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
- 本文主要介绍了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

$$f(x_1),\ f'(x_1),\cdots,\ f^{(\alpha_1-1)}(x_1);$$
$$f(x_2),\ f'(x_2),\cdots,\ f^{(\alpha_2-1)}(x_2); \qquad \text{(4-1)}$$
$$\cdots \quad \cdots$$
$$f(x_n),\ f'(x_n),\cdots,\ f^{(\alpha_n-1)}(x_n),$$

构造一个简单易算的函数，使其满足下述条件:

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

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**。

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

4.1.2 插值函数的存在唯一性、插值基函数

设简单函数类**S**是连续函数空间**C**$[a,b]$的n维子空间，$\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是S的一组基底函数，即 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 在$[a,b]$上线性无关，且对任意 $\varphi(x)\in S$ ，有且仅有一组系数 $c_1,c_2,\cdots,c_n\in\mathbf{R}$，使得 $\varphi(x)=\sum_{k=1}^{n}c_k\varphi_k(x)$

下面以（4-1）中所有 $\alpha_i=1$ $(i=1,2,\cdots,n)$ 的特殊情形为例，介绍插值函数的存在唯一性。 此时插值条件为

$$p(x_i)=f(x_i),\quad i=1,2,\cdots,n \tag{4-3}$$

而插值问题就是在S 中寻求一个函数 $p(x)=\sum_{k=1}^{n}c_k\varphi_k(x)$， 使得$p(x)$ 满足插值条件（4-3）。 该问题等价于通过求解方程组

$$\sum_{k=1}^{n}c_k\varphi_k(x_i)=f(x_i),\quad i=1,2,\cdots,n \tag{4-4}$$

确定一组系数 $c_1,c_2,\cdots,c_n$

定义4.1 设 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是$[a,b]$上的连续函数，并且对$[a,b]$上的任意n个互异点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$，行列式

$$D[x_1,x_2,\cdots,x_n]=\begin{vmatrix}\varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1)\\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \cdots & \varphi_n(x_2)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \cdots & \varphi_n(x_n)\end{vmatrix}\neq 0 \qquad \textbf{(4-5)}$$

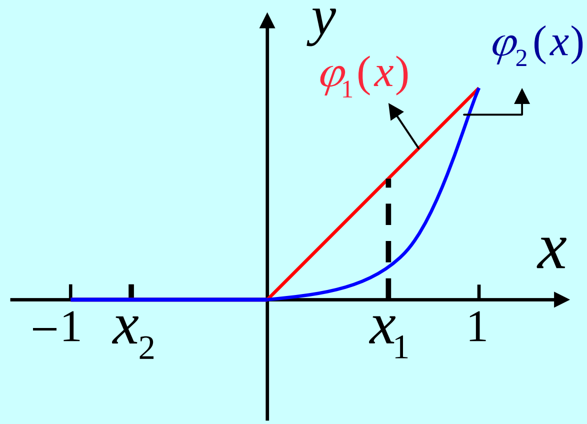
则称 $\varphi_1(x),\varphi_2(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 在$[a,b]$上满足**Haar**条件。

注：并不是任何线性无关的连续函数都满足 Haar**条件。**

例如，取[-1,1]上的连续函数

$$\varphi_1(x)=\begin{cases}0 & -1\le x<0\\ x & 0\le x\le 1\end{cases}\qquad \varphi_2(x)=\begin{cases}0 & -1\le x<0\\ x^2 & 0\le x\le 1\end{cases}$$

显然 $\varphi_1(x)$ 和 $\varphi_2(x)$ 线性无关，但是不满足Haar条件。



即存在x_1、x_2使得

$$D[x_1, x_2] = \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) \\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ x_2 & x_2^2 \end{vmatrix} = 0$$

由线性代数的基本知识，易得下述定理.

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 $y_1, y_2, \cdots, y_n$，亦即 $y_i = f(x_i)$ $(i=1,2,\cdots,n)$ 又设S的基底函数 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在$[a,b]$上满足**Haar**条件， 则存在唯一的函数 $p(x)=\sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k(x) \in S$，满足插值条件

$$p(x_i) = y_i, \qquad i=1,2,\cdots,n。$$

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

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

$l_k(x)$ (k=1, 2, …， n)称为插值基函数。 易证 $l_1(x), l_2(x), \cdots, l_n(x)$ 也是S的一组基底函数。

利用插值函数的存在唯一性，可证明

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。

由定理4.1可知，对于插值问题（1）：

$$\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \end{array}$$

存在唯一的函数$l_1(x)$满足如下的插值条件:

$$l_1(x_1)=1=y_1\,,\quad l_1(x_i)=0=y_i\,,\quad i=2,3,\cdots,n\,。$$

对于插值问题（2）：

$$\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \end{array}$$

存在唯一的函数$l_2(x)$满足如下的插值条件:

$$l_2(x_2)=1=y_2\,,\quad l_1(x_i)=0=y_i\,,\quad i=1,3,\cdots,n\,。$$

如此定义下去，对于插值问题（n）：

$$\begin{array}{cccc} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{array}$$

存在唯一的函数$l_n(x)$满足如下的插值条件：

$$l_n(x_1)=1=y_n\,,\quad l_n(x_i)=0=y_i\,,\ i=1,3,\cdots,n-1。$$

这样就得到一组唯一的函数 $l_k(x)$ (k=1, 2, …，n)称为插值基函数。

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

且对于插值问题：$p(x_i)=y_i$，$i=1,2,\cdots,n$，有相应的插值函数：

$$p(x)=\sum_{k=1}^{n}y_k l_k(x)$$

返回本节

4.1.2 多项式插值基本概念

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

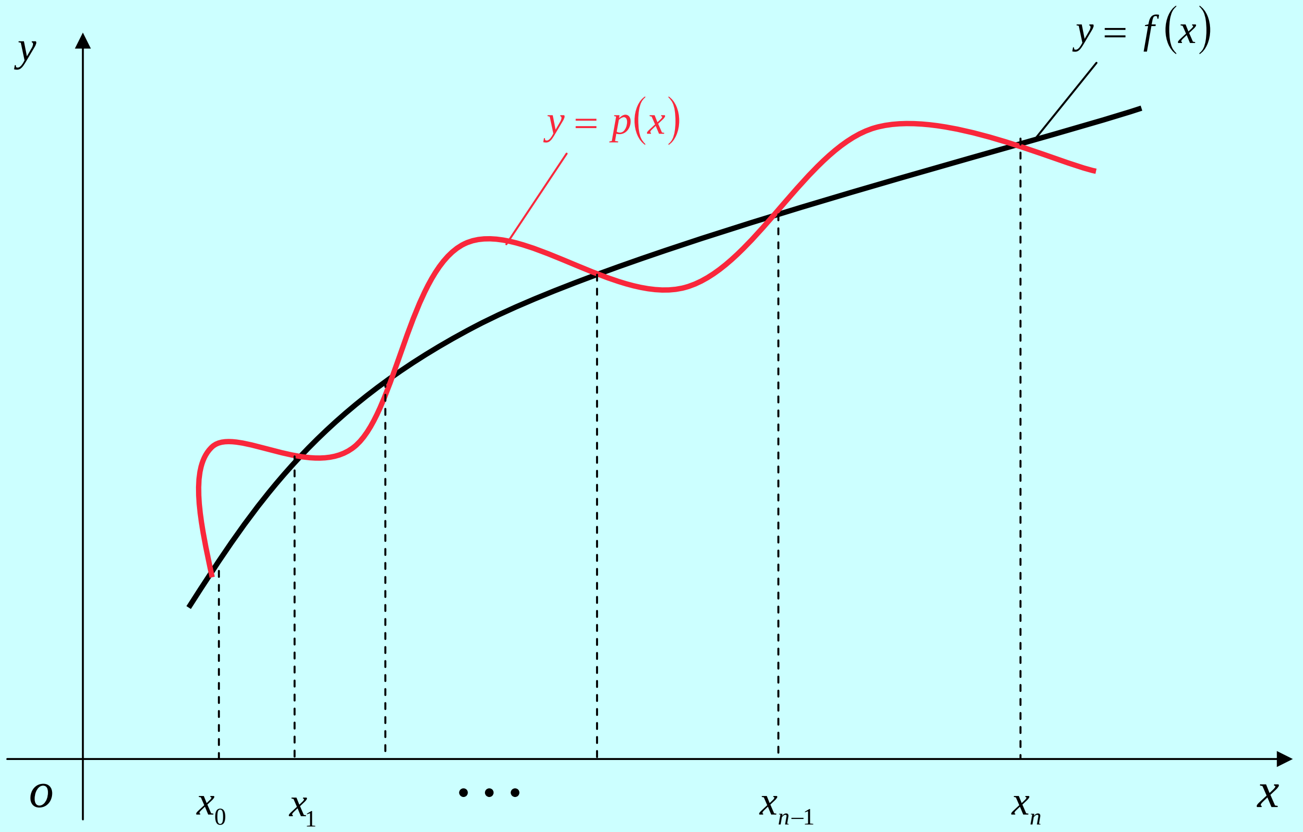
$$a \le x_0 < \cdots < x_n \le b$$

处的函数值 $y_0\ ,\ y_1\ ,\ \cdots\ ,\ y_n$

我们的目标是找一个简单的函数，例如多项式函数 $p_n(x)$ ，使之满足条件

$$p_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \cdots, n \qquad \textbf{(4-3)}$$

即在给定点 x_i 处，$p(x)$ 与 $f(x)$ 是相吻合的。


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

通常把 $x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n$ 称为插值节点，

$p(x)$ 称为 $f(x)$ 的插值多项式（函数），

$f(x)$ 称为被插函数，$[a,b]$ 称为插值区间，

条件（**4-3**）称为插值条件**,** 求 $p(x)$ 的过程称为插值法。

例1, 只需取 $\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$, $\cdots$, $\varphi_n(x)=x^n$

且在**[**a,b**]**上满足**Haar**条件， 则有

$$p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

由插值条件可得

$$\begin{cases} a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \cdots + a_1 x_0 + a_0 = f(x_0) \\ a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \cdots + a_1 x_1 + a_0 = f(x_1) \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ a_n x_n^n + a_{n-1} x_n^{n-1} + \cdots + a_1 x_n + a_0 = f(x_n) \end{cases}$$

显然，其系数是满足Vandermorde（范德蒙）行列式

$$V_n[x_1,x_2,\cdots,x_n]=\begin{vmatrix}1 & x_0 & \cdots & x_0^n\\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}=\prod_{i>j}\left(x_i-x_j\right)=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=0}^{i-1}\left(x_i-x_j\right)\neq 0$$

因此，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 $p_n(x)$ ，满足

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

这实际上就证明了代数多项式插值的存在唯一性。

返回本节

4.2.1 Lagrange插值公式

考虑n=1的情形，给定 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ 且 $x_0 \neq x_1$

构造一次多项式 $p_1(x)$，满足条件：$p_1(x_0) = y_0$，$p_1(x_1) = y_1$

由直线的两点式可知： $\dfrac{(y - y_0)}{(y_1 - y_0)} = \dfrac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}$，解之，得

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

进一步可改写成

$$p_1(x) = l_0(x) y_0 + l_1(x) y_1$$

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

分别称其为关于节点 x_0 和 x_1 的插值基函数。

并且具有性质：

$$l_0(x_0)=\frac{(x_0-x_1)}{(x_0-x_1)}=1,\quad l_0(x_1)=\frac{(x_1-x_1)}{(x_0-x_1)}=0\,,\quad l_1(x_0)=\frac{(x_0-x_0)}{(x_1-x_0)}=0\,,\quad l_1(x_1)=\frac{(x_1-x_0)}{(x_1-x_0)}=1$$

从而，$p_1(x)$ 满足插值条件条件：$p_1(x_1)=y_1$ $p_1(x_0)=y_0$

故 $p_1(x)$ 即为满足条件的一次**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;
- 插值基函数决定着插值多项式满足插值条件;
- 插值基函数与插值节点的次序无关。

考虑 $n=2$的情形， 给定 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2)$ 且 $x_0 \neq x_1 \neq x_2$

构造二次多项式 $p_2(x)$，满足条件：

$$p_2(x_0) = y_0, \quad p_2(x_1) = y_1, \quad p_2(x_2) = y_2$$

进一步写成 $p_2(x) = l_0(x)y_0 + l_1(x)y_1 + l_2(x)y_2$

其中 $l_i(x)$ $i = 0, 1, 2$，均为二次的插值基函数多项式，且满足

$$l_0(x_0) = 1 \qquad l_0(x_1) = 0 \qquad l_0(x_2) = 0$$

$$l_1(x_1) = 1 \qquad l_1(x_1) = 0 \qquad l_1(x_2) = 0$$

$$l_2(x_2) = 1 \qquad l_2(x_0) = 0 \qquad l_2(x_1) = 0$$

下面我们 $l_0(x)$ 以为例来确定出： $l_0(x), l_1(x), l_2(x)$

由条件 $l_0(x_1)=0$ $l_0(x_2)=0$ 可知，x_1，x_2 是 $l_0(x)$ 的两个根，从而

$$l_0(x)=A(x-x_1)(x-x_2)$$

其中**A**为待定系数。又由 $l_0(x_0)=1$，可得

$$1=A(x_0-x_1)(x_0-x_2)\Rightarrow A=\frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

从而，

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

同理，

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

进而满足条件的二次**Lagrange插值**多项式为：

$$p_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}y_0+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}y_1+\frac{(x-x_1)(x-x_0)}{(x_2-x_1)(x_2-x_0)}y_2$$

设 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 是 $[a,b]$ 上的 $n+1$ 个互异点，取

$$l_j(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)} \qquad (4\text{-}6)$$

$$=\frac{w_{n+1}(x)}{(x-x_j)w'(x_j)} \qquad j=0,1,\cdots,n.$$

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

显然 $l_j(x_i)=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases} \qquad i,j=0,1,\cdots,n.$ (4-7)

$l_j(x_i)\,(j=0,1,\cdots,n)$ 称为n次**Lagrange插值基函数**。

从而

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

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。

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 $p_2(x)$，并利用 $p_2(x)$ 计算出 $f(1.5)$的近似值。

解 首先计算插值基函数：

$$l_0(x)=\frac{(x-2)(x-3)}{(1-2)(1-3)}=\frac{1}{2}(x-2)(x-3),\quad l_1(x)=\frac{(x-1)(x-3)}{(2-1)(2-3)}=-(x-1)(x-3),$$

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

$$\begin{aligned}p_2(x)&=l_0(x)y_0+l_1(x)y_1+l_2(x)y_2\\&=\frac{1}{2}(x-2)(x-3)\times(-1)+[-(x-1)(x-3)\times(-1)]+\frac{1}{2}(x-1)(x-2)\times 1\\&=-\frac{1}{2}\times(x^2-5x+6)+(x^2-4x+3)+\frac{1}{2}\times(x^2-3x+2)=x^2-3x+1\end{aligned}$$

于是 $f(1.5)\approx p_2(1.5)=\left(\frac{3}{2}\right)^2-3\times\frac{3}{2}+1=-1.25.$

返回本节

4.2.2 Newton插值公式

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。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”，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 $f_0, f_1, \cdots, f_n$，将的基函数取作：

$$\begin{cases} \varphi_0(x)=1, \\ \varphi_j(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})=\prod_{i=0}^{j-1}(x-x_i), \\ j=1,2,\cdots,n \end{cases} \tag{4-8}$$

则可将 n 次插值多项式写成如下形式：

$$\begin{aligned} p_n(x) &= \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) \\ &= a_0 + a_1(x-x_0) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \end{aligned} \tag{4-9}$$

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.

例如，$n=1$ 时， $p_1(x)=a_0+a_1(x-x_0)$， 由插值条件:

$$p(x_0)=f_0 \qquad p(x_1)=f_1$$

可得，即

$$p_1(x_0)=a_0=f_0$$

$$p_1(x_1)=f(x_0)+a_1(x_1-x_0)=f(x_1) \Rightarrow a_1=\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

从而

$$p_1(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)$$

$n=2$ 时，应有

$$p_2(x)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)+a_2(x-x_0)(x-x_1)$$

由

$$p_2(x_2)=f(x_0)+\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)+a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1)=f(x_2)$$

得

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

即

$$p_2(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) + \frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{(x_2 - x_0)}(x - x_0)(x - x_1)$$

实际上，由于插值多项式的唯一性，Newton插值多项式只不过是Lagrange插值多项式的另一种表现形式，两者是可以互推的。为得到Newton插值多项式的一般表达式，即

$$a_j, \quad j = 1, \cdots, n$$

的一般表达式，我们给出均差的定义。

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**

$$f[x_i, x_k] = \frac{f_k - f_i}{x_k - x_i} \quad k \neq i \tag{4-11}$$

为 $f(x)$ 关于 x_i, x_k 的**一阶均差（差商）**。称

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

为 $f(x)$ 关于 x_i, x_j, x_k 的**二阶均差（差商）**。称

$$f[x_0, x_1, \cdots, x_k] = \frac{f[x_0, \cdots, x_{k-2}, x_k] - f[x_0, x_1, \cdots, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}} \tag{4-12}$$

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

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

显然，因为由**1°**，可以看出任何两个节点调换顺序，只是意味着上式求和的次序的改变，而其值不变。

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

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:

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

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

从而我们可以构造出 n 次**Newton插值多项式公式:**

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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，

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

故所求的插值多项式为：

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

$$= x^2 + 6x + 3$$

下面给出均差的性质4°的证明。

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

即$p_k(x)$是$f(x)$关于节点组 $x_0, x_1, \cdots, x_k$的k次插值多项式，则插值余项

$$r_k(x) = f(x) - p_k(x)$$

至少有k+1个互异的零点 $x_0, x_1, \cdots, x_k$。反复利用**Rolle**定理，可知在 $\min(x_0, x_1, \cdots, x_k)$和 $\max(x_0, x_1, \cdots, x_k)$ 之间至少有一个ξ，使

$$r_k^{(k)}(\xi) = f^{(k)}(\xi) - p_k^{(k)}(\xi) = 0$$

又由$p_k(x)$的表达式， $p_k^{(k)}(\xi) = k!\, f[x_0, x_1, \cdots, x_k]$ 所以

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

返回本节

4.2.3 插值余项

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

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

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

证 **任取**$x\in[a, b]$,当$x=x_0, x_1,\cdots, x_n$时，公式（4-14）显然成立。以下设 $x\neq x_i$ ($i=0,1, \cdots,n$),视 x 为一个节点，据一阶均差的定义，

$$f(x) = f(x_0) + f[x, x_0](x - x_0) \tag{4-15}$$

并且由

$$f[x, x_0, \cdots, x_{k-1}] = f[x_0, x_1, \cdots, x_k] + f[x, x_0, \cdots, x_k](x - x_k), \tag{4-16}$$

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

将（4-15）递推展开：

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

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

$$=\cdots=$$

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

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

所以

$$r_n(x)=f(x)-p_n(x)$$

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

$$=f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]\omega_{n+1}(x), \qquad (4\text{-}17)$$

由均差的性质**4°**，

$$r_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x), \quad \min(x,x_0,\cdots,x_n)<\xi<\max(x,x_0,\cdots,x_n)$$

特别地，

$$f[x_0,x_1]=f'(\xi_1),\quad f[x,x_0,x_1]=\frac{f''(\xi_2)}{2!},\quad \cdots,\quad f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=\frac{f^{(n)}(\xi_n)}{n!}$$

Newton公式可写成：

$$N_n(x)=f(x_0)+f'(\xi_1)(x-x_0)+\frac{f''(\xi_2)}{2!}(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+\frac{f^{(n)}(\xi_n)}{n!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

其中 $\min(x_0,\cdots,x_n)<\xi_i<\max(x_0,\cdots,x_n)$， $i=1,2,\cdots,n$

若固定x_0, 令$x_1,x_2,\cdots,x_n$一起趋于x_0，那么，

$$N_n(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

Newton公式的极限即为$f(x)$在$x=x_0$点处的**Taylor**级数的前$n+1$项和。

插值余项的应用

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

首先，由 $p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} l_i(x) \cdot 1$ 可知被插值函数应该为 $f(x) \equiv 1$。

由插值余项公式，

$$1 - \sum_{i=0}^{n} l_i(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f(\xi)^{(n+1)}}{(n+1)\,!} \omega_{n+1}(x) \equiv 0 \Rightarrow \sum_{i=0}^{n} l_i(x) \equiv 1。$$

同理，由插值余项公式，

$$x^k - \sum_{i=0}^{n} l_i(x)\, x_i^k = \frac{\left.\left(x^k\right)^{(n+1)}\right|_{x=\xi}}{(n+1)\,!} \omega_{n+1}(x) \equiv 0 \Rightarrow \sum_{i=0}^{n} l_i(x)\, x_i^k = x^k$$

那么，$\sum_{i=0}^{n} l_i(0)\, x_i^k = 0^k = 0$。

练习 取节点 $x_0=1, x_2=4, x_3=9$ ，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:

$$\sqrt{3}\approx p_2(3)=\frac{(3-4)(3-9)}{(1-4)(1-9)}\times 1+\frac{(3-1)(3-9)}{(4-1)(4-9)}\times 2+\frac{(3-1)(3-4)}{(9-1)(9-4)}\times 3$$

$$=\frac{(-1)\times(-6)}{(-3)(-8)}\times 1+\frac{2\times(-6)}{3\times(-5)}\times 2+\frac{2\times(-1)}{8\times 5}\times 3$$

$$=\frac{1}{4}+\frac{24}{15}-\frac{1}{20}=1.70000$$

从而

$$r_2(3)=\sqrt{3}-p_2(3)=\frac{\left.\left(\sqrt{x}\right)^{(3)}\right|_{x=\zeta}}{(2+1)\,!}(3-1)\cdot(3-4)\cdot(3-9)$$

$$\left|\sqrt{3}-p_2(3)\right|\le\frac{1}{6}\times\frac{1}{2}\times\frac{1}{2}\times\frac{3}{2}\times 2\times 6=\frac{36}{48}=0.75$$

返回本节

4.5.1 正交多项式简介

对于$[a, b]$上的连续函数$f(x)$、$g(x)$，定义内积：

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

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

连续函数$f(x)$、$g(x)$和$h(x)$的内积满足：

（1） $(f,f)\geq 0$，当且仅当 $f\equiv 0$时，$(f,f)=0$;

（2） $(f,g)=(g,f)$;

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

（4） $(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$。

若$(f,g)=0$, 则称$f(x)$和$g(x)$在$[a, b]$上关于权函数$\rho(x)$正交。

定义 定义在C$[a, b]$**上的一个实值函数，记为** $\|f\|$ **，满足：**

（**1**）非负性 $\|f\|\geqslant 0$，并且 $\|f\|=0$当且仅当 $f(x)\equiv 0$；

（2）齐次性 $\|\alpha f\| = |\alpha| \cdot \|f\|$；

（3）三角不等式 $\|f+g\| = \|f\| + \|g\|$；

则称函数 $\|f\|$ 为**C**$[a, b]$上的一个范数。

常用的连续函数范数有：

$$\|\boldsymbol{f}\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx, \quad \|\boldsymbol{f}\|_\infty = \max_{a \le x \le b} |f(x)|$$

$$\|\boldsymbol{f}\|_2 = \sqrt{(f, f)} = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx}$$

可以证明，连续函数的2-范数与内积之间的关系满足

Cauchy-Schwarz不等式：

$$|(f, g)| \le \|f\|_2 \cdot \|g\|_2$$

例，设函数 $f(x)=|x-1/2|$，$f\in \mathbf{C}[0,1]$，权函数 $\rho(x)=1$，

试计算：$\|f\|_1$，$\|f\|_\infty$ 和 $\|f\|_2$。

解：

$$\|f\|_\infty=\max_{0\le x\le 1}\left|x-\frac{1}{2}\right|=\frac{1}{2}$$

$$\|f\|_1=\int_0^1\left|x-\frac{1}{2}\right|dx=\int_0^{\frac{1}{2}}-\left(x-\frac{1}{2}\right)dx+\int_{\frac{1}{2}}^1\left(x-\frac{1}{2}\right)dx=\frac{1}{4}$$

$$\|f\|_2=\sqrt{\int_0^1\left(x-\frac{1}{2}\right)^2dx}=\sqrt{\int_0^1\left(x^2-x+\frac{1}{4}\right)dx}=\frac{1}{2\sqrt{3}}$$

若 $(f,g)=0$，则称 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交。

给定线性无关的函数组 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ ，可通过 Schmidt正交化过程予以正交化, 得到一组正规正交函数系。

具体作法如下： 令 $\phi_0(x) = \varphi_0(x)$

$$\phi_i(x) = \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_{i-1}) & \varphi_0(x) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_{i-1}) & \varphi_1(x) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_i, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_i, \varphi_{i-1}) & \varphi_i(x) \end{vmatrix}, \quad i = 1, 2, \cdots, n。 \quad \textbf{(4-67)}$$

易证

$$\left(\varphi_i, \phi_j\right) = \begin{cases} 0, & j < i \\ \Delta_i. & j = i \end{cases} \qquad (i, j = 0, 1, 2, \cdots, n) \qquad \textbf{(4-68)}$$

,

此式中

$$\Delta_i = \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_i) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_i) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_i, \varphi_0) & (\varphi_i, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_i, \varphi_i) \end{vmatrix}, \quad i = 0, 1, \cdots, n \quad \textbf{(4-69)}$$

注：

$$\phi_1(x)=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & \varphi_0(x)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & \varphi_1(x)\end{vmatrix}=\varphi_1(x)(\varphi_0,\varphi_0)-\varphi_0(x)(\varphi_1,\varphi_0),\quad \text{则}$$

$$(\phi_1,\varphi_0)=(\varphi_1,\varphi_0)(\varphi_0,\varphi_0)-(\varphi_0,\varphi_0)(\varphi_1,\varphi_0)=0$$

$$(\varphi_1,\phi_1)=(\varphi_1,\varphi_1)(\varphi_0,\varphi_0)-(\varphi_0,\varphi_1)(\varphi_1,\varphi_0)=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1)\end{vmatrix}=\Delta_1$$

一般地，

$$\phi_i(x)=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_j) & \cdots & \varphi_0(x)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_j) & \cdots & \varphi_1(x)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots\\ (\varphi_{i-1},\varphi_0) & (\varphi_{i-1},\varphi_1) & \cdots & (\varphi_{i-1},\varphi_j) & \cdots & \varphi_{i-1}(x)\\ (\varphi_i,\varphi_0) & (\varphi_i,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_j) & \cdots & \varphi_i(x)\end{vmatrix}$$

$$=\varphi_0(x)A_0+\varphi_1(x)A_1+\cdots+\varphi_j(x)A_j+\cdots+\varphi_i(x)A_i$$

其中A_i为代数余子式。从而，对于$j<i$有

$$(\phi_i,\varphi_j)=(\varphi_0,\varphi_j)A_0+(\varphi_1,\varphi_j)A_1+\cdots+(\varphi_i,\varphi_j)A_i$$

$$=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_j) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_j)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_j) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_j)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots\\ (\varphi_{i-1},\varphi_0) & (\varphi_{i-1},\varphi_1) & \cdots & (\varphi_{i-1},\varphi_j) & \cdots & (\varphi_{i-1},\varphi_j)\\ (\varphi_i,\varphi_0) & (\varphi_i,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_j) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_j)\end{vmatrix}=0$$

对于$j=i$有 $(\phi_i,\varphi_i)=(\varphi_0,\varphi_i)A_0+(\varphi_1,\varphi_i)A_1+\cdots+(\varphi_i,\varphi_i)A_i$

$$=\begin{vmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_i)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_i)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ (\varphi_i,\varphi_0) & (\varphi_i,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_i,\varphi_i)\end{vmatrix}=\Delta_i$$

由 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 的线性无关性,可证$\Delta_i>0$。

因为$\Phi_i(x)$由 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_i(x)$ 线性表示，故由（4-68）不难验证 $\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$ 是正交函数系。

注：对任意$i>j$

$$\left(\phi_i,\phi_j\right)=\left(\phi_i,\sum_{k=0}^{j}a_k\varphi_k\right)=\sum_{k=0}^{j}a_k\left(\phi_i,\varphi_k\right)=\sum_{k=0}^{j}a_k\cdot 0=0,$$

$$\left(\phi_i,\phi_i\right)=\left(\phi_i,\Delta_{i-1}\varphi_{i-1}+\sum_{k=0}^{i-1}a_k\varphi_k\right)=\left(\phi_i,\Delta_{i-1}\varphi_i\right)+\left(\phi_i,\sum_{k=0}^{i-1}a_k\varphi_k\right)$$

$$=\left(\phi_i,\Delta_{i-1}\varphi_i\right)=\Delta_{i-1}\left(\varphi_i,\phi_i\right)=\Delta_{i-1}\Delta_i>0。$$

若进一步令

$$\begin{cases}\psi_0(x)=\dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{\Delta_0}},\\[2ex]\psi_i(x)=\dfrac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}},\quad i=1,2,\cdots,n\end{cases}\tag{4-70}$$

那么，有

$$(\psi_i,\psi_i)=\left(\frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}},\frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}\right)=\left(\frac{1}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}\right)^2(\phi_i(x),\phi_i(x))=\frac{\Delta_{i-1}\Delta_i}{\Delta_{i-1}\Delta_i}=1$$

$$(\psi_i,\psi_j)=\left(\frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}},\frac{\phi_j(x)}{\sqrt{\Delta_{j-1}\Delta_j}}\right)=\left(\frac{1}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}\sqrt{\Delta_{j-1}\Delta_j}}\right)(\phi_i(x),\phi_j(x))=0$$

则 $\psi_0(x),\psi_1(x),\cdots,\psi_n(x)$ 成为标准正交函数系。

几种正交函数系：

三角函数系，于[-π, π]上正交

$1,\ \cos x,\ \sin x,\ \cos 2x,\ \sin 2x,\ \cdots,\ \cos nx,\ \sin x,\ \cdots$

余弦函数系，于[0, π]上正交

$1,\ \cos x,\ \cos 2x,\ \cdots,\ \cos nx,\ \cdots$

正弦函数系，于[0, π]上正交

$1,\ \sin x,\ \sin 2x,\ \cdots,\ \sin x,\ \cdots$

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$1, x, \cdots, x^m, \cdots$进行正交化即得正交多项式系。

令 $\mu_m = \int_a^b \rho(x)\cdot x^m dx,\ m=0,1,\cdots;$ 取 $\phi_0(x)=\mu_0$，

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

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

$$\Delta_i=\begin{vmatrix} (1,1) & (1,x) & \cdots & (1,x^i) \\ (x,1) & (x,x) & \cdots & (x,x^i) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (x^i,1) & (x^i,x) & \cdots & (x^i,x^i) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_i \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_{i+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i} \end{vmatrix},\quad i=0,1,\cdots,$$

则 $\psi_0(x)=\dfrac{\phi_0}{\sqrt{\Delta_0}},\ \psi_i(x)=\dfrac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}},\ i=1,2,\cdots,$ 构成标准正交多项式系。

例1， 求[−1,1] 上关于$\rho(x)=1$二次正交多项式族。

解 取 $\phi_0(x)=\mu_0=\int_{-1}^{1}1\,dx=2$

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

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

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

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

事实上，

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

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

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

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

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

解 取 $\phi_0(x) = \mu_0 = \int_{-1}^{1} |x|\, dx = 1$

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

$$\mu_3 = \int_{-1}^{1} |x| \cdot x^3\, dx = 0 \qquad \phi_1(x) = \begin{vmatrix} \mu_0 & 1 \\ \mu_1 & x \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & x \end{vmatrix} = x$$

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

下面举出两种常用的正交多项式的例子

例1 令$T_0=1$, $T_n(x)=\cos(n\cdot\arccos x)$，$x\in[-1,1]$, 称$T_n(x)$为$n$次**Chebyshev**多项式。

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

令$x=\cos\vartheta$，得

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

所以$T_n(x)$是n次多项式，且具有

（1）递归性 $T_0(x)=1$，$T_1(x)=x$， $T_2(x)=2x^2-1$，

$T_3(x)=4x^3-3x$，$T_4(x)=8x^4-8x^2+1$， $\cdots$,

（**2**）正交性

$$\left(T_n(x),T_m(x)\right)=\int_{-1}^{1}\frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\begin{cases}0 & n\neq m\\ \dfrac{\pi}{2} & n=m\neq 0\\ \pi & n=m=0\end{cases}$$

（3）奇偶性 $T_n(-x)=(-1)^n T_n(x)$ n为偶数时为偶函数，n为奇数时为奇函数；

（4） $T_n(x)=\cos(n\cdot\arccos x)$，在（−1, 1）有$n$个互异实根：

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi \qquad k=1,2,\cdots,n$$

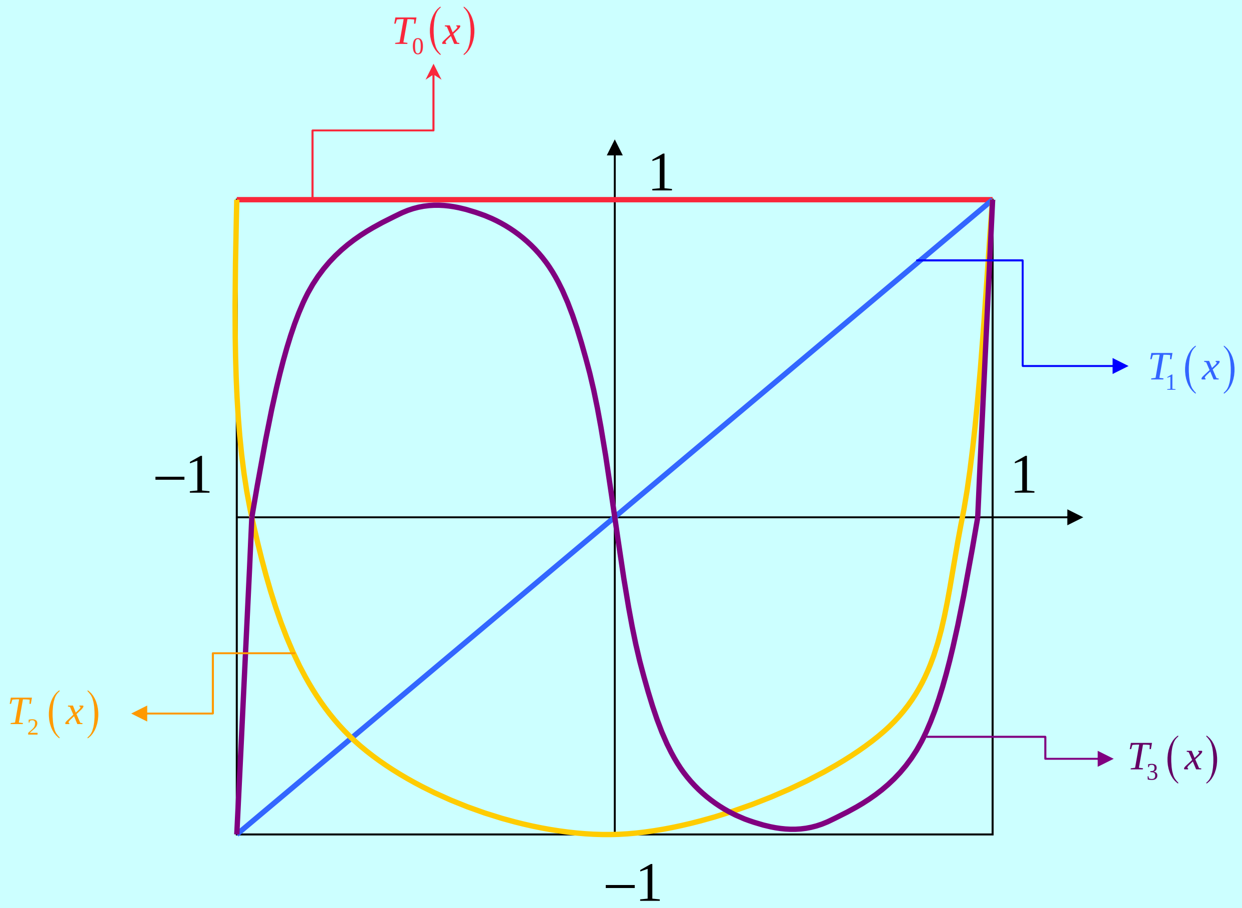
所以$\{T_n(x)\}$是$[-1,1]$上以 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 为权函数的正交多项式系。

而

$$\tilde{T}_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x) \qquad (n\geq 1)$$

是首项系数为1的n次**Chebyshev**多项式。

n=0，1，2，3次Chebyshev多项式的曲线



例2 设$L_n(x)$，$x\in[-1,1]$, 是以$\rho(x)\equiv 1$为权函数的正交多项式，称 $L_n(x)$（n=0, 1, ⋯）为n次**Legendre**多项式。

n次**Legendre**多项式的一般表达式为：

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

其具有：（1）递归性 $(n+1)L_{n+1}(x)=(2n+1)\cdot x\cdot L_n(x)-n\cdot L_{n-1}(x)$

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

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

（2）正交性

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

（**3**）奇偶性 $L_n(-x)=(-1)^n L_n(x)$ n为偶数时为偶函数，n为奇数时为奇函数；

（**4**）$L_n(x)$ 在（$-1, 1$）有n个互异实根：

所以$\{L_n(x)\}$是$[-1, 1]$上以$\rho(x)=1$为权函数的正交多项式系。

而

$$\tilde{L}_n(x)=\frac{n!}{(2n)!}\cdot\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right] \quad (n\geqslant 1)$$

是首项系数为1的n次**Legendre**多项式。

$$\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right]=\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2)^n+C_n^1(x^2)^{n-1}+\cdots\right]=(2n)(2n-1)\cdots(n+1)x^n+\cdots$$

从而，上述n次多项式的首项x^n的系数为：$\dfrac{(2n)!}{n!}$

4.5.2 正交多项式的一些重要性质

性质 1 $\psi_n(x)$ 恰好是n次多项式，$\psi_0(x),\psi_1(x),\cdots,\psi_n(x)$ 是 $\mathbf{P}_n$ 的一组基底函数。

性质 2 $\psi_n(x)$与次数低于 n 次的所有多项式正交。

性质 3 $\psi_n(x)$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

定理 $\psi_n(x)$**在**(a,b)内恰有n个单实根。

证明：若ψ_n在(a,b)内的根都是偶数重根， 则ψ_n在(a,b)内便应保持定号。而， 由于$\psi_n(x)$与$\psi_0(x)\equiv 1$的正交性，可知

$$\int_a^b \rho(x)\psi_n(x)\psi_0(x)dx = \int_a^b \rho(x)\psi_n(x)dx = 0$$

由此看来，ψ_n在(a,b)内必有奇数重根。设奇数重根的个数为k,而$\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_k$（$k<n$）为这些互异的奇数重根。 于是

$$f(x) = (x-\xi_1)(x-\xi_2)\cdots(x-\xi_k)$$

显然，$f(x)$为次数低于$\psi_n(x)$的多项式，由$\psi_n(x)$的正交性质，可知

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\psi_n(x)dx = 0$$

而 $f(x)\psi_n(x)$是只含偶重根的多项式，则上述积分不可能为0。

结论：只有$k=n$才成立（$k<n$不成立）。

定理　设$n\geqslant 1$，则正交多项式系$\{\psi_n(x)\}$中，$\psi_n(x)$与$\psi_{n+1}(x)$的根必相互交错，亦即$\psi_n(x)$的根为ζ_k，$k=1, 2, \cdots, n$，$\psi_{n+1}(x)$的根为η_k，$k=1,2,\cdots, n+1$，则

$$a<\eta_1<\xi_1<\cdots<\xi_n<\eta_{n+1}<b。$$

由三项递推公式：
$$\begin{cases}\psi_0(x)=1\\ \psi_1(x)=(x-\alpha_0)\psi_0(x)=(x-\alpha_0)\\ \cdots\\ \psi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\psi_k(x)-\beta_k\psi_{k-1}(x)\end{cases}$$

其中 $\alpha_k=\dfrac{(x\psi_k,\psi_k)}{(x\psi_k,\psi_k)}$，$k=0, 1, 2\cdots$　$\beta_{k-1}=\dfrac{(\psi_k,\psi_k)}{(\psi_{k-1},\psi_{k-1})}$，$k=1, 2\cdots$

可知，$\psi_{k+1}(x)$与$\psi_k(x)$不能有公共根。若不然，由递推公式可知，该根也是$\psi_k(x)$与$\psi_{k-1}(x)$的公共根。依次类推最后该根还是$\psi_1(x)$与$\psi_0(x)$的公共根。而$\psi_0(x)\equiv$常数$\neq 0$。

返回本节

4.5.2 函数的最佳平方逼近

设$\mathbf{S}=\mathrm{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}\subset\mathbf{C}[a,b]$，$f(x)\in\boldsymbol{L}^2[a,b]$（在$[a,b]$上所有平方可积函数的集合），若存在 $s^*(x)=\sum_{k=0}^{n}a_k^*\varphi_k(x)\in\mathbf{S}$，使

$$\left\|f(x)-s^*(x)\right\|_2=\min_{s(x)\in S}\left\|f(x)-s(x)\right\|_2$$

$$=\min_{s(x)\in S}\left(\int_a^b\rho(x)[f(x)-s(x)]^2dx\right)^{\frac{1}{2}}\qquad(4\text{-}75)$$

则称$S^*(x)$是$f(x)$在$\mathbf{S}$中的最佳平方逼近函数，$\|f(x)-S^*(x)\|_2$称为均方误差。显然，求解$S^*(x)$等价于求多元函数

$$E(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\int_a^b\rho(x)[f(x)-\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x)]^2dx\qquad(4\text{-}76)$$

的最小值点$(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)$。

利用多元函数求极值的必要条件，令

$$\frac{\partial E}{\partial a_i}=0 \qquad (i=0,1,\cdots,n) \tag{4-77}$$

即

$$\int_a^b \rho(x)\left[f(x)-\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x)\right]\varphi_i(x)dx=0 \qquad (i=0,1,\cdots,n) \tag{4-78}$$

$$\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)f(x)dx=\int_a^b \rho(x)\left(\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x)\varphi_i(x)\right)dx \qquad (i=0,1,\cdots,n)$$

$$=\sum_{k=0}^{n} a_k\left(\int_a^b \rho(x)\varphi_k(x)\varphi_i(x)dx\right) \qquad (i=0,1,\cdots,n)$$

利用内积符号，将上述方程组简记为

$$\sum_{k=0}^{n} a_k(\varphi_k,\varphi_i)=(f,\varphi_i) \qquad (i=0,1,\cdots,n) \tag{4-79}$$

即为

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

方程组(4−79)称为法方程组，求解该方程组得到 $a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*$。

由 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 的线性无关性，可知法方程组的系数矩阵非奇异，故法方程组有唯一解。 但该系数矩阵经常是病态矩阵，使解失真。

例如，特别取$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$为多项式系$1, x, x^2, \cdots, x^n$，不妨设权函数$\rho(x)=1$。 则

$$(\varphi_k,\varphi_i)=\int_0^1 x^k\cdot x^i dx=\int_0^1 x^{k+i}dx=\frac{1}{k+i+1}\qquad k,i=0,1,2,\cdots,n$$

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_0) \\ (\varphi_0,\varphi_1) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n+1} \end{pmatrix}$$

为$n+1$阶**Hilbert**矩阵。

因此在实际计算中可利用S的正交基，解最佳平方逼近问题。

设 $\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$ 是S的正交基，则法方程组的系数矩阵为非奇异对角阵，

$$\begin{pmatrix} (\phi_0,\phi_0) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\phi_1,\phi_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\phi_n,\phi_n) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} (f,\phi_0) \\ (f,\phi_1) \\ \vdots \\ (f,\phi_n) \end{pmatrix}$$

则
$$a_k^* = \frac{(f,\phi_k)}{(\phi_k,\phi_k)} \qquad (k=0,1,\cdots,n) \tag{4-80}$$

于是
$$s^*(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\phi_k)}{(\phi_k,\phi_k)}\phi_k(x) \tag{4-81}$$

进一步，若 $\psi_0(x)$, $\psi_1(x),\cdots,\psi_n(x)$ 是的标准正交基，则 $s^*(x)$ 就是 $f(x)$ 在S中的正交展开式：

$$s^*(x)=\sum_{k=0}^{n}(f,\psi_k)\psi_k(x) \tag{4-82}$$

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

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

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 $y=a+bx$而在xOy坐标平面上将以这组数据为坐标的点描出来（所得图形称为散点图）时, 这些点可能并不共线（但这些点又必然在直线$y=a+bx$的周围），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。

设 (x_i, y_i) $(i=0, 1, \cdots, m)$ 为给定的一组数据，$\omega_i > 0$ $(i=0,1, \ldots, m)$ 为各点的权系数，要求在函数空间

$$\mathbf{S} = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$$

$$= \{\varphi(x) \mid \varphi(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x), \forall a_0, \cdots, a_n \in \mathbf{R}\}$$

中，求一个函数

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

使其满足

$$\sum_{i=0}^{m} \omega_i (s^*(x_i) - y_i)^2 = \min_{s(x)\in S} \sum_{i=0}^{m} \omega_i (s(x_i) - y_i)^2 \tag{4-83}$$

则称 $s^*(x)$ 为离散数据 (x_i, y_i) $(i = 0, 1, \cdots, m)$ 在子空间S中带权的数据拟合的最小二乘法（离散最小二乘逼近），简称最小二乘法，并称 $s^*(x)$ 为最小二乘解。

显然，求$s*(x)$等价于求多元函数

$$E(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i (s(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(\sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x_i) - y_i \right)^2 \qquad (4\text{-}84)$$

的最小值点 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$。令

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0 \qquad (i = 0, 1, \cdots, n) \qquad (4\text{-}85)$$

得

$$\sum_{i=0}^{m} \omega_i \left(\sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x_i) - y_i \right) \varphi_j(x_i) = 0 \qquad (j = 0, 1, \cdots, n) \qquad (4\text{-}86)$$

即为

$$\sum_{k=0}^{n} \left(\sum_{i=0}^{m} \omega_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) \right) a_k = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \cdot y_i \cdot \varphi_j(x_i) \quad (j = 0, 1, \cdots, n) \qquad (4\text{-}87)$$

定义内积 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$， $\boldsymbol{\varphi}_j = (\varphi_j(x_1), \varphi_j(x_2), \cdots, \varphi_j(x_n))^T$，

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \cdot \varphi_k(x_i) \cdot \varphi_j(x_i) \qquad (y, \varphi_j) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \cdot y_i \cdot \varphi_j(x_i)$$

$$(j = 0, 1, \cdots, n)$$

则方程组（4.87）简记为

$$\sum_{k=0}^{n}\left(\varphi_k\,,\varphi_j\right)a_k=\left(y,\varphi_j\right)\qquad (j=0,1,\cdots,n)\qquad (4\text{-}90)$$

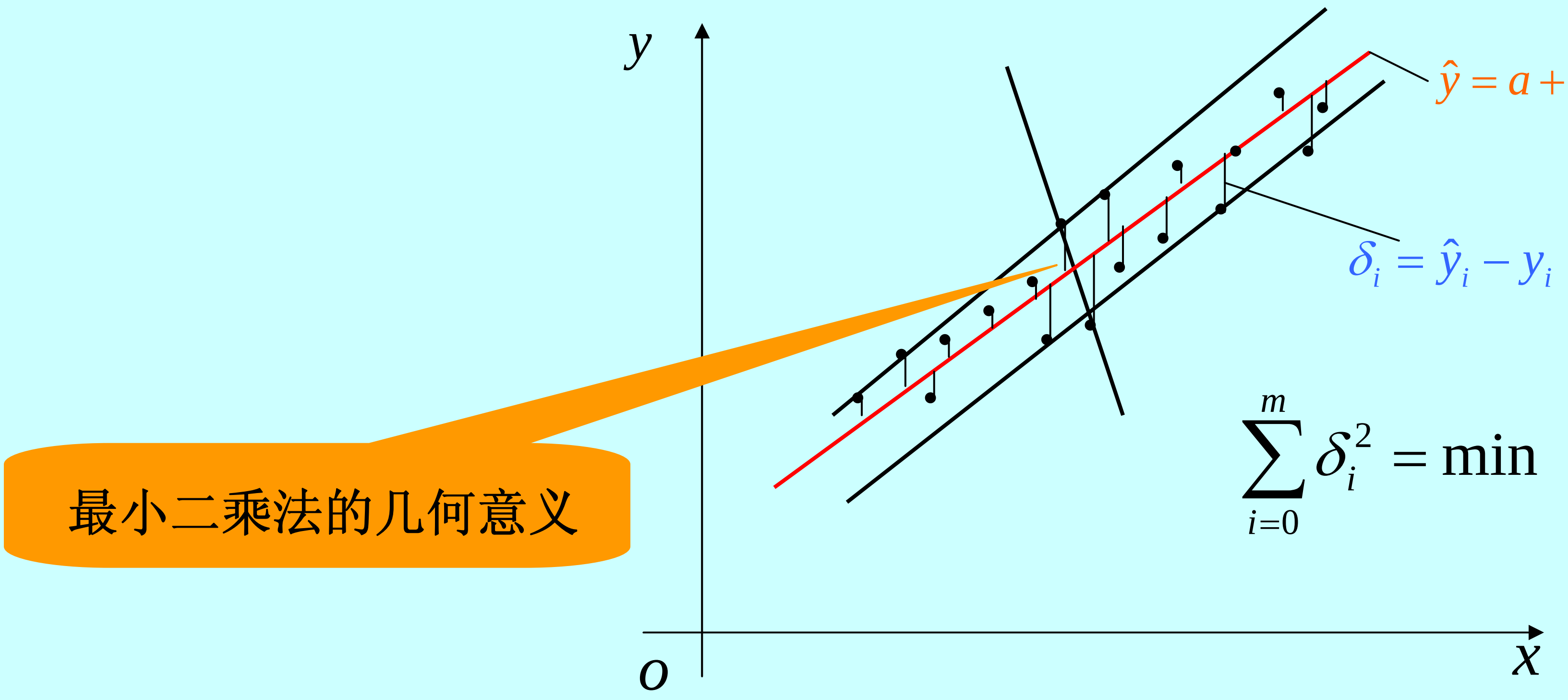
矩阵形式为：

$$\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_0)\\ (\varphi_0,\varphi_1) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_1)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\ (f,\varphi_1)\\ \vdots\\ (f,\varphi_n)\end{pmatrix}\qquad (4\text{-}91)$$

此方程组称为法方程组，求解该方程组得到 $a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*$。

由 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 的线性无关性，可知法方程组的系数矩阵非奇异，故法方程组有唯一解。

称 $(s^*-y,s^*-y)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s^*(x_i)-y_i)^2$ 为最小二乘解**s***(x)的平方误差，$\sqrt{\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s^*(x_i)-y_i)^2}$ 为**均方差**。


y
$\hat{y} = a + bx$
$\delta_i = \hat{y}_i - y_i$
$\sum_{i=0}^{m} \delta_i^2 = \min$
最小二乘法的几何意义
o
x

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 $\{x_i, y_i\}_{i=0}^{m}$ 拟合的最小二乘法简称**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

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

即

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

进一步有,

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

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

写成矩阵形式为

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

称此方程组为**法方程组**。可由**Gramer**法则求解该方程组，即得

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

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

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：

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

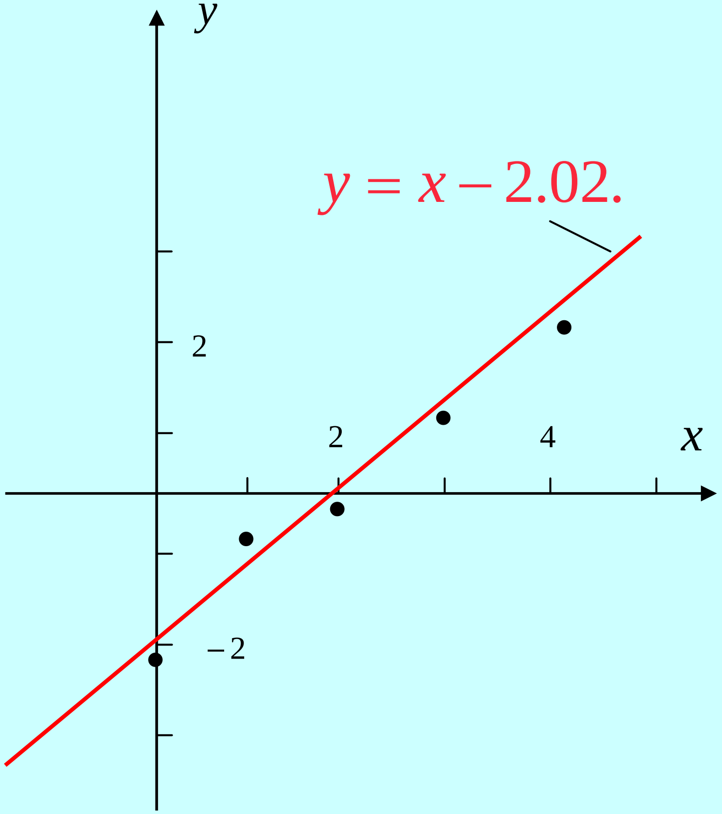
解得

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

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

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：

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

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

或

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

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

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 $z = \ln y$, $b = \ln c$ 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。

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

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

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

可设

$$Y=\frac{1}{y}，则得 \quad Y=a+bx$$

又设

$$X=\frac{1}{x}，则得 \quad y=a+bX$$

用最小二乘法可解超定方程组：$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$, 其中$\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$, $x\in\mathbf{R}^{n}$, $\boldsymbol{b}\in\mathbf{R}^{m}$ 。

首先， $E(x_1, x_2, \cdots, x_n)=\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2^2$ 则令 $\dfrac{\mathbf{d}\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2^2}{\mathbf{d}\boldsymbol{x}}=0$

可得 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}=0 \Rightarrow \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$

再来看例3，首先，

$$E(a_0,a_1)=\sum_{i=0}^{m}\left(s(x_i)-y_i\right)^2=\sum_{i=0}^{m}\left((a_0+a_1x_i)-y_i\right)^2=\left\|\begin{pmatrix}1 & x_0\\ 1 & x_1\\ \vdots & \vdots\\ 1 & x_m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}y_0\\ y_1\\ \vdots\\ y_m\end{pmatrix}\right\|_2^2=\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2^2$$

其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 1 & 1\\ 1 & 2\\ 1 & 3\\ 1 & 4\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}-2.1\\ -0.9\\ -0.1\\ 1.1\\ 1.9\end{pmatrix},$$

则令 $$\frac{\mathrm{d}E(a_0,a_1)}{\mathrm{d}\boldsymbol{a}}=\frac{\mathrm{d}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}=0,$$ 可得

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}=0\Rightarrow\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

从而

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1\\0&1&2&3&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\1&1\\1&2\\1&3\\1&4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5&10\\10&30\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}1&1&1&1&1\\0&1&2&3&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-2.1\\-0.9\\-0.1\\1.1\\1.9\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-0.1\\9.8\end{pmatrix}$$

则求法方程组 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$，得 $$\begin{pmatrix}5&10\\10&30\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\a_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-0.1\\9.8\end{pmatrix}$$

即 $y=x-2.02$

例5 试按最小二乘法原理求解下列超定方程组

$$\begin{cases} 2x+4y=11 \\ 3x-5y=3 \\ x+2y=6 \\ 2x+y=7 \end{cases}$$

按最小二乘法原理求此超定方程组的解等价于线性方程组 $(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$ 的解，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{z}=\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix}。$$

从而有

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 2 \\ 4 & -5 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 2 \\ 4 & -5 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix}$$

即得法方程组：$\begin{pmatrix} 18 & -3 \\ -3 & 46 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 51 \\ 48 \end{pmatrix}$， 解之，得到

$$x=3.04029，\ y=1.24176。$$

THE END

约瑟夫·路易·拉格朗日

（**Joseph Louis Lagrange，1736～1813**）,法国数学家、物理学家

18世纪最伟大的科学家之一。在数学、力学和天文学三个学科领域中都有历史性的贡献，其中尤以数学方面的成就最为突出。他是参议员，帝国伯爵，并被授予帝国大十字勋章。

1755年拉格朗日发表第一篇论文“极大和极小的方法研究”，发展了欧拉所开创的变分法，为变分法奠定了理论基础。1756年，受欧拉的举荐，拉格朗日被任命为普鲁士科学院通讯院士。1783年，被任命为都灵科学院名誉院长。出任法国米制委员会主任。制定了被世界公认的长度、面积、体积、质量的单位，拉格朗日为此做出了巨大的努力。1791年，拉格朗日被选为英国皇家学会会员，又先后在巴黎高等师范学院和巴黎综合工科学校任数学教授。1795年建立了法国最高学术机构——法兰西研究院后，拉格朗日被选为科学院数理委员会主席。他自己的一系列研究工作包括，编写了一批重要著作：《论任意阶数值方程的解法》、《解析函数论》和《函数计算讲义》。

拉格朗日科学研究所涉及的领域极其广泛。他在数学上最突出的贡献是使数学分析与几何与力学脱离开来，使数学的独立性更为清楚，从此数学不再仅仅是其他学科的工具。

拉格朗日在代数方程和超越方程的解法上，作出了有价值的贡献，推动了代数学的发展。最终解决了高于四次的一般方程为何不能用代数方法求解的问题。因而也可以说拉格朗日是群论的先驱。

在《解析函数论》以及他早在1772年的一篇论文中，他用幂级数表示函数的处理方法对分析学的发展产生了影响，成为实变函数论的起点。

拉格朗日也是分析力学的创立者。拉格朗日在其名著《分析力学》中，在总结历史上各种力学基本原理的基础上，发展达朗贝尔、欧拉等人研究成果，引入了势和等势面的概念，建立了拉格朗日方程，把力学体系的运动方程从以力为基本概念的牛顿形式，改变为以能量为基本概念的分析力学形式，奠定了分析力学的基础，为把力学理论推广应用到物理学其他领域开辟了道路。

拉格朗日用自己在分析力学中的原理和公式，建立起各类天体的运动方程。在天体运动方程的解法中，拉格朗日发现了三体问题运动方程的五个特解，即拉格朗日平动解。此外，他还研究彗星和小行星的摄动问题，提出了彗星起源假说等。

近百余年来，数学领域的许多新成就都可以直接或间接地溯源于拉格朗日的工作。所以他在数学史上被认为是对分析数学的发展产生全面影响的数学家之一。

作者姓名：张宏伟、金光日

工作单位：大连理工大学应用数学系

联系方式：E-mail: hwzhhwdl@sohu.com