样条函数与逼近论

孙天阳

中国科学技术大学数学科学学院

tysun@mail.ustc.edu.cn

2024 年 9 月 25 日

目录

Chapter 1

差商

1.1 绪论

多项式插值：Lagrange、Newton、Hermite。

P_m: 最高不超过 m 次的多项式。

Runge 现象：$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, x \in [-5, 5]$，用一个多项式插值不能很好地拟合这个函数。

1.1.1 分段插值

分段插值 $\rightarrow$ 样条：分段光滑多项式。插值方法不行，不做插值，改做逼近。

给定区间 $[a, b]$，假设 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_k < x_{k+1} = b$，

$$\Big\{ I_i = [x_i, x_{i+1}), i = 0, \cdots, k$$

每一段上都可以约定多项式的次数，叫做 multi-degree spline，就是每段上最高次数不一样。我们这门课，每一段上多项式次数，给一个统一的最高值。

$$S_m(\Delta) := \left\{ s(x) \mid s(x) \mid_{I_i} \in \mathbb{P}_m, s(x) \in C^{m-1}[a, b] \right\}$$

以后每个结点可以指定不同的光滑次数。

$S_m(\Delta) \subset C^{m-1}[a, b]$ 线性空间（关心基函数）+ 对偶基。从计算的角度来说，具有紧支集的基函数。学过有限元的话，具有紧支集的函数 $\int_{\mathbb{R}} f(x)g(x)\mathrm{d}x$ 就很好算。

1.1.2 B 样条基函数

B 样条基函数 (B-spline)，B 是 Basic。

1.2 Lagrange 插值

问题: 给定区间 $[a,b]$ 上的函数 $f(x)$，给定互异的插值节点组 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 使得

$$a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_m \leqslant b$$

找 $p_m(x) \in \mathbb{P}_m$ 满足插值条件 $p_m(x_i) = f(x_i), i = 0, \cdots, m$.

定理 1.2.1. *插值问题的解存在且唯一.*

证明. 设 $p_m(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m$, 则插值条件等价于

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \cdots + a_m x_0^m = f(x_0) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_0 + a_1 x_m + \cdots + a_m x_m^m = f(x_m) \end{cases}$$

这是一个关于 $\{a_i\}_{i=0}^m$ 的线性方程组, 解存在唯一当且仅当行列式

$$\det B = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^m \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^m \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^m \end{vmatrix} = \prod_{i<j}(x_i - x_j) \neq 0.$$

□

上面是理论上的存在唯一性. 如果要按照上面的方法去解 $\{a_i\}_{i=0}^m$, 因为这个矩阵是非稀疏的, 我们会发现这个计算量太大. $\{1, x, \cdots, x^m\}$ 作为 $\mathbb{P}_m$ 的一组基虽然在理论上很自然, 但在计算上的效果并不好. 所以我们希望在给定插值节点组 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的情况下, 找到 $\mathbb{P}_m$ 的一组基 $\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^m$, 使得此时求 $p_m(x)$ 关于基的系数的方程尽可能简单, 也就是使矩阵

$$B = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_m) & \varphi_1(x_m) & \cdots & \varphi_m(x_m) \end{pmatrix}$$

尽可能简单. 我们能想到的最简单的矩阵就是 $B = I$, 这就是要求

$$\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}.$$

以 φ_0 为例, 这样就要求 $x_1, \cdots, x_m$ 是 φ_0 的零点, 又因为 φ_0 是一个不超过 m 次的多项式, 所以我们已经在相差一个常数倍的意义下决定了 φ_0,

$$\varphi_0(x) \sim (x - x_1)\cdots(x - x_m).$$

再结合条件 $\varphi_0(x_0) = 1$, 我们得到

$$\varphi_0(x) = \frac{(x - x_1)\cdots(x - x_m)}{(x_0 - x_1)\cdots(x_0 - x_m)}.$$

其他的 $\varphi_i(x)$ 是同理的. 这样一来,

$$p_m(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_m\varphi_m(x)$$

中的系数 $\{a_i\}_{i=0}^m$ 就被确定为

$$a_i = f(x_i), \quad i = 0, \cdots, m.$$

我们给这组基一个专有的记号记作 l_i, 称作 Lagrange 插值多项式, 将这种插值方式

$$p_m(x) = \sum_{i=0}^m f(x_i) l_i(x)$$

称作 **Lagrange 插值**.

命题 1.2.2.

$$\sum_{i=0}^m l_i(x) \equiv 1$$

证明. 左侧其实就是 1 的 Lagrange 插值多项式, 按插值的要求它在 $m+1$ 个点取到 1, 这大于它的次数 m, 所以只能恒为 1. □

如果引入记号

$$\omega_{m+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_m)$$

那么

$$l_i(x) = \frac{\omega_{m+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{m+1}(x_i)}.$$

1.3 Newton 插值

Lagrange 插值有一个缺点, 就是基函数高度依赖于节点的选择. 如果节点发生了变化, 哪怕是在原有的 m 个节点的基础上新增一个节点, 也需要重新算一遍基函数. 这就促使我们引入了 **Newton 插值**. 把握住目的是新增节点时能够复用原有的基函数, 就不难理解 Newton 插值的基函数的选择.

首先 $m=0$ 只有一个节点的时候, 很平凡的情形自然会选 $\varphi_0=1$ 作为基函数. 当 $m=1$ 也就是有两个节点的时候, 首先我们已经有了 $\varphi_0=1$, 所以矩阵长成

$$B=\begin{pmatrix}1 & \varphi_1(x_0)\\ 1 & \varphi_1(x_1)\end{pmatrix}$$

的样子, 我们为了 B 简单所以取 $\varphi_1=x-x_0$. 当 $m=2$ 时, 矩阵长成

$$B=\begin{pmatrix}1 & 0 & \varphi_2(x_0)\\ 1 & \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1)\\ 1 & \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2)\end{pmatrix}$$

依旧是为了矩阵简单我们取 $\varphi_2=(x-x_0)(x-x_1)$. 这样一来, $\varphi_i(x)$ 的取法就比较清楚了

$$\varphi_0(x)=1,\quad \varphi_i(x)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1}),\quad i=1,2,\ldots,m.$$

根据这种取法, A 是一个下三角矩阵. 为什么不在 $\varphi_i(x)$ 前加系数来进一步简化矩阵? 因为给 $\varphi_1(x)$ 前加系数顶多把 $\varphi_1(x_1)$ 给调成 1, 不可能同时把 $\varphi_1(x_2)$ 给调成 1, 所以干脆摆烂, 这样系数还干净.

命题 1.3.1 (作业)**.** *$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^m$ 线性无关.*

证明.

$$\lambda_0+\lambda_1(x-x_0)+\lambda_2(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+\lambda_m(x-x_0)\cdots(x-x_{m-1})=0$$

取 $x=x_0$ 推得 $\lambda_0=0$. 再取 $x=x_1$ 得 $\lambda_1=0$. 以此类推. □

接下来我们看一下此时怎么确定

$$p_m(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_m\varphi_m(x)$$

中的系数. 我们有三个观察, 首先注意到有

$$p_m(x)=p_{m-1}(x)+a_m\varphi_m(x),$$

这是因为 φ_m 在 $x_0,\cdots,x_{m-1}$ 处全为零, 即 $a_m\varphi_m(x)$ 这一项对 $p_m(x)$ 在 $x_0,\cdots,x_{m-1}$ 处的值没有影响, 所以除去这部分就是插值前 m 个节点的插值多项式. 从这里看出来, 采用牛顿插值, 我们不仅可以复用基函数, 在计算插入新节点后的插值多项式时还可以复用之前的插值多项式. 另一个观察是 a_m 就是 p_m 中 x^m 前的系数, 由插值多项式的存在唯一性, 我们可以利用 Lagrange 插值

$$p_m(x)=\sum_{i=0}^m f(x_i)l_i(x)$$

来计算 a_m. 直接可以从上式与 $l_i(x)$ 的定义读出 $p_m(x)$ 的最高阶项次数就是

$$a_m=\sum_{i=0}^m f(x_i)\frac{1}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}.$$

第三个观察是我们可以递归地计算出 a_i, 首先在 $x = x_0$ 处取值可以计算出

$$a_0 = f(x_0) =: [x_0]f$$

然后在 $x = x_1$ 处取值得到

$$[x_1]f = [x_0]f + a_1(x_1 - x_0) \Longrightarrow a_1 = \frac{[x_1]f - [x_0]f}{x_1 - x_0} =: [x_0, x_1]f$$

然后在 $x = x_2$ 处取值得到

$$[x_2]f = [x_0]f + [x_0, x_1]f \cdot (x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)$$

$$[x_2]f - [x_1]f + [x_1]f - [x_0]f = [x_0, x_1]f \cdot (x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)$$

$$[x_1, x_2]f \cdot (x_2 - x_1) + [x_0, x_1]f \cdot (x_1 - x_0) = [x_0, x_1]f \cdot (x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)$$

$$[x_1, x_2]f \cdot (x_2 - x_1) - [x_0, x_1]f \cdot (x_2 - x_1) = a_2(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)$$

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

然后在 $x = x_3$ 处取值得到

$$[x_2, x_3]f \cdot (x_3 - x_2) + [x_1, x_2]f \cdot (x_2 - x_1) + [x_0, x_1]f \cdot (x_1 - x_0) = [x_0, x_1]f \cdot (x_3 - x_0) + [x_0, x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1)(x_3 - x_0) + a_3(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)(x_3 - x_0)$$

$$[x_2, x_3]f \cdot (x_3 - x_2) - [x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_2) + [x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1) + [x_0, x_1]f \cdot (x_1 - x_0) = [x_0, x_1]f \cdot (x_3 - x_0) + [x_0, x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1)(x_3 - x_0) + a_3(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)(x_3 - x_0)$$

$$[x_2, x_3]f \cdot (x_3 - x_2) - [x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_2) + [x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1) - [x_0, x_1]f \cdot (x_3 - x_1) = [x_0, x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1)(x_3 - x_0) + a_3(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)(x_3 - x_0)$$

$$[x_1, x_2, x_3]f \cdot (x_3 - x_2)(x_3 - x_1) + [x_0, x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1)(x_2 - x_0) = [x_0, x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_1)(x_3 - x_0) + a_3(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)(x_3 - x_0)$$

$$[x_1, x_2, x_3]f \cdot (x_3 - x_2)(x_3 - x_1) - [x_0, x_1, x_2]f \cdot (x_3 - x_2)(x_3 - x_1) = a_3(x_3 - x_2)(x_3 - x_1)(x_3 - x_0)$$

$$a_3 = \frac{[x_1, x_2, x_3]f - [x_0, x_1, x_2]f}{x_3 - x_0} =: [x_0, x_1, x_2, x_3]f$$

然后在 $x = x_m$ 处取值得到

$$[x_m]f = [x_0]f + [x_0, x_1]f \cdot (x_m - x_0) + \cdots + a_m(x_m - x_{m-1}) \cdots (x_m - x_0)$$

接下来我们将归纳证明, 将式子右侧的前 k 项挪到式子左侧, 会得到

$$\sum_{i=1}^{m-k+1} [x_{m-i+2-k}, \cdots, x_{m-i+1}]f \cdot (x_m - x_{m-i}) \cdots (x_m - x_{m-i+2-k}) - [x_{m-i+1-k}, \cdots, x_{m-i}]f \cdot (x_m - x_{m-i}) \cdots (x_m - x_{m-i+2-k})$$

当 $k = 1$ 时, 这就是

$$\sum_{i=1}^{m} [x_{m-i+1}]f - [x_{m-i}]f = [x_m]f - [x_{m-1}]f + [x_{m-1}]f - [x_{m-2}]f + \cdots + [x_1]f - [x_0]f$$

这是显然的, 假设上式对 k 成立, 下证对 $k+1$ 成立, 对 k 的式子变形并移项得

$$= \sum_{i=1}^{m-k+1} [x_{m-i+1-k}, \cdots, x_{m-i+1}]f \cdot (x_m - x_{m-i}) \cdots (x_m - x_{m-i+2-k})(x_{m-i+1} - x_{m-i+1-k}) - [x_0, \cdots, x_k]f \cdot (x_m - x_{k-1}) \cdots (x_m - x_0)$$

要证这玩意等于

$$\sum_{i=1}^{m-k} [x_{m-i+1-k}, \cdots, x_{m-i+1}]f \cdot (x_m - x_{m-i}) \cdots (x_m - x_{m-i+1-k}) - [x_{m-i-k}, \cdots, x_{m-i}]f \cdot (x_m - x_{m-i}) \cdots (x_m - x_{m-i+1-k})$$

首先可以看到含 $[x_{m-k},\cdots,x_m]$ 的项是一样的, 接下来就是证

$$\begin{aligned}&-[x_{m-j-k},\cdots,x_{m-j}]f\cdot(x_m-x_{m-j})\cdots(x_m-x_{m-j+1-k})+[x_{m-j-k},\cdots,x_{m-j}]f\cdot(x_m-x_{m-j-1})\cdots(x_m-x_{m-j-k})\\=&[x_{m-j-k},\cdots,x_{m-j}]f\cdot(x_m-x_{m-j-1})\cdots(x_m-x_{m-j+1-k})(x_{m-j}-x_{m-j-k})\end{aligned}$$

即证

$$-(x_m-x_{m-j})\cdots(x_m-x_{m-j+1-k})+(x_m-x_{m-j-1})\cdots(x_m-x_{m-j-k})=(x_m-x_{m-j-1})\cdots(x_m-x_{m-j+1-k})(x_{m-j}-x_{m-j-k})$$

消去公因式, 即证

$$-(x_m-x_{m-j})+(x_m-x_{m-j-k})=x_{m-j}-x_{m-j-k}$$

这是显然的. 最后还需要额外验证

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

即证

$$-(x_m-x_k)\cdots(x_m-x_1)=(x_m-x_{k-1})\cdots(x_m-x_1)(x_k-x_0)-(x_m-x_{k-1})\cdots(x_m-x_0)$$

消去公因式, 即证

$$-(x_m-x_k)=(x_k-x_0)-(x_m-x_0),$$

这是显然的. 所以当 $k=m$ 时我们得到

$$[x_1,\cdots,x_m]f\cdot(x_m-x_{m-1})\cdots(x_m-x_1)-[x_0,\cdots,x_{m-1}]f\cdot(x_m-x_{m-1})\cdots(x_m-x_1)=a_m(x_m-x_{m-1})\cdots(x_m-x_1)(x_m-x_0)$$

$$\Longrightarrow a_m=\frac{[x_1,\cdots,x_m]f-[x_0,\cdots,x_{m-1}]f}{x_m-x_0}$$

定义 1.3.2. 互异节点的差商的定义

差商的实际计算的例子

命题 1.3.3. 差商的对称性

证明. □

命题 1.3.4. 从 *Lagrange* 插值多项式的首项系数的定义推满足递归关系

命题 1.3.5. 存在 $\xi\in(a,b)$ 使得

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

证明. □

例 1.3.6 (作业)**.** 计算 $f=x^n$ 的各阶差商.

命题 1.3.7. *Crammer* 法则

1.4 误差估计

1.5 Hermite 插值

设

$$a \leqslant x_1 < x_2 < \cdots < x_r \leqslant b$$

为插值节点, 对节点 x_i, 给定 l_i 个实数 $y_i^{(k)}, k = 0, \cdots, l_i - 1$, 记 $\sum_{i=1}^r l_i = m + 1$. Hermite 问题: 寻找一个 m 次多项式 $H_m(x) \in \mathbb{P} + m$ 满足插值条件

$$H_m^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)}, \quad k = 0, \cdots, l_i - 1, \quad i = 1, \cdots, r$$

定理 1.5.1. *满足上述插值条件的多项式 $H_m(x) \in \mathbb{P}_m$ 存在且唯一.*

假设 $\{u_i(x)\}_{i=0}^m$ 是 $\mathbb{P}_m$ 的一组基, 设 $H_m(x) = \sum_{i=0}^m c_i u_i(x)$, 代入 Hermite 插值条件有

推论 1.5.2. *若 $D^m f(x) = 0$, 则 $[t_1, \cdots, t_{m+1}]f = 0$*

1.6 差商的性质

命题 1.6.1 (Leibniz 公式)**.** 对光滑函数 f, g, 有

$$[t_1, \cdots, t_{m+1}](f \cdot g) = \sum_{i=1}^{m+1} [t_1, \cdots, t_i]f \cdot [t_i, \cdots, t_{m+1}]g$$

证明一. 设 p, q 是 f, g 满足 $t_1, \cdots, t_{m+1}$ 作为插值条件的 Hermite 插值问题的解.

$$p = \sum_{i=1}^{m} (x - t_1) \cdots (x - t_i)[t_1, \cdots, t_i]f$$

$$q = \sum_{i=1}^{m} (x - t_{i+1}) \cdots (x - t_{m+1})[t_i, \cdots, t_{m+1}]g$$

□

证明二. 当 $m = 0$ 时,

$$[t_1](f \cdot g) = (f \cdot g)(t_1) = f(t_1) \cdot g(t_1) = [t_1]f \cdot [t_1]g$$

假设对 m 个插值节点成立, 下面推对 $m+1$ 个插值节点成立.

(1) 当 $t_1 = \cdots = t_{m+1}$,

$$[t_1, \cdots, t_{m+1}](f \cdot g) = \frac{D^m}{m!}(f \cdot g)(t_1)$$

$$LHS = \sum_{i}^{m+1} \frac{D^{(i-1)}f}{(i-1)!}(t_1) \cdot \frac{D^{m+1-i}g}{(m+1-i)!}(t_1) = \frac{1}{m!} \sum_{i=0}^{m} \binom{m}{i} D^i f(t_1) \cdot D^{m-i} g(t_1) = \frac{D^m f \cdot g(t_1)}{m!}$$

(2) 若 $t_1 < t_{m+1}$

$$[t_1, \cdots, t_{m+1}](f \cdot g) = \frac{[t_2, \cdots, t_{m+1}](f \cdot g) - [t_1, \cdots, t_m](f \cdot g)}{t_{m+1} - t_1}$$

$$= \frac{\sum_{i=2}^{m+1} [t_2, \cdots, t_i]f \cdot [t_i, \cdots, t_{m+1}]g - \sum_{i=1}^{m} [t_1, \cdots, t_i]f \cdot [t_i, \cdots, t_m]g}{t_{m+1} - t_1}$$

看分子

$$\sum_{i=2}^{m+1} \left((t_i - t_1)[t_1, \cdots, t_i]f + [t_1, \cdots, t_{i-1}]f\right)[t_i, \cdots, t_{m+1}]g - \sum_{i=1}^{m} [t_1, \cdots, t_i]\left(-(t_{m+1} - t_i)[t_i, t_{i+1}, \cdots, t_{m+1}]g +\right.$$

注意

$$\sum_{i=2}^{m+1} [t_1, \cdots, t_{i-1}]f \cdot [t_i, \cdots, t_{m+1}]g = \sum_{i=1}^{m} [t_1, \cdots, t_i]f \cdot [t_{i+1}, \cdots, t_{m+1}]g$$

从而上式为

$$\sum_{i=2}^{m+1} (t_i - t_1)[t_1, \cdots, t_i]f \cdot [t_i, \cdots, t_{m+1}]g + \sum_{i=1}^{m} (t_{m+1} - t_i)[t_1, \cdots, t_i]f \cdot [t_i, \cdots, t_{m+1}]g$$

$$= \sum_{i=1}^{m+1} [t_1, \cdots, t_i]f \cdot [t_i, \cdots, t_{m+1}]g(t_{m+1} - t_1)$$

□

推论 1.6.2.

$$[t_1, \cdots, t_{m+1}](x - t_{m+1})f = [t_1, \cdots, t_m]f$$

命题 1.6.3. 当 $\epsilon_i \to 0$ 时，若 $\{t_i\}_{i=1}^{n+1}$ 是 $[t_1, t_n]$ 的某个分割，则

$$\{t_i\}_{i=1}^{n+1} \to \{t_i\}_{i=1}^{n+1}$$

对光滑函数 f 有：

$$\lim_{\epsilon_i \to 0} \sum_{i=1}^{n+1} f(t_i, \xi_i)\Delta t_i = \int_{t_1}^{t_n} f(t)\, dt$$

证明. 只需证 t_i 成立即可, $t_1 \leqslant t_2$

□