



目录

- 引言与预备知识
- 最佳一致逼近多项式
- 最佳平方逼近
- 正交多项式
- 函数按正交多项式展开
- 曲线拟合的最小二乘法



正交多项式

- **定义3.9** 设 $g_n(x)$ 是首项系数 $a_n \neq 0$ 的 n 次多项式，如果多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \dots$ 满足

$$(g_j, g_k) = \int_a^b \rho(x) g_j(x) g_k(x) dx = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases} \quad (j, k = 0, 1, \dots)$$

则称多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \dots$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交，并称 $g_n(x)$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 n 次正交多项式

- 一般来说，当权函数 $\rho(x)$ 及区间 $[a, b]$ 给定以后，可以由线性无关的一组基 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 并利用正交化方法构造出正交多项式



正交化

□ 正交化方法

$$g_0(x) = 1,$$

$$g_n(x) = x^n - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x^n, g_k(x))}{(g_k(x), g_k(x))} g_k(x) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

□ 这样构造的正交多项式有以下性质

1. $g_n(x)$ 是最高项系数为1的 n 次多项式
2. 任一 n 次多项式 $P_n(x) \in H_n$ 均可表示为 $g_0(x), g_1(x), \dots, g_n(x)$ 的线性组合
3. 当 $n \neq m$ 时, $(g_n, g_m) = 0$ 且 $g_n(x)$ 与任一次数小于 n 的多项式正交



正交化（续）

4. 有递推关系

$$g_{n+1}(x) = (x - \alpha_n)g_n(x) - \beta_n g_{n-1}(x), \quad (n = 0, 1, \dots)$$

其中 $g_0(x) = 1, \quad g_{-1}(x) = 0$

$$\alpha_n = \frac{(xg_n, g_n)}{(g_n, g_n)}, \quad (n = 0, 1, \dots)$$

$$\beta_n = \frac{(g_n, g_n)}{(g_{n-1}, g_{n-1})}, \quad (n = 1, 2, \dots)$$

5. 设 $g_0(x), g_1(x), \dots$ 是在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列，则 $g_n(x) (n \geq 1)$ 的 n 个根都是单重实根，且都在区间 (a, b) 内



Legendre (勒让德) 多项式

Legendre 多项式

- 当区间为 $[-1,1]$ 、权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 时，由 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 正交化得到的多项式

$$P_0(x) = 1 \quad P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \quad (n = 1, 2, \dots)$$

- 由于 $(x^2 - 1)^n$ 是 $2n$ 次多项式，求 n 阶导数后得

$$P_n(x) = \frac{1}{2^{2n} n!} (2n)(2n-1) \cdots (n+1)x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0$$

最高项系数为1的Legendre 多项式

$$\tilde{P}_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$$



Legendre多项式的性质

□ 性质1 正交性

$$\int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{2}{2n+1}, & m = n \end{cases}$$

□ 性质2 奇偶性

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$$

- n 为偶数时 $P_n(x)$ 为偶函数, n 为奇数时为奇函数

□ 性质3 递推关系

$$P_0(x) = 1 \quad P_1(x) = x$$

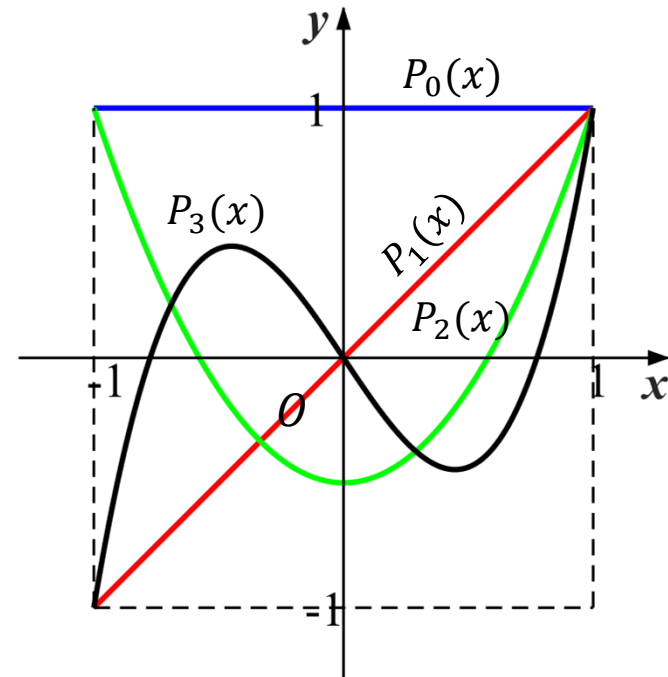
$$(n+1)p_{n+1}(x) = (2n+1)xp_n(x) - np_{n-1}(x) \quad (n = 1, 2, \dots)$$



Legendre多项式的性质 (续)

■ 根据递推公式

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= (3x^2 - 1)/2 \\ P_3(x) &= (5x^3 - 3x)/2 \\ P_4(x) &= (35x^4 - 30x^2 + x)/8 \\ P_5(x) &= (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8 \\ P_6(x) &= (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)/16 \\ &\dots \end{aligned}$$



□ 性质4 在所有最高项系数为1的 n 次多项式中， $\tilde{P}_n(x)$ 在 $[-1, 1]$ 上与零的平方误差最小

■ 由于权重函数为1

□ 性质5 $P_n(x)$ 在区间 $(-1, 1)$ 内有 n 个不同实零点



Chebyshev多项式

□ Chebyshev多项式

- 当权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 、区间为 $[-1,1]$ 时，由序列 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 正交化得到的正交多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), |x| \leq 1$$

- 若令 $x = \cos \theta$ ，则

$$T_n(x) = \cos(n\theta), 0 \leq \theta \leq \pi$$

□ Chebyshev多项式并不是三角函数

□ 权函数不同、正交多项式也不同



Chebyshev多项式的性质

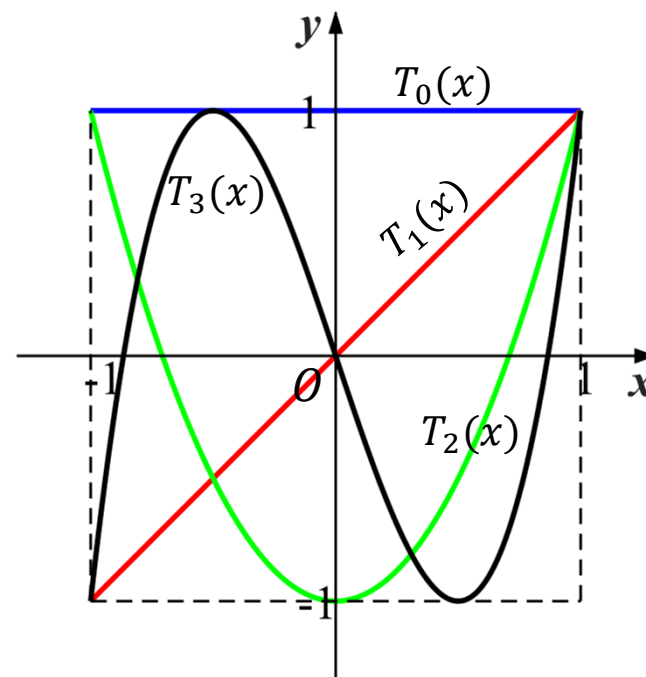
□ 性质1 递推关系

$$T_0(x) = 1 \quad T_1(x) = x$$

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

■ 由递推关系式可得

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_2(x) &= 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 4x^3 - 3x \\ T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1 \\ T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x \\ T_6(x) &= 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1 \\ &\dots \end{aligned}$$





Chebyshev多项式的性质（续）

□ 性质2 $T_n(x)$ 对零的偏差最小

- 定理3.7 在区间 $[-1, 1]$ 上所有最高项系数为1的 n 次多项式中, $\omega_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与零的偏差最小, 其偏差为 $\frac{1}{2^{n-1}}$
- $T_n(x)$ 的最高项系数是 $2^{n-1} (n \geq 1)$
- 在区间 $[-1, 1]$ 上, 将 x^n 在 H_{n-1} 中的“最佳一致逼近多项式”记为 $P_{n-1}^*(x)$, 则误差

$$x^n - P_{n-1}^*(x) = \omega_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$$



例3.3

□ 求 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[-1,1]$ 上的最佳二次逼近多项式

■ 考虑“最佳一致逼近多项式”， $P_2^*(x)$ 应满足

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - P_2^*(x)| = \min$$

■ 注意到， $x^2 + 2x - 1$ 能够被二次函数完美表达，因此只有 $2x^3$ 会导致逼近误差

■ 由定理3.7可知，

$$\frac{1}{2} [f(x) - P_2^*(x)] = x^3 - \hat{P}_2^*(x) = \frac{1}{2^{3-1}} T_3(x)$$



例3.3 (续)

■ 代入

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

■ 得到

$$\begin{aligned} P_2^*(x) &= f(x) - \frac{1}{2}T_3(x) \\ &= x^2 + \frac{7}{2}x - 1 \end{aligned}$$

就是 $f(x)$ 在 $[-1, 1]$ 上的最佳二次逼近多项式



Chebyshev多项式的性质（续）

- 性质**3** Chebyshev多项式 $\{T_n(x)\}$ 在区间 $[-1, 1]$ 上带权 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交，且

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

- 性质**4** $T_{2k}(x)$ 只含 x 的偶次幕， $T_{2k+1}(x)$ 只含 x 的奇次幕



Chebyshev多项式的性质（续）

□ 性质**5** $T_n(x)$ 在区间 $[-1,1]$ 上有 n 个零点

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

□ 此外， x^n 可以用 T_0, T_1, \dots, T_n 的线性组合表示

$$x^n = 2^{1-n} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} T_{n-2k}(x)$$

其中规定 $T_0 = 1/2$



第二类Chebyshev多项式

□ 第二类Chebyshev多项式

- 在区间 $[-1,1]$ 上带权 $\rho(x) = \sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式

$$U_n(x) = \frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}}$$

□ 正交关系

$$\int_{-1}^1 U_n(x)U_m(x)\sqrt{1-x^2}dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{\pi}{2}, & m = n \end{cases}$$

□ 递推关系式

$$U_0(x) = 1 \quad U_1(x) = 2x$$

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x) \quad (n = 1, 2, \dots)$$



Laguerre (拉盖尔) 多项式

□ Laguerre多项式

- 在区间 $[0, \infty)$ 上带权 $\rho(x) = e^{-x}$ 的正交多项式

$$L_n(x) = e^n \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

□ 正交关系

$$\int_0^{\infty} L_n(x)L_m(x)e^{-x}dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ (n!)^2, & m = n \end{cases}$$

□ 递推关系式

$$L_0(x) = 1 \quad L_1(x) = 1 - x$$

$$L_{n+1}(x) = (1 + 2n - x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x) \quad (n = 1, 2, \dots)$$



Hermite (埃尔米特) 多项式

□ Hermite多项式

- 在区间 $(-\infty, \infty)$ 上带权 $\rho(x) = e^{-x^2}$ 的正交多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$$

□ 正交关系

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & m = n \end{cases}$$

□ 递推关系式

$$H_0(x) = 1 \quad H_1(x) = 2x$$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \quad (n = 1, 2, \dots)$$



目录

- 引言与预备知识
- 最佳一致逼近多项式
- 最佳平方逼近
- 正交多项式
- 函数按正交多项式展开
- 曲线拟合的最小二乘法



函数按正交多项式展开

- 设 $f(x) \in C[a, b]$ 用正交多项式 $\{g_0(x), g_1(x), \dots, g_n(x)\}$ 作基, 求最佳平方逼近多项式

$$S_n(x) = a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + \dots + a_n g_n(x) \quad (3.5.1)$$

- 由 $\{g_k(x)\}$ 的正交性及式(3.3.13),

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = (f, \varphi_k) \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.3.13)$$

可求得系数

$$a_k = \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.5.2)$$



函数按正交多项式展开（续）

□ $f(x)$ 的最佳平方逼近多项式为

$$S_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} g_k(x) \quad (3.5.3)$$

□ 由式(3.3.15)

$$\|\delta\|_2^2 = (f, f) - (f, S^*) = \|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n a_k^*(\varphi_k, f) \quad (3.3.15)$$

可得均方误差为

$$\|\delta_n\|_2 = \|f - S_n\|_2 = \sqrt{\|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} (f, g_k)} \quad (3.5.4)$$



函数按正交多项式展开（续）

- 若 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上按正交多项式 $\{g_k(x)\}$ 展开，系数 $a_k (k = 0, 1, \dots)$ 按式(3.5.2)计算，这样可得到 $f(x)$ 的展开式

$$f(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} a_k g_k(x) \quad (3.5.5)$$

- 式(3.5.5)右端级数称为**广义Fourier级数**
 - 系数 a_k 称为**广义Fourier系数**
- 任何 $f(x) \in C[a, b]$ 均可展开成**广义Fourier级数**，其部分和 $S_n(x)$ 是 $f(x)$ 的最佳平方逼近
- 系数 a_k 与 n 无关： n 增加时，只要计算增加的系数
 - 在 $f(x)$ 满足一定条件下也可一致收敛到 $f(x)$



举例

$$\|\delta_n\|_2 = \sqrt{\|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} (f, g_k)} \quad (3.5.4)$$

- 考虑函数 $f(x) \in C[-1,1]$ 按 Legendre 多项式 $\{P_0(x), P_1(x), \dots\}$ 展开的最佳平方逼近多项式 S_n^* 。由式(3.5.1)和式(3.5.2)可得

$$S^*(x) = a_0^* P_0(x) + a_1^* P_1(x) + \dots + a_n^* P_n(x) \quad (3.5.6)$$

■ 其中

$$a_k^* = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_k(x) dx \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.5.7)$$

- 根据式(3.5.4)平方误差为

$$\|\delta_n\|_2^2 = \int_{-1}^1 f^2(x) dx - \sum_{k=0}^n \frac{2}{2k+1} a_k^{*2} \quad (3.5.8)$$



例3.4

□ 求 $f(x) = e^x$ 在 $[-1,1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式

■ 先计算 (f, P_k) ($k = 0,1,2,3$), 即

$$(f, P_0) = \int_{-1}^1 e^x dx \approx 2.3504 \quad (f, P_1) = \int_{-1}^1 x e^x dx \approx 0.7358$$

$$(f, P_2) = \int_{-1}^1 \left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \right) e^x dx \approx 0.1431$$

$$(f, P_3) = \int_{-1}^1 \left(\frac{5}{2}x^2 - \frac{3}{2} \right) e^x dx \approx 0.02013$$



例3.4 (续)

$$a_k^* = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} \quad (3.5.7)$$

■ 由式(3.5.7)得

$$a_0^* = 1.1752, a_1^* = 1.1036, a_2^* = 0.3578, a_3^* = 0.07046$$

■ 代入式(3.5.6), 得

$$S_3^*(x) = 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3$$

■ 均方误差为

$$\|\delta_n\|_2 = \|e^x - S_3^*(x)\|_2 = \sqrt{\int_{-1}^1 e^{2x} dx - \sum_{k=0}^3 \frac{2}{2k+1} a_k^{*2}} \leq 0.0084$$

■ 最大误差为

$$\|\delta_n\|_\infty = \|e^x - S_3^*(x)\|_\infty \leq 0.0112$$



任意区间上的函数逼近

□ 如果 $f(x) \in C[a, b]$, 求 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的最佳平方逼近多项式

1. 作变换

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2} \quad (-1 \leq t \leq 1)$$

得到 $F(t) = f(x) = f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$ 为定义在 $[-1, 1]$ 上的函数

2. 用 Legendre 多项式, 求 $F(t)$ 的最佳平方逼近多项式 $S_n^*(t)$

3. 回代, 得到结果 $S(x) = S_n^*\left(\frac{1}{b-a}(2x - a - b)\right)$



讨论

- Legendre多项式 $\{P_k(x)\}$ 是在区间 $[-1,1]$ 上由 $\{1, x, x^2, \dots, x^k, \dots\}$ 正交化得到的
 - 利用函数的Legendre展开部分和得到的最佳平方逼近多项式与解法方程得到的 H_n 中的最佳平方逼近多项式是一致的
- 当 n 较大时求法方程会出现病态方程，计算误差较大，不能使用
- 而用Legendre展开不用解线性方程组，不存在病态问题，计算公式使用起来也较方便，因此通常都用此法求最佳平方逼近多项式



目录

- 引言与预备知识
- 最佳一致逼近多项式
- 最佳平方逼近
- 正交多项式
- 函数按正交多项式展开
- 曲线拟合的最小二乘法



数据拟合

- 在科学实验的统计方法研究中，往往要从一组实验数据 $(x_i, y_i) (i = 0, 1, \dots, m)$ 中寻找自变量 x 与因变量 y 之间的函数关系 $y = F(x)$
 - 由于观测数据往往不准确，因此不要求 $y = F(x)$ 经过所有点 (x_i, y_i) 而只要求在给定点 x_i 上误差 $\delta_i = F(x_i) - y_i (i = 0, 1, \dots, m)$ 按某种标准最小
- 若记 $\boldsymbol{\delta} = (\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_m)^T$ ，就是要求向量 $\boldsymbol{\delta}$ 的范数 $\|\boldsymbol{\delta}\|$ 最小
 - 如果用最大范数，计算上困难较大
 - 通常就采用Euclid范数 $\|\boldsymbol{\delta}\|_2$ 作为误差度量的标准



一般的最小二乘逼近

- 对于给定的一组数据 $(x_i, y_i) (i = 0, 1, \dots, m)$, 要求在函数空间 $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 中 找一个函数 $y = S^*(x)$, 使误差平方和满足

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \delta_i^2 = \sum_{i=0}^m [S^*(x_i) - y_i]^2 = \min_{S(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^m [S(x_i) - y_i]^2 \quad (3.6.1)$$

- 这里

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x) \quad (3.6.2)$$

- 若 $\varphi_k(x)$ 是 k 次多项式, $S(x)$ 就是 n 次多项式

- 几何语言说, 就称为曲线拟合的**最小二乘**



一般的最小二乘逼近（续）

□ 确定 $S(x)$ 的具体形式

- 不是单纯数学问题，还与所研究问题的运动规律及所得观测数据 (x_i, y_i) 有关
- 通常要从问题的运动规律及给定数据描图来确定 $S(x)$ 的形式，并通过实际计算选出较好的结果

□ 把最小二乘法中 $\|\delta\|_2^2$ 考虑为加权平方和

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) [S^*(x_i) - f(x_i)]^2 \quad (3.6.3)$$

- $\omega(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，它表示不同点 $(x_i, f(x_i))$ 处的数据比重
- $\omega(x_i)$ 可表示在点 $(x_i, f(x_i))$ 处重复观测的次数

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$$



求解过程

(3.6.2)

□ 用最小二乘法求拟合曲线的问题

- 在形如式(3.6.2)的 $S(x)$ 中求一函数 $y = S^*(x)$, 使式(3.6.3)取得最小

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \omega(x_i)[S^*(x_i) - f(x_i)]^2 \quad (3.6.3)$$

- 等价于求多元函数极小点 $(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*)$

$$I(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \left[\sum_{i=0}^n a_i \varphi_i(x_i) - f(x_i) \right]^2 \quad (3.6.4)$$

与3.3节讨论的“函数的最佳平方逼近”类似



求解过程（续）

- 由求多元函数极值的必要条件，有

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2 \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_i) - f(x_i) \right] \varphi_k(x_i) = 0 \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

- 若记

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i) \quad (3.6.5)$$

$$(f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) f(x_i) \varphi_k(x_i) \equiv d_k \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

- 则必要条件可改写为

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = d_k \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.6.6)$$



求解过程（续）

- 此方程称为**法方程**它也可写成矩阵形式

$$\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{d}$$

其中

$$\mathbf{a} = (a_0, a_1, \dots, a_n)^T \quad \mathbf{d} = (d_0, d_1, \dots, d_n)^T$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \dots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \quad (3.6.7)$$

- 该方程是否有解？
- 该方程是否有唯一解？



要求 $m > n$

求解过程（续）

- 由于 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 线性无关，故系数行列式 $|G| \neq 0$ ，于是方程组(3.6.6)有唯一解

$$a_k = a_k^* \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

- 从而得到函数 $f(x)$ 的最小二乘解为

$$S^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + \dots + a_n^* \varphi_n(x) \quad (3.3.14)$$

- 同样可以证明充分性：对于任何 $S(x) \in \Phi$ ，都有

$$\sum_{i=0}^m \omega(x_i) [S^*(x_i) - f(x_i)]^2 \leq \sum_{i=0}^m \omega(x_i) [S(x_i) - f(x_i)]^2$$

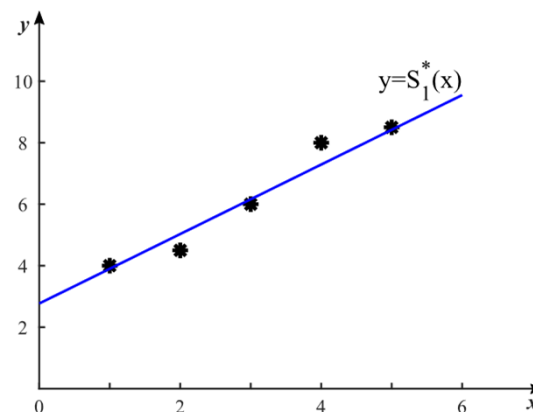
故 $S^*(x)$ 确是所求最小二乘解



例3.5

□ 已知一组实验数据如下表，求它的拟合曲线

x_i	1	2	3	4	5
f_i	4	4.5	6	8	8.5
ω_i	2	1	3	1	1



- 在坐标纸上标出所给数据，观测到各点分布在一条直线附近，故可选择线性函数作拟合曲线
- 令 $S_1(x) = a_0 + a_1x$ ，这里 $m = 4, n = 1, \varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x$ 故

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=0}^4 \omega_i = 8 \quad (\varphi_0, \varphi_1) = (\varphi_1, \varphi_0) = \sum_{i=0}^4 \omega_i x_i = 22$$



例3.5 (续)

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = d_k \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.6.6)$$

$$(\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=0}^4 \omega_i x_i^2 = 74$$

$$(\varphi_0, f) = \sum_{i=0}^4 \omega_i f_i = 47 \quad (\varphi_1, f) = \sum_{i=0}^4 \omega_i x_i f_i = 145.5$$

■ 由式(3.6.6)得方程组

$$\begin{cases} 8a_0 + 22a_1 = 47 \\ 22a_0 + 74a_1 = 145.5 \end{cases}$$

■ 解得

$$a_0 = 2.77, a_1 = 1.13$$

■ 于是所求拟合曲线为

$$S_1^*(x) = 2.77 + 1.13x$$

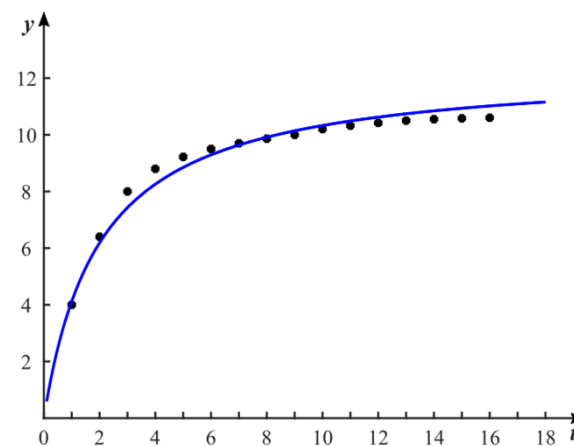


例3.6

- 在某化学反应过程中，根据实验所得生成物的质量分数与时间的关系如下表所示，求质量分数 y 与时间 t 的拟合曲线 $y = F(t)$

t/min	1	2	3	14	15	16
$y/\times 10^{-3}$	4.00	6.40	8.00	10.55	10.58	10.60

- 质量分数开始时增加较快，后来逐渐减慢，到一定时间就基本稳定在一个水平上，即当 $t \rightarrow \infty$ 时， y 趋于某个数，故 $y = F(t)$ 有一水平渐近线
- $t = 0$ 时，反应未开始，质量分数为零





例3.6 (续)

1. 设想 $y = F(t)$ 是双曲线型 $1/y = a + b/t$, 即 $y = t/(at + b)$, 与给定数据的规律大致符合

■ 为了确定 a, b 的值, 先将上述关系改写为

$$y = \frac{t}{at + b} \Leftrightarrow \frac{1}{y} = a + \frac{b}{t}$$

■ 令 $\bar{y} = 1/y, x = 1/t$, 因此可以用 x 的线性函数 $S_1(x) = a + bx$ 拟合数据 (x_i, \bar{y}_i) ($i = 1, 2, \dots, 16$)

■ (x_i, \bar{y}_i) 由原始数据 (t_i, y_i) 变换而来

■ 与例3.5类似, 得到下面的方程组

$$\begin{cases} 16a + 3.38073b = 1.8372 \times 10^3 \\ 3.38073a + 1.58435b = 0.52886 \times 10^3 \end{cases}$$



例3.6 (续)

■ 得 $a = 80.6621, b = 161.6822$

■ 从而得到

$$y = t/(80.6621t + 161.6822) = F^{(1)}(t)$$

■ 其误差为

$$\delta_i^{(1)} = y_i - F^{(1)}(t_i) (i = 1, 2, \dots, 16)$$

2. 符合给定数据的函数还可选为指数形式, 此时令曲线为

$$y = ae^{b/t}$$

■ 当 $t \rightarrow \infty$ 时, $y \rightarrow a$; 当 $t \rightarrow 0$ 时, 若 $b < 0$, 则 $y \rightarrow 0$ 且 t 增加时 y 增加, 与给出数据规律相同



例3.6 (续)

- 为了确定 a 与 b ，对上式两端取对数

$$\ln y = \ln a + \frac{b}{t}$$

- 令 $\hat{y} = \ln y, A = \ln a, x = 1/t$
- 由 (t_i, y_i) 计算出 (x_i, \hat{y}_i) ，拟合数据 (x_i, \hat{y}_i) 的曲线仍为 $S_1(x) = A + bx$
- 用例3.5的方法计算出 $A = -4.48072, b = -1.0567$ ，从而 $a = e^A = 11.3253 \times 10^{-3}$
- 最后求得

$$y = 11.3253 \times 10^{-3} e^{-1.0567/t} = F^{(2)}(t)$$

- 误差为
$$\delta_i^{(2)} = y_i - F^{(2)}(t_i) (i = 1, 2, \dots, 16)$$



例3.6 (续)

□ 怎样比较这两个数学模型的好坏呢？

- 分别计算各点误差，从中挑选误差较小的模型
- 经过计算可得

$$\|\delta^{(1)}\|_{\infty} = 0.568 \times 10^{-3}$$

$$\|\delta^{(2)}\|_{\infty} = 0.277 \times 10^{-3}$$

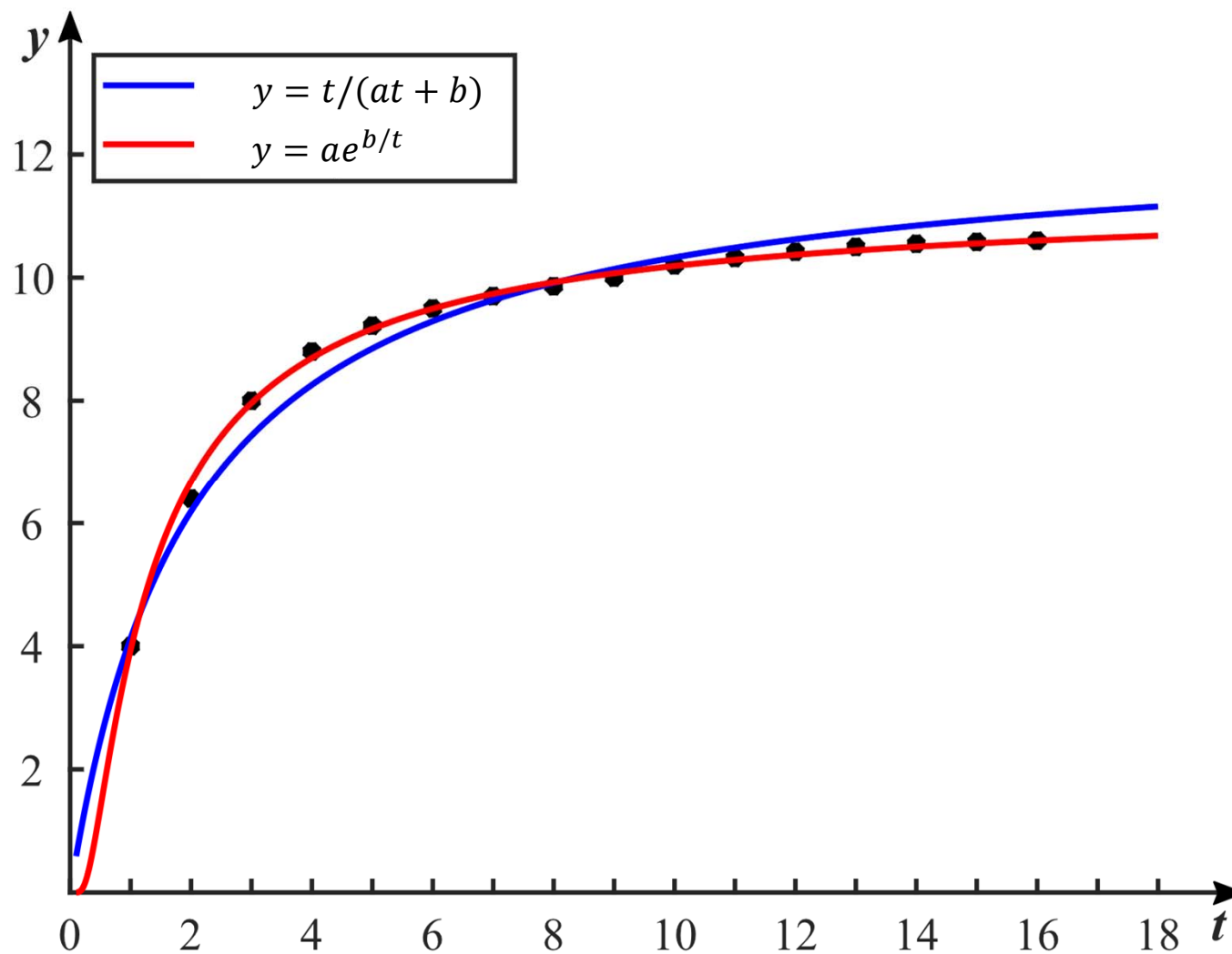
$$\|\delta^{(1)}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m (\delta_i^{(1)})^2} = 1.19 \times 10^{-3}$$

$$\|\delta^{(2)}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m (\delta_i^{(2)})^2} = 0.34 \times 10^{-3}$$

$\|\delta^{(2)}\|_2$ 及 $\|\delta^{(2)}\|_{\infty}$
都比较小，所以用
 $y = F^{(2)}(t)$ 作拟合
曲线比较好



例3.6 (续)





数据拟合流程

1. 在坐标系中画出数据点，观察分布特点
 2. 由数据点的分布，取基函数系 $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$

{	多项式
	指数函数
	三角函数
 3. 构成法方程并求解，得到拟合曲线，分析误差
- 拟合曲线的数学模型并不是一开始就能选得好的，往往要通过分析确定若干模型后，再经过实际计算，才能选到较好的模型
- 存在过拟合的风险！



用正交函数作最小二乘拟合

- 最小二乘法得到的法方程组(3.6.6)，其系数矩阵 \mathbf{G} 可能是病态的

$$\mathbf{G}\mathbf{a} = \mathbf{d}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \dots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \quad (3.6.7)$$

- 考虑 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 是关于点集 $\{x_i\}$ ($i = 0, 1, \dots, m$) 带权 $\omega(x)$ ($i = 0, 1, \dots, m$) 正交的函数族

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i) = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases} \quad (3.6.8)$$

$$a_k = \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.5.2)$$



用正交函数作最小二乘拟合（续）

- 根据(3.6.6)

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = d_k \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.6.6)$$

可得

$$a_k^* = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} = \frac{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) f(x_i) \varphi_k(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) \varphi_k^2(x_i)} \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.6.9)$$

✓ 与(3.5.2)一致

- 经过化简，易得平方误差为

$$\|\delta\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \sum_{i=0}^m A_k (a_k^*)^2$$

✓ 与(3.5.4)一致

与3.4.1节函数正交化
手续一致



正交化

□ 根据给定节点 x_0, x_1, \dots, x_m 及权函数 $\omega(x) > 0$,
构造带权 $\omega(x)$ 正交的多项式 $\{P_n(x)\}$

■ 注意 $n \leq m$, 递推公式

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = (x - \alpha_1)P_0(x) \\ P_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)P_k(x) - \beta_k P_{k-1}(x) (k = 1, 2, \dots, n-1) \end{cases} \quad (3.6.10)$$

■ $P_k(x)$ 是首项系数为1的 k 次多项式, 根据正交性得

$$\begin{cases} \alpha_{k+1} = \frac{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) x_i P_k^2(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) P_k^2(x_i)} = \frac{(xP_k, P_k)}{(P_k, P_k)} \\ \beta_k = \frac{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) P_k^2(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) P_{k-1}^2(x_i)} = \frac{(P_k, P_k)}{(P_{k-1}, P_{k-1})} \end{cases} \quad (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (3.6.11)$$



与3.5节函数按正交多项式
展开一致

计算过程

□ 用正交多项式 $\{P_k(x)\}$ 的线性组合作最小二乘

- 只要在根据式(3.6.10)及式(3.6.11)逐步求 $P_k(x)$ 的同时，相应计算出系数

$$a_k = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) f(x_i) P_k(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) P_k^2(x_i)} \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

- 逐步把 $a_k^* P_k(x)$ 累加到 $F(x)$ 中去，最后就可得到所求的拟合曲线

$$y = F(x) = a_0^* P_0(x) + a_1^* P_1(x) + \dots + a_n^* P_n(x)$$

□ n 可事先给定或在计算过程中根据误差确定

- 当逼近次数增加一次，只要把程序中循环数加1



多元最小二乘拟合

- 已知多元函数 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_l)$ 的一组测量数据 $(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li}, y_i)$ ，以及一组权系数 $\omega_i > 0 (i = 0, 1, \dots, m)$ ，要求函数

$$S_n(x_1, x_2, \dots, x_l) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_1, x_2, \dots, x_l), n \leq m$$

使得

$$F(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=1}^m \omega_i [y_i - S_n(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li})]^2$$

最小



多元最小二乘拟合（续）

- 这与式(3.6.4)的极值问题完全一样，系数 a_0, a_1, \dots, a_n 同样满足法方程组(3.6.6)，

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = d_k \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.6.6)$$

只是这里

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=1}^m \omega(x_i) \varphi_k(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li}) \varphi_j(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li})$$

- 求解法方程组(3.6.6)就可得到 $a_k (k = 0, 1, \dots, n)$ ，从而得到 $S_n(x_1, x_2, \dots, x_l)$



数据拟合 vs 数据插值

□ 数据拟合

- 对拟合函数**不要求**它通过所给的数据点
- 所处理的数据量大且不能保证每一个数据没有误差
- 要求一个函数严格通过每一个数据点是不合理的
- 数据拟合方法求拟合函数

□ 数据插值

- 插值函数则**必须通过**每一个数据点
- 插值方法求插值函数



总结

□ 引言与预备知识

- 函数逼近与计算、一致逼近、均方逼近
- 一致逼近的存在性、连续函数空间

□ 最佳一致逼近多项式

- 定义、偏差、最佳逼近多项式的偏差点性质
- Chebyshev定理，推论、最佳一次逼近多项式

□ 最佳平方逼近

- 定义、函数内积、函数范数、正交函数
- 线性无关函数、最佳平方逼近函数、法方程



总结（续）

□ 正交多项式

- 带权 $\rho(x)$ 正交、正交化
- Legendre多项式、Chebyshev多项式

□ 函数按正交多项式展开

- 简化的计算过程、任意区间上的函数逼近

□ 曲线拟合的最小二乘法

- 数据拟合、最小二乘逼近、法方程
- 用正交函数作最小二乘拟合、正交化