數學傳播 40卷1期, pp. 16-30

兩個多項函數的插值公式
— 插值是讀間的藝術

蔡聰明

函數代表自然律或數學律, 例如自由落體定律 $S(t) = gt^2/2$, 半徑爲 r 的圓面積公式 $A(r) = \pi r^2$。大自然的秘密往往以函數的形態隱藏起來, 把它們探求出來是科學研究的重大問題。古希臘德爾斐 (Delphi) 神廟的神諭說： 自然不顯露, 也不故意隱藏, 她會透露出一些線索。

數學告訴我們如何透過線索來捕捉未知函數。如果透露的是函數局部的變化訊息, 那麼我們就用微分方程來捕捉未知函數, 再解微分方程就得到答案。

自然還有另一種透露線索的方式, 就是人類經由實驗與觀察來叩問她, 逼她吐露出部分的訊息或數據。我們相信自然是誠實無欺的。我們就根據部分的訊息或數據, 尋幽探徑, 找出或猜測出大自然的祕密。

本文我們要來探討多項函數的插值問題, 即在坐標平面上, 給定 $n+1$ 個點, 要找一個 n 次多項函數通過它們, 得到的結果就是著名的牛頓 (Isaac Newton, 1642～1727) 插值公式與拉格朗日 (Lagrange, 1736～1813) 插值公式。更進一步, 考慮等間距的牛頓插值公式, 將它連續化且無窮化, 就得到微積分的核心結果：泰勒 (Brook Taylor, 1685～1731) 展開公式。它被尊稱爲「微積分之心 (the heart of calculus)」, 可見其重要與美妙。

目前高中數學的課程已對這兩個插值公式有所推導, 用到的只是淺易的因式定理。然而, 有許多學生對它們總是疑惑不解, 希望本文對高中生具有淸晰易讀的功效, 並且能夠達到理解的境地。

1. 多項函數的插值問題

假設未知的函數爲 $y = f(x)$, 在實驗室裡我們對它做實驗觀察 $n+1$ 次, 得到 $n+1$ 個點或數據:

$$\{(x_k, y_k) : y_k = f(x_k), \quad k = 0, 1, \ldots, n\}$$

本文我們要來探討下面的問題:

多項函數的插值問題: 要找一個 n 次多項函數 $y = p_n(x)$ 通過這 $n+1$ 個點, 亦即使得 $p_n(x_k) = y_k$。於是就用 $y = p_n(x)$ 來當作 $y = f(x)$ 的近似估計 (見圖1 : $n = 3$ 的情形)。

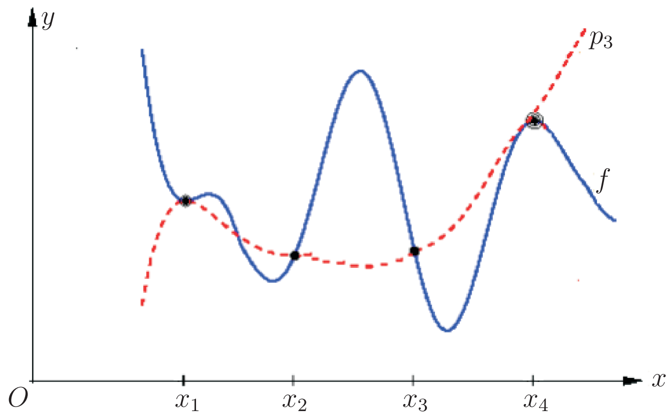


圖 1

註: 插值是讀間的藝術 (Interpolation is the art of reading between the lines.)

這是數值分析的一個重要問題。在各種函數類中, 多項函數是相對簡單的函數, 這使得我們可以「用已知的多項函數 $y = p_n(x)$ 來掌握未知的函數 $y = f(x)$」, 達到「以簡御繁」的功效, 或乾脆就用 $p_n(x)$ 來取代 $f(x)$。

另一方面, 多項函數類已足夠廣泛, 只要讓次數不斷提高, 就可以逼近幾乎所有常用的函數, 這是泰勒展開定理 (Taylor expansion theorem) 給我們的洞察。值得注意的是, 統計學裡的多項式迴歸分析, 類似於此地的插值問題。

面對多項函數的插值問題, 我們要解決四個問題 : *解答存在嗎? 解答唯一嗎?* (*解答有幾個?*) *如何建構出解答? 解答有何應用?* 這些分別叫做存在性問題、唯一性問題、建構問題以及應用問題。前兩者比較是理論層次的問題, 後兩者比較實際, 因爲建構出解答往往就回答了前兩個問題。

對於多項函數的插值問題, 很容易證明解答存在且唯一, 而實際建構則有牛頓與拉格朗日的兩種有趣且美妙的 “主題變奏”, 表面形式不同但實質相同。

2. 存在性、唯一性與建構

定理 1: 在坐標平面上, 假設 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 皆相異, 則存在唯一的 n 次多項函數, 通過這 $n+1$ 個點。

證明: 存在性

假設 $p_n(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$ 爲所求 n 次多項函數, 則有

$$\begin{cases} a_0 & + & a_1x_0 & + & a_2x_0^2 & + & \cdots & + & a_nx_0^n & = & y_0 \\ a_0 & + & a_1x_1 & + & a_2x_1^2 & + & \cdots & + & a_nx_1^n & = & y_1 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & = & \vdots \\ a_0 & + & a_1x_n & + & a_2x_n^2 & + & \cdots & + & a_nx_n^n & = & y_n \end{cases}$$

其中諸係數 a_k 是待求的未知數。考慮係數行列式

$$V_{n+1}=\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{vmatrix}$$

這叫做 $n+1$ 階的 Vandermonde (1735～1796, 法國數學家兼音樂家) 行列式。因爲若把 x_i 換成 x_j, 則有兩列 (rows) 相同, 故行列式的值爲 0, 由因式定理知, V_{n+1} 恰含有 C_2^{n+1} 個形如 (x_j-x_i) 的因式, 事實上 $V_{n+1}=\prod\limits_{0\le i<j\le n}(x_j-x_i)$。令 D_k 表示以 $y_0,y_1,\ldots,y_n$ 取代 V_{n+1} 的第 k 行 (column), 由 Cramer 規則得知,

$$a_k=D_k/V_{n+1},\qquad k=0,1,2,\ldots,n,$$

因此, 聯立方程組的解答存在且唯一, 並且透過 Cramer 規則與行列式的計算就可以建構出解答。

唯一性也可以這樣證明: 假設 $g(x)$ 與 $h(x)$ 皆爲通過 $n+1$ 個點的 n 次多項函數。令 $q(x)=g(x)-h(x)$, 則 $q(x)$ 至多爲 n 次多項函數, 並且具有 $n+1$ 個根, 因此 $q(x)$ 必爲 0 多項函數, 從而 $g(x)=h(x)$。 □

例1: 假設 x_0、x_1、x_2 皆爲相異數, 試求通過三點 (1,3), (3,2), (5,7) 的二次多項函數。

解答: 假設二次多項函數爲 $p_2(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$, 解聯立方程組:

$$\begin{cases} a_0 & + & a_1 & + & a_2 & = & 3 \\ a_0 & + & 3a_1 & + & 9a_2 & = & 2 \\ a_0 & + & 5a_1 & + & 25a_2 & = & 7 \end{cases}$$

因爲 Van der Monde 行列式 (即係數行列式) 爲

$$M=\begin{vmatrix}1&1&1\\1&3&9\\1&5&25\end{vmatrix}=16$$

並且

$$M_1=\begin{vmatrix}3&1&1\\2&3&9\\7&5&25\end{vmatrix}=92,\quad M_2=\begin{vmatrix}1&3&1\\1&2&9\\1&7&25\end{vmatrix}=-56,\quad M_3=\begin{vmatrix}1&1&3\\1&3&2\\1&5&7\end{vmatrix}=12$$

所以

$$a_0=\frac{92}{16}=\frac{23}{4},\quad a_1=\frac{-56}{16}=\frac{-7}{2},\quad a_2=\frac{12}{16}=\frac{3}{4}$$

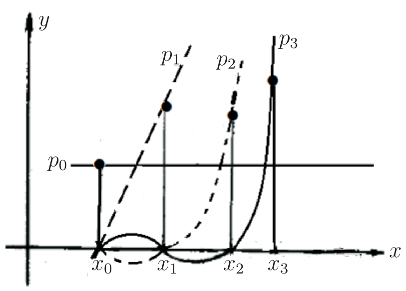
因此所求的插值二次多項函數爲 $y=p_2(x)=\dfrac{23}{4}-\dfrac{7}{2}x+\dfrac{3}{4}x^2$。 □

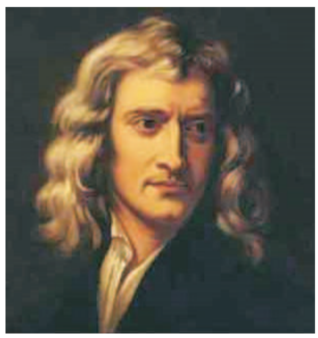
上述方法的缺點是, 當插值多項函數通過的點數較多時, 會遇到高階的行列式, 計算量會變得很大, 相當繁瑣。因此需要另找簡潔易算的方法來解決多項函數的插值問題。這一步是牛頓與拉格朗日跨出去的, 他們對插值多項函數作分析與綜合, 利用因式定理洞察出其內在的結構, 分別得到牛頓插值公式與拉格朗日插值公式。

然而, 不論採取什麼方法來建構出插值多項函數, 儘管其表面形式不同, 但是它們在實質上都是相同的唯一解答。不過, 形式有時也很重要, 例如牛頓插值公式的形式就方便於通到 微積分之心的泰勒展開公式 (Taylor expansion), 而拉格朗日插值公式僅止於對稱、漂亮而已。

3. 牛頓插值公式

牛頓利用因式定理並且採用逐步升高次數的方法來逐步建構出所欲求的 n 次多項函數 $p_n(x)$。這類似於解方程式的牛頓逐步逼近求根法。





牛頓 (Newton, 1642~1727)

圖 2

甲、非等間距的牛頓插值公式

(1) 第一步做出 0 次多項函數: 取 $g_0(x) = a_0 \equiv y_0 \equiv p_0(x)$, 這是通過 (x_0, y_0) 點的常函數。假設 $y_0 \neq 0$, 則它是一個 0 次多項函數。

(2) 第二步做出 1 次多項函數: 找一個一次多項函數 $p_1(x)$ 使其通過 (x_0, y_0) 點。根據因式定理, 可令 $p_1(x) = a_1(x - x_0)$。於是一次多項函數

$$g_1(x) = p_0(x) + p_1(x) = a_0 + a_1(x - x_0)$$

通過 (x_0, y_0) 點。再要求 $g_1(x)$ 通過 (x_1, y_1) 點, 由此可求出 a_1。

(3) 第三步做出 2 次多項函數: 找一個二次多項函數 $p_2(x)$ 通過 $(x_0, 0)$ 與 $(x_1, 0)$ 兩點, 那麼又根據因式定理, 可令其爲 $p_2(x) = a_2(x - x_0)(x - x_1)$。加到 $g_1(x)$ 得到二次多項函數

$$g_2(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1)$$

再要求 $g_2(x)$ 通過 (x_2, y_2) 點, 由此可求出 a_2。(參見示意圖2)

按此要領繼續做下去, 直到 $n+1$ 個點都做完爲止, 最後將 $n+1$ 個多項函數相加起來, 得到 n 次多項函數

$$g_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1}) \quad (1)$$

其中的係數由下面的遞迴方程組決定:

$$\begin{cases} a_0 = y_0 \\ a_0 + a_1(x_1 - x_0) = y_1 \\ a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2 \\ \qquad \vdots \\ a_0 + a_1(x_n - x_0) + \cdots + a_n(x_n - x_0)\cdots(x_n - x_{n-1}) = y_n \end{cases}$$

求出諸 a_k 之後, 代入 (1) 式, 就叫做牛頓插值公式, 相當簡潔易記, 諸 a_k 也易求。在上述中不需要等間距, 亦即 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 相鄰的間隔不必相等。

習題1: 求牛頓三次多項函數插值公式, 使其通過四點: (0,1), (1,2), (2,5), (3,22)。答: $p(x) = 1 + x + x(x-1) + 2x(x-1)(x-2)$。

乙、等間距的牛頓插值公式

爲了得到簡潔的公式, 考慮等間距的特例, 並且令間距爲 Δx, 亦即

$$x_1 = x_0 + \Delta x, \quad x_2 = x_0 + 2\Delta x, \ldots, \quad x_n = x_0 + n\Delta x,$$

或者

$$x_1 - x_0 = \Delta x, \quad x_2 - x_0 = 2\Delta x, \ldots, \quad x_n - x_0 = n\Delta x,$$

此時牛頓遞迴方程組變成:

$$\begin{cases} a_0 = y_0 \\ a_0 + a_1(\Delta x) = y_1 \\ a_0 + 2a_1(\Delta x) + 2!a_2(\Delta x)^2 = y_2 \\ \qquad \vdots \\ a_0 + na_1(\Delta x) + \cdots + C_k^n k! a_n(\Delta x)^k + \cdots + C_n^n n! a_n(\Delta x)^n = y_n \end{cases}$$

解得

$$a_k = \frac{1}{k!}\frac{\Delta^k y_0}{\Delta x^k}, \qquad k = 0, 1, \ldots, n. \tag{2}$$

我們定義 (右) 差分 $\Delta y_0 = y_1 - y_0$, 而 $\Delta^k y_0$ 表示第 k 階差分。另外, 我們也採用慣例: 將 $(\Delta x)^k$ 簡寫 Δx^k。

從而, 等間距的牛頓插值公式就是

$$\begin{aligned} p_n(x) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{\Delta x}(x - x_0) + \frac{1}{2!}\frac{\Delta^2 y_0}{\Delta x^2}(x - x_0)(x - x_1) \\ &\quad + \cdots + \frac{1}{k!}\frac{\Delta^k y_0}{\Delta x^k}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1}) \\ &\quad + \cdots + \frac{1}{n!}\frac{\Delta^n y_0}{\Delta x^n}(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{3}$$

這個式子並不漂亮, 我們進一步將它修飾一下: 對於一般點 x, 必可表成

$$x = x_0 + t \cdot \Delta x \tag{4}$$

之形, 其中 t 爲某個實數。於是

$$\begin{aligned} x - x_k &= x_0 + t\Delta x - x_k \\ &= t \cdot \Delta x - (x_k - x_0) \\ &= t \cdot \Delta x - k \cdot \Delta x = (t - k)\Delta x \end{aligned}$$

從而

$$(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1}) = t(t-1)\cdots(t-k+1)(\Delta x)^k = t^{(k)}(\Delta x)^k$$

其中 $t^{(k)} \equiv t(t-1)(t-2)\cdot(t-k+1)$ 爲排列數 P_k^t[註]。因此, 等間距的牛頓插值公式(在文獻上又叫做 Gregory-Newton 插值公式) 可以改寫成更簡潔的形式:

$$p_n(x) = p_n(x_0 + t \cdot \Delta x)$$

$$= y_0 + \Delta y_0 \cdot t^{(1)} + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} t^{(2)} + \cdots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} t^{(n)} \tag{5}$$

或者

$$\begin{aligned} p_n(x) &= p_n(x_0 + t \cdot \Delta x) \\ &= y_0 + C_1^t \Delta y_0 + C_2^t \Delta^2 y_0 + \cdots + C_n^t \Delta^n y_0. \end{aligned} \tag{6}$$

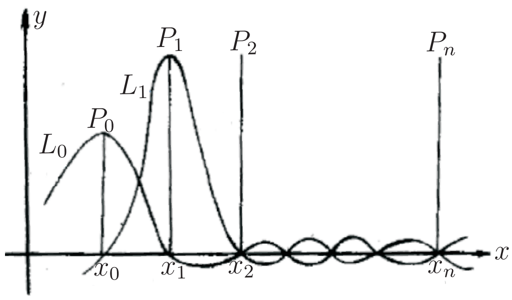
其中組合係數 $C_k^t = \dfrac{t(t-1)(t-2)\cdots(t-k+1)}{k!}$。這兩個公式都叫做等間距 Δx 的牛頓插值公式, 其中 (5) 式又叫做離散的 Maclaurin 公式, 而 (6) 式是連續化的差分三角形公式, 因為當 $t = n$ 時, (6) 式就變成差分三角形公式:

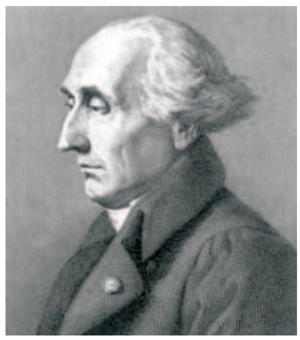
$$\begin{aligned} y_n(x) &= p_n(x_n) = f(x_0 + n \cdot \Delta x) \\ &= y_0 + C_1^n \Delta y_0 + C_2^n \Delta^2 y_0 + \cdots + C_n^n \Delta^n y_0. \end{aligned} \tag{7}$$

註: 排列數的記號 $t^{(k)}$ 類推於單項式 t^k, 因為差分公式 $\Delta t^{(k)} = kt^{(k-1)}$ 與微分公式 $Dt^k = kt^{k-1}$ 具有類推的相同形式。

4. 拉格朗日插值公式

拉格朗日也是利用因式定理, 但想法稍有不同, 過程與結果的對稱性、漂亮性也值得欣賞與品味。





拉格朗日 (Lagrange, 1736∼1813)

圖 3

甲、非等間距的拉格朗日插值公式

拉格朗日觀察到: 如果能夠找到 $n+1$ 個 n 次多項函數 $L_0(x), L_1(x), \ldots, L_n(x)$, 使得

$$\begin{array}{lll} L_0(x) & \text{通過} & (x_0, y_0), (x_1, 0), (x_2, 0), \ldots, (x_n, 0) \text{ 諸點} \\ L_1(x) & \text{通過} & (x_0, 0), (x_1, y_1), (x_2, 0), \ldots, (x_n, 0) \text{ 諸點} \\ \vdots & \vdots & \qquad\qquad\vdots \\ L_n(x) & \text{通過} & (x_0, 0), (x_1, 0), \ldots, (x_{n+1}, 0), (x_n, y_n) \text{ 諸點} \end{array}$$

(參見示意圖3), 它們叫做拉格朗日基本的多項式 (basis polynomials)。再做特殊的線性組合, 即全部加起來:

$$p_n(x) = L_0(x) + L_1(x) + \cdots + L_n(x)$$

那麼 $L(x)$ 就是所求。這是方法論中最重要的分析與綜合的思考方法。

根據多項式的因式定理, 我們令 n 次多項函數

$$L_0(x) = \alpha_0 \cdot (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$$

其中 α_0 爲待定常數。因爲 $L_0(x)$ 通過 (x_0, y_0) 點, 所以我們有

$$y_0 = \alpha_0 \cdot (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)$$

解 α_0 得到

$$\alpha_0 = y_0/[(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)]$$

於是得到

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)} y_0,$$

同理可得

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2) \cdots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_n)} y_1, \quad \text{等等。}$$

相加起來就是所欲求:

$$\begin{aligned} p_n(x) \;\; = \;\; & \frac{(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)} y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2) \cdots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_n)} y_1 \\ & + \cdots + \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})} y_n. \end{aligned} \tag{8}$$

這是通過 $n+1$ 點 (x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), $\ldots$, (x_n, y_n) 的 n 次多項函數, 叫做 拉格朗日插値公式, 非常對稱好記。它當然跟牛頓插值公式相同, 只是表現的形式不同, 我們可以比喻爲, 同一個人穿不同的衣服, 一個是穿著運動服, 另一個是穿著西裝, 各有不同的功能。

例 2: 求一個三次拉格朗日多項函數 $p_3(x)$, 使其通過五點: (0,5), (2,9), (4,1), (5,7) : 再求 $p_3(3)$。

解答:

$$\begin{aligned}
L_0(x) &= \frac{(x-2)(x-4)(x-5)}{(0-2)(0-4)(0-5)}\times 5=\frac{-1}{40}(x-2)(x-4)(x-5)\\
L_1(x) &= \frac{(x-0)(x-4)(x-5)}{(2-0)(2-4)(2-5)}\times 9=\frac{1}{12}x(x-4)(x-5)\\
L_2(x) &= \frac{(x-0)(x-2)(x-5)}{(4-0)(4-2)(4-5)}\times 1=\frac{-1}{8}x(x-2)(x-5)\\
L_3(x) &= \frac{(x-0)(x-2)(x-4)}{(5-0)(5-2)(5-4)}\times 7=\frac{1}{15}x(x-2)(x-4)
\end{aligned}$$

所以拉格朗日多項函數

$$p_3(x)=L_0(x)+L_1(x)+L_2(x)+L_3(x)$$

於是 $p_3(3)=\dfrac{21}{20}=1.05$。 □

習題 2: 求一個四次拉格朗日多項函數 $p_4(x)$, 使其通過下列 5 點: $(-2,3)$, (1,4), (3,9), (4,5), (5,3); 再求 $p_4(10)$。

乙、等間距的拉格朗日插值公式

仿等間距牛頓插值公式的情形, 我們也考慮等間距的拉格朗日插值公式, 經過計算, (8) 式就變成比較簡潔的形式:

$$\begin{aligned}
p_n(x)=p_n(x_0+t\cdot\Delta x) &= \frac{t^{(n+1)}}{(-1)^n tn!}y_0+\frac{t^{(n+1)}}{(-1)^{n-1}(t-1)(n-1)!}y_1+\cdots\\
&\quad +\frac{t^{(n+1)}}{(-1)[t-(n-1)](n-1)!}y_{n-1}+\frac{t^{(n+1)}}{(t-n)n!}y_n \qquad (9)
\end{aligned}$$

似乎沒有甚麼用途, 欣賞就好。

另外在統計學裡, 有一個迴歸分析的論題, 有點類似於插值問題。對於兩個統計變量 X,Y 觀察 n 次, 得到如下的數據:

$$\{(x_k,y_k)\mid k=1,2,\ldots,n\}.$$

我們要找一個多項函數來最佳適配 (best fit) 這一堆數據, 這就是曲線適配 (curve fitting) 問題。特別地, 若採用最簡單的一次函數 (直線) $y=ax+b$, 就是所謂的線性迴歸分析, 所求得的直線叫做迴歸直線。這個論題也非常有趣, 我們留待另文討論。

5. 經驗與科學理論

科學就是要追求大自然的真理, 利用數學來編織科學理論, 可供任何人檢驗與質疑。我們採用愛因斯坦有關科學理論的一個圖像來說明:

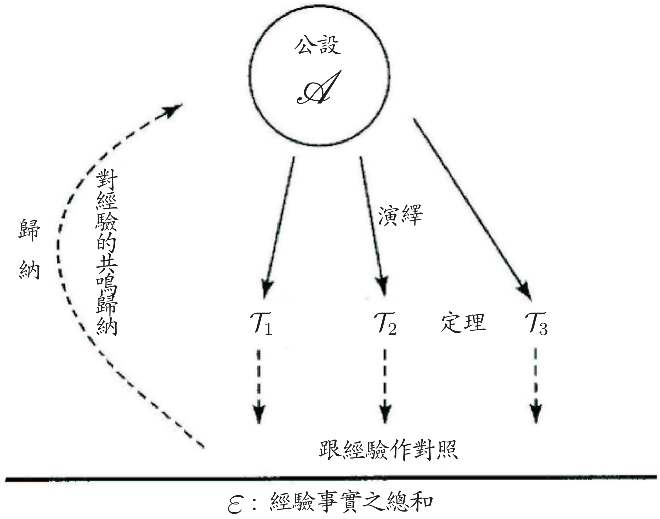


圖 4

科學的發展是由經驗事實 (ε) 出發, 對經驗產生共鳴, 然後透過創造想像力歸納出一組的公設 (A), 接著由公設演繹 (邏輯推理) 出各種定理 (T), 再跟經驗事實 (ε) 作對照 (檢驗), 除了必須適配既有的經驗事實之外 (這是最起碼的要求), 還要能夠預測未知。如果預測被證實, 那麼科學理論就算暫時成功, 但沒有保證永遠成功。如果預測被否證, 則科學理論就要重新建構。這整個合起來就是一套的科學理論。

把插值法應用到科學理論, 我們做個想像的比擬: 觀測數據

$$\{(x_k, y_k) \mid k = 1, 2, \ldots, n\}$$

代表經驗事實, 通過這些數據的一條曲線 (函數) $y = g(x)$ 代表適配經驗事實的一個科學理論。科學研究就是要找一條曲線通過這些點, 據此再作出預測, 若預測符合觀測事實, 則科學理論就暫時成立。同一組的經驗事實, 可以有許多個科學理論都適配經驗事實, 例如在圖 5 中, 我們作出 T_1, T_2, T_3 三個理論。換言之, 從經驗事實延拓出來的科學理論不唯一, 事實上有「無窮」多個, 經過競爭的結果才得到最適當的唯一理論暫時存留下來! 這是現代科學的哲學 (Philosophy of Science) 討論的課題之一。

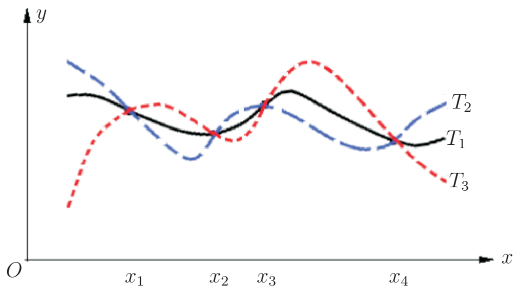


圖 5

例3: (歸納法的弔詭) 數列1, 4, 9, 16, □, 問空格應填多少?

大多數人會從首四項 1, 4, 9, 16 猜測出一般項的規律爲 $a_n = n^2$, 所以第 5 項爲 $a_5 = 5^2 = 25$。但是有位天才填 23, 被評爲 0 分。天才很不服氣, 找老師理論, 他論證說: 利用因式定理, 考慮 $a_n = n^2 + k(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)$, k 待定, 以 $n=5$ 代入, 令其爲 23, 解得 $k = -1/12$, 所以歸納出的一般項公式爲

$$a_n = n^2 - \frac{1}{12}(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)$$

從而 $a_5 = 23$。事實上, 這個填空題可以填上任何答案 x, 而且都有公式可循:

$$a_n = n^2 - \frac{x-25}{24}(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)$$

因此, 任何有限的觀測事實, 無法決定下一個觀測值, 也就是說可以發展出無窮多個理論。有限多個觀測值無法決定下一個值, 更不用說往後的無窮多個值。

6. 連續化與無窮化

首先我們引進逼近的觀點來看等間距牛頓插值公式。它的意思是: 對於一個未知函數 $y = f(x)$, 我們觀察到它的等間距的 $n+1$ 個點 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 的取值:

$$y_0 = f(x_0), \quad y_1 = f(x_1), \ldots, \quad y_n = f(x_n)$$

其中 $\Delta x = x_{k+1} - x_k$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$ 令 $x = x_0 + t\Delta x$, 那麼等間距牛頓插值公式, 即 (5) 式:

$$p_n(x) = p_n(x_0 + t\cdot\Delta x) = y_0 + \Delta y_0 \cdot t^{(1)} + \frac{\Delta^2 y_0}{2!} t^{(2)} + \cdots + \frac{\Delta^n y_0}{n!} t^{(n)}$$

就是通過 $n+1$ 個點 $(x_0, y_0), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$ 的 n 次多項函數, 它是 x 的函數, 又透過 $x = x_0 + t\cdot\Delta x$ 的關係, 表爲 t 的函數 (此地 x_0 固定, Δx 也暫時固定)。

換言之, $y=f(x)$ 與 $y=p_n(x)$ 在 $n+1$ 個點上被綑綁在一起。於是我們就理直氣壯地用已知的 $p_n(x)$ 來當作 $f(x)$ 之近似估計。

一個很自然的想法: 讓 $n\to\infty$ (叫做無窮化) 並且間距 $\Delta x\to 0$ (叫做連續化), 則 $f(x)$ 與 $p_n(x)$ 被綑綁在一起的點就愈多且越綑越細密, 那麼它們「理應」越來越逼近, 甚至終究合而為一, 此時 $f(x)$ 就對 x_0 點展開為泰勒級數。

詳言之, 對於任意固定的 x, 我們不妨假設 $x>x_0$。現在令

$$\Delta x=\frac{x-x_0}{n}\quad \text{且}\quad x_1=x_0+\Delta x,\ldots,x_n=x_0+n\cdot\Delta x$$

則 $n\cdot\Delta x=x-x_0$ 為固定數並且 $x_n=x$。於是 f 在 $n+1$ 個點 $x_0,x_1,\ldots,x_n$ 上的等間距牛頓插值公式為

$$p_n(x)=f(x_0+n\cdot\Delta x)=f(x_0)+\Delta f(x_0)\cdot n^{(1)}+\frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!}n^{(2)}+\cdots+\frac{\Delta^n f(x_0)}{n!}n^{(n)}$$

那麼在 $n\cdot\Delta x=x-x_0$ 保持為定數之下, 我們合理地猜測:

$$f(x)=\lim_{\Delta x\to 0}p_n(x). \tag{10}$$

註: 當 $\Delta x\to 0$ 時, 連帶地 $n\to\infty$。

下面我們來探究這個極限的明白表達式。為此, 令 $h=n\cdot\Delta x=x-x_0$, 則

$$\Delta x=\frac{h}{n}\quad\text{並且}\quad n=\frac{h}{\Delta x}.$$

亦即將長度為 h 的區間 $[x_0,x]$ 等分割為 n 段, 每一小段的長度為 Δx, 見圖 6:

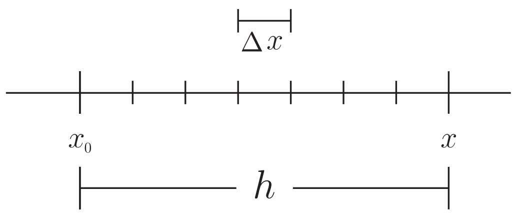


圖 6

於是等間距牛頓插值公式的通項為

$$\begin{aligned}\frac{\Delta^k f(x_0)}{k!}n^{(k)} &= \frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!}\Delta^k f(x_0)\\ &= \frac{\frac{h}{\Delta x}\Big(\frac{h}{\Delta x}-1\Big)\cdots\Big(\frac{h}{\Delta x}-k+1\Big)}{k!}\Delta^k f(x_0)\\ &= \frac{h(h-\Delta x)(h-2\cdot\Delta x)\cdots[h-(k-1)\cdot\Delta x]}{k!}\frac{\Delta^k f(x_0)}{(\Delta x)^k}\end{aligned}$$

現在令 $\Delta x\to 0$, 就得到

$$h(h-\Delta x)(h-2\cdot\Delta x)\cdots[h-(k-1)\cdot\Delta x]\to h^k$$

並且

$$\frac{\Delta f(x_0)}{\Delta x}\to f'(x_0),\quad \frac{\Delta^2 f(x_0)}{\Delta x^2}\to f''(x_0),\ldots,\quad \frac{\Delta^k f(x_0)}{\Delta x^k}\to f^{(k)}(x_0).$$

因此

$$\frac{\Delta^k f(x_0)}{k!}n^{(k)}\to\frac{\Delta^k f(x_0)}{k!}h^k.$$

從而, 在 $\Delta x\to 0$, 但 $h=n\cdot\Delta x=x-x_0$ 保持不變之下, 我們從有涯飛躍到無涯, 就得到

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

或者寫成

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

這就是鼎鼎著名的泰勒級數。特別地, 當 $x_0=0$ 時, 叫做 Maclaurin 級數:

$$f(x)=f(0)+f'(0)x+\frac{f''(0)}{2!}x^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n+\cdots$$

現在我們可以輕鬆簡潔的論述如下: 若 $f(x)$ 可以展開爲冪級數

$$f(x)=c_0+c_1(x-x_0)+c_2(x-x_0)^2+\cdots+c_n(x-x_0)^n+\cdots$$

則係數必爲

$$c_n=\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}$$

這樣就得到 $f(x)$ 的泰勒級數。然而, 我們還是看重從等間距牛頓插值公式一路尋幽探徑的過程。事實上, 這就是從差和分連續化與無窮化變成微積分的過程。離散與連續 (discrete and continuous) 之間的平行類推, 屬於數學方法論的層級, 值得特別強調。

上述就是泰勒的思路與發現過程。他由增分法 (the method of increments) 與有限差分演算法 (Calculus of finite differences) 起家, 在 1715 年得到偉大的發現:

定理 2: (**泰勒定理**, 1715**年**) 對於 "足夠好" 的一類函數都可以展開爲泰勒級數:

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

至於什麼是 "足夠好" 的條件, 以及如何證明泰勒定理, 則留給微積分去說清楚講明白。

泰勒 (Brook Taylor, 1685∼1731)

值得作個對照。泰勒分析的「原子」(基本組成要素) 是基本的單項函數:

$$1, \quad (x-x_0), \quad (x-x_0)^2, \quad (x-x_0)^3, \ldots$$

另外一種更重要且深刻的 Fourier 分析, 其「原子」是基本的周期波動函數:

$$1, \quad \cos x, \quad \sin x, \quad \cos 2x, \quad \sin 2x, \quad \cos 3x, \quad \sin 3x, \ldots$$

可以把「任意」2π 周期的函數 $f(x)$ 展開爲

$$f(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{k=1}^{\infty}(a_n\cos nx+b_n\sin nx)$$

這被形容爲美得像「一首科學的詩」(a scientific poem)。

例 4:Maclaurin 展開式:

$$\begin{aligned}
\sin x &= x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\frac{x^7}{7!}+\cdots+(-1)^n\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}+\cdots\\
\cos x &= 1-\frac{x^2}{2!}+\frac{x^4}{4!}-\frac{x^6}{6!}+\cdots+(-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!}+\cdots\\
e^x &= 1+x+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}+\frac{x^4}{4!}+\frac{x^5}{5!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots
\end{aligned}$$

在數學史上, 這是數學家首次有系統地對函數的結構作「庖丁解牛」的工作, 今日叫做泰勒分析法。這啟示我們: 對於一個函數, 只要在一點 $x=x_0$ 知道足夠多的資訊 (即各階導數), 那麼我們就知道了整個函數。這實在令人驚奇, 簡直就是「一個人不出門, 就能知天下事」。

歷史人物簡介

牛頓只有少數幾個學生, 泰勒是其中之一。泰勒具有相當的音樂與藝術才華。爲了探索音律之謎, 他首開其端採用微積分來研究小提琴的弦振動問題 (1713年), 開啟三角級數研究的先河。大約一個世紀之後, Fourier 研究熱傳導問題, 產生 Fourier 分析 (1807年), 這個研究才達於高潮。泰勒也研究線性透視 (linear perspective) 的理論, 影響後來的畫法幾何學 (Descriptive geometry) 與射影幾何學 (Projective geometry), 他的美術作品至今仍然被珍藏於英國倫敦的國家畫廊 (The National Gallery)。

—本文作者爲台大數學系退休教授—