

$$=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ \dfrac{2^{\alpha+\beta+1}\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{(2n+\alpha+\beta+1)n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}, & m=n,\end{cases}$$

其中 $\Gamma(\cdot)$ 是 Γ 函数，其定义为

$$\Gamma(t)=\int_0^{+\infty}x^{t-1}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x.$$

$$a_1=\frac{\langle L_1(t),\mathrm{e}^{\frac{1+t}{2}}\rangle}{\langle L_1(t),L_1(t)\rangle}\approx\frac{0.56344}{\frac{2}{3}}=0.84516,$$

$$a_2=\frac{\langle L_2(t),\mathrm{e}^{\frac{1+t}{2}}\rangle}{\langle L_2(t),L_2(t)\rangle}\approx\frac{0.05595}{\frac{2}{5}}=0.13987.$$

从而 $\mathrm{e}^{\frac{1+t}{2}}$ 在 $[-1,1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式是

5.4 函数的最佳平方逼近

递推关系式为

$$2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta)P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x)$$
$$=(2n+\alpha+\beta+1)[(\alpha^2-\beta^2)+(2n+\alpha+\beta+2)(2n+\alpha+\beta)x]P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$$
$$-2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x),$$
$$P_0^{(\alpha,\beta)}(x)=1,$$
$$P_1^{(\alpha,\beta)}(x)=\left[1+\frac{1}{2}(\alpha+\beta)\right]x+\frac{1}{2}(\alpha-\beta).$$

7. 广义 Laguerre 多项式

$$U_n^{(\alpha)}(x)=x^{-\alpha}e^x\frac{d^n}{dx^n}(x^{n+\alpha}e^{-x})\quad(n=0,1,\cdots);$$

$$\int_0^{+\infty}x^\alpha e^{-x}U_m^{(\alpha)}(x)U_n^{(\alpha)}(x)dx=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ n!\Gamma(n+\alpha+1), & m=n.\end{cases}$$

递推关系式为

$$U_{n+1}^{(\alpha)}(x)=(2n+\alpha+1-x)U_n^{(\alpha)}(x)-n(n+\alpha)U_{n-1}^{(\alpha)}(x),$$
$$U_0^{(\alpha)}(x)=1,\quad U_1^{(\alpha)}(x)=1+\alpha-x.$$

例 5 用 Legendre 多项式系求 e^x 在区间[0,1]上的二次最佳平方逼近多项式.

解 由于 Legendre 多项式是区间[−1,1]上的正交多项式，所以先作变换 $x=$

5.4 函数的最佳平方逼近

$\frac{1}{2}(1+t)$，那么当 x 从 0 变到 1 时，t 从 -1 变到 1，且 $e^x=e^{(1+t)/2}$. 从而问题化为用 Legendre 多项式系求 $e^{(1+t)/2}$ 在区间 $[-1,1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式，权函数为 1.

由于 $L_0(t)=1, L_1(t)=t, L_2(t)=\frac{1}{2}(3t^2-1)$，所以由(5.4-14)式知，

$$\langle L_0(t),L_0(t)\rangle=\int_{-1}^{1}L_0(t)L_0(t)\mathrm{d}t=2,$$

$$\langle L_1(t),L_1(t)\rangle=\frac{2}{3},\quad \langle L_2(t),L_2(t)\rangle=\frac{2}{5},$$

且

$$\int_{-1}^{1}L_0(t)e^{(1+t)/2}\mathrm{d}t=\int_{-1}^{1}e^{(1+t)/2}\mathrm{d}t=2e^{(1+t)/2}\Big|_{-1}^{1}=2(e-1)\approx 3.43656,$$

$$\int_{-1}^{1}L_1(t)e^{(1+t)/2}\mathrm{d}t=\int_{-1}^{1}te^{(1+t)/2}\mathrm{d}t=(2te^{(1+t)/2}-4e^{(1+t)/2})\Big|_{-1}^{1}=6-2e\approx 0.56344,$$

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1}L_2(t)e^{(1+t)/2}\mathrm{d}t&=\int_{-1}^{1}\frac{1}{2}(3t^2-1)e^{(1+t)/2}\mathrm{d}t=\frac{1}{2}[2(3t^2-1)e^{(1+t)/2}\\&\quad-12(2te^{(1+t)/2}-4e^{(1+t)/2})]\Big|_{-1}^{1}\\&=\frac{1}{2}(28e-76)=14e-38\approx 0.05595.\end{aligned}$$

于是，由(5.4-5)式得

$$a_0=\frac{\langle L_0(t),e^{(1+t)/2}\rangle}{\langle L_0(t),L_0(t)\rangle}\approx\frac{3.43656}{2}=1.71828,$$

5.4 函数的最佳平方逼近

$$a_1=\frac{\langle L_1(t),e^{\frac{1+t}{2}}\rangle}{\langle L_1(t),L_1(t)\rangle}\approx\frac{0.56344}{\frac{2}{3}}=0.84516,$$

$$a_2=\frac{\langle L_2(t),e^{\frac{1+t}{2}}\rangle}{\langle L_2(t),L_2(t)\rangle}\approx\frac{0.05595}{\frac{2}{5}}=0.13987.$$

从而 $e^{\frac{1+t}{2}}$ 在$[-1,1]$上的二次最佳平方逼近多项式是

$$1.71828+0.84516t+0.13987\times\frac{1}{2}(3t^2-1).$$

以 $t=2x-1$ 代入上式，得到 e^x 在$[0,1]$上的二次最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x)=1.01299+0.85114x+0.83922x^2.$$

例 6 用 Чебышев 第一类多项式系求 e^x 在$[-1,1]$上的最佳平方逼近多项式.

解 利用 Чебышев 第一类多项式系，可以得到区间$[-1,1]$上的函数 $f(x)$关于正交多项式系$\{T_n(x),n=0,1,\cdots\}$的广义 Fourier 级数：

$$f(x)\sim\frac{1}{2}a_0T_0(x)+a_1T_1(x)+a_2T_2(x)+\cdots=\frac{a_0}{2}+\sum_{i=1}^{\infty}a_iT_i(x),$$

其中 $a_i=\frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{f(x)T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx\,(i=0,1,\cdots)$.

如取上述级数的部分和

5.4 函数的最佳平方逼近

$$1.71828+0.84516t+0.13987\times\frac{1}{2}(3t^2-1).$$

以 $t=2x-1$ 代入上式，得到 e^x 在[0,1]上的二次最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x)=1.01299+0.85114x+0.83922x^2. \quad \blacksquare$$

例 6 用 Чебыщев 第一类多项式系求 e^x 在[−1,1]上的最佳平方逼近多项式.

解 利用 Чебыщев 第一类多项式系，可以得到区间[−1,1]上的函数 $f(x)$关于正交多项式系$\{T_n(x),n=0,1,\cdots\}$的广义 Fourier 级数：

$$f(x)\sim\frac{1}{2}a_0T_0(x)+a_1T_1(x)+a_2T_2(x)+\cdots=\frac{a_0}{2}+\sum_{i=1}^{\infty}a_iT_i(x),$$

其中 $a_i=\dfrac{2}{\pi}\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{f(x)T_i(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx\,(i=0,1,\cdots)$.

如取上述级数的部分和

$$s_n(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{i=1}^{n}a_iT_i(x),$$

则 $s_n(x)$实际上是 $f(x)$在内积空间 $\Phi=\mathrm{Span}(T_0(x),T_1(x),\cdots,T_n(x))$中的最佳平方逼近多项式.

$f(x)=e^x$ 的 Чебыщев 展开式的前几项的系数如表 5.4-2 所示.

5.4 函数的最佳平方逼近

$$s_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{i=1}^{n} a_i T_i(x),$$

则 $s_n(x)$实际上是 $f(x)$在内积空间 $\Phi=\mathrm{Span}(T_0(x),T_1(x),\cdots,T_n(x))$中的最佳平方逼近多项式.

$f(x)=e^x$ 的 Чебыщев 展开式的前几项的系数如表 5.4-2 所示.

表 5.4-2

k	0	1	2	3	4	5
a_k	2.532132	1.130318	0.271495	0.0443368	0.00547424	0.00054293

利用这个系数表，可以求得 e^x 在$[-1,1]$上的一次和三次最佳平方逼近多项式分别为

$$s_1(x) = 1.266066 + 1.130318x;$$

$$\begin{aligned} s_3(x) &= 1.266066 + 1.130318x + 0.271495(2x^2-1) + 0.0443368(4x^3-3x) \\ &= 0.994571 + 0.997308x + 0.54299x^2 + 0.177347x^3. \end{aligned}$$

∎

5.5 二元插值

在许多实际问题中，需要建立离散数据点组$\{(x_i,y_j;f_{ij})\}$的连续模型，即要求构造一个较简单的二元函数 $z=z(x,y)$去逼近这组数据. 如果 $z_{ij}=z(x_i,y_j)=f_{ij}$，则称为**二元插值**. 通常由于 f_{ij}带有观测误差，所以并不要求 $z_{ij}=f_{ij}$，而只要近似满足就行. 例如，要求 $\delta^2=\sum_{i,j}|z_{ij}-f_{ij}|^2$ 尽量小，这在几何上就是用一张曲面拟合这组数，因此称为**曲面拟合**.

逼近二元函数的最简单的函数类，自然是二元多项式. 但实际问题往往数据点(x_i,y_j,f_{ij})很多，如果用一个整体多项式去逼近，必然使多项式的次数很高，效果并不好. 因此类似于一元函数的分段多项式或样条函数逼近，一般采用分片二元多项式逼近，并使不同曲面片之间光滑连接起来. 本节只介绍二元插值的基本思想.

设给定 xOy 平面上的一个矩形区域 $\Omega: a\leqslant x\leqslant b, c\leqslant y\leqslant d$，及剖分 $\Delta_x: a=x_0<x_1<\cdots<x_m=b$，$\Delta_y: c=y_0<y_1<\cdots<y_n=d$，那么 $\Delta=\{(x_i,y_j),0\leqslant i\leqslant m,0\leqslant j\leqslant n\}$构成 Ω 的一个矩形剖分点集，令

$$\{h_x=\max_{0\leqslant i\leqslant m-1}|x_{i+1}-x_i|,\quad h_y=\max_{0\leqslant j\leqslant n-1}\}|y_{j+1}-y_j|,$$

$$h=\max\{h_x,h_y|, \tag{5.5-1}$$

h 称为剖分 Δ 的**网格尺寸.**

考虑矩形区域 Ω 上在剖分 Δ 下的插值问题. 这时，可以先固定 x_i(或 y_j)，用一元插值的方法得到数据组$\{(y_j,f_{ij}),j=0,1,\cdots,n\}$(或$\{(x_i,f_{ij}),i=0,1,\cdots,m\}$)的插值函数 $p_i(y)$(或 $\varphi_j(x)$)，然后再对“数据”组$\{(x_i,p_i(y)),i=0,1,\cdots,m\}$(或$\{(y_j,\varphi_j(x)),j=0,1,\cdots,n\}$)进行一元插值，得到满足插值条件的二元插值函数，这种方法称为**乘积型插值法.**

5.5 二元插值

若令$\{M_i(x)\mid i=0,1,\cdots,m\}$，$\{N_j(y)\mid j=0,1,\cdots,n\}$分别表示 x 方向的 m 次，y 方向的 n 次 Lagrange 插值基函数组，它们分别满足插值条件

$$M_i(x_k)=\delta_{ik},\quad (i,k=0,1,\cdots,m),$$
$$N_j(y_s)=\delta_{js},\quad (j,s=0,1,\cdots,n).$$

令 $l_{ij}(x,y)=M_i(x)N_j(y)$，那么 $l_{ij}(x,y)$满足

$$l_{ij}(x_k,y_s)=\begin{cases}1,(k,s)=(i,j),\\0,(k,s)\neq(i,j)\end{cases}\quad (i=0,1,\cdots,m;j=0,1,\cdots,n),$$

从而得到二元 Lagrange 插值公式

$$L(x,y)=\sum_{i=0}^{m}\Big(\sum_{j=0}^{n}f_{ij}N_j(y)\Big)M_i(x),\qquad(5.5\text{-}2)$$

其中 $$M_i(x)=\prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{m}\frac{x-x_k}{x_i-x_k},\quad N_j(y)=\prod_{\substack{s=0\\s\neq j}}^{n}\frac{y-y_s}{y_j-y_s}.$$

显然，$L(x,y)$是一个对 x 为 m 次，对 y 为 n 次的二元多项式，且 $L(x_i,y_j)=f_{ij}(i=0,1,\cdots,m;j=0,1,\cdots,n)$.

例 1 给定二元函数 $f(x,y)$的函数表如下：

5.5 二元插值

$x \backslash y$ (f)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
0.5	0.165	0.428	0.687	0.942	1.190	1.431
1.0	0.271	0.640	1.003	1.359	1.703	2.035
1.5	0.447	0.990	1.624	2.045	2.549	3.031
2.0	0.738	1.568	2.384	3.177	3.943	4.672
2.5	1.216	2.520	3.380	5.044	6.241	7.379
3.0	2.005	4.090	6.136	8.122	10.030	11.841

求 $f(1.6, 0.33)$ 的近似值.

解 首先选取插值区域 Ω，它应使点 $(1.6, 0.33)$ 位于区域 Ω 的中央，并适合关于 x 和 y 插值次数的要求. 比如，欲作一个对 x 为二次，对 y 为三次的二元插值多项式，那么所取的插值点集可为 $x_0=1.0, x_1=1.5, x_2=2.0$ 及 $y_0=0.2, y_1=0.3, y_2=0.4, y_3=0.5$ 所构成的矩形网格点集. 在(5.5-2)式中代入插值点及有关数据的值，经计算后得

$$f(1.6, 0.33) \approx L(1.6, 0.33) = 1.841.$$

实际上，本例 $f(x,y)=e^x \sin y + y - 0.1$，故由函数值 $f(1.6, 0.33)=1.8350$ 看出，插值的效果还是比较好的. ∎

类似于一元样条插值，对于矩形区域 Ω，也可以用二元样条函数插值. 将 x 方向和 y 方向的一元基样条的乘积构成二元样条插值的基样条. 基样条的定义及二元三次样条函数插值，请参阅王德人、杨忠华编《数值逼近引论》(高等教育出版社，1990 版).

5.5 二元插值

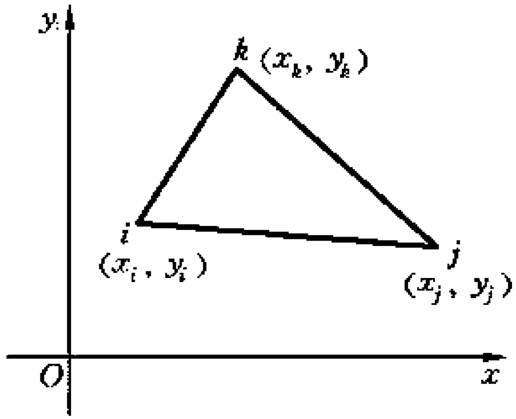

图 5.5-1

对于不规则分布的数据点组，可以先依据数据点组构成三角剖分，然后应用三角剖分的插值公式。例如，考虑三角形上的线性插值。求图 5.5-1 所示三角形单元 Δ_{ijk} 上的线性插值函数

$$z = ax + by + c.$$

其中 a、b、c 是待定系数，它们可以由插值条件

$$\begin{cases} z(x_i, y_i) = ax_i + by_i + c = f(x_i, y_i), \\ z(x_j, y_j) = ax_j + by_j + c = f(x_j, y_j), \\ z(x_k, y_k) = ax_k + by_k + c = f(x_k, y_k) \end{cases}$$

确定.

我们也可以用插值基函数法，选取基函数 $\varphi_i(x, y)$，$\varphi_j(x, y)$，$\varphi_k(x, y)$，它们都是关于 x、y 的线性函数，且满足插值条件

$$\varphi_s(x_t, y_t) = \delta_{st} = \begin{cases} 1, & s = t, \\ 0, & s \neq t \quad (s, t = i, j, k). \end{cases}$$

这里不作详述，请参阅李岳生、黄友谦编《数值逼近》(人民教育出版社，1978 版).

作业

习题 5

1. 给定数据表

x_i	1.2	3.2	4.5
f_i	101	112	109

求通过这三个数据点的次数不超过 2 的插值多项式.

4. 已知数据表

x	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
$y(x)$	0.70010	0.40160	0.10810	−0.17440	−0.43750

用反插值(即在 $y=y(x)$ 的反函数 $x=x(y)$ 存在的假设下,构造反函数 $x=x(y)$ 的插值多项式)求 $y(x)=0$ 在(0.3,0.4)内的根的近似值.

15. 已知实验数据表

x_i	19	25	31	38	44
y_i	19.0	32.3	49.0	73.3	97.8

用最小二乘法求形如 $y=a+bx^2$ 的经验公式,并计算均方误差.

謝謝觀看！

厦門大學
XIAMEN UNIVERSITY

信息学院
（国家示范性软件学院）
School of Informatics

黄 煒
博士，副教授
Dr. Wei Huang