第4章 插值与逼近

4.1 引言

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

4.1.1 插值问题

设已知函数在上个互异点处的函数值和导数值

$$f(x_1),\ f'(x_1),\cdots,\ f^{(\alpha_1-1)}(x_1);$$

$$f(x_2),\ f'(x_2),\cdots,\ f^{(\alpha_2-1)}(x_2); \qquad (4\text{-}1)$$

$$\cdots\quad\cdots$$

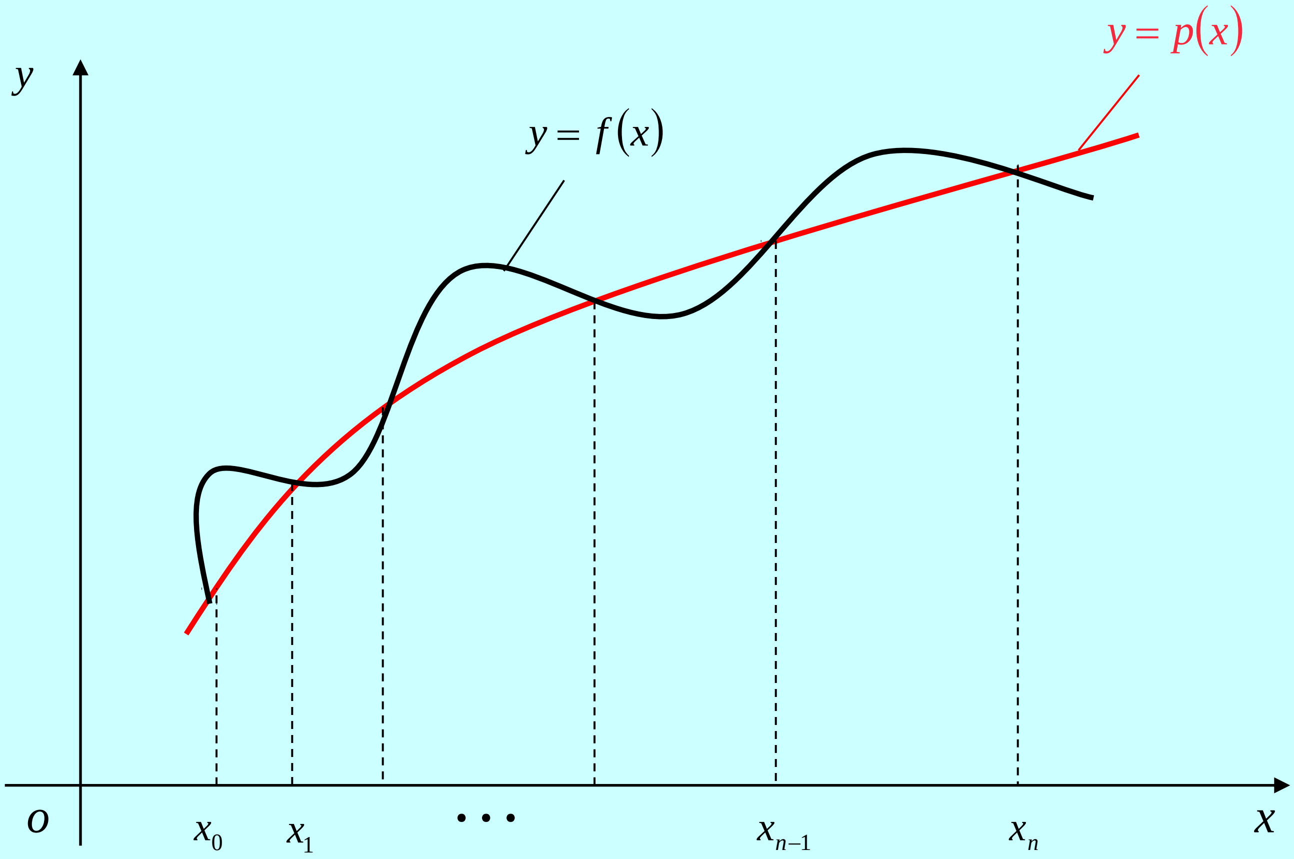
$$f(x_n),\ f'(x_n),\cdots,\ f^{(\alpha_n-1)}(x_n),$$

$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i$ 个条件

构造一个简单易算的函数p(x)，使其满足下述条件

$$p^{(\mu_i)}(x_i)=f^{(\mu_i)}(x_i),\quad i=1,2,\cdots,n;\quad \mu_i=0,1,\cdots,\alpha_i-1。\qquad (4\text{-}2)$$

以上问题称作插值问题, $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 称为插值节点, $p(x)$ 称为 $f(x)$ 关于节点组 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的插值函数,（4-2）称为插值条件。



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

在插值法中需考虑的问题：

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

如代数多项式，三角多项式，分段多项式，有理函数，样条函数等

基本想法:

- 简单函数类的基底需满足的条件
- 给出具体的基底
- 给出系数

4.1.2 插值函数的存在唯一性，插值基函数

假设$f(x)$ 是定义在区间$[a,b]$上的未知或复杂函数，但已知该函数在互异点

$$a \le x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$$

处的函数值 $f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_n)$

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

$$p(x_i) = f(x_i),\ i = 1, \cdots, n$$

即在给定点x_i处，$p(x)$与$f(x)$是相吻合的。

插值问题等价于求解方程组:

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

$$\begin{pmatrix}\varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1)\\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \cdots & \varphi_n(x_2)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \cdots & \varphi_n(x_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f(x_1)\\ f(x_2)\\ \vdots\\ f(x_n)\end{pmatrix}$$

定义4.1 设 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是[*a*,*b*]上的函数，

且对[*a*,*b*]上的任意*n*个互异点 $x_1, x_2, \cdots, x_n$,行列式

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

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

定理4.1　设已知函数 $f(x)$ 在n个互异点 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，处的函数值 $y_i = f(x_i)$ $(i=1,\cdots,n)$，简单函数类S的基函数 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在$[a,b]$上满足Haar条件，则存在唯一的

$$p(x) = \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x) \in S,$$

满足插值条件 $p(x_i) = y_i$，$i=1,\cdots,n.$

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

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

$l_k(x)\ (k = 1,2,\ldots,n)$ 称为插值基函数。

易证 $l_1(x), l_2(x), \cdots, l_n(x)$ 也是S的一组基函数，

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

且满足Haar条件

利用插值函数的存在唯一性，则有

推论4.2 在定理4.1的假设下，函数 $p(x)=\sum_{k=1}^{n} y_k l_k(x)$ 是S中满足插值条件 $p(x_i)=y_i,\ i=1,2,\cdots,n$ 的唯一函数。

多项式插值

问题描述:

设 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个互异点，构造 n 次多项式 $p(x)$ 满足:

$$p(x_i) = f(x_i) = y_i, \qquad i = 0, 1, \cdots, n$$

多项式函数的基底为 $\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=x, \cdots, \varphi_n(x)=x^n$，由于

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

故多项式函数的基底满足Haar条件。

代数多项式插值的存在唯一性

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

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

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

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

求解 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 困难，故实用方法需满足：

基底及系数简单易算

- Lagrange插值：先给系数，再确定基底
- Newton插值：先给基底，再确定系数

4.2.1 Lagrange插值公式 （系数为给定的函数值）

假定构造的 n 次多项式为：

$$p(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x) + \cdots + y_n l_n(x)$$

由插值条件 $p(x_i) = f(x_i) = y_i$ 知，基函数 $l_i(x)$ 需满足：

$$l_i(x_k) = \begin{cases} 1, & k = i \\ 0, & k \neq i \end{cases} \qquad i, k = 0, 1, \cdots, n.$$

$l_i(x)(i = 0,1,\cdots,n)$ 称为 n 次Lagrange插值基函数.

n 次Lagrange插值基函数的确定

由于 $l_i(x_k)=0,\ \ k\neq i$，故

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

由于 $l_i(x_i)=1$，故

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

$$\alpha=\frac{1}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

基函数 $l_i(x)$ 为：

$$l_i(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}=\frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_i)w'_{n+1}(x_i)}$$

其中

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

多项式

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

就是多项式空间 $\mathbf{P}_n(x)$ 中满足插值条件

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

的唯一的多项式，$p_n(x)$ 称为 n 次Lagrange插值多项式.

注意：

- 插值基函数的个数=插值节点的个数;
- 插值基函数的次数=插值节点的个数-1;
- 插值基函数与插值节点的次序无关。

例1　已知函数 $f(x)$ 的如下函数值：

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

求 $f(x)$ 的二次Lagrange插值多项式并计算 $f(1.5)$ 的近似值

解　首先计算插值基函数：

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

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

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

$$\begin{aligned} &p_2(x) \\ &= l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2 \\ &= x^2 - 3x + 1 \end{aligned}$$

$$f(1.5) \approx p_2(1.5) = -1.25.$$

Lagrange插值公式缺点：

在插值问题中，为了提高插值精度，有时需增加插值节点个数．插值节点个数发生变化后，所有的Lagrange插值基函数都会发生变化，从而整个Lagrange插值多项式的结构发生变化，这在计算实践中是不方便的．

4.2.2 Newton插值公式

为了克服Lagrange插值多项式的缺点，能灵活地增加插值节点，使其具有“承袭性”，即可以充分利用已有的信息，我们引进Newton插值公式。

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

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

则可将n次插值多项式写成如下形式：

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

其中待定系数$a_0, a_1, \cdots, a_n$由插值条件

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

来确定.

n 次插值多项式写成如下形式:

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$$

$$p_n(x_0) = f(x_0) \Rightarrow a_0 = f(x_0)$$

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

$$p_n(x_2) = f(x_2) \Rightarrow f(x_0) + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = f(x_2)$$

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

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

n 次插值多项式写成如下形式:

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$$

$$a_0 = f(x_0)$$

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

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

$$a_0 = f[x_0, x_0]$$

$$a_1 = f[x_0, x_1]$$

$$a_2 = f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$$

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

定义4.2 设函数 $f(x)$ 在互异的节点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上的函数值为 $f_0,f_1,\cdots,f_n$ ，称

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

为 $f(x)$ 关于 x_i,x_k 的一阶均差（差商）。称

$$f[x_i,x_j,x_k]=\frac{f[x_j,x_k]-f[x_i,x_j]}{x_k-x_i}\quad i\neq j\neq k$$

为 $f(x)$ 关于 x_i,x_j,x_k 的二阶均差（差商）。称

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

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

均差有如下性质：

1° k 阶均差

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

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

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

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

3° 若 $f(x)=x^m$ m 为自然数，则

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

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

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

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

从而我们可以构造出 n 次Newton插值多项式公式：

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

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

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

插值多项式的唯一性

$$\text{Newton插值多项式} \xleftrightarrow[\text{表达式相同}]{\text{表现形式不同}} \text{Lagrange插值多项式}$$

练习：若

$$f(x) = -3x^4 + 5x^3 - 2x^2 + 1,$$

求 $f[2^0, 2^1, \cdots, 2^4]$和 $f[e^0, e^1, \cdots, e^5]$

解:

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

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

为了便于计算均差，常利用如下形式生成均差表：

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

注意：

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

Taylor多项式

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

例2　已知 $f(0)=2,\ f(1)=-3,\ f(2)=-6,\ \ f(3)=11,$

求 $f(x)$ 关于上述节点组的三次插值多项式 $p_3(x)$。

解　首先利用均差表计算均差

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

由上面的均差表可知，$f[0,1]=-5$，$f[0,1,2]=1$，$f[0,1,2,3]=3$，故所求的插值多项式为：

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

例 3　已知 $f(-2)=-5,\ f(-1)=-2, f(0)=3, f(1)=10, f(2)=19, f(3)=30,$

求 $f(x)$ 关于上述节点组的插值多项式 $p(x)$。

解　首先利用均差表计算均差

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

由上面的均差表可知，

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

故所求的插值多项式为：

$$\begin{aligned}p_3(x) &= -5+3(x+2)+(x+1)(x+2)\\ &= x^2+6x+3\end{aligned}$$

差商性质4证明

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

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

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

反复利用Rolle定理，可知存在

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

使得

$$r_k^{(k)}(\xi) = f^{(k)}(\xi) - p_k^{(k)}(\xi) = 0 \Longrightarrow f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$

定理4.2 若 $f(x)$ 在包含着插值节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 的区间 $[a,b]$ 上 $n+1$ 次可微，则对任意 $x\in[a,b]$，存在与 x 有关的 ξ $(a<\xi<b)$，使得

$$r_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \qquad (4\text{-}14)$$

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

练习：取节点 $x_0 = 1, x_1 = 4, x_2 = 9$，求函数 $y = \sqrt{x}$ 在区间 $[1, 9]$ 上的插值多项式 $p_2(x)$，进一步求出 $y(3)$ 的近似值，并估计误差。

解：利用Lagrange插值多项式，

$$p_2(x) = \sqrt{1}\frac{(x-4)(x-9)}{(1-4)(1-9)} + \sqrt{4}\frac{(x-1)(x-9)}{(4-1)(4-9)} + \sqrt{9}\frac{(x-1)(x-4)}{(9-1)(9-4)}$$

有

$$\sqrt{3} \approx p_2(3) = 1.70000.$$

从而

$$|r_2(3)| = \left| \left.\frac{\left(\sqrt{x}\right)'''}{3!}\right|_{x=\xi} (3-1)(3-4)(3-9) \right| \le 0.75.$$

4.2.4 Hermite插值

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

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

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

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

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

采用类似于构造Lagrange插值基函数的方法解决Hermite插值问题

先构造一批 n 次多项式

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

使这些多项式满足条件：

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

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

只要上述问题一解决，则n次多项式

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

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

必满足插值条件。

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

此时相应的插值问题就是通常的Lagrange插值， 插值多项式

就是以 $x_1,x_2,\cdots,x_s$为节点的不超过s-1次Lagrange插值多项式

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

例4 $s=1, x_1=a,\ \alpha_1=\alpha$ 的情形。 $a \mid f(a), f'(a), \cdots, f^{(\alpha-1)}(a)$

设 $$p_{\alpha-1}(x)=f(a)L_0(x)+f'(a)L_1(x)+\cdots+f^{(\alpha-1)}(a)L_{\alpha-1}(x)$$

解

$L_0(a)=1$	$L_1(a)=0$	$\cdots$	$L_{\alpha-1}(a)=0$
$L'_0(a)=0$	$L'_1(a)=1$	$\cdots$	$L'_{\alpha-1}(a)=0$
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
$L_0^{(\alpha-1)}(a)=0$	$L_1^{(\alpha-1)}(a)=0$	$\cdots$	$L_{\alpha-1}^{(\alpha-1)}(a)=1$
$\Downarrow$	$\Downarrow$		$\Downarrow$
$L_0(x)=1$	$L_1(x)=x-a$		$L_{\alpha-1}(x)=\dfrac{(x-\alpha)^{\alpha-1}}{(\alpha-1)!}$

所求的插值多项式

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

恰为 $f(x)$ 在 $x=a$ 附近的Taylor多项式。

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

求

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

满足

$$\begin{aligned} &A_i(x_i) = 1,\ A_i'(x_i) = 0, \\ &A_i(x_j) = 0,\ A_i'(x_j) = 0, \end{aligned} \qquad i, j = 1, 2, .., s, \quad j \neq i$$

$$\begin{aligned} &B_i(x_i) = 0,\ B_i'(x_i) = 1, \\ &B_i(x_j) = 0,\ B_i'(x_j) = 0, \end{aligned} \qquad i, j = 1, 2, .., s, \quad j \neq i$$

因为 $\begin{array}{l} B_i(x_i)=0, \quad B_i'(x_i)=1, \\ B_i(x_j)=0, \quad B_i'(x_j)=0, \end{array} \quad i,j=1,2,..,s, \quad j\neq i$

所以，x_i是单根，$x_j(j\neq i)$是二重根。

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

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

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

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

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

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

再由 $A_i(x_i)=1,\quad A_i'(x_i)=0,$

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

所以，$x_j\,(j\neq i)$ 是二重根。

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

$$\begin{cases}(a_ix_i+b_i)\left(\sigma'(x_i)\right)^2=1\\ a_i\left(\sigma'(x_i)\right)^2+(a_ix_i+b_i)\displaystyle\sum_{j\neq i}\frac{2\left(\sigma'(x_i)\right)^2}{(x_i-x_j)}=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}a_ix_i+b_i=\dfrac{1}{\left(\sigma'(x_i)\right)^2}\\ a_i+(a_ix_i+b_i)\displaystyle\sum_{j\neq i}\frac{2}{(x_i-x_j)}=0\end{cases}$$

$$\begin{cases}a_i=-\dfrac{\sigma''(x_i)}{\left(\sigma'(x_i)\right)^3}\\ b_i=\dfrac{\sigma'(x_i)+x_i\sigma''(x_i)}{\left(\sigma'(x_i)\right)^3}\end{cases}\Rightarrow A_i(x)=\left(\frac{\sigma(x)}{(x-x_i)\sigma'(x_i)}\right)^2\left(-\frac{\sigma''(x_i)}{\sigma'(x_i)}x+1+\frac{\sigma''(x_i)}{\sigma'(x_i)}x_i\right)$$

$$=\left(\frac{\sigma(x)}{(x-x_i)\sigma'(x_i)}\right)^2\left(1-\frac{\sigma''(x_i)}{\sigma'(x_i)}(x-x_i)\right)$$

例6　$s=2$ 且 $\alpha_1=\alpha_2=2$ 情形

此时有不超过3次插值多项式:

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

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

这就是二点三次Hermite插值多项式，插值条件为:

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

$$(k=1,2)$$

例5类型的Hermite插值公式的误差估计

定理4.3 设 $f(x)\in C^{2s-1}[a,b]$，在 (a,b) 内 $2s$ 阶可导，又设 $a\le x_1<x_2<\cdots<x_s\le b$，则由例5确定的Hermite插值多项式 p_{2s-1} 有如下的误差估计式

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

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

用基函数法来构造三次多项式 $H_3(x)$

设：

$$H_3(x) = f(x_1)\,L_{1,0}(x) + f(x_2)L_{2,0}(x) + f'(x_1)L_{1,1}(x) + f'(x_2)L_{2,1}(x)$$

其中 $L_{1,0}(x), L_{1,1}(x), L_{2,0}(x), L_{2,1}(x)$ 为插值基函数。它们满足：

$$L_{1,0}(x_1)=1 \qquad L_{1,0}(x_2) = L'_{1,0}(x_1) = L'_{1,0}(x_2) = 0$$

$$L'_{1,1}(x_1)=1 \qquad L_{1,1}(x_1) = L_{1,1}(x_2) = L'_{1,1}(x_2) = 0$$

$$L_{2,0}(x_2)=1 \qquad L_{2,0}(x_1) = L'_{2,0}(x_1) = L'_{2,0}(x_2) = 0$$

$$L'_{2,1}(x_2)=1 \qquad L_{2,1}(x_1) = L'_{2,1}(x_1) = L_{2,1}(x_2) = 0$$

以 $L_{1,0}(x)$ 为例计算之，$L_{1,1}(x), L_{2,0}(x), L_{2,1}(x)$ 同理。

由于$L_{1,0}(x)$为三次多项式，又 $L_{1,0}(x_2)=L'_{1,0}(x_2)=0$，故应有

$$L_{1,0}(x)=\left(x-x_2\right)^2\left(ax+b\right)$$

$$L'_{1,0}(x)=2\cdot\left(x-x_2\right)\left(ax+b\right)+a\cdot\left(x-x_2\right)^2$$

又由于 $L_{1,0}(x_1)=1,\ L'_{1,0}(x_1)=0$，进一步有，

$$\left(x_1-x_2\right)^2\left(ax_1+b\right)=1 \Rightarrow ax_1+b=\frac{1}{\left(x_1-x_2\right)^2}$$

$$2\cdot\left(ax_1+b\right)+a\cdot\left(x_1-x_2\right)=0 \Rightarrow a=\frac{-2}{\left(x_1-x_2\right)^3}$$

代入上式得，$b=\dfrac{3x_1-x_2}{\left(x_1-x_2\right)^3}$

那么，

$$L_{1,0}(x)=\left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\right)^2\left\{1-\frac{2\left(x-x_1\right)}{\left(x_1-x_2\right)}\right\}$$

同理有：

$$L_{1,1}(x)=\left(\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\right)^2(x-x_1),$$

$$L_{2,0}(x)=\left(\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)^2\left(1-2\frac{x-x_2}{x_2-x_1}\right)$$

$$L_{2,1}(x)=\left(\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\right)^2(x-x_2)$$

例：满足下列条件

$$H(0)=1, H'(0)=0, H(1)=0, H'(1)=1,$$

的三次Hermite插值多项式为

定理4.3' 设 $f(x)\in C^3[a,b]$，在 (a,b) 内4阶可导，又设 $a\le x_1<x_2\le b$，则两点三次Hermite插值多项式 $p_3(x)$ 有如下的误差估计式:

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

其中 $\min(x_1,x_2)<\xi<\max(x_1,x_2)$。

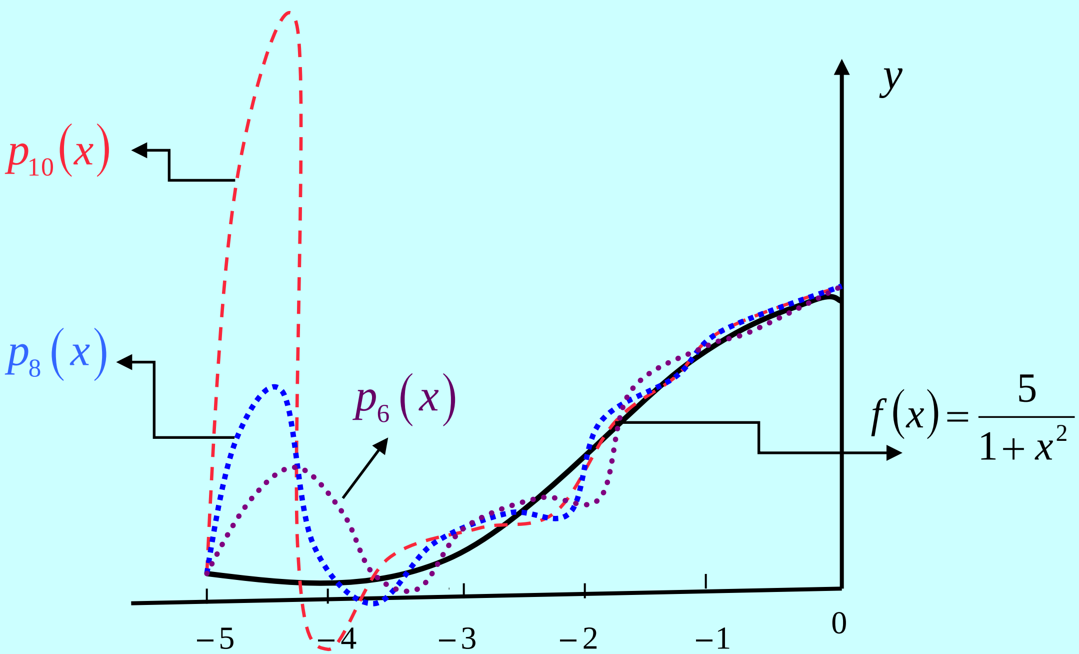
4.2.5 分段低次插值

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

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

例：函数 $f(x)=\dfrac{5}{1+x^2}$ 在[-5,5]上构造 n+1个等距节点：$x_k=-5+\dfrac{10}{n}k$

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



等距节点高次插值多项式的Rung现象

插值函数的稳定性分析

$$f_i=\bar{f}_i+\delta_i$$

舍入误差为：

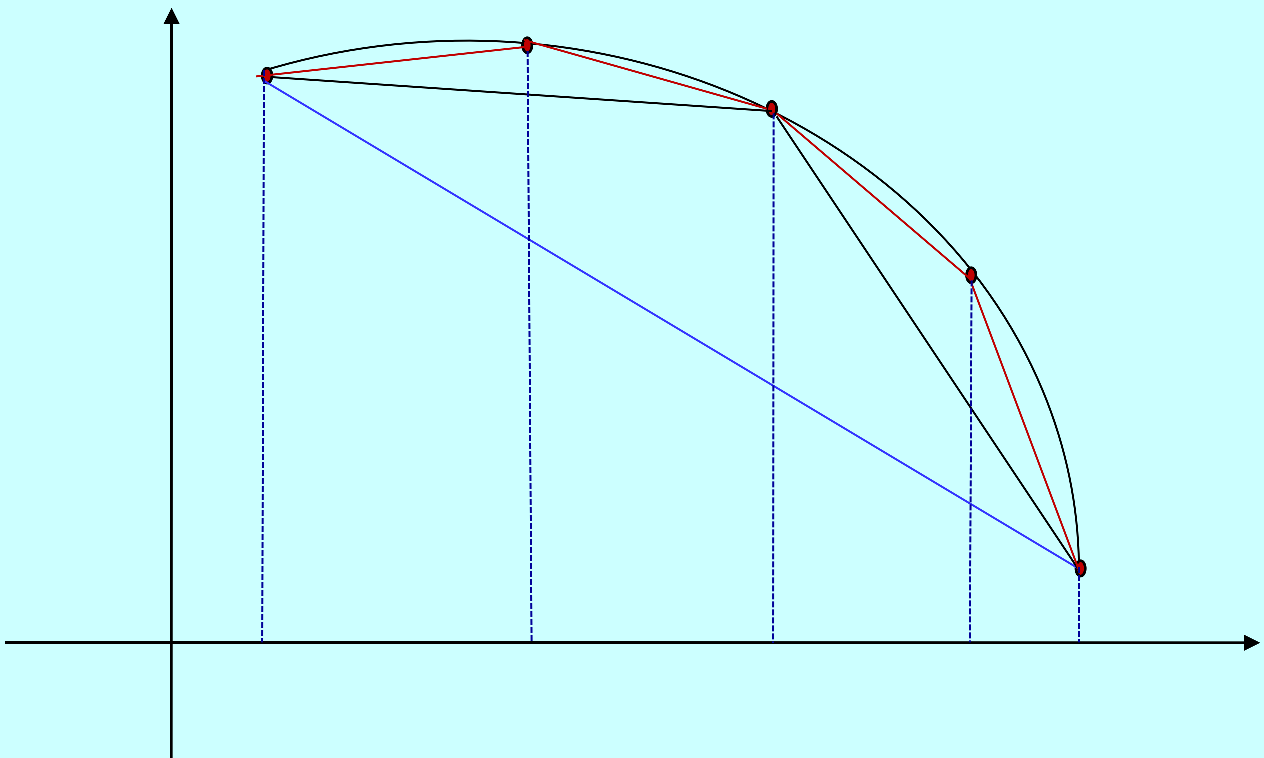
$$\max_{a\le x\le b}\left|\sum_{i=0}^{n}l_i(x)f_i-\sum_{i=0}^{n}l_i(x)\bar{f}_i\right|$$

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

其中 $\max\limits_{a\le x\le b}\left(\sum\limits_{i=0}^{n}|l_i(x)|\right)$ 随n增长

Runge现象对等距节点的高次插值多项式的是典型的。

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



分段线性Lagrange插值

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

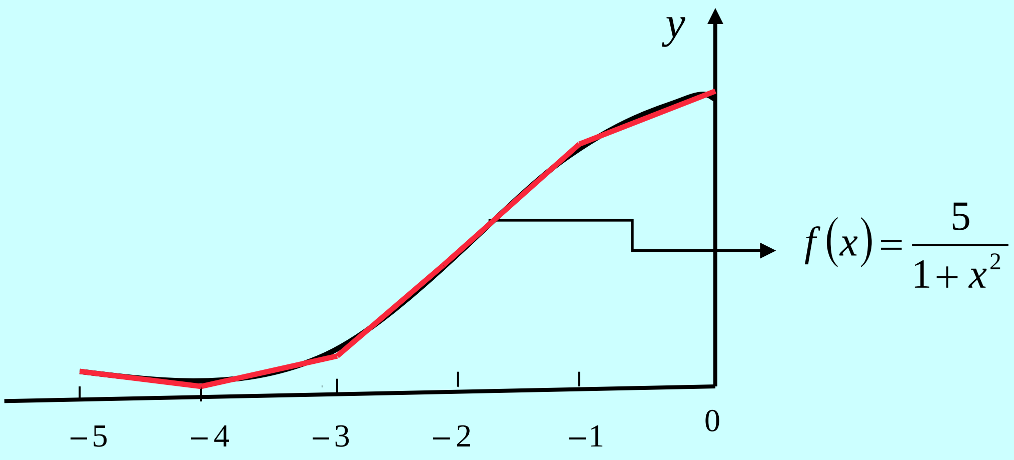
$$L_h^{(k)}(x) = y_k \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} + y_{k+1} \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k}, \quad x \in [x_k, x_{k+1}]。$$

令

$$L_h(x) = \begin{cases} L_h^{(0)}(x), & x \in [x_0, x_1], \\ L_h^{(1)}(x), & x \in [x_1, x_2], \\ \quad\cdots \\ L_h^{(n-1)}(x), & x \in [x_{n-1}, x_n], \end{cases} \qquad L_h(x_i) = y_i, i = 0,1,\ldots,n$$

$L_h(x)$称为 $f(x)$ 在 $[a,b]$上的分段线性插值多项式

$y = L_h(x)$ 的图形是平面上连接点 $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$ 的一条折线



分段多项式插值余项

若$f(x)$在$[a,b]$ 上二次可微，对任意 $x\in[x_k,x_{k+1}]$余项为：

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

从而

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

其中

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

收敛性:

若 $f(x)\in C[a,b]$，则 $\lim\limits_{h\to 0}L_h(x)=f(x)$ 在 $[a,b]$ 上一致成立。

求函数 $f(x)$ 在任意 $x\in[a,b]$ 处近似值:

若 $x\in[x_k,x_{k+1}]$，则以 $L_h^{(k)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值;

若 $x>x_n$，则以 $L_h^{(n-1)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值;

若 $x<x_0$，则以 $L_h^{(0)}(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值。

二、分段二次Lagrange插值

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

对于 $x \in [a,b]$ ，应选择靠近 x 的三个节点做二次插值多项式:

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

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

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

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

根据实际问题的需要，还可采用分段Hermite插值或样条插值方法。

4.3 三次样条插值

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

多项式Lagrange插值:

整体性强, 光滑性好 (无穷阶连续), 但不一定收敛

分段多项式(Lagrange)插值:

局部性好, 光滑性差 (C^0连续), 收敛性保证

分段多项式(Hermite)插值:

局部性好, 满足一定光滑性, 收敛性保证,

但需要导数值信息

样条插值　　样条函数: 满足一定光滑性的分段多项式

局部性好, 满足一定光滑性, 收敛性保证,

只需要函数值信息

定义4.3 对区间$\left(-\infty,+\infty\right)$的一个分割：

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

若分段函数 $s(x)$满足条件：

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

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

则称 $y=s(x)$ 为对应于分割Δ 的 m 次样条函数，$x_1,x_2,\cdots,x_n$ 为样条节点

以 $x_1,x_2,\cdots,x_n$为节点的 m次样条函数的全体记为：

$$S_m\left(x_1,x_2,\cdots,x_n\right)$$

m次样条函数比一般的m次分段插值多项式的光滑性好。

问题: 如何判断一个分段的多项式函数是样条函数?

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

$$p_0(x) \quad p_1(x) \quad \cdots \quad p_{j-1}(x) \quad p_j(x) \quad \cdots \quad p_n(x)$$

$$x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_j \quad \cdots \quad x_n \qquad x$$

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

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

x_j是$q_j(x)$的m重根

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

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

光滑因子

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

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

于是$s(x)$是m次样条的充要条件是

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

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

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

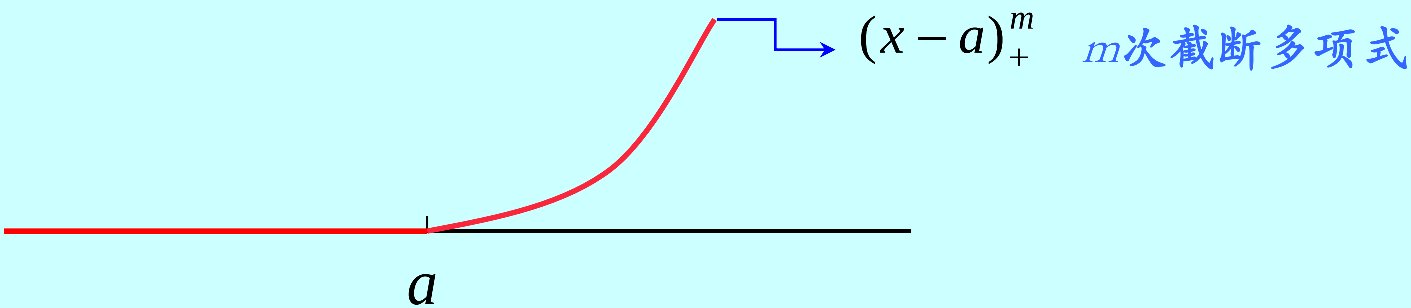
$$\cdots$$

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

为了便于表示分段信息，引进截断多项式：

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

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



定理4.4 任意$s(x)\in S_m(x_1,x_2,\cdots,x_n)$均可唯一地表示为

$$s(x)=p_m(x)+\sum_{j=1}^{n}c_j(x-x_j)_+^m,\quad -\infty<x<+\infty \qquad (4\text{-}31)$$

其中$p_m(x)\in P_m$，$c_j\ (j=1,2,\cdots,n)$为实数。

定理4.5 为使$s(x)\in S_m(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，必须且只须存在$p_m(x)\in P_m$和$n$个实数$c_1,c_2,\cdots,c_n$，使得

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

结论

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

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

例1 验证分片多项式是三次样条函数.

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

解 利用上面的定理(光滑因子)验证.

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

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

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

所以由定理4.5可知该函数为三次样条函数.

4.3.2 三次样条插值及其收敛性

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

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

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

样条节点为插值节点

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

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

维数为n+3

利用两点三次Hermite插值公式, 设

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

当 $x \in [x_k, x_{k+1}]$ 时,

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

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

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

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

$$s''(x)=\frac{6x-2x_k-4x_{k+1}}{h_k^2}m_k+\frac{6x-4x_k-2x_{k+1}}{h_k^2}m_{k+1}$$
$$+\frac{6(x_k+x_{k+1}-2x)}{h_k^3}(y_{k+1}-y_k),\quad x\in[x_k,x_{k+1}],$$

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

由三次样条函数的二次连续条件

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

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

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

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

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

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

n-1个方程
n+1个未知量

我们考虑下面三类边界条件.

第一类边界条件

$$\begin{cases} s'(x_0)=f_0', \\ s'(x_n)=f_n', \end{cases} \Leftrightarrow m_0=f_0', m_n=f_n'$$

$$\begin{cases} 2m_1+\mu_1 m_2=g_1-\lambda_1 f_0', \\ \lambda_k m_{k-1}+2m_k+\mu_k m_{k+1}=g_k, & (k=2,3,\cdots,n-2) \\ \lambda_{n-1}m_{n-2}+2m_{n-1}=g_{n-1}-\mu_{n-1}f_n', \end{cases}$$

三对角
严格对角占优

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & & & & \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & & \\ & \lambda_3 & 2 & \mu_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \mu_{n-2} \\ & & & & \lambda_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1-\lambda_1 f_0' \\ g_2 \\ g_3 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1}-\mu_{n-1}f_n' \end{bmatrix}$$

第二类边界条件

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

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

三对角
严格对角占优

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

第三类边界条件(周期性条件)

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

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

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

由边界条件，$m_0=m_n$，所以

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

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

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

严格对角占优

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

例2 给定插值条件

x_i	0	1	2	3
y_i	0	0	0	0

以及第一类边界条件 $m_0=1, m_3=0$ 求三次样条插值函数.

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

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

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

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

代入(4-35)

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

例3 已知正弦函数表

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

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

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

解 利用在第二类边界条件中介绍的方法，计算结果列表如下：

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

上述结果表明，三次样条插值的逼近效果较好.

三次样条插值函数的收敛性

定理4.6 设$f(x)\in C^2[a,b]$，$s(x)$是以$a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$为节点，满足三种边界条件中的任何一种的三次样条插值函数，

记$h=\max\limits_{0\le i\le n-1}(x_{i+1}-x_i)$，则当$h\to 0$时，$s(x)$和$s'(x)$在$[a,b]$上分别一致收敛于$f(x)$和$f'(x)$.

4.5 正交函数族在逼近中的应用

正交函数概念的引入

向量（离散）内积：

（1）$(f,f)\geq 0,\ (f,f)=0 \Leftrightarrow f\equiv 0$

（2）$(f,g)=(g,f)$;

（3）$(\lambda f,g)=\lambda\cdot(f,g)$;

（4）$(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$。

连续函数内积：

(1) $(f,f)\geq 0,(f,f)=0 \Leftrightarrow f\equiv 0$

(2) $(f,g)=(g,f)$;

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

(4) $(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$

向量正交（垂直）：

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

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

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

$(f,g)=0$

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

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

其中可积函数$\rho(x)\geqslant 0$（$x\in[a,b]$）是权函数。

正交多项式系

通过Schmidt正交化构造正交多项式,具体作法如下:

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

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

取

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

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

令

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

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

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

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

称 $T_n(x)$ 为 n 次Chebyshev多项式.

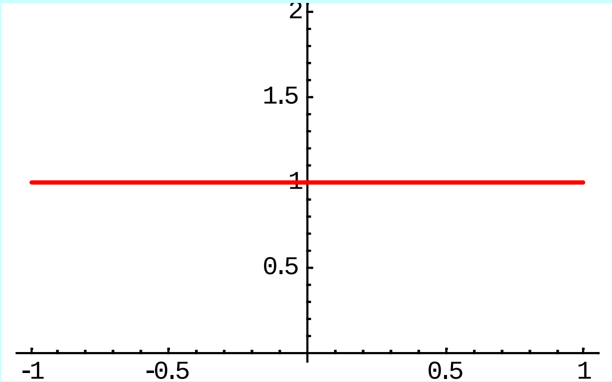
$$T_1(x)=x,$$

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

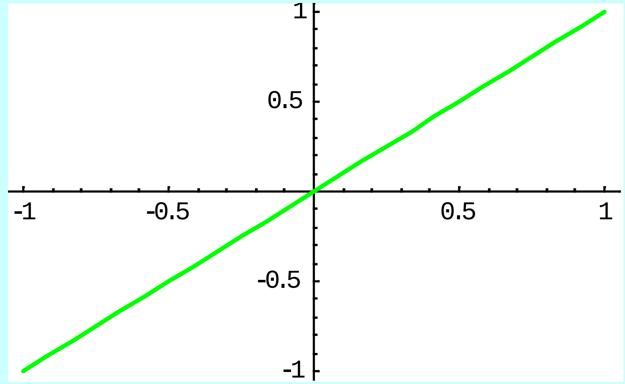
$$T_3(x)=4x^3-3x,$$

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

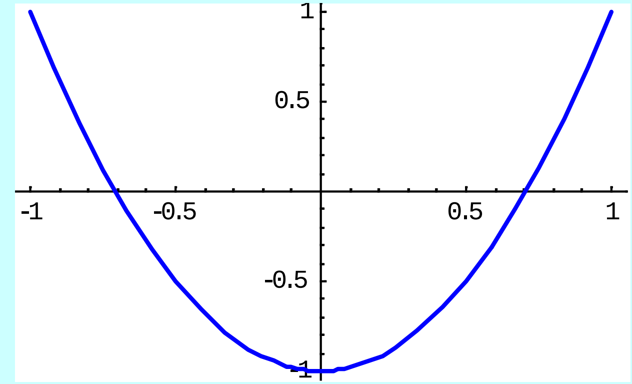
$$T_5(x)=16x^5-20x^3+5x,$$



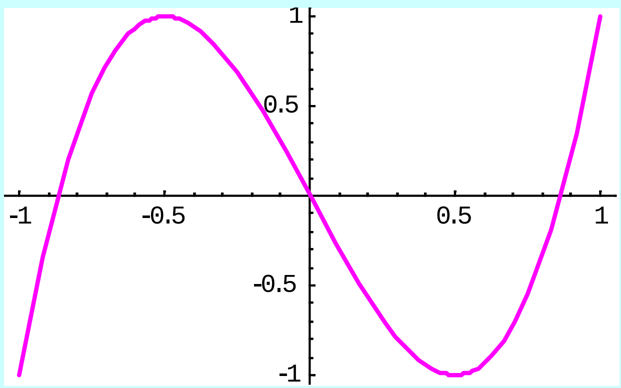
$$T_0(x) = 1,$$



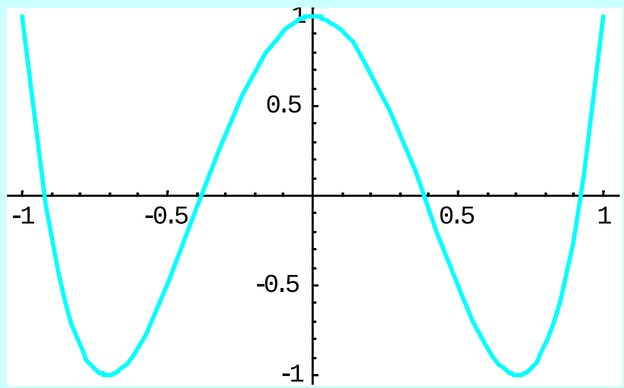
$$T_1(x) = x,$$



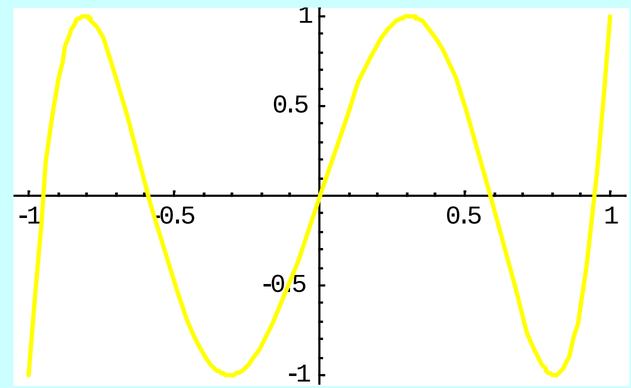
$$T_2(x) = 2x^2 - 1,$$



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



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



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

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

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

知 $T_n(x)$ 是n次多项式，其零点落在(-1,1)中

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

并且

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

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

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

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

解 取 $$\mu_0=\int_{-1}^{1}1\,dx=2$$

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

$$\phi_0(x)=1 \qquad \phi_1(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & 1\\ \mu_1 & x\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}2 & 1\\ 0 & x\end{vmatrix}=2x$$

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

下面验证$\phi_0(x)$、$\phi_1(x)$ 和$\phi_2(x)$ 两两相互正交。

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

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

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

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

例　求 $[0,1]$ 上关于 $\rho(x)=x$ 二次正交多项式族。

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

n次Legendre多项式的一般表达式为

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

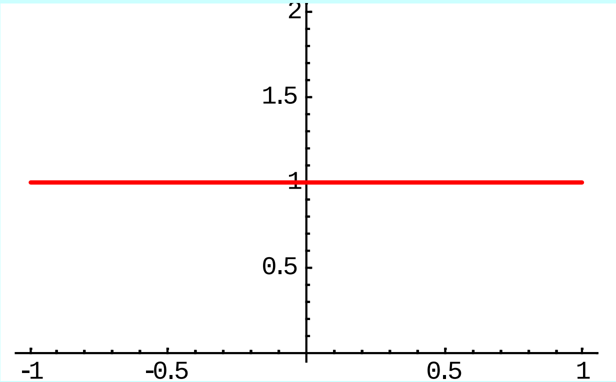
$$L_0(x)=1,\qquad L_1(x)=x,\qquad L_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),$$

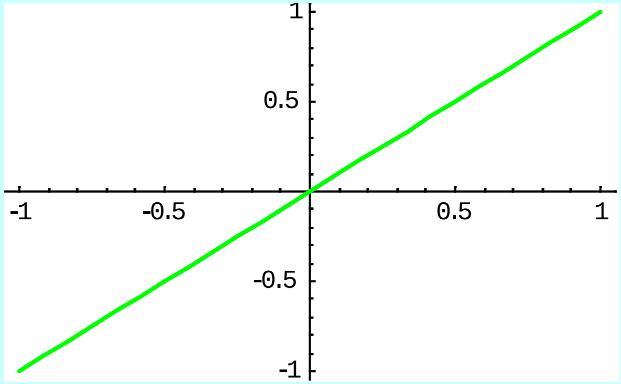
$$L_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x),\qquad L_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3),$$

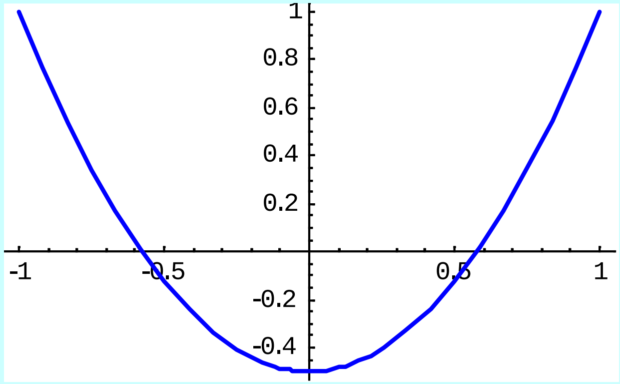
$$L_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x),$$

三项递推式

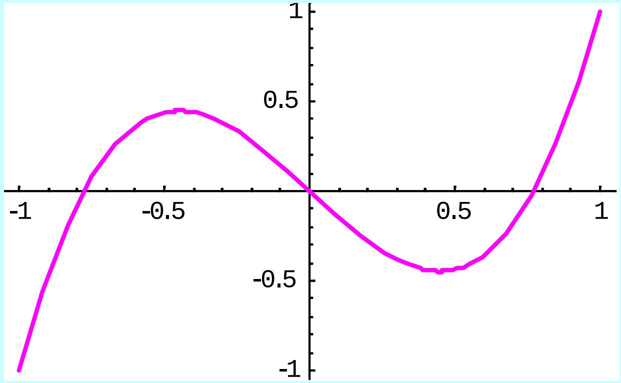
$$L_n(x)=\frac{2n-1}{n}xL_{n-1}(x)-\frac{n-1}{n}L_{n-2}(x),\quad n=2,3,\ldots$$

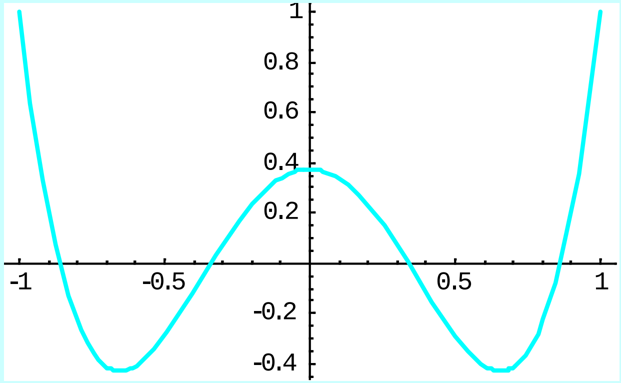


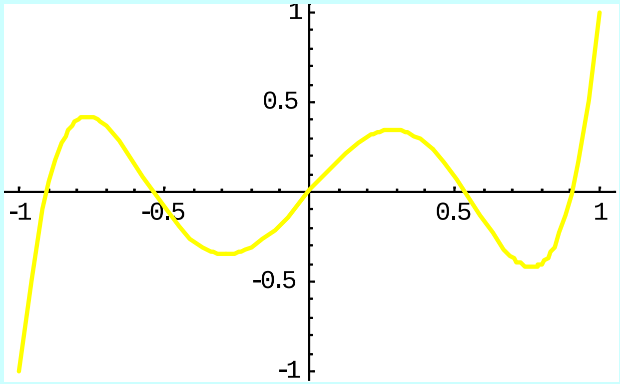




$$L_0(x)=1,\qquad L_1(x)=x,\qquad L_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),$$







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

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

解　取

$$\mu_0=\int_{-1}^{1}|x|\,dx=1$$

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

$$\phi_0(x)=1\qquad\qquad \phi_1(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & 1\\ \mu_1 & x\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 1\\ 0 & x\end{vmatrix}=x$$

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

正交多项式的一些重要性质

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

性质 2　$\phi_n(x)$与次数低于 n 次的所有多项式正交。

性质 3　$\phi_n(x)$ 在(a, b)内恰有 n个互异零点。

性质2和性质3是构造Gauss型求积公式的重要依据

4.5.3 数据拟合的最小二乘法

假设有变量 x, y 的一组数据

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

这些数据往往带有随机的误差，如果利用这些数据按插值法求函数关系

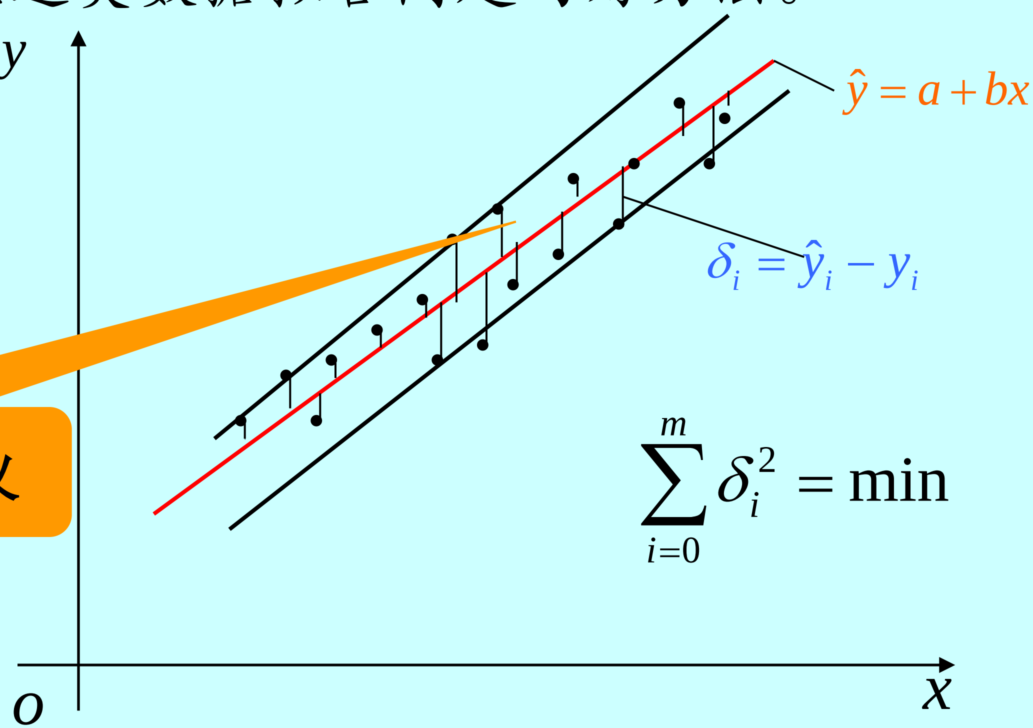
$$y = f(x)$$

的近似表达式，必然将误差带入函数关系式中，甚至可能得到与实际不符的结果。

例如，假设 x, y 满足线性关系 $y = a + bx$

在xOy坐标平面上将以这组数据为坐标的点描出来，这些点可能并不共线，因此插值多项式不会是线性函数。只能另选办法确定关系式 $y = a + bx$

最小二乘法是处理这类数据拟合问题的好方法。



最小二乘法的几何意义

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

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

使其满足

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

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

显然，求解 $\hat{y}(x)$ 等价于求多元数

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

的最小值点 (a^*, b^*)

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

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

即

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

进一步有，

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

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

写成矩阵形式为

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

称此方程组为法方程组。可由Gramer法则求解该方程组，即得

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

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

一般情况

设 $(x_i, y_i)(i=0,1,\ldots,m)$ 为给定数据，$\omega_i > 0$ 为各点的权系数，函数空间 $S = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$

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

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

称按条件求函数 $s^*(x)$ 的方法为数据拟合的最小二乘法

并称 $s^*(x)$ 为最小二乘解。

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

$\sqrt{\sum_{i=0}^{m} \omega_i (s^*(x_i) - y_i)^2}$ 称为均方误差。

求解$s^*(x)$ 等价于求多元函数

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

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

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

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

法方程组

$$\sum_{k=0}^{n}\left(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\phi_k(x_i)\phi_j(x_i)\right)a_k=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\phi_j(x_i)$$

定义函数的离散型内积

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

则法方程组可写为

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

矩阵形式为

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

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

用最小二乘法做数据拟合问题的步骤是:

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

例3 求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y = a + bx$。

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

解：法方程组为：

$$\begin{pmatrix} 5 & \sum_{i=1}^{5} x_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i & \sum_{i=1}^{5} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{5} y_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot y_i \end{pmatrix} \text{ 即 } \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 9.8 \end{pmatrix}$$

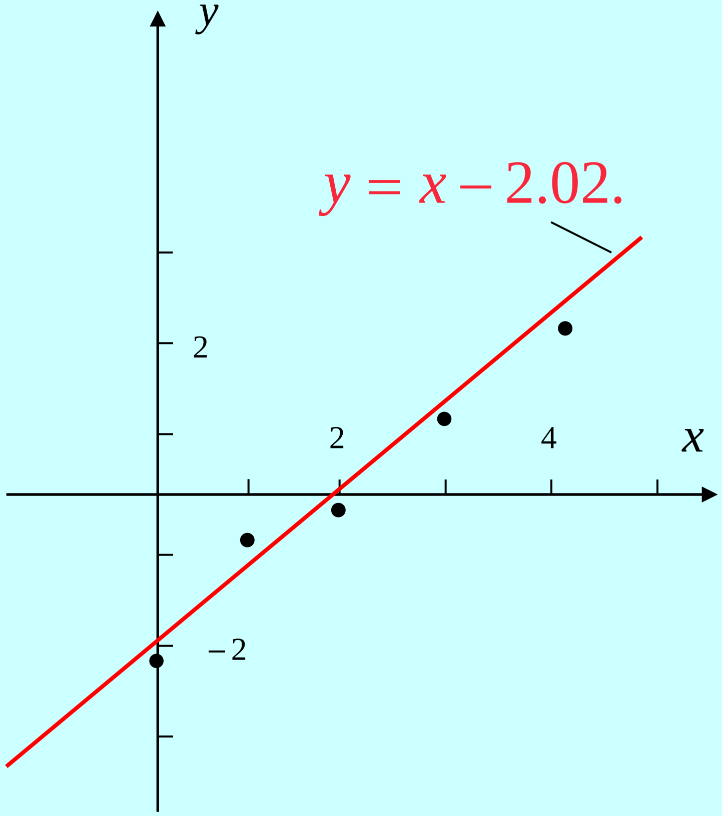
解得

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

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

故所求直线方程是 $y = x - 2.02.$

拟合数据的最小二乘曲线示意图



要拟合数据表

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

$y = x - 2.02$ 为最小二乘曲线

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

例如，已知拟合曲线方程的形式为

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

此时法方程组是非线性方程组（求解比较困难）：

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

我们可按如下方式将非线性问题转为线性问题

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

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

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

则上述非线性问题就变为由观测数据

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

或

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

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

例4 求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y = ce^{bx}$

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

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

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

即

$$\begin{pmatrix} 5 & 7.50 \\ 7.50 & 11.875 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.404 \\ 14.422 \end{pmatrix}$$

解得

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

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

又

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

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

又例如，拟合曲线方程的形式为

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

可设

$$Y=\frac{1}{y}\text{，则得 } Y=a+bx$$

又设

$$X=\frac{1}{x}\text{，则得 } y=a+bX$$