第四章 插值方法

引 言

1　插值法是广泛应用于理论研究和生产实践的重要数值方法，它是用简单函数(特别是多项式或分段多项式)为各种离散数组建立连续模型；为各种非有理函数提供好的逼近方法。众所周知，反映自然规律的数量关系的函数有三种表示方法：

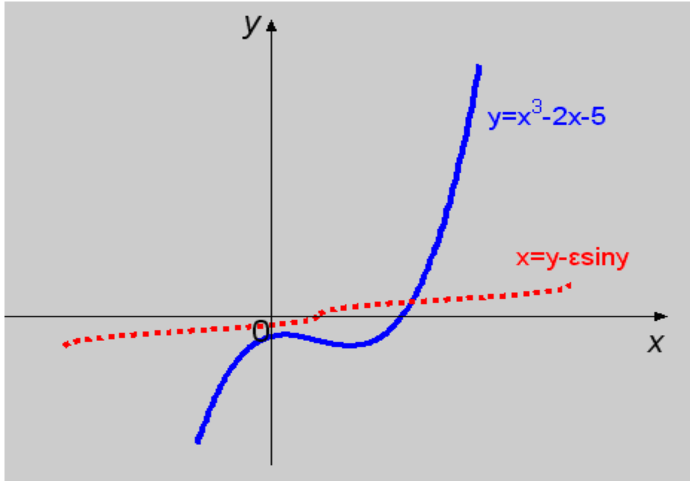
A 解析表达式

$f(x)=x^3-2x-5$。（1865年，瓦里斯Walis；1690年，Raphson拉夫逊；1669年，牛顿Newton；历史悠久的方程）。

$x=y-\varepsilon\sin y$，（开普勒(Kepler)方程）。

悬链线方程；$y=\lambda\cos(x/\lambda)$。

B 图像法



C 表格法

x	y
0.924	-0.008513725
0.928	-0.003822324
0.932	0.000343434
0.936	0.005532443
0.940	0.012976643

2 事实上，许多数据都是用表格法给出的(如观测和实验而得到的函数数据表格)，可是，从一个只提供离散的函数值去进行理论分析和进行设计，是极不方便的甚至是不可能的。因此需要设法去寻找与已知函数值相符，并且形式简单的插值函数(或近似函数)。

3 另外一种情况是，函数表达式完全给定，但其形式不适宜计算机使用，因为计算机只能执行算术和逻辑操作，因此涉及连续变量问题的计算都需要经过离散化以后才能进行。如数值积分方法、数值微分方法、差分方程以及有限元法等，都必须直接或间接地应用到插值理论和方法。

1　多项式插值问题的一般提法

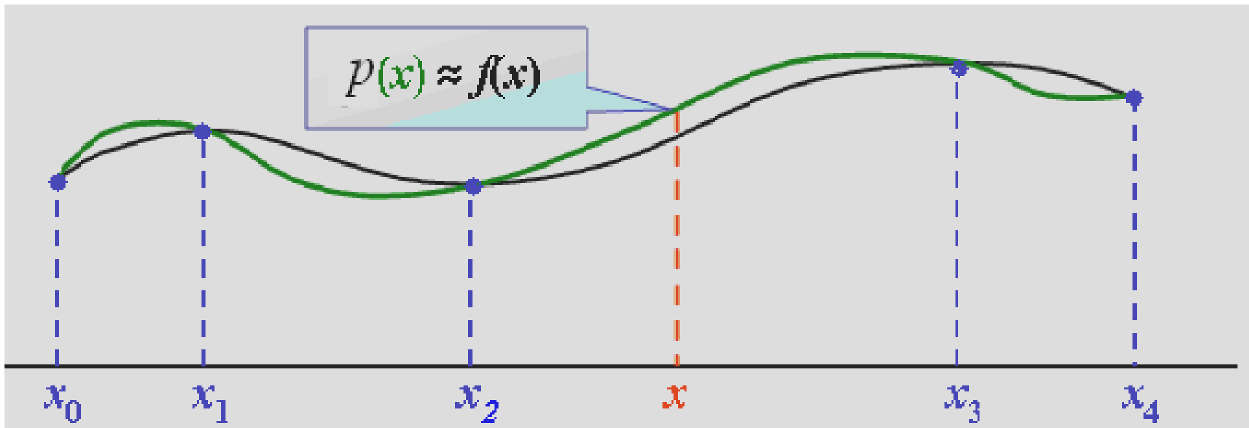
1 插值法的概念

假设函数$y=f(x)$是$[a, b]$上的实值函数，$x_0,x_1,\ldots,x_n$是$[a,b]$上$n+1$个互异的点，$f(x)$在这些点上的取值分别为$y_0,y_1,\ldots,y_n$。

求一个确定的函数$P(x)$，使之满足：

$$P(x_i)=y_i \qquad (i=0,1,2,\ldots,n) \qquad (1)$$

称 $x_0,x_1,\ldots,x_n$为插值节点，关系式(1)称为插值原则，函数$P(x)$称为函数$y=f(x)$的插值函数，区间$[a, b]$称为插值区间。



插值函数$p(x)$作为$f(x)$的近似，可以选自不同类型的函数，如$p(x)$为代数多项式、三角多项式、有理分式；其函数性态可以是光滑的、亦可以是分段光滑的。其中，代数多项式类的插值函数占有重要地位:

(a) 结构简单、计算机容易处理、任何多项式的导数和积分也易确定，并且仍是多项式。

(b) 著名的Weierstrass逼近定理(定义在闭区间上的任何连续函数$f(x)$，存在代数多项式$p(x)$一致逼近$f(x)$，并达到所要求的精度.)。

因此，我们主要考虑代数多项式的插值问题。

2 例题分析：

已知函数$f(x)$有如下数据：

x:	0	1	2
y:	0	1	1
y':	0	1	

求$f(x)$的插值多项式$p(x)$，并求$f(x)$在x=0.5处的近似值。

解：设 $P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3+a_4x^4$，其中，$a_0, a_1, \cdots, a_4$为待定系数。由给定的条件有：

$$P(0)=a_0=0=f(0)$$

$$P(1)=a_0+a_1+a_2+a_3+a_4=1=f(1)$$

$$P(2)=a_0+2a_1+4a_2+8a_3+16a_4=1=f(2)$$

$$P'(0)=a_1=0=f'(0)$$

$$P'(1)=a_1+2a_2+3a_3+4a_4=1=f'(1)$$

联立上式得：

$$a_0=0 \quad a_1=0 \quad a_2=\frac{9}{4} \quad a_3=-\frac{3}{2} \quad a_4=\frac{1}{4}$$

于是，

$$P(x)=\frac{9}{4}x^2-\frac{3}{2}x^3+\frac{1}{4}x^4$$

$$f(0.5)\approx P(0.5)=0.3906$$

§2 拉格朗日(Lagrange)插值

1 多项式插值的存在唯一性：

从如下数据表着手，并假定 $x_i \neq x_j, 0 \le i \neq j \le n$,

x：	x_0	x_1	x_2	…	x_n
y：	y_0	y_1	y_2	…	y_n

求n 次多项式 $P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$, 使得：$P(x_i)=y_i$ $(i=0,1,2,\ldots,n)$ 。

根据插值条件，有：

$$\begin{cases} P(x_0) = a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_n x_0^n = y_0 \\ P(x_1) = a_0 + a_1 x_1 + \cdots + a_n x_1^n = y_1 \\ \quad\vdots \\ P(x_n) = a_0 + a_1 x_n + \cdots + a_n x_n^n = y_n \end{cases} \qquad (1)$$

显然，这是一个关于 $a_0, a_1, \cdots a_n$ 的n+1元线性方程组，其系数矩阵的行列式为：

$$V_n(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\begin{vmatrix}1 & x_0 & \cdots & x_0^n\\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}$$

注意到插值节点 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$两两相异，而

$$V_n(x_0,x_1,\cdots,x_n)=\prod_{0\le j<i\le n}(x_i-x_j)\ne 0$$

故方程组(1)有惟一解 $a_0,a_1,\cdots a_n$，于是满足插值条件的多项式存在且惟一。

定理 由n+1个不同插值节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$可以惟一确定一个n 次多项式 $P_n(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$满足插值条件 $P_n(x_i)=y_i$

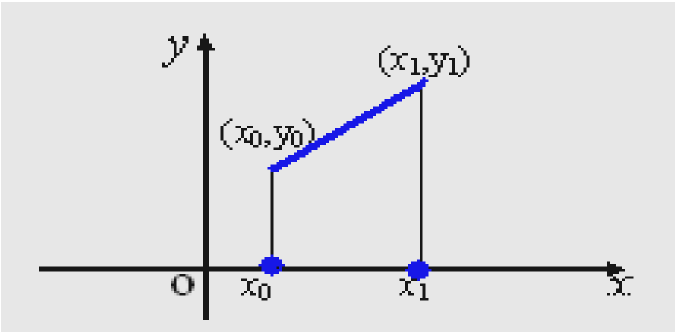
从理论上说，由方程组(1)可以求出$a_0,a_1,\cdots a_n$的惟一解,从而确定$P_n(x)$。但从数值计算上看，当n 较大时求解线性方程组的工作量较大且不便应用。为解决此问题，现已提出了不少构造$P_n(x)$的巧妙办法。

2 Lagrange插值的基函数构造法

首先讨论n=1时的情形。

已知 $x_0, x_1; y_0, y_1$， 求 $L_1(x) = a_0 + a_1 x$使得 $L_1(x_0) = y_0\ ; L_1(x_1) = y_1$

显然 $L_1(x)$是过(x_0, y_0)和 (x_1, y_1)两点的一条直线。



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

$$= \underbrace{\frac{x - x_1}{x_0 - x_1}}_{l_0(x)} y_0 + \underbrace{\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}}_{l_1(x)} y_1 = \sum_{i=0}^{1} l_i(x) y_i$$

由点斜式容易求得：

其中，$l_i(x), (i = 0,1)$ 具有如下特点：

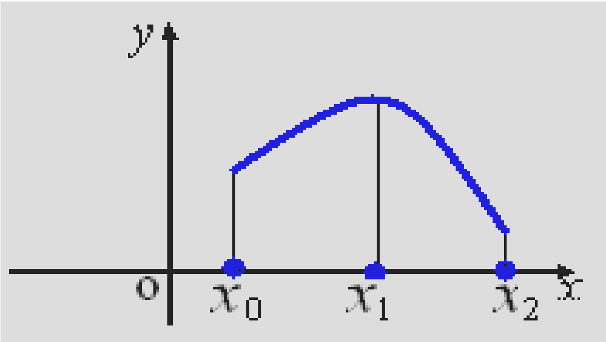
$$\begin{cases} l_0(x_0) = 1; l_0(x_1) = 0 \\ l_1(x_0) = 0; l_1(x_1) = 1 \end{cases}$$

称其为线性插值基函数。

再讨论 *n*=2 时的情形。

已知 $\begin{matrix} x_0, x_1, x_2 \\ y_0, y_1, y_2 \end{matrix}$， 求 $L_2(x)$ 使得 $L_2(x_0)=y_0;L_2(x_1)=y_1;L_2(x_2)=y_2$ 。

显然 $L_2(x)$ 是过 (x_0,y_0)、(x_1,y_1)、(x_2,y_2) 三点的一条抛物线。



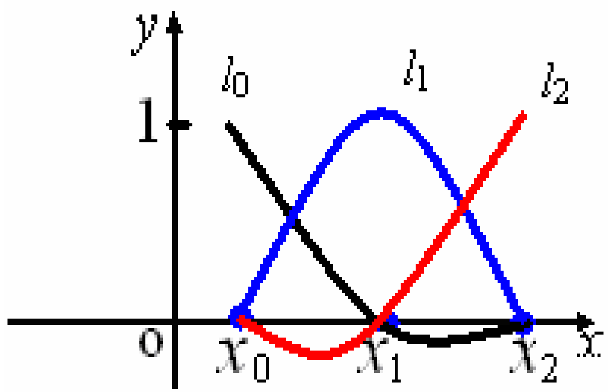
- 其中， $l_i(x),(i=0,1,2)$ 具有如下特点：

$$\begin{cases} l_0(x_0)=1;l_0(x_1)=0;l_0(x_2)=0 \\ l_1(x_0)=0;l_1(x_1)=1;l_1(x_2)=0 \\ l_2(x_0)=0;l_2(x_1)=0;l_2(x_2)=1 \end{cases}$$

- 仿照线性插值基函数的构造方法，令

$$\begin{cases} l_0(x)=\dfrac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \\ l_1(x)=\dfrac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\ l_2(x)=\dfrac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \end{cases}$$

- 称其为抛物线插值基函数(如下图所示)。



于是，

$$L_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}y_2=\sum_{i=0}^{2}l_i(x)y_i$$

最后讨论一般情形。

$x:$	x_0	x_1	x_2	…	x_n
y:	y_0	y_1	y_2	…	y_n

求$L_n(x)$使得$L(x_i)=y_i$ $(i=0,1,2,\ldots,n)$ 。

令n 次多项式插值基函数为：

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j\neq i\\ j=0}}^{n}\frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}$$

$l_i(x),(i=0,1,\cdots,n)$具有如下特点：

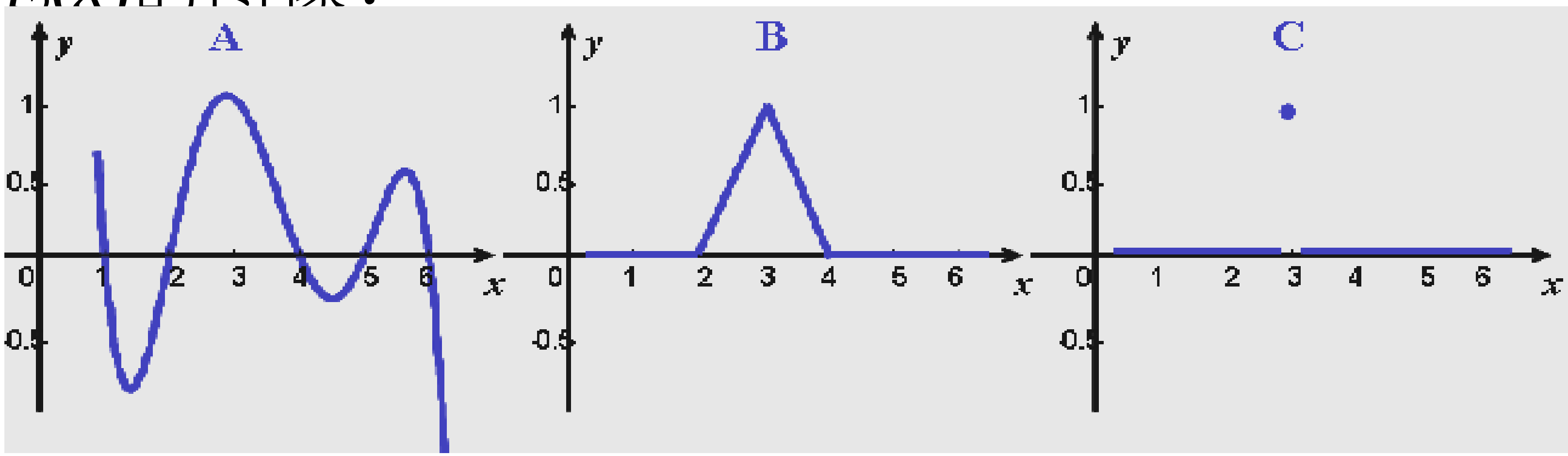
$$l_i(x_j)=\delta_{ij}=\begin{cases}1, i=j\\0, i\neq j\end{cases}\quad (i,j=0,1,\cdots,n)$$

于是，满足插值条件的n次多项式可以直接写为：

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\prod_{\substack{j\neq i\\j=0}}^{n}\frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}y_i=\sum_{i=0}^{n}l_i(x)y_i$$

我们称$L_n(x)$为Lagrange 多项式，$l_i(x)$为Lagrange 插值基函数。

思考　给定 $x_i=i+1$，　$i=0, 1, 2, 3, 4, 5$。下面哪个是$l_2(x)$的图像？



3 例题

a) 已知连续函数$f(x)$的函数表如下：

x	-1	0	1	2
$f(x)$	-2	-2	1	2

求方程$f(x)=0$在(-1,2)内的近似根。

解：利用Lagrange插值法有

$$
\begin{aligned}
L_3(x) &= \frac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(-1-0)(-1-1)(-1-2)}(-2) \\
&+ \frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(0+1)(0-1)(0-2)}(-2) \\
&+ \frac{(x+1)x(x-2)}{2\cdot 1(-1)}\cdot 1 \\
&+ \frac{(x+1)x(x-1)}{(2+1)(2-0)(2-1)}\cdot 2 \\
&= \frac{1}{6}[-5x^3+9x^2+14x-12]
\end{aligned}
$$

- 解方程

$$-5x^3+9x^2+14x-12=0$$

- 取初值 x=0.5，利用牛顿法求解可得 $f(x)$ 在 (-1,2) 内的近似根为 0.67433 。

b) 利用100，121的开方计算$\sqrt{115}$。

解：由于

x	100	121
$\sqrt{x}$	10	11

利用Lagrange 插值法有

$$L_1(x)=\frac{x-121}{100-121}\cdot 10+\frac{x-100}{121-100}\cdot 11$$

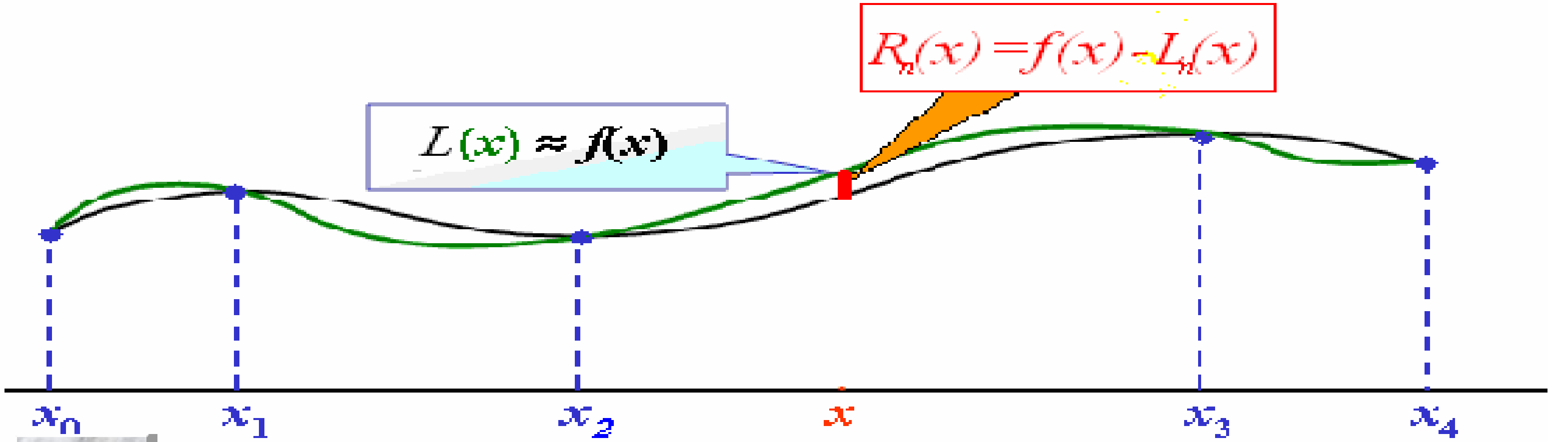
于是，

$$\sqrt{115}\approx L_1(115)=\frac{115-121}{100-121}\cdot 10+\frac{115-100}{121-100}\cdot 11$$
$$=10.71428$$

- $\sqrt{115}$的准确值为10.72380529…，因此近似值10.71428有3位有效数字。

4 插值余项

如图所示，其截断误差$R_n(x)=f(x)-L_n(x)$，称为Lagrange插值多项式的余项。



定理 假设$f(x)$在$[a, b]$上有$n+1$阶导数，且在不同插值节点$x_0,x_1,\cdots,x_n$取值为$f(x_i)=y_i$，$L_n(x)$是经过插值样点$(x_i,y_i),(i=0,1,\cdots,n)$的Lagrange插值多项式，若引进记号:

$$\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

则有如下的误差估计:

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

$$= \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x) \quad \xi \in (a,b)$$

证明：因为 $R_n(x_i) = f(x_i) - L_n(x_i) = 0 \quad (i = 0,1,\cdots,n)$

于是可假定$R_n(x)$具有如下形式：

$$R_n(x) = k(x)(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n) = k(x)\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

作辅助函数

$$\varphi(t) = f(t) - L_n(t) - k(x)(t - x_0)(t - x_1)\cdots(t - x_n)$$

$$= f(t) - L_n(t) - k(x)\prod_{i=0}^{n}(t - x_i)$$

容易看出，$\varphi(t)$有 $x, x_0, x_1, \cdots, x_n$共 n+2个相异零点，且在[a, b]上存在n+1阶导数。根据Rolle'Principle，在$\varphi(t)$的两个零点之间至少有一个零点，故$\varphi(t)$在[a, b]上至少有n+1个零点。如此类推，$\varphi^{(n+1)}(t)$在(a, b)上至少有1个零点ξ，使得

$$\varphi^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - L_n^{(n+1)}(\xi) - k(x)\frac{d^{(n+1)}}{dt^{(n+1)}}\prod_{i=0}^{n}(t-x_i)\Big|_{t=\xi} = 0$$

注意到 L_n是n次多项式，$L_n^{(n+1)}(t)\equiv 0$ ；$\prod_{i=0}^{n}(t-x_i)$的首项为 t^n,
故 $\frac{d^{(n+1)}}{dt^{(n+1)}}\prod_{i=0}^{n}(t-x_i)=(n+1)!$。 由上述方程解得

$$k(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad \xi\in(a,b)$$

于是

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

注1： 如果 $f^{(n+1)}(x)$在(a, b)上有界，即

$$\exists M>0,\quad \left|f^{(n+1)}(x)\right|\le M, \forall x\in(a,b)$$

则有余项估计：

$$|R_n(x)|\le\frac{M}{(n+1)!}\left|\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\right|$$

注2： 当 $f(x)$为任一个次数$\le n$的多项式时， 由$f^{(n+1)}(x)\equiv 0$, 可知$R_n(x)\equiv 0$, 因此，插值多项式$L_n(x)$对于次数$\le n$的多项式的估计是精确的。

思考:

(1) 线性插值的余项估计： $|R_1(x)| \le \frac{(x_1-x_0)^2}{8} \max_{x_0 \le x \le x_1} |f''(x)|$

(2) 抛物线插值的余项估计：

$$R_2(x) = \frac{f'''(\xi)}{6}(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2), \xi \in [x_0, x_2]$$

5 例题

例1 已知函数$y=f(x)$的观察数据为

x_k	-2	0	4	5
y_k	5	1	-3	1

试构造 $f(x)$的拉格朗日多项式$L_n(x)$，并计算 $f(-1)$。

解：先构造基函数

$$l_0(x) = \frac{x(x-4)(x-5)}{(-2-0)(-2-4)(-2-5)} = -\frac{x(x-4)(x-5)}{84}$$

$$l_1(x) = \frac{(x+2)(x-4)(x-5)}{(0-(-2))(0-4)(0-5)} = \frac{(x+2)(x-4)(x-5)}{40}$$

$$l_2(x)=\frac{(x+2)x(x-5)}{(4+2)(4-0)(4-5)}=-\frac{x(x+2)(x-5)}{24}$$

$$l_3(x)=\frac{(x+2)x(x-2)(x-4)}{(5+2)(5-0)(5-4)}=\frac{(x+2)x(x-4)}{35}$$

所求三次多项式为

$$L_3(x)=\sum_{k=0}^{3}y_k l_k(x)=-5\times\frac{x(x-4)(x-5)}{84}+\frac{(x+2)(x-4)(x-5)}{40}-(-3)\times\frac{x(x+2)(x-5)}{24}+\frac{(x+2)x(x-4)}{35}=\frac{5}{42}x^3-\frac{1}{14}x^2-\frac{55}{21}x+1$$

$$L_3(-1)=-\frac{5}{42}-\frac{1}{14}-\frac{55}{21}+1=\frac{24}{7}$$

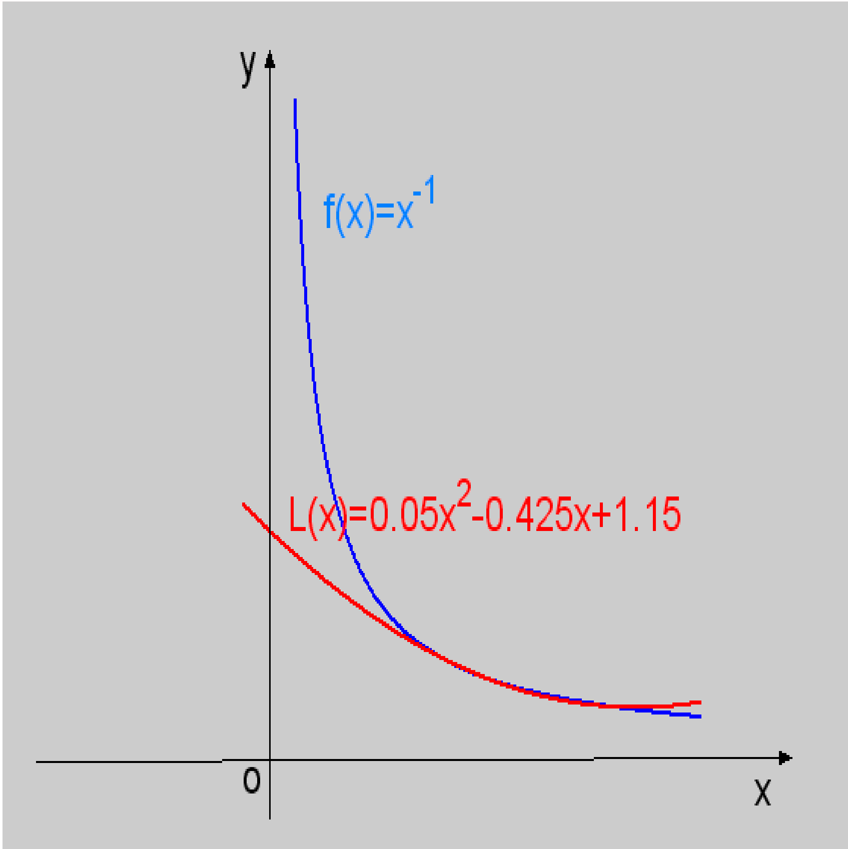
例2 已知连续函数$f(x)=1/x$，其函数表如下：

x	2	2.5	4
$f(x)$	0.5	0.4	0.25

求方程 $f(3)$的值并估计误差。

解：利用Lagrange插值法有

$$L_2(x)=\frac{(x-2.5)(x-4)}{(2-2.5)(2-4)}(0.5)$$
$$+\frac{(x-2)(x-4)}{(2.5-2)(2.5-4)}(0.4)$$
$$+\frac{(x-2)(x-2.5)}{(4-2)(4-2.5)}(0.25)$$
$$=0.05x^2-0.425x+1.15$$



故 $f(3)\approx L_2(3)=0.325$

因为 $f'''(x)=-\frac{6}{x^4}$,

$$\max_{2\le x\le 4}|f'''(x)|=|f'''(2)|=\frac{3}{8},$$

故

$$|R_2(3)|=|f(3)-L_2(3)|\le\frac{1}{6}\cdot\frac{3}{8}\cdot|(3-2)(3-2.5)(3-4)|$$
$$=0.03125$$

实际误差 $|R_2(3)|=|f(3)-L_2(3)|=\frac{1}{3}-0.325=0.008\dot{3}$

4.3 差商与差分及其性质

1　差商的概念：

定义1：称 $f[x_0\,,x_1]=\dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$为函数 $f(x)$的一阶差商；

称 $f[x_0,x_1,x_2]=\dfrac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$为函数 $f(x)$的二阶差商；

一般地，称 $f[x_0,x_1,\ldots,x_n]=\dfrac{f[x_1,\ldots,x_n]-f[x_0,\ldots,x_{n-1}]}{x_n-x_0}$为函数 $f(x)$的 n 阶差商；特别地，定义 $f[x_0]=f(x_0)$为函数$f(x)$关于x_o的零阶差商。

由此可知，高阶差商总是由比它低一阶的的两个差商组合而成。

2　差商性质

a) <u>性质1</u>：n阶差商可以表示成n+1个函数值$y_0,y_1,\cdots,y_n$的线性组合，即

$$\boldsymbol{f[x_0,x_1,\cdots,x_n]}=\sum_{k=0}^{n}\frac{y_k}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$$

例：
$$f[x_0,x_1]=\frac{f(x_0)-f(x_1)}{x_0-x_1}=\frac{y_0}{x_0-x_1}+\frac{y_1}{x_1-x_0}$$

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

$$=\frac{1}{x_0-x_2}\left(\frac{y_0}{x_0-x_1}+\frac{y_1}{x_1-x_0}\right)-\frac{1}{x_0-x_2}\left(\frac{y_1}{x_1-x_2}+\frac{y_2}{x_2-x_1}\right)$$

$$=\frac{y_0}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}+\frac{y_1}{x_0-x_2}\left(\frac{1}{x_1-x_0}-\frac{1}{x_1-x_2}\right)+\frac{y_2}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

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

b) 性质2(对称性)：差商与节点的顺序无关。

即 $f[x_0,x_1]=f[x_1,x_0]$，$f[x_0,x_1,x_2]=f[x_1,x_0,x_2]=f[x_0,x_2,x_1]$

这一点可以从性质1看出。

c) 性质3：若$f(x)$是x的n次多项式，则

一阶差商$f[x,x_0]$是x的n-1次多项式；

二阶差商$f[x,x_0,x_1]$是x的n-2次多项式；

一般地，函数$f(x)$的k阶差商$f[x,x_0,\cdots,x_{k-1}]$是x的n-k次多项式$(k\le n)$，而$k>n$时，k阶差商为零。

3 利用差商表计算差商

利用差商的递推定义,可以用递推来计算差商。

如下表:

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
x_0	$f(x_0)$			
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0,x_1]$		
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$	
$\Delta y_k = y_{k+1} - y_k$	$f(x_3)$	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$

如要计算四阶差商，应再增加一个节点，表中还要增加一行。

例1：已知下表，计算三阶差商　$f[1,2,4,7]$。

x_i	1	2	4	7
$f(x_i)$	0	2	15	12

解：列表计算

x_i	$f(x_i)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商
1	0			
3	2	1		
4	15	13	4	
7	12	-1	-3.5	-1.25

4 差分的概念

2：设函数$y=f(x)$在等距节点 $x_i = x_0 + ih(i = 0,1,\cdots,n)$ 上的函数值$f(x_i)=f_i$，其中，h为常数称作步长。称

$$\triangle f_i=f_{i+1}-f_i \qquad \nabla f_i=f_i-f_{i-1}$$

$$\delta f_i=f(x_i+h/2)-f(x_i-h/2)= f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}$$

分别为$f(x)$在x_i 处以h为步长的一阶向前差分，一阶向后差分和一阶中心差分。称符号$\triangle$、∇、 δ分别为向前差分算子，向后差分算子和中心差分算子。

5　算例：

例　已知函数$y=f(x)$的数据如表中第2、3列。计算它的各阶差商。

k	x_k	$f(x_k)$
0	0.40	0.41075
1	0.55	0.57815
2	0.65	0.69675
3	0.80	0.88811
4	0.90	1.20152

解：依据差商计算公式，结果列表中。

k	x_k	$f(x_k)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商
0	0.40	0.410 75				
1	0.55	0.578 15	1.116 00			
2	0.65	0.696 75	1.168 00	0.280 00		
3	0.80	0.888 11	1.275 73	0.358 93	0.197 33	
4	0.90	1.201 52	1.384 10	0.433 48	0.213 00	0.031 34

3 性质：

(a) $$f[x_0,\ldots,x_k]=\sum_{i=0}^{k}\frac{f(x_i)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

该性质说明：

k 阶差商 $f[x_0,x_1,\ldots,x_n]$计算是由函数值 $f(x_0)$，$f(x_1)$，…，$f(x_k)$线性组合而成，且与所含节点的次序无关，通常称为差商的对称性。

$$f[x_0, x_1, x_2] = f[x_1, x_0, x_2] = f[x_2, x_1, x_0]$$

$$f[x_0\ , x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0}$$

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

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

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

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

(b)
$$\begin{cases} \Delta^{\mathrm{n}} f_i = \Delta^{\mathrm{n-1}} f_{i+1} - \Delta^{\mathrm{n-1}} f_i \\ \nabla^{\mathrm{n}} f_i = \nabla^{\mathrm{n-1}} f_i - \nabla^{\mathrm{n-1}} f_{i-1} \\ \delta^{\mathrm{n}} f_i = \delta^{\mathrm{n-1}} f_{i+\frac{1}{2}} - \delta^{\mathrm{n-1}} f_{i-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

§4 牛顿插值公式

1 牛顿插值公式的构造

Lagrange插值虽然易算，但若要增加一个节点时，全部基函数$l_i(x)$ 都需重新算过。本节介绍另外一种方法—牛顿插值法，并用它解决上面所述问题。

将 *Lagrange*插值公式

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} y_i = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) y_i$$

中的$L_n(x)$改写成：

$$N_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + a_n(x - x_0)\ldots(x - x_{n-1})$$

其中，$a_0, a_1, \cdots, a_n$为待定系数。如何求$a_0, a_1, \cdots, a_n$?

解：因为 $$f[x, x_0] = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

所以 $$f(x) = f(x_0) + f[x, x_0](x - x_0) \qquad (0)$$

又 $$f[x, x_0, x_1] = \frac{f[x, x_0] - f[x_0, x_1]}{x - x_1}$$

有 $$f[x,x_0]=f[x_0,x_1]+f[x,x_0,x_1](x-x_1) \qquad (1)$$

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

$$f[x,x_0,x_1]=f[x_0,x_1,x_2]+f[x,x_0,x_1,x_2](x-x_2) \qquad (2)$$

一般地，

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

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

将式(n)代入式(n-1)，…，式(2)代入式(1)，式(1)代入式 (0)，如此可得：

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

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

尤为注意的是：最后一项中，差商部分含有x，乃是余项部分，记作$R_n(x)$；而前面n+1项中，差商部分都不含有x，因而前面n+1项是关于x的n次多项式，记作 $N_n(x)$，这就是牛顿插值公式。

于是，上式成为$f(x)=N_n(x)+R_n(x)$。

2 算例

例1：当 n=1时，

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

其中

$$N_1(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)=y_0+\frac{y_0-y_1}{x_0-x_1}(x-x_0)$$

这就是牛顿一次插值多项式，也就是点斜式直线方程。

当 n=2 时，

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

$$N_2(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$$

这就是牛顿二次插值多项式。

显然，$N_2(x_0)=f(x_0)$ $\quad N_2(x_1)=f(x_0)+\dfrac{f(x_0)-f(x_1)}{x_0-x_1}(x_1-x_0)=f(x_1)$

$$N_2(x_2)=f(x_0)+\frac{f(x_0)-f(x_1)}{x_0-x_1}(x_2-x_0)+\frac{1}{x_0-x_2}\left(\frac{f(x_0)-f(x_1)}{x_0-x_1}-\frac{f(x_1)-f(x_2)}{x_1-x_2}\right)(x_2-x_0)(x_2-x_1)$$
$$=f(x_2)$$

即 $N_2(x)$满足二次插值条件。

例2：已知

x_i	1	2	4	7
$f(x_i)$	0	1	15	12

求满足以上插值条件的牛顿型插值多项式。

解：由于 $f(x_0)=0$ ，$f[x_0,x_1]=1$ ，$f[x_0,x_1,x_2]=4$ ，$f[x_0,x_1,x_2,x_3]=-1.25$ ；

则牛顿三次插值多项式为

$$N_3(x)=0+(x-1)+4\times(x-1)(x-3)-1.25\times(x-1)(x-3)(x-4)$$

例3：已知 $f(x)$ 在六个点的函数值如下表，运用牛顿型插值多项式求 $f(0.596)$ 的近似值。

例2：已知

x_i	1	2	4	7
$f(x_i)$	0	1	15	12

求满足以上插值条件的牛顿型插值多项式。

解：由于

$$f(x_0)=0,\quad f[x_0,x_1]=1,\quad f[x_0,x_1,x_2]=4,\quad f[x_0,x_1,x_2,x_3]=-1.25;$$

则牛顿三次插值多项式为

$$N_3(x)=0+(x-1)+4\times(x-1)(x-3)-1.25\times(x-1)(x-3)(x-4)$$

例3：已知 $f(x)$ 在六个点的函数值如下表，运用牛顿型插值多项式求 $f(0.596)$ 的近似值。

x_k	$f(x_k)$	一阶差商	二阶差商	三阶差商	四阶差商	五阶差商	$x-x_k$
0.40	0.41075						0.196
0.55	0.57815	1.1160					0.046
0.65	0.69675	1.1860	0.2800				-0.054
0.80	0.88811	1.2757	0.3588	0.1970			-0.204
0.90	1.02652	1.3841	0.4336	0.2137	0.0344		-0.454
1.05	1.25386	1.5156	0.5260	0.2310	0.0346	0.0003	

$$N_2(x)=f(x_0)+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$$

$$N_2(0.596)=0.41075+1.1160\times0.196+0.28\times0.196\times0.046=0.632010$$

$$N_3(x)=N_2(x)+f[x_0,x_1,x_2,x_3](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$$

$$N_3(0.596)=0.632010+0.1970\times0.196\times0.046\times(-0.054)=0.6319145$$

欲求$N_4(x)$，只需在$N_3(x)$之后再加一项：$f[x_0,x_1,x_2,x_3,x_4](x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)$

$$=0.0344\times0.196\times0.046\times(-0.054)\times(-0.204)=3.4\times10^{-6}$$

$$N_4(x)=0.6319145+0.0000034=0.6319179$$

4 拉格朗日插值与牛顿插值的比较

1) $P_n(x)$和$N_n(x)$均是n次多项式，且均满足插值条件：

$$P_n(x_k)=N_n(x_k)=f(x_k),\ \ k=0,1,\cdots,n$$

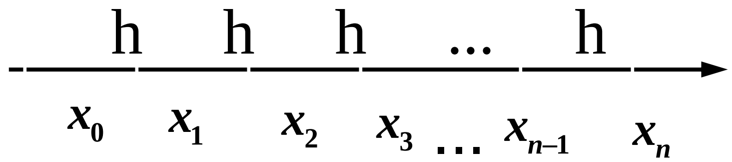
由多项式的唯一性：$P_n(x)\equiv N_n(x)$，因而，两个公式的余项是相等的，即

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

2) 当插值多项式从n-1次增加到n次时，拉格朗日型插值必须重新计算所有的基本插值多项式；而对于牛顿型插值，只需用表格再计算一个n阶差商，然后加上一项即可。

5 等距牛顿插值公式

插值节点为等距节点：



$x_k = x_0 + kh,\quad k = 0,1,\cdots,n,$ 如右图：

牛顿插值公式

设等距节点 $x_k = x_0 + kh$， 记 $y_k = f(x_k), k = 0,1,\cdots,n$。 当 $x \in [x_0, x_n]$，

令 $x = x_0 + th$， $0 \le t \le n$ 。

例如(右图)

x 在x_2， x_3的中点时，$x = x_0 + 2.5h$ 。

将牛顿插值公式中的差商用差分代替，而

$x - x_k = (x_0 + th) - (x_0 + kh) = (t - k)h,$ 从而， 牛顿插值公式在等距插值节点下的形式为：

$$N_n(x) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{1}{2!}t(t-1)\Delta^2 y_0 + \frac{1}{3!}t(t-1)(t-2)\Delta^3 y_0 + \cdots + \frac{1}{n!}t(t-1)\cdots(t-n+1)\Delta^n y_0$$

余项为 $R_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\omega_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) h^{n+1} t(t-1)\cdots(t-n)$

上式为等距牛顿向前插值公式。

下面来推导等距牛顿向后插值公式：

令 $x=x_n+th\left(-n\le t\le 0\right)$， 这时 $x_{n-k}=x_n-kh$， $x-x_{n-k}=(t+k)h$ ；

$$N_n(x)=y_n+t\nabla y_n+\frac{1}{2!}t(t+1)\nabla^2 y_n+\frac{1}{3!}t(t+1)(t+2)\nabla^3 y_n+\cdots+\frac{1}{n!}t(t+1)\cdots(t+n-1)\nabla^n y_n$$

余项为：
$$R_n(x)=\frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)h^{n+1}t(t+1)\cdots(t+n)$$

例4：设 $y=f(x)=e^x$ 插值节点为 $x=1,1.5,2,2.5,3$ ，相应的函数值如下表，求 $f(2.2)$。

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
1	2.71828	1.76341	1.14396	0.74210	0.48146
1.5	4.48169	2.90737	1.88606	1.22356	
2	7.28906	4.79343	3.10962		
2.5	12.18249	7.90305			
3	20.08554				

解：精确值 $f(2.2)=e^{2.2}=9.025011$。

此时$[x_k, x_{k+1}]$，$x=2.2=1+2.4h$，故$t=2.4$，于是

$$N_2(2.2)=y_0+t\Delta y_0+\frac{1}{2!}t(t-1)\Delta^2 y_0=8.87232$$

求$N_3(2.2)$ 时，

在 $N_2(2.2)$ 后加一项：

$$\frac{1}{3!}t(t-1)(t-2)\Delta^3 y_0=\frac{1}{6}\times 2.4\times(2.4-1)\times(2.4-2)\times 0.74210=0.16623$$

所以

$$N_3(2.2)=N_2(2.2)+0.16623=9.03855$$

求$N_4(2.2)$时，

在 $N_3(2.2)$后再加一项：

$$\frac{1}{4!}t(t-1)(t-2)(t-3)\Delta^4 y_0=\frac{1}{24}\times 2.4\times(2.4-1)\times(2.4-2)\times(2.4-3)\times 0.48146=-0.01618$$

所以

$$N_4(2.2)=N_3(2.2)-0.01618=9.02237$$

$$R_2=0.15269\,,\quad R_3=-0.01354\,,\quad R_2=0.00264$$

5 分段插值法

1 问题的提出

在区间$[a, b]$上用插值多项式P逼近函数f时，f和P在每个节点上的差异(理论上)应该为零。自然，我们期望在一切中间点上也能很好地逼近f，并且当插值点增加时这种逼近效果应该越来越好。

但上述的期望不可能实现的。当认识到这一点时，在数学界曾引起强烈的震动。

2 反例

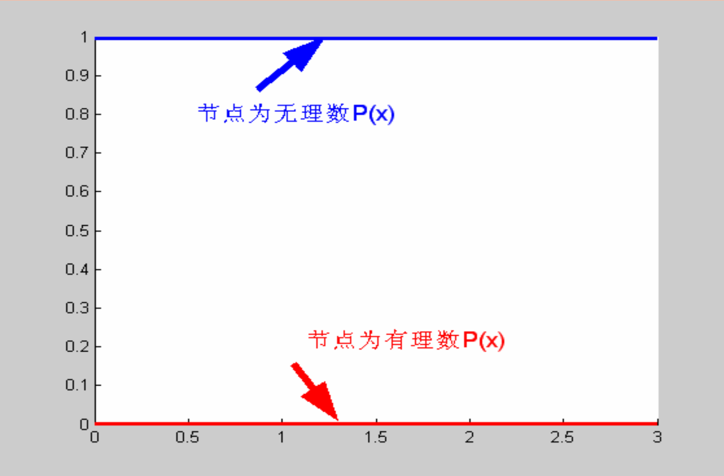
(A) 狄里克莱(Dirichlet)函数

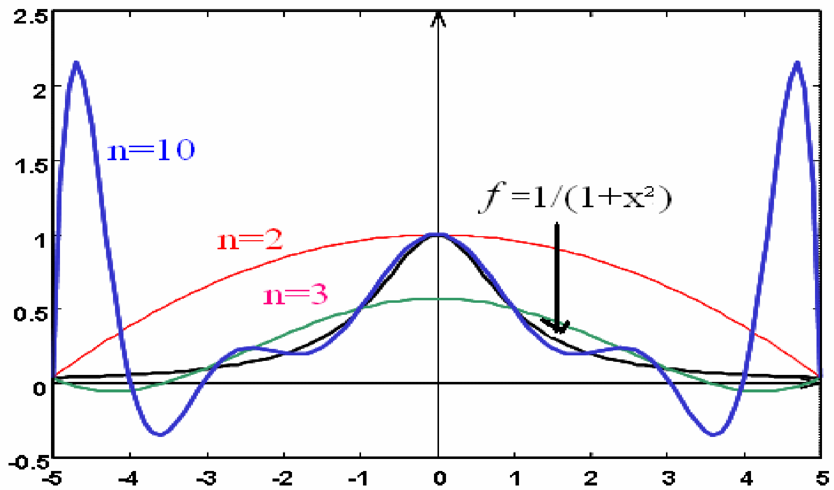
$$f(x)=\begin{cases} 0 & x\in Q \\ 1 & x\notin Q \end{cases}$$

如果取插值节点为有理数时： $P(x)=0 \quad \forall x\in R$

如果取插值节点为无理数时： $P(x)=1 \quad \forall x\in R$

插值多项式P的图象如左下：(逼近函数效果极差)





(B) 龙格(Runge)函数

将区间[-5,5]分成 n 等分，以$P_n(x)$表示取 n+1个等分的插值多项式，右上图给出了$P_2(x)$、$P_3(x)$、$P_{10}(x)$的图象：

可以看出，随着插值节点数增加，插值多项式的次数也相应增加，而对于高次插值容易带来剧烈振荡，带来数值不稳定；越靠近端点逼近的效果越差(Runge现象)。

因此，既要增加插值结点，减小插值区间，又要不增加插值多项式的次数以减少误差，我们可以采用分段插值的办法。

3 分段线性插值

分段线性插值问题的提出

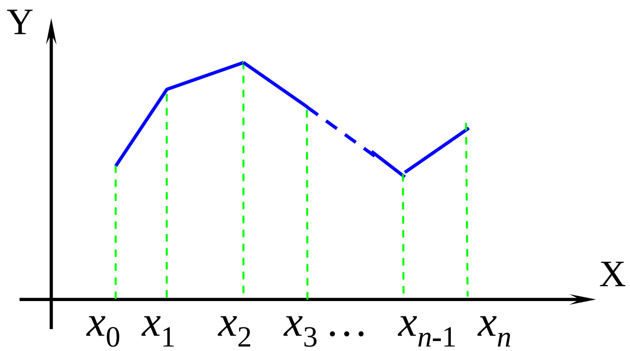
给定区间[a, b]，将其分割成$a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b$， 已知函数$y=f(x)$在这些插值结点的函数值为$y_k=f(x_k)$，$k=0,1,\cdots,n$

求一个分段函数$P(x)$， 使其满足：

(1) $P(x_k)=y_k$， $k=0,1,\cdots,n$；

(2) 在每个区间$[x_k,x_{k+1}]$上， $P(x)$是 个一次函数；

(3) 在区间$[a,b]$上， $P(x)$为连续函数。



易知，$P(x)$是个折线函数，在每个区间$[x_k,x_{k+1}]$，$(k=0,1,\cdots,n-1)$上

$$P(x)=\frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}y_k+\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}y_{k+1}$$

于是，$P(x)$ 在$[a, b]$上是连续的，但其一阶导数是不连续的(即不光滑的)。

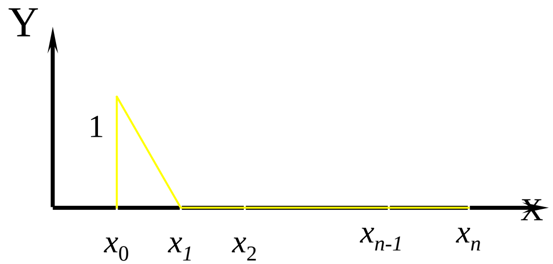
4 分段线性函数的基函数

我们从整体上来构造分段线性函数的基函数。每个插值结点上所对应的插值基函数 $l_i(x)$ 应当满足：

(1) $l_i(x)$是分段线性函数；

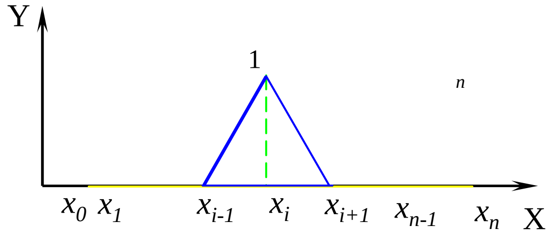
(2) $l_i(x_k)=\begin{cases}1 & k=i\\ 0 & k\neq i\end{cases}$

如：$l_0(x)=\begin{cases}\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1} & x\in[x_0,x_1]\\ 0 & \text{在其它点上}\end{cases}$

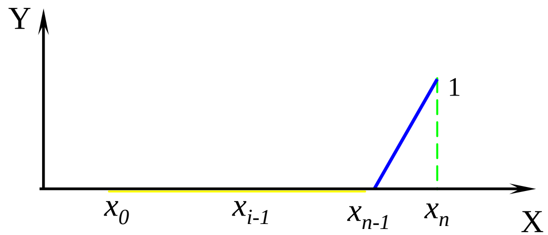


对于 $i=1,\cdots,n-1,$

$$l_i(x)=\begin{cases}\dfrac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x\in[x_{i-1},x_i]\\[2ex] \dfrac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}} & x\in[x_i,x_{i+1}]\\[2ex] 0 & x\notin[x_{i-1},x_{i+1}]\end{cases}$$



$$l_n(x)=\begin{cases}\dfrac{x-x_{n-1}}{x_n-x_{n-1}} & x\in[x_{n-1},x_n]\\[2ex] 0 & x\notin[x_{n-1},x_n]\end{cases}$$



于是， $P(x)=\sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)$。

注意：此表达式在区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上，只有 $l_k(x)$ ，$l_{k+1}(x)$ 是非零的，其它基函数均为零，即 $P(x)=y_k l_k(x)+y_{k+1} l_{k+1}(x)$ 。

5 例题

已知函数 $y=f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$ 在区间[0, 5]上取等距插值节点(如下表)，求区间上分段线性插值函数，并利用它求出 $f(4.5)$ 近似值。

于是，$P(x)=\sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x)$。

注意：此表达式在区间 $[x_k, x_{k+1}]$上，只有 $l_k(x)$，$l_{k+1}(x)$ 是非零的，其它基函数均为零，即 $P(x)=y_k l_k(x)+y_{k+1} l_{k+1}(x)$。

5 例题

已知函数 $y=f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$ 在区间[0, 5]上取等距插值节点（如下表），求区间上分段线性插值函数，并利用它求出 $f(4.5)$近似值。

x_i	0	1	2	3	4	5
y_i	1	0.5	0.2	0.1	0.05882	0.03846

解：在每个分段区间 $[k,k+1]$ 上，

$$P(x)=\frac{x-(k+1)}{k-(k+1)}y_k+\frac{x-k}{(k+1)-k}y_{k+1}$$

$$=-y_k(x-k-1)+y_{k+1}(x-k)$$

于是

$$P(x)=\begin{cases}-(x-1)+0.5x, & x\in[0,1]\\ -0.5(x-2)+0.2(x-1), & x\in[1,2]\\ -0.2(x-3)+0.1(x-2), & x\in[2,3]\\ -0.1(x-4)+0.05882(x-3), & x\in[3,4]\\ -0.05882(x-5)+0.03846(x-4), & x\in[4,5]\end{cases}$$

$$P(4.5)=-0.05882\times(4.5-5)+0.03846\times(4.5-4)=0.04864$$

实际值：$f(4.5)=0.047058823529\,41$

当n=7时， $P(4.5)$=0.04762270321996

当n=10时，$P(4.5)$=0.04705882352941

由此可见，对于光滑性要求不高的插值问题，分段线性插值的效果非常好！计算也简单！

根据拉格朗日一次插值函数的余项，可以得到分段线性插值函数的插值误差估计：

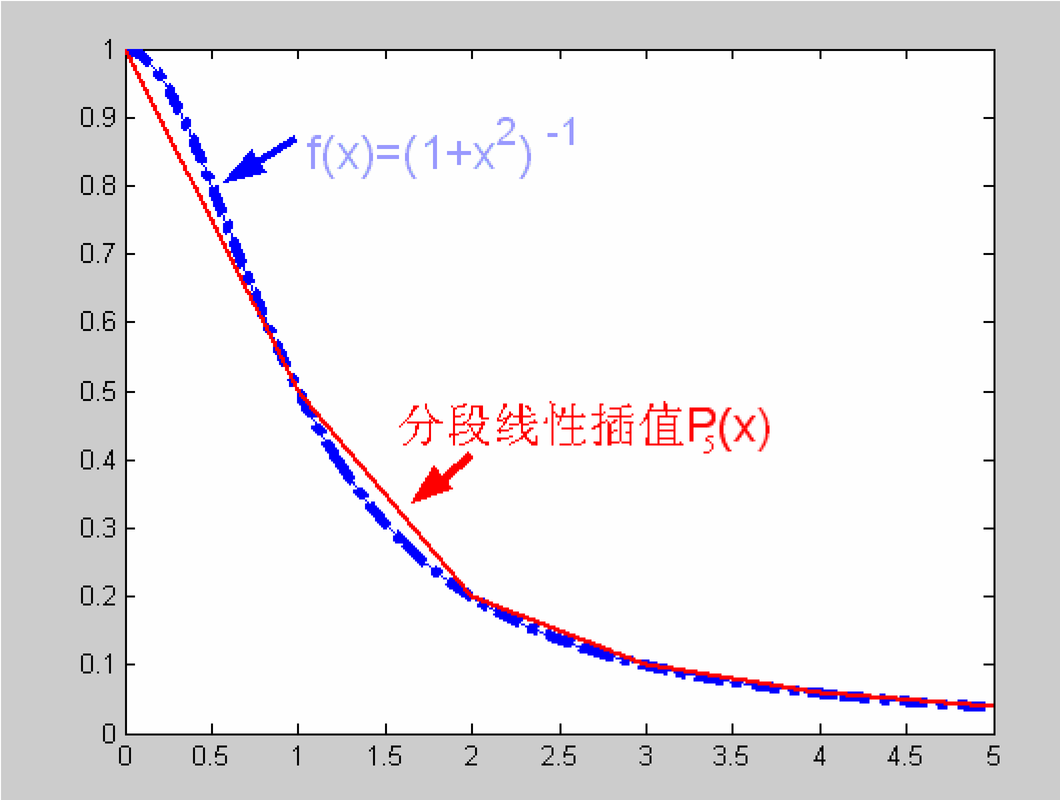
对$\boldsymbol{x}\in[a, b]$，当$\boldsymbol{x}\in[x_k, x_{k+1}]$时，

$$R(x)=\frac{1}{2}f''(\xi)(x-x_k)(x-x_{k+1}) \quad 则 \ |R(x)|\le \frac{h^2}{8}M$$

其中

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

于是可以加密插值结点，缩小插值区间，使h减小，从而减小插值误差。



§4.6　三次样条插值

高次插值函数可以保证曲线的光滑性，但计算量大，有剧烈振荡，数值稳定性差；

而分段线性插值在分段点上仅连续而不光滑(导数不连续)，这往往不能满足工程设计的需要。

样条函数可以同时解决这两个问题，使插值函数既是低阶分段函数，又是光滑的函数。

1 样条函数的概念：

1：在[a, b]上取n+1个插值结点 $a=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_n=b$，已知函数 $y=f(x)$ 在这n+1个点的函数值为 $y_k=f(x_k)$，则

在[a, b]上函数$y=f(x)$的m次样条插值函数$S(x)$满足：

(1) $S(x)$在(a, b)上直到m-1阶导数连续；

(2) $S(x_k)=y_k$， $k=0,1,\cdots,n$；

(3) 在区间$[x_k, x_{k+1}](k=0,1,\cdots,n-1)$上，$S(x)$是$m$次多项式。

2：三次样条函数

在[a, b]上函数 $y=f(x)$ 的三次样条插值函数$S(x)$满足：

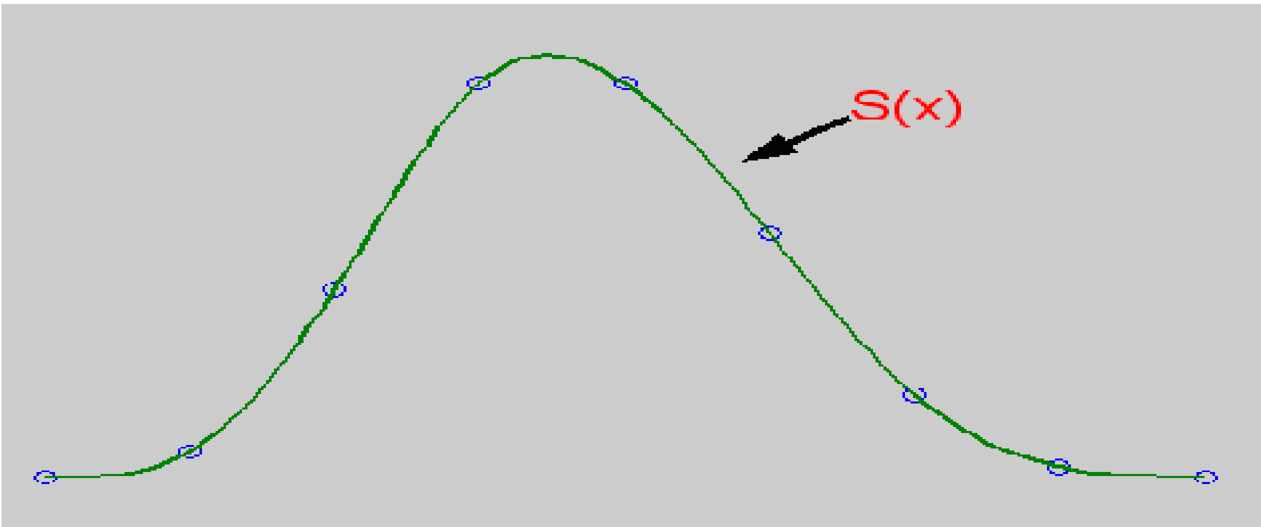
(1) $S(x)$在(a, b)上0、1、2阶导数连续；即

$$S(x_k-0)=S(x_k+0)\ ,\ \ S'(x_k-0)=S'(x_k+0)\ ,\ \ S''(x_k-0)=S''(x_k+0)$$

$$k=1,2,\cdots,n-1$$

(2) $S(x_k)=y_k$， $k=0,1,\cdots,n$ ；

(3) 在区间 $[x_k,x_{k+1}](k=0,1,\cdots,n-1)$ 上，$S(x)$是三次多项式。



2 三次样条函数的计算

由二阶导数连续，设$S''(x_k)=m_k$，$k=0,1,\cdots,n$，m_k 是未知、待定的数。

因为$S(x)$是分段三次多项式，则$S''(x)$是分段一次多项式，在每个区间$[x_k,x_{k+1}]$内，

$$S''(x)=\frac{x_{k+1}-x}{x_{k+1}-x_k}m_k+\frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}m_{k+1}$$

记 $h_k=x_{k+1}-x_k$，则

$$S''(x)=\frac{x_{k+1}-x}{h_k}m_k+\frac{x-x_k}{h_k}m_{k+1}$$

将上式在区间$[x_k,x_{k+1}]$上积分两次，并且由$S(x_k)=y_k$，$S(x_{k+1})=y_{k+1}$来确定两个积分常数。

当$x\in[x_k,x_{k+1}]$时，

$$S(x)=-\frac{(x-x_{k+1})^3}{6h_k}m_k+\frac{(x-x_k)^3}{6h_k}m_{k+1}-(y_k-\frac{h_k^2}{6}m_k)\frac{x-x_{k+1}}{h_k}+(y_{k+1}-\frac{h_k^2}{6}m_{k+1})\frac{x-x_k}{h_k}$$

利用$S(x)$一阶导数连续的性质，对上式求导，得：

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

在上式中，令$x=x_k$，得:

$$S'(x_k+0)=-\frac{h_k}{6}m_{k+1}-\frac{h_k}{3}m_k+\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}$$

将上式中的***k*** 换成 ***k*-1**，得$S'(x)$ 在$[x_{k-1},x_k]$ 上的表达式，用$x=x_k$ 代入，

$$S'(x_k-0)=\frac{h_{k-1}}{6}m_{k-1}+\frac{h_{k-1}}{3}m_k+\frac{y_k-y_{k-1}}{h_k}$$

而 $S'(x_k+0)=S'(x_k-0)$ ，

联立上述两式，得到关于 m_k 的方程:

$$\frac{h_{k-1}}{6}m_{k-1}+\frac{h_k+h_{k-1}}{3}m_k+\frac{h_k}{6}m_{k+1}=\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}-\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}}\quad k=1,2,\cdots,n-1$$

两边乘以 $\frac{6}{h_k+h_{k-1}}$，得:

$$\frac{h_{k-1}}{h_k+h_{k-1}}m_{k-1}+2m_k+\frac{h_k}{h_k+h_{k-1}}m_{k+1}=\frac{6}{h_k+h_{k-1}}\left(\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}-\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}}\right)$$

上式中，等式左边含未知量m_{k-1}，m_k，m_{k+1}，等式右边y_{k-1}，y_k，y_{k+1}是已知的，令

$$\lambda_k=\frac{h_{k-1}}{h_k+h_{k-1}},\quad \mu_k=\frac{h_k}{h_k+h_{k-1}}=1-\lambda_k,\quad C_k=\frac{6}{h_k+h_{k-1}}\left(\frac{y_{k+1}-y_k}{h_k}-\frac{y_k-y_{k-1}}{h_{k-1}}\right)$$

则得：

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

这是含有n+1个未知量$m_0,m_1,\cdots,m_n$，共有n-1个方程组成的线性方程组。欲确定方程的解，尚缺2个方程。因此，求三次样条函数还要2个附加条件。

通常有如下三种给法：

① 给出边界端点的一阶导数值：

$S'(x_0)=y'_0$，$S'(x_n)=y'_n$；三转角方程。

② 给出边界端点的二阶导数值:

$S''(x_0)=y''_0$，$S''(x_n)=y''_n$；三弯矩方程。

③ 给出导数值：$S''(x_0)=S''(x_n)=0$；自然样条。

3 三转角方程的计算

给出边界端点的一阶导数值：

$$S'(x_0)=y'_0\text{，}\quad S'(x_n)=y'_n\text{。}$$

利用前面已推导的公式，

当 $x\in[x_k,x_{k+1}]$ 时，

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

取 $k=0$， $x=x_0$， 得：

$$y'_0=-\frac{h_0}{3}m_0-\frac{h_0}{6}m_1+\frac{y_1-y_0}{h_0}$$

取 $k=n-1$， $x=x_n$， 得：

$$y'_n=\frac{h_{n-1}}{6}m_{n-1}+\frac{h_{n-1}}{3}m_n+\frac{y_n-y_{n-1}}{h_{n-1}}$$

移项得

$$\begin{cases} 2m_0 + m_1 = \dfrac{6}{h_0}\left(\dfrac{y_1 - y_0}{h_0} - y_0'\right) = C_0 \\ m_{n-1} + 2m_n = \dfrac{6}{h_{n-1}}\left(y_n' - \dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}}\right) = C_n \end{cases}$$

于是，我们可以建立如下方程组：

$$\begin{cases} 2m_0 \quad +m_1 & =C_0 \\ \lambda_1 m_0 \quad +2m_1 \quad +\mu_1 m_2 & =C_1 \\ \qquad\qquad \cdots \qquad \cdots & \\ \lambda_{n-1} m_{n-2} \quad +2m_{n-1} \quad +\mu_{n-1} m_n & =C_{n-1} \\ m_{n-1} \quad +2m_n & =C_n \end{cases}$$

其系数矩阵是严格对角占优的三对角矩阵：

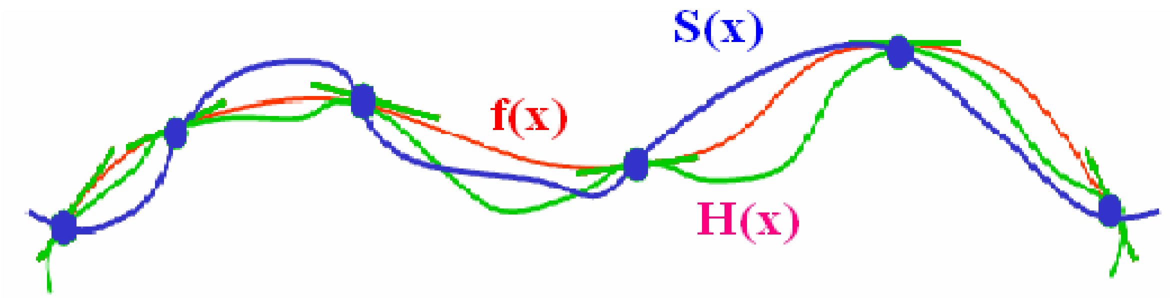
$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ \lambda_1 & 2 & \mu_1 & & & \\ & \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-1} & 2 & \mu_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

从而可以解出 $m_0, m_1, \cdots, m_n$。解出后可以得到三次样条函数的分段表达式，

即当 $x \in [x_k, x_{k+1}]$ 时，

$$S(x) = -\frac{(x-x_{k+1})^3}{6h_k} m_k + \frac{(x-x_k)^3}{6h_k} m_{k+1} - (y_k - \frac{h_k^2}{6} m_k)\frac{x-x_{k+1}}{h_k} + (y_{k+1} - \frac{h_k^2}{6} m_{k+1})\frac{x-x_k}{h_k}$$

注：三次样条插值与Hermite插值的区别。



4 三弯矩方程的计算

附加条件为 $S''(x_0) = m_0$， $S''(x_n) = m_n$。

则方程组为：

$$\begin{cases} 2m_1 + \mu_1 m_2 = C_1 - \lambda_1 m_0 \\ \lambda_2 m_1 + 2m_2 + \mu_2 m_3 = C_2 \\ \lambda_3 m_2 + 2m_3 + \mu_3 m_4 = C_3 \\ \cdots\cdots \\ \lambda_{n-2} m_{n-3} + 2m_{n-2} + \mu_{n-2} m_{n-1} = C_{n-2} \\ \lambda_{n-1} m_{n-2} + 2m_{n-1} = C_{n-1} - \mu_{n-1} m_n \end{cases}$$

其系数矩阵为

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & & & & \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & & & \\ & \lambda_3 & 2 & \mu_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_{n-2} & 2 & \mu_{n-2} \\ & & & & \lambda_{n-1} & 2 \end{bmatrix}$$

这是一个三对角矩阵，由于 $\lambda_k + \mu_k = 1 < 2$，因而它是严格对角占优的。原方程组是个三对角方程组，可以用追赶法求解。

5 算例

例： 已知 $y = f(x)$ 的函数值为

x	1	2	4	5
Y	1	3	4	2
y'	0			0

求函数的三次样条插值。

解：$h_0=1$， $h_1=2$， $h_2=1$，

$$\lambda_1=\frac{1}{1+2}=\frac{1}{3},\quad \mu_1=1-\lambda_1=\frac{2}{3},\quad \lambda_2=\frac{2}{1+2}=\frac{2}{3},\quad \mu_2=1-\lambda_2=\frac{1}{3};$$

$$C_1=\frac{6}{h_0+h_1}\left(\frac{y_2-y_1}{h_1}-\frac{y_1-y_0}{h_0}\right)=\frac{6}{1+2}\left(\frac{4-3}{2}-\frac{3-1}{1}\right)=-3\ ,$$

$$C_2=\frac{6}{h_1+h_2}\left(\frac{y_3-y_2}{h_2}-\frac{y_2-y_1}{h_1}\right)=\frac{6}{2+1}\left(\frac{2-4}{1}-\frac{4-3}{2}\right)=-5\ ;$$

建立方程组

$$\begin{bmatrix}2 & 2/3\\ 2/3 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}m_1\\ m_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-3\\ -5\end{bmatrix}$$

解得

$$m_1=-\frac{3}{4},\quad m_2=-\frac{9}{4}$$

从而得到函数的三次样条插值；

当$x\in[x_0,x_1]=[1,\ 2]$时，

$$S(x)=-\frac{(x-2)^3}{6}\times 0+\frac{(x-1)^3}{6}\times\left(-\frac{3}{4}\right)-\left(1-\frac{1}{6}\times 0\right)\frac{x-2}{1}+\left(3-\frac{1}{6}\times\left(-\frac{3}{4}\right)\right)\frac{x-1}{1}$$

$$=-\frac{1}{8}x^3+\frac{3}{8}x^2+\frac{7}{4}x-1$$

- 当$x\in[x_1,x_2]=[2,\ 4]$时，

$$S(x)=-\frac{(x-4)^3}{6\times 2}\times\left(-\frac{3}{4}\right)+\frac{(x-2)^3}{6\times 2}\times\left(-\frac{9}{4}\right)-\left(3-\frac{2^2}{6}\times\left(-\frac{3}{4}\right)\right)\frac{x-4}{2}+\left(4-\frac{2^2}{6}\times\left(-\frac{9}{4}\right)\right)\frac{x-2}{2}$$

$$=-\frac{1}{8}x^3+\frac{3}{8}x^2+\frac{7}{4}x-1$$

- 当$x\in[x_2,x_3]=[4,\ 5]$ 时，

$$S(x)=-\frac{(x-5)^3}{6}\times\left(-\frac{9}{4}\right)+\frac{(x-4)^3}{6}\times 0-\left(4-\frac{1}{6}\times\left(-\frac{9}{4}\right)\right)\frac{x-5}{1}+\left(2-\frac{1}{6}\times 0\right)\frac{x-4}{1}$$

$$=\frac{3}{8}x^3-\frac{45}{8}x^2+\frac{103}{8}x-33$$

- 所以

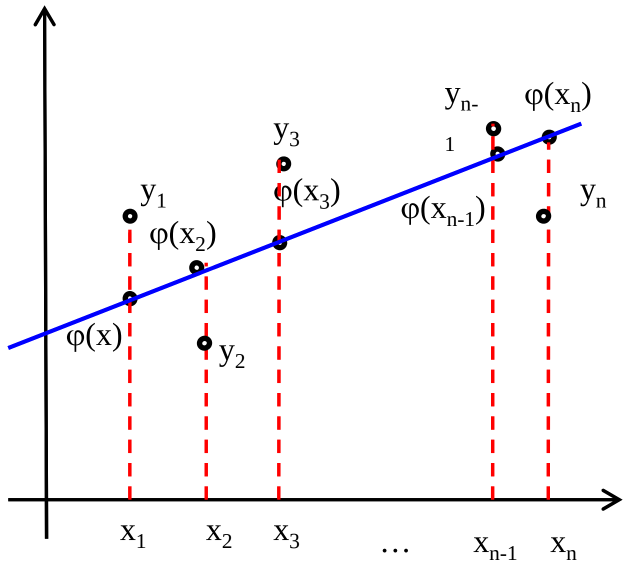
$$S(x)=\begin{cases}-\frac{1}{8}x^3+\frac{3}{8}x^2+\frac{7}{4}x-1 & (1\le x\le 2)\\ -\frac{1}{8}x^3+\frac{3}{8}x^2+\frac{7}{4}x-1 & (2\le x\le 4)\\ \frac{3}{8}x^3-\frac{45}{8}x^2+\frac{103}{8}x-33 & (4\le x\le 5)\end{cases}$$

§ 4.7 曲线拟合的最小二乘法

1 拟合问题的数学提法

通过观测、测量或试验得到某一函数在 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的函数值 $y_1, y_2, \cdots, y_n$。我们可以用插值的方法对这一函数进行近似，而插值方法要求所得到的插值多项式经过已知的这n个插值结点；在n比较大的情况下，插值多项式往往是高次多项式，这也就容易出现振荡现象；虽然在插值结点上没有误差，但在插值结点之外插值误差变得很大，从整体上看，插值逼近效果将变得很差。于是，我们采用曲线拟合的方法。

所谓曲线拟合是求一个简单的函数$y=\varphi(x)$，例如$\varphi(x)$是一个低次多项式，这儿不要求$y=\varphi(x)$通过已知的这n个点，而是要求在整体上“尽量好”的逼近原函数. 这时，在每个已知点上就会有误差$y_k-\varphi(x_k)$，$k=1,2,\cdots,n$，数据拟合就是从整体上使误差$y_k-\varphi(x_k)$，$k=1,2,\cdots,n$尽量的小一些。



如果要求 $\sum_{k=1}^{n}(y_k-\varphi(x_k))$ 达到最小，因误差 $y_k-\varphi(x_k)$ 可正可负，本来很大的误差可能会正负抵消，这样的提法不合理。为防止正负抵消，可以要求 $\sum_{k=1}^{n}|y_k-\varphi(x_k)|$ 达到最小，但是由于绝对值函数不可以求导，分析起来不方便，求解也很难。

为了既能防止正负抵消，又能便于我们分析、求解，提出如下问题：

求一个低次多项式 $\varphi(x)$，使得 $Q=\sum_{k=1}^{n}(y_k-\varphi(x_k))^2$ 达到最小，此问题便是一个曲线拟合的最小二乘问题。

1 直线拟合（一次函数）

a) 问题的提法

通过观测、测量或试验得到某一函数在 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的函数值 $y_1, y_2, \cdots, y_n$，即得到n组数据 (x_1, y_1)， $(x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ 如果这些数据在直角坐标系中近似地分布在一条直线上，我们可以用直线拟合的方法。

问题： 已知数据 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ ，求一个一次多项式 $\varphi(x) = a + bx$（实际上，就是求a, b），使得

$Q(a,b) = \sum_{k=1}^{n} (y_k - \varphi(x_k))^2 = \sum_{k=1}^{n} (y_k - a - bx_k)^2$ 达到最小。

注意到 $Q(a,b)$ 中， x_k, y_k 均是已知的，而a, b是未知量是未知量a, b的二元函数，利用高等数学中求二元函数极小值(最小值)的方法，因此，上述问题转化为求解下列方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial b} = 0 \end{cases}$$

b) 正则方程组

由 $Q(a,b)=\sum_{k=1}^{n}\left(y_k-a-bx_k\right)^2$ 得：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial a}=-2\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)=0\\ \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial b}=-2\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)x_k=0\end{cases}$$

因为

$$\sum_{k=1}^{n}a=na \qquad \sum_{k=1}^{n}bx_k=a\sum_{k=1}^{n}x_k$$

得到如下的正则方程组

$$\begin{cases}na+\left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)b=\sum_{k=1}^{n}y_k\\ \left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)a+\left(\sum_{k=1}^{n}x_k^2\right)b=\sum_{k=1}^{n}x_ky_k\end{cases}$$

这是个关于a, b的二元一次方程组，称其为最小二乘问题的正则方程组。解得a, b，便得到最小二乘问题的拟合函数 $y=a+bx$。

c) 算例

例1：已知10对数据如下表，利用最小二乘法求拟合曲线 $y=a+bx$ 。

x_k	2	4	4	4.6	5	5.2	5.6	6	6.6	7
y_k	5	3.5	3	2.7	2.4	2.5	2	1.5	1.2	1.2

解：先列表来计算四个：

$$\sum x_k, \sum x_k^2, \sum y_k, \sum x_k y_k$$

	x_k	y_k	x_k^2	$x_k y_k$
	2	5	4	10
	4	3.5	16	14
	4	3	16	12
	4.6	2.7	21.16	12.46
	5	2.4	25	12
	5.2	2.5	27.04	13
	5.6	2	31.36	11.2
	6	1.5	36	9
	6.6	1.2	43.56	7.92
	7	1.2	49	8.4
$\sum$	50	25	269.12	109.94

形成正则方程组

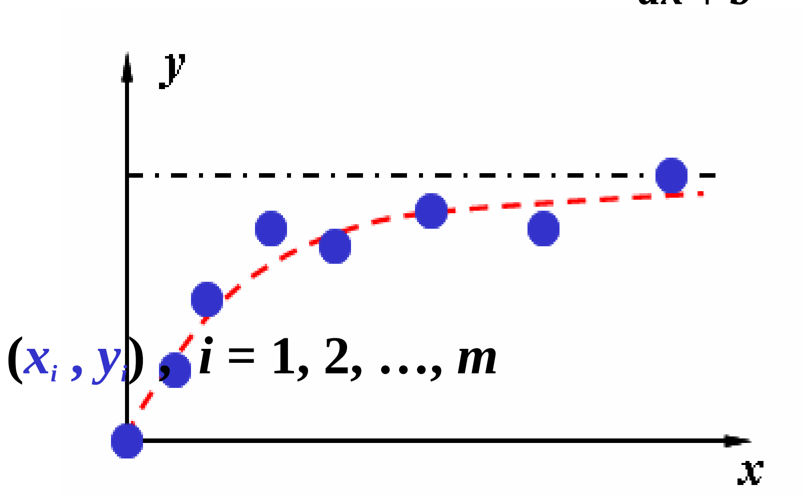
$$\begin{cases} 10a + 50b = 25 \\ 50a + 269.12b = 109.94 \end{cases}$$

解得

$$a = 6.4383 \quad , \quad b = -0.7877$$

于是，最小二乘拟合一次函数为 $y = 6.4383 - 0.7877x$ 。

例2: 已知(x_i, y_i)，i= 1, 2, …, m，如图所示，如何构造拟合曲线 $P(x) = \dfrac{x}{ax+b}$?



分析：由于 $y \approx P(x) = \dfrac{x}{ax+b}$ 。

于是可令： $y' = \dfrac{1}{y} \quad x' = \dfrac{1}{x}$

由此 $y' = a + bx'$ 。这是个线性问题.

将 $(x_i \; y_i)$ 化为 $(x_i' \; y_i')$ 后易解a和b。