

第3章 函数逼近与计算

张利军

zlj@nju.edu.cn

<http://cs.nju.edu.cn/zlj>





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



问题背景

□ 在数值计算中经常遇到求函数值的问题，我们希望求出便于计算且计算量省的公式来近似已知函数 $f(x)$

■ 例如，Taylor展开式的部分和

$$P_n(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} (x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

就是一种近似公式，在 x_0 附近的误差较小

■ 例如， $f(x) = e^x$ 在 $[-1,1]$ 上用

$$P_4(x) = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4$$

来近似



问题背景（续）

■ 误差

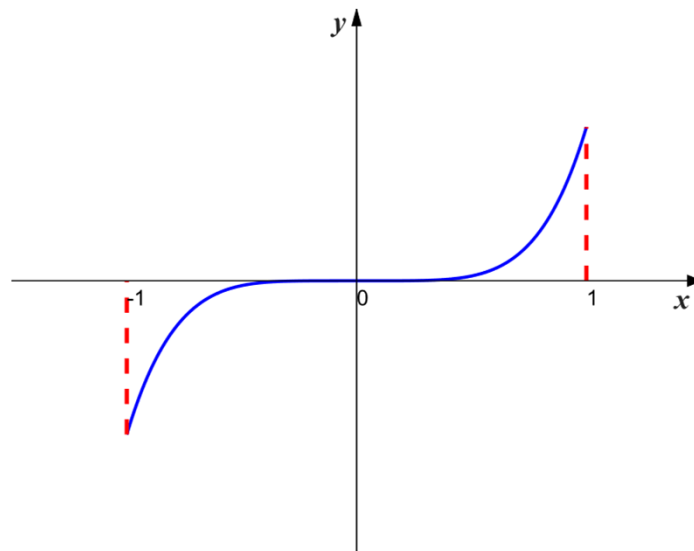
$$R_4(x) = e^x - P_4(x) = \frac{1}{120}x^5 e^\varepsilon, \quad \varepsilon \in (-1, 1)$$

■ 误差限

$$|R_4(x)| \leq \frac{e}{120}|x^5| \quad \max_{-1 \leq x \leq 1} |R_4(x)| \leq \frac{e}{120} \approx 0.0226$$

■ 误差分布如下图所示，它在整个区间上误差较大

如精度要求较高，则需取很多项，这样既费时又多占存储单元





函数逼近与计算

□ 函数逼近与计算要解决的问题

- 在给定精度下求计算次数最少的近似公式

□ 定义：对于函数类 A 中给定的函数 $f(x)$ ，要求在另一类较简单且便于计算的函数类 B 中，求函数 $P(x) \in B \subseteq A$ ，使 $P(x)$ 与 $f(x)$ 之差在某种度量意义下最小

- 函数类 A 通常是区间 $[a, b]$ 上的连续函数，记作 $C[a, b]$
- 函数类 B 通常为代数多项式、分式有理函数或三角多项式等



度量标准

□ 一致逼近或均匀逼近

$$\|f(x) - P(x)\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P(x)|$$

■ $\|\cdot\|_{\infty}$ 是范数

□ 均方逼近或平方逼近

$$\|f(x) - P(x)\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - P(x)]^2 dx}$$

■ $\|\cdot\|_2$ 是范数

□ 本章主要研究在这两种度量标准下用代数多项式 $P_n(x)$ 逼近 $f(x) \in C[a, b]$

■ 最佳一致逼近多项式、最佳平方逼近多项式



一致逼近的存在性

□ 对于 $[a, b]$ 上的连续函数 $f(x)$ ，是否存在多项式 $P_n(x)$ 一致收敛于 $f(x)$ ？

■ 用插值法或Taylor展开求 $f(x) \in C[a, b]$ 的逼近多项式，在某些点上可能没有误差，但在整个区间 $[a, b]$ 上误差可能很大，例如Runge现象

□ 定理**3.1**(Weierstrass定理) 设 $f(x) \in C[a, b]$ ，则对于任何 $\varepsilon > 0$ ，总存在一个代数多项式 $P(x)$ ，使

$$\|f(x) - P(x)\|_{\infty} < \varepsilon$$

在 $[a, b]$ 上一致成立



定理3.1

□ Bernstein给出一种构造性证明，他根据函数整体逼近的特性造出Bernstein多项式

$$\begin{cases} B_n(f, x) = \sum_{k=0}^n f\left(\frac{k}{n}\right) P_k(x) \\ P_k(x) = \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} \end{cases} \quad (3.1.4)$$

- 证明了 $\lim_{n \rightarrow \infty} B_n(f, x) = f(x)$ 在 $[0,1]$ 上一致成立
- 若 $f(x)$ 在 $[0,1]$ 上 m 阶导数连续，则

$$\lim_{n \rightarrow \infty} B_n^{(m)}(f, x) = f^{(m)}(x)$$



定理3.1 (续)

- 对于 $B_n(f, x)$, 可以证明

$$\sum_{k=0}^n P_k(x) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k (1-x)^{n-k} = 1$$

这只要从恒等式

$$(x+y)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^k y^{n-k}$$

中令 $y = 1 - x$ 就可得到

- 当 $x \in [0, 1]$ 时还有 $P_k(x) \geq 0$, 于是

$$\sum_{k=0}^n |P_k(x)| = \sum_{k=0}^n P_k(x) = 1$$

是有界的



定理3.1（续）

- 因而只要 $|f(x)| \leq \delta$ 对于任意 $x \in [0,1]$ 成立，则

$$|B_n(f, x)| \leq \max_{0 \leq x \leq 1} |f(x)| \sum_{k=0}^n |P_k(x)| \leq \delta$$

有界，故 $B_n(f, x)$ 是稳定的，有良好的逼近性质

- 但是， $B_n(f, x)$ 收敛太慢，比三次样条逼近效果差得多，实际中很少使用

□ Lagrange插值多项式

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) l_k(x), \quad \sum_{k=0}^n l_k(x) = 1$$

- $\sum_{k=0}^n |l_k(x)|$ 无界，不能保证高阶插值的稳定与收敛



连续函数空间 $C[a, b]$

□ 区间 $[a, b]$ 上的所有实连续函数组成一个空间，记作 $C[a, b]$

□ $f \in C[a, b]$ 的范数定义为

$$\|f\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|$$

■ $\|\cdot\|_{\infty}$ 称为 ∞ -范数

□ 范数 $\|\cdot\|$ 要满足三个性质：

1. $\|f\| \geq 0$ ，当且仅当 $f \equiv 0$ 时才有 $\|f\| = 0$ ；
2. 对于任意 $f \in C[a, b]$ 和 $a \in \mathbb{R}$ ， $\|af\| = |a|\|f\|$ ；
3. 三角不等式：对于任意 $f, g \in C[a, b]$ ，有

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\| \quad (3.1.7)$$

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\| \quad (3.1.7)$$



连续函数空间 $C[a, b]$ (续)

□ 空间 $C[a, b]$ 可与向量空间类比，函数 $f \in C[a, b]$ 可看成向量

□ 当 $f, g \in C[a, b]$ 时，定义 f 与 g 的距离为

$$D(f, g) = \|f - g\|_\infty \quad (3.1.8)$$

□ 同时，由式(3.1.7)可得

$$D(f, g) \leq D(f, h) + D(h, g) \quad (3.1.9)$$

$$|\|f\|_\infty - \|g\|_\infty| \leq \|f - g\|_\infty \quad (3.1.10)$$



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



研究动机

□ 定理3.1中的存在性并没有约束 n 的值

■ n 太大的话，函数复杂，难以计算

□ 新的视角：固定 n ，寻求最优的逼近

□ 符号

■ 记次数不大于 n 的多项式集合为 H_n ， $H_n \subseteq C[a, b]$

■ 记 $H_n = \text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$ ，其中 $1, x, \dots, x^n$ 是 $[a, b]$ 上一组线性无关的函数组，是 H_n 中的一组基

■ H_n 中的元素 $P_n(x)$ 可表示为

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

其中 $a_0, a_1, \dots, a_n$ 为任意实数



最佳逼近多项式

□ 最佳一致逼近或Chebyshev逼近问题

■ 在 H_n 中求 $P_n^*(x)$ 逼近 $f(x) \in C[a, b]$, 使其误差为

$$\max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P_n^*(x)| = \min_{P_n \in H_n} \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P_n(x)|$$

□ 定义**3.1** $P_n(x) \in H_n$, $f(x) \in C[a, b]$, 称

$$\Delta(f, P_n) = \|f - P_n\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P_n(x)| \quad (3.2.1)$$

为 $f(x)$ 与 $P_n(x)$ 在 $[a, b]$ 上的偏差

■ $\Delta(f, P_n) \geq 0$, $\Delta(f, P_n)$ 的全体组成一个集合, 记作 $\{\Delta(f, P_n)\}$, 它有下列下界0



最佳逼近多项式（续）

□ 定义 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最小偏差

■ 集合 $\{\Delta(f, P_n)\}$ 的下确界

$$E_n = \inf_{P_n \in H_n} \{\Delta(f, P_n)\} = \inf_{P_n \in H_n} \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P_n(x)| \quad (3.2.2)$$

□ 定义 **3.2** 假定 $f(x) \in C[a, b]$, 若存在

$$P_n^*(x) \in H_n, \quad \Delta(f, P_n^*) = E_n \quad (3.2.3)$$

则称 $P_n^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最佳一致逼近多项式、最小偏差逼近多项式、最佳逼近多项式

□ 定理 **3.2** 若 $f(x) \in C[a, b]$, 则总存在 $P_n^*(x) \in H_n$, 使 $\|f(x) - P_n^*(x)\|_\infty = E_n$



偏差点

□ 定义**3.3** 设 $f(x) \in C[a, b]$, $P(x) \in H_n$, 若在 $x = x_0$ 上有

$$|P(x_0) - f(x_0)| = \max_{a \leq x \leq b} |P(x) - f(x)| = \mu$$

则称 x_0 是 $P(x)$ 的偏差点

■ 若 $P(x_0) - f(x_0) = \mu$, 则称 x_0 为“正”偏差点

■ 若 $P(x_0) - f(x_0) = -\mu$, 则称 x_0 为“负”偏差点

□ 函数 $P(x) - f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, 因此, 至少存在一个点 $x_0 \in [a, b]$, 使得

$$|P(x_0) - f(x_0)| = \mu$$



最佳逼近多项式的偏差点性质

□ **定理3.3** 若 $P(x) \in H_n$ 是 $f(x) \in C[a, b]$ 的最佳逼近多项式，则 $P(x)$ 同时存在正、负偏差点

- 因 $P(x)$ 是 $f(x)$ 的最佳逼近多项式，故 $\mu = E_n$
- 由于 $P(x)$ 在 $[a, b]$ 上总有偏差点存在，故可用反证法来证明
- 假定只有正偏差点，没有负偏差点，于是，对于所有 $x \in [a, b]$ 都有

$$P(x) - f(x) > -E_n$$

- 由于 $P(x) - f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续，故有最小值大于 $-E_n$ ，用 $-E_n + 2h$ 表示，其中 $h > 0$



定理3.3证明

- 因此，对于所有 $x \in [a, b]$ 都有

$$-E_n + 2h \leq P(x) - f(x) \leq E_n$$

$$-E_n + h \leq [P(x) - h] - f(x) \leq E_n - h$$

- 即

$$|[P(x) - h] - f(x)| \leq E_n - h$$

它表示多项式 $P(x) - h$ 与 $f(x)$ 的偏差小于 E_n ，与 E_n 是最小偏差的假定矛盾

- 同样，可证明只有负偏差点没有正偏差点也是不成立

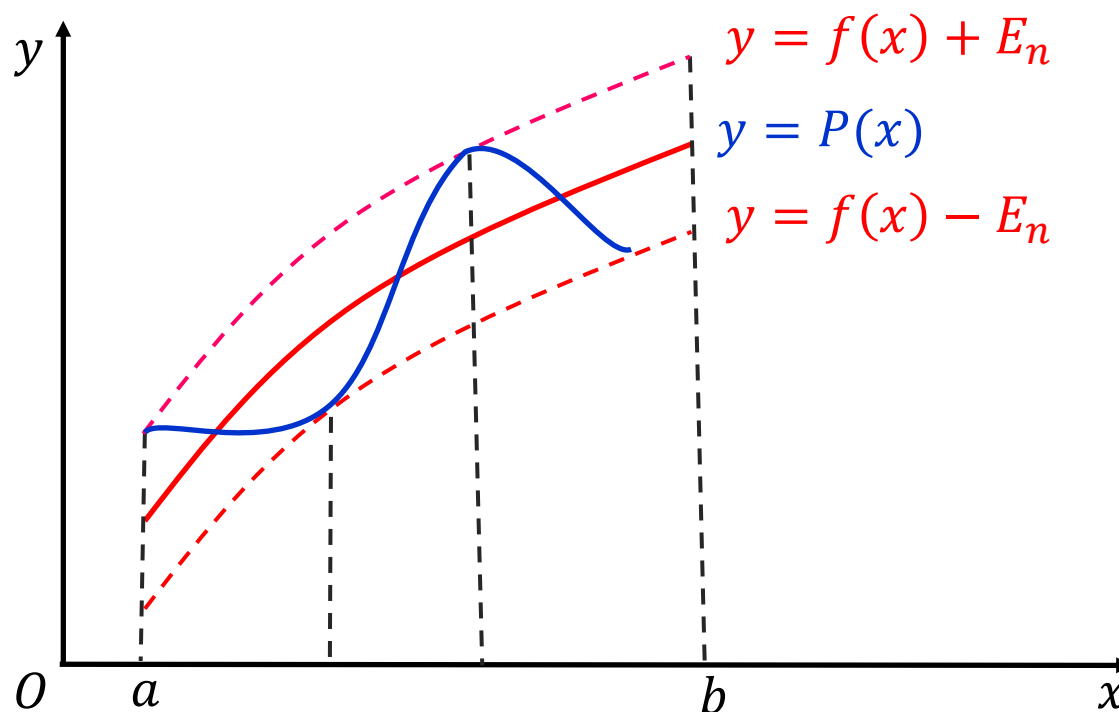


几何意义

□ 曲线 $y = P(x)$ 位于下面两条曲线间的带状区域

$$y = f(x) + E_n, \quad y = f(x) - E_n$$

- $P(x)$ 的图形应当与这两条曲线至少各接触一次
- 否则，可把曲线 $y = P(x)$ 稍微移动，得到更好的近似





Chebyshev定理

- 定理**3.4** $P(x) \in H_n$ 是 $f(x) \in C[a, b]$ 的最佳逼近多项式的**充要条件**是 $P(x)$ 在 $[a, b]$ 上至少有 $n + 2$ 个轮流为“正”、“负”的偏差点，即有 $n + 2$ 个点 $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_{n+2} \leq b$ ，使

$$P(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \|P(x) - f(x)\|_\infty \quad (3.2.4)$$
$$\sigma = \pm 1, \quad k = 1, 2, \dots, n + 2$$

这样的点组称为**Chebyshev交错点组**

- 只证充分性. 假定在 $[a, b]$ 上有 $n + 2$ 个点使式(3.2.4)成立，要证明 $P(x)$ 是 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最佳逼近多项式，用**反证法**求证



定理3.4证明

- 若存在 $Q(x) \in H_n$, $Q(x) \not\equiv P(x)$ 使

$$\|f(x) - Q(x)\|_\infty < \|f(x) - P(x)\|_\infty$$

- 注意到

$$P(x) - Q(x) = [P(x) - f(x)] - [Q(x) - f(x)]$$

在点 $x_1, x_2, \dots, x_{n+2}$ 上的符号与 $P(x_k) - f(x_k) =$
($k = 1, \dots, n + 2$) 一致

- ✓ $P(x_k) - f(x_k) = \|f(x) - P(x)\|_\infty$

- ✓ $Q(x_k) - f(x_k)$ 的值小, 不足以影响符号

- 因此, 故 $P(x) - Q(x)$ 也在 $n + 2$ 个点上轮流取符号 “+” 、 “-”



定理3.4证明（续）

- 由连续函数性质， $P(x) - Q(x)$ 在 (a, b) 内有 $n + 1$ 个零点
- 但 $P(x) - Q(x) \not\equiv 0$ 是不超过 n 次的多项式，它的零点不超过 n ，这个矛盾说明假设不对，故 $P(x)$ 就是所求最佳逼近多项式，充分性得证
- 必要性证明较繁，但证明思想类似定理3.3，此处从略



Chebyshev定理的推论

□ 推论1 若 $f(x) \in C[a, b]$ ，则在 H_n 中存在唯一的最佳逼近多项式

■ 若 H_n 中有两个最佳逼近多项式 $P(x)$ 与 $Q(x)$ ，则对于所有 $x \in [a, b]$ ，都有

$$-E_n \leq P(x) - f(x) \leq E_n \quad -E_n \leq Q(x) - f(x) \leq E_n$$

■ 于是

$$-E_n \leq \frac{P(x) + Q(x)}{2} - f(x) \leq E_n$$

表明 $R(x) = \frac{P(x) + Q(x)}{2}$ 也是 H_n 中的最佳逼近多项式

■ 因此， $R(x) - f(x)$ 的 $n + 2$ 个交错点组 $\{x_k\}$ 满足

$$R(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma E_n (k = 1, \dots, n + 2)$$



推论1证明

■ 同时

$$E_n = |R(x_k) - f(x_k)| = \left| \frac{P(x_k) - f(x_k)}{2} + \frac{Q(x_k) - f(x_k)}{2} \right| \quad (3.2.5)$$

■ 由于 $|P(x_k) - f(x_k)| \leq E_n$, $|Q(x_k) - f(x_k)| \leq E_n$, 故当且仅当

$$\frac{P(x_k) - f(x_k)}{2} = \frac{Q(x_k) - f(x_k)}{2} = \pm \frac{E_n}{2}$$

时, 式(3.2.5)才能成立

■ 于是 $P(x_k) = Q(x_k) (k = 1, \dots, n+2)$ 从而表明 $P(x) - Q(x)$ 有 $n+2$ 个根, 这个矛盾说明 $Q(x) \equiv P(x)$



Chebyshev定理的推论

□ 推论2 若 $f(x) \in C[a, b]$, 则其最佳逼近多项式 $P_n^*(x) \in H_n$ 就是 $f(x)$ 的一个 Lagrange 插值多项式

■ 由定理3.4可知, $P_n^*(x) - f(x)$ 在 $[a, b]$ 上要么恒为零, 要么有 $n + 2$ 个轮流取“正”、“负”的偏差点

■ 于是存在 $n + 1$ 个点 $x_k \leq \overline{x}_k \leq x_{k+1}$ ($k = 1, 2, \dots, n + 1$) 使 $P_n^*(\overline{x}_k) - f(\overline{x}_k) = 0$, 以 $\overline{x}_k$ 为插值节点的 Lagrange 插值多项式就是 $P_n^*(x)$

✓ 插值多项式的唯一性



最佳一次逼近多项式

□ 定理3.4给出了最佳逼近多项式 $P(x)$ 的特性，但要求出 $P(x)$ 却相当困难

□ 简单起见，考虑 $n = 1$ 的情形

■ 假定 $f(x) \in C^2[a, b]$ ，且 $f''(x)$ 在 (a, b) 内不变号，要求最佳一次逼近多项式 $P_1(x) = a_0 + a_1x$

■ 根据定理3.4可知，至少有3个点 $a \leq x_1 < x_2 < x_3 \leq b$ ，使

$$P_1(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \max_{a \leq x \leq b} |P_1(x) - f(x)| \quad (\sigma = \pm 1, k = 1, 2, 3)$$

■ 根据函数连续性， $P_1(x) - f(x)$ 在 (a, b) 内至少有2个零点



最佳一次逼近多项式（续）

- 根据Rolle定理， $P_1'(x) - f'(x) = a_1 - f'(x)$ 在 (a, b) 内至少有1个零点
- 由于 $f''(x)$ 在 (a, b) 上不变号，故 $f'(x)$ 单调， $a_1 - f'(x)$ 在 (a, b) 内只有1个零点
- 因此， $P_1'(x) - f'(x)$ 的变化趋势为 “+0 -” 或者 “-0 +”
- $P_1(x) - f(x)$ 有3个轮流为正、负的偏差点
 - （1） +0 -：误差 $P_1(x) - f(x)$ 由 负（极小）
→ 零 → 正（极大）→ 零 → 负（极小）
 - （2） -0 +：误差 $P_1(x) - f(x)$ 由 正（极大）
→ 零 → 负（极小）→ 零 → 正（极大）



最佳一次逼近多项式（续）

- 根据Rolle定理， $P_1'(x) - f'(x) = a_1 - f'(x)$ 在 (a, b) 内至少有1个零点
- 由于 $f''(x)$ 在 (a, b) 上不变号，故 $f'(x)$ 单调， $a_1 - f'(x)$ 在 (a, b) 内只有1个零点
- 因此， $P_1'(x) - f'(x)$ 的变化趋势为 “+0 -” 或者 “-0 +”，必然导致

（1） x_2 处梯度为0

$$P_1'(x_2) - f'(x_2) = a_1 - f'(x_2) = 0 \Rightarrow f'(x_2) = a_1$$

（2） x_1 和 x_3 位于区间端点

$$x_1 = a, x_3 = b$$

$$\Rightarrow P_1(a) - f(a) = P_1(b) - f(b) = -[P_1(x_2) - f(x_2)]$$

$$f'(x_2) = a_1$$



最佳一次逼近多项式（续）

■ 由此得到

$$\begin{cases} a_0 + a_1 a - f(a) = a_0 + a_1 b - f(b) \\ a_0 + a_1 a - f(a) = f(x_2) - (a_0 + a_1 x_2) \end{cases} \quad (3.2.6)$$

■ 解出

$$a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \quad (3.2.7)$$

■ 代入(3.2.6)，得到

$$a_0 = \frac{f(a) + f(x_2)}{2} - \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \frac{a + x_2}{2} \quad (3.2.8)$$

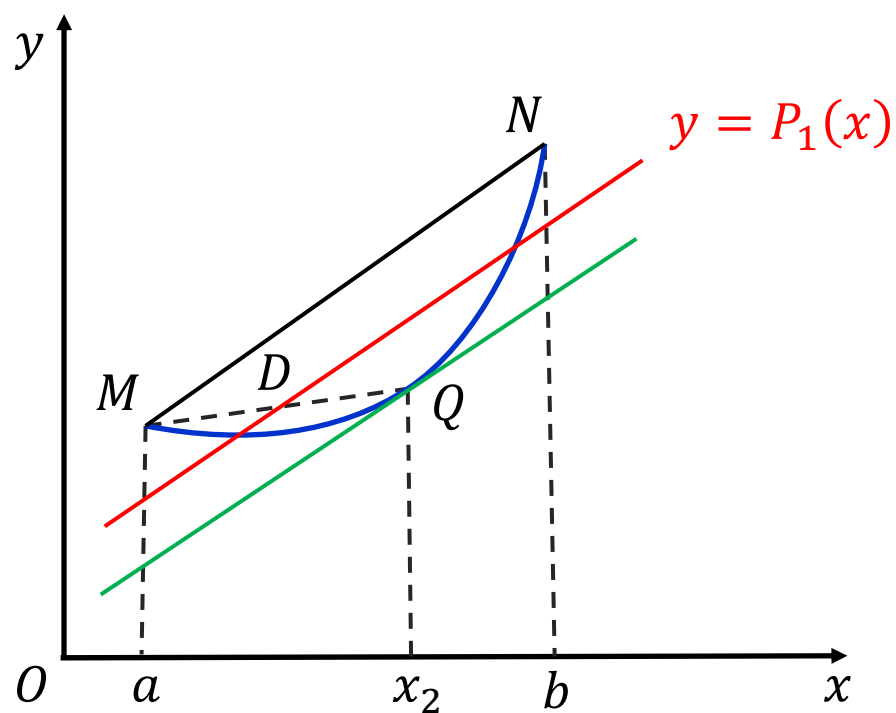
■ 这就得到最佳一次逼近多项式 $P_1(x)$ ，其方程为

$$P_1(x) = \frac{1}{2} [f(a) + f(x_2)] + a_1 \left(x - \frac{a + x_2}{2} \right)$$



几何意义

□ 直线 $y = P_1(x)$ 与弦 MN 平行，且通过 MQ 的中点 D





例3.1

$$a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \quad (3.2.7)$$

□ 求 $f(x) = \sqrt{1 + x^2}$ 在 $[0,1]$ 上的最佳一次逼近多项式

■ 由式(3.2.7)可算出

$$a_1 = \sqrt{2} - 1 \approx 0.414$$

■ 此外，由于 $f'(x_2) = a_1$ ，可得

$$\frac{x_2}{\sqrt{1 + x_2^2}} = \sqrt{2} - 1$$

■ 解得

$$x_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{2} - 1}{2}} \approx 0.4554 \quad f(x_2) = \sqrt{1 + x_2^2} \approx 1.0986$$



例3.1 (续)

$$a_0 = \frac{f(a) + f(x_2)}{2} - \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \frac{a + x_2}{2}$$

- 由式(3.2.8)得

$$a_0 = \frac{1 + \sqrt{1 + x_2^2}}{2} - a_1 \frac{x_2}{2} \approx 0.955$$

- 得 $f(x) = \sqrt{1 + x^2}$ 的最佳一次逼近多项式为

$$P_1(x) = 0.955 + 0.414x$$

- 故

$$\sqrt{1 + x^2} \approx 0.955 + 0.414x, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.2.9)$$

- 误差限为

$$\max_{0 \leq x \leq 1} \left| \sqrt{1 + x^2} - P_1(x) \right| \leq f(0) - 0.955 = 0.045$$

- 在式(3.2.9)中若令 $x = \frac{a}{b} \leq 1$, 得到近似求根公式

$$\sqrt{a^2 + b^2} \approx 0.955a + 0.414b$$



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



最佳平方逼近

□ 均方逼近或平方逼近

$$\|f(x) - P(x)\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - P(x)]^2 dx}$$

□ $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最佳平方逼近多项式

■ 若存在 $P_n^*(x) \in H_n$, 使

$$\|f - P_n^*\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - P_n^*(x)]^2 dx} = \inf_{P \in H_n} \|f - P\|_2$$

□ 先介绍内积空间的预备知识



权函数

□ 定义**3.4** 设在区间 (a, b) 内, 非负函数 $\rho(x)$ 满足以下条件, 就称 $\rho(x)$ 为区间 (a, b) 内的权函数:

1. $\int_a^b |x|^n \rho(x) dx$ ($n = 0, 1, 2, \dots$)存在

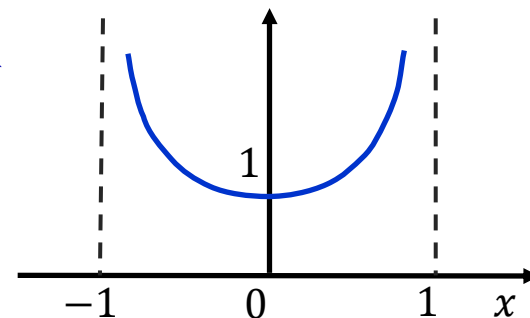
2. 对于非负的连续函数 $g(x)$, 若

$$\int_a^b g(x) \rho(x) dx = 0 \quad (3.3.2)$$

则在 (a, b) 内 $g(x) \equiv 0$

□ $\rho(x)$ 对 (a, b) 内的点赋予权重

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$





函数内积

□ 定义**3.5** 设 $f(x), g(x) \in C[a, b]$, $\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数, 积分

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx \quad (3.3.3)$$

称为函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上的内积

□ 这样定义的内积满足下列四条公理:

1. $(f, g) = (g, f)$
2. $(cf, g) = c(f, g)$, c 为常数
3. $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$
4. $(f, f) \geq 0$, 当且仅当 $f = 0$ 时 $(f, f) = 0$



欧式空间 $\mathbb{R}^n$ 中的内积和范数

□ 设 $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 其内积定义为

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \sum_{k=1}^n f_k g_k$$

□ $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$ 的模（范数）定义为

$$\|\mathbf{f}\|_2 = \sqrt{(\mathbf{f}, \mathbf{f})} = \left(\sum_{k=1}^n f_k^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

□ 通常没有权函数



函数的范数

□ 定义**3.6** $f(x) \in C[a, b]$, 称

$$\|f\|_2 = \sqrt{(f, f)} = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx} \quad (3.3.4)$$

为 $f(x)$ 的**Euclid范数**（满足范数的三条性质）

□ 定理**3.5** 对于任何 $f(x), g(x) \in C[a, b]$, 下列结论成立:

1. $|(f, g)| \leq \|f\|_2 \|g\|_2$ (Cauchy-Schwarz不等式)
2. $\|f + g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2$ (三角不等式)
3. $\|f + g\|_2^2 + \|f - g\|_2^2 = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2)$ (平行四边形定律)



正交函数

□ 定义**3.7** 若 $f(x), g(x) \in C[a, b]$ 满足

$$(f, g) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0 \quad (3.3.7)$$

则称 f 与 g 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交

若函数族 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$ 满足关系

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \int_a^b \rho(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) dx = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases} \quad (3.3.8)$$

则称 $\{\varphi_k\}$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交函数族;
若 $A_k \equiv 1$, 则称 $\{\varphi_k\}$ 为标准正交函数族



举例

□ 例如，三角函数族

$$1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots$$

就是区间 $[-\pi, \pi]$ 上的正交函数族（权 $\rho(x) \equiv 1$ ），
其

$$(1,1) = 2\pi$$

$$(\sin nx, \sin mx) = \int_{-\pi}^{\pi} \sin nx \sin mx \, dx = \begin{cases} \pi, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \quad (n, m = 1, 2, \dots)$$

$$(\cos nx, \cos mx) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos mx \, dx = \begin{cases} \pi, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \quad (n, m = 1, 2, \dots)$$

$$(\cos nx, \sin mx) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \sin mx \, dx = 0 \quad (n, m = 1, 2, \dots)$$



线性无关函数

□ **定义3.8** 设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, 如果

$$a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_{n-1}\varphi_{n-1}(x) = 0$$

当且仅当 $a_0 = a_1 = \dots = a_{n-1} = 0$ 时成立, 则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 在 $[a, b]$ 上是线性无关的

□ 若函数族 $\{\varphi_k\}(k = 0, 1, \dots)$ 中的任何有限个 φ_k 线性无关, 则称 $\{\varphi_k\}$ 为线性无关函数族

■ $1, x, x^2, \dots, x^n, \dots$ 就是 $[a, b]$ 上的线性无关函数族



线性无关函数（续）

- 若 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 是 $[a, b]$ 上的线性无关函数，且 $a_0, a_1, \dots, a_{n-1}$ 是任意实数，则

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_{n-1}\varphi_{n-1}(x)$$

的全体是 $C[a, b]$ 中的一个子集，记作

$$\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}\}$$

- **定理3.6** $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 在 $[a, b]$ 上线性无关的充要条件是它的Cramer行列式 $G_{n-1} \neq 0$

$$G_{n-1} = G(\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) = \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_{n-1}) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_{n-1}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_{n-1}, \varphi_0) & (\varphi_{n-1}, \varphi_1) & \dots & (\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1}) \end{vmatrix}$$



函数的最佳平方逼近

□ 对 $f(x) \in C[a, b]$, 及 $C[a, b]$ 中的一个子集 $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$, 若存在 $S^*(x) \in \Phi$, 使

$$\|f - S^*\|_2^2 = \inf_{S \in \Phi} \|f - S\|_2^2 = \inf_{S \in \Phi} \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx \quad (3.3.11)$$

则称 $S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近函数

□ 显然, 求 $S^*(x)$ 等价于求多元函数

$$I(a_0, a_1, \dots, a_n) = \int_a^b \rho(x) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) - f(x) \right]^2 dx$$

的最小值



求解最佳平方逼近函数

- 由于 $I(a_0, a_1, \dots, a_n)$ 是关于 $a_0, a_1, \dots, a_n$ 的二次函数, 利用多元函数极值的必要条件

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0 (k = 0, 1, \dots, n)$$

可得

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2 \int_a^b \rho(x) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) - f(x) \right] \varphi_k(x) dx = 0 (k = 0, 1, \dots, n)$$

- 于是有

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

是关于 $a_0, a_1, \dots, a_n$ 的线性方程组, 称为法方程



求解最佳平方逼近函数（续）

- 由于 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 线性无关，故系数行列式 $G(\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n) \neq 0$ ，于是方程组(3.3.13)有唯一解 $a_k = a_k^* (k = 0, 1, \dots, n)$ ，从而得到

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

- 下面证明 $S^*(x)$ 满足式(3.3.11)

$$\|f - S^*\|_2^2 = \inf_{S \in \Phi} \|f - S\|_2^2 = \inf_{S \in \Phi} \int_a^b \rho(x) [f(x) - S(x)]^2 dx \quad (3.3.11)$$

即对任何 $S \in \Phi$

$$\int_a^b \rho(x) [f(x) - S^*(x)]^2 dx \leq \int_a^b \rho(x) [f(x) - S(x)]^2 dx \quad (3.3.14)$$



求解最佳平方逼近函数（续）

■ 为此只要考虑

$$\begin{aligned} D &= \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx - \int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]^2 dx \\ &= \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)]^2 dx + 2 \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)][f(x) - S^*(x)] dx \end{aligned}$$

■ 由于 $S^*(x)$ 的系数 a_k^* 满足下面的方程

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2 \int_a^b \rho(x) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) - f(x) \right] \varphi_k(x) dx = 0 \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

因此

$$\int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]\varphi_k(x) dx = 0 \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$$

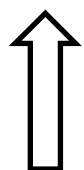


求解最佳平方逼近函数（续）

■ 为此只要考虑

$$\begin{aligned} D &= \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx - \int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]^2 dx \\ &= \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)]^2 dx + 2 \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)][f(x) - S^*(x)] dx \end{aligned}$$

$$\int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)][f(x) - S^*(x)] dx = 0$$



$S(x) - S^*(x)$ 一定可以写成
 $\varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 的线性组合

$$\int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]\varphi_k(x) dx = 0 (k = 0, 1, 2, \dots, n)$$



求解最佳平方逼近函数（续）

■ 因此

$$\begin{aligned} D &= \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx - \int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]^2 dx \\ &= \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)]^2 dx \geq 0 \end{aligned}$$

■ 于是(3.3.14)成立。这就证明了 $S^*(x)$ 的是 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近函数

$$\int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]^2 dx \leq \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx \quad (3.3.14)$$



最佳平方逼近函数的平方误差

□ 若令 $\delta = f(x) - S^*(x)$, 则平方误差为

$$\begin{aligned}\|\delta\|_2^2 &= (f - S^*, f - S^*) \\ &= (f, f - S^*) - (S^*, f - S^*)\end{aligned}$$

□ 由于

$$\int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]\varphi_k(x) dx = 0 \quad (k = 0, 1, 2, \dots, n)$$

□ 可得 $(S^*, f - S^*) = 0$, 因此

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



举例

- 取 $\varphi_k(x) = x^k, \rho(x) \equiv 1, f(x) \in C[0,1]$, 即要在 H_n 中求 n 次最佳平方逼近多项式

$$S^*(x) = a_0^* + a_1^*x + \cdots + a_n^*x^n$$

- 回顾法方程

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

- 此时

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \int_0^1 x^{k+j} dx = \frac{1}{k+j+1}$$

$$(f, \varphi_k) = \int_0^1 f(x) x^k dx \equiv d_k$$



举例（续）

- 构造下面的方程组，求解即可得到系数 a_k^*

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

- $\mathbf{H}$ 表示行列式 $G_n = G(1, x, x^2, \dots, x^n)$ 对应的矩阵

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \dots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \dots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \dots & 1/(2n+1) \end{bmatrix} \quad (3.3.16)$$

$\mathbf{H}$ 称为Hilbert矩阵

- 此外

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

$$d_k = (f, x^k) (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.3.17)$$



$$d_k = (f, x^k) (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.3.17)$$

例3.2

□ 求 $f(x) = \sqrt{1+x^2}$ 在 $[0,1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式

■ 由式(3.3.17)可算出

$$d_0 = \int_0^1 \sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{2} \ln(1+\sqrt{2}) + \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 1.147$$

$$d_1 = \int_0^1 x\sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{3} (1+x^2)^{\frac{3}{2}} \Big|_0^1 = \frac{2\sqrt{2}-1}{3} \approx 0.609$$

■ 构造方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.147 \\ 0.609 \end{pmatrix}$$



例3.2 (续)

■ 求解, 得到

$$a_0 = 0.934, \quad a_1 = 0.426, \quad S_1^* = 0.934 + 0.426x$$

■ 平方误差

$$\begin{aligned} \|\delta\|_2^2 &= (f, f) - (f, S_1^*) = \|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^1 a_k^*(\varphi_k, f) \\ &= \int_0^1 (1 + x^2) dx - 0.426d_1 - 0.934d_0 = 0.0026 \end{aligned}$$

■ 最大误差

$$\|\delta\|_\infty = \max_{0 \leq x \leq 1} \left| \sqrt{1 + x^2} - S_1^*(x) \right| = 0.066$$

■ 与例3.1对比



问题

- $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 作基求最佳平方逼近多项式，当 n 较大时，系数矩阵式(3.3.16)是高度病态的，求解法方程舍入误差很大

$$Ha = d$$

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \dots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \dots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \dots & 1/(2n+1) \end{bmatrix} \quad (3.3.16)$$

- 解决方案：用正交多项式作基



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

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

□ 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

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

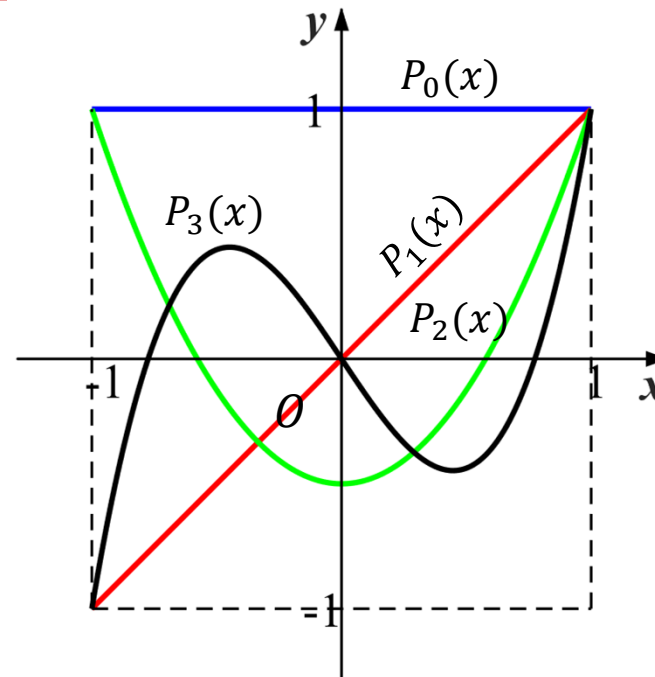
$$P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$$

$$P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + x)/8$$

$$P_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$$

$$P_6(x) = (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)/16$$

.....



□ 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

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

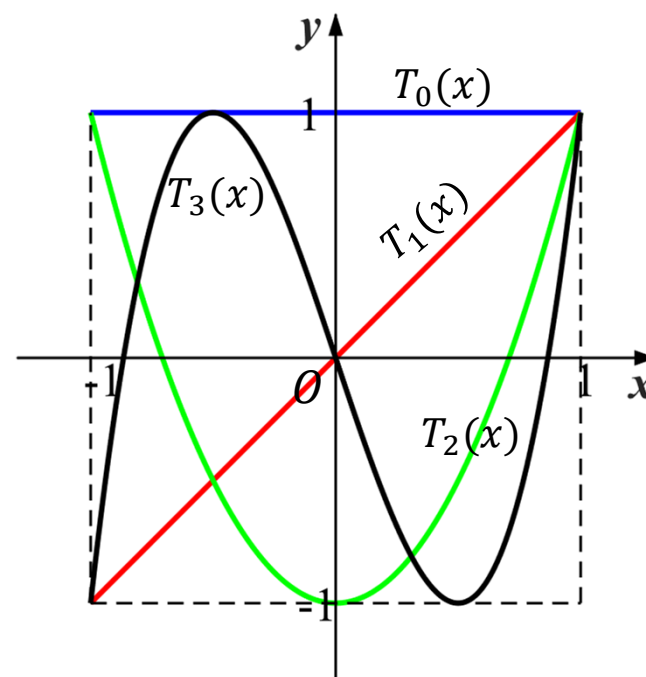
$$T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$$

$$T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1$$

... ..





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

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

✓ $\omega_n(x)$ 最高项系数为1，因此上述分解一定存在

✓ $\omega_n(x)$ 的取值满足Chebyshev定理



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

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

□ 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

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

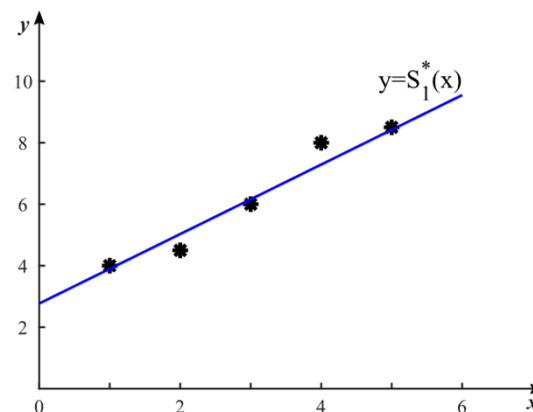
故 $S^*(x)$ 确是所求最小二乘解



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

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

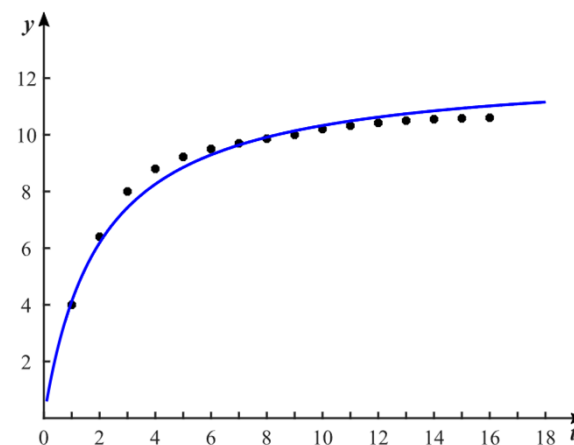


例3.6

- 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
- 如何从数据中估计出 a, b ?

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

$$y = \frac{t}{at + b}$$



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

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

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

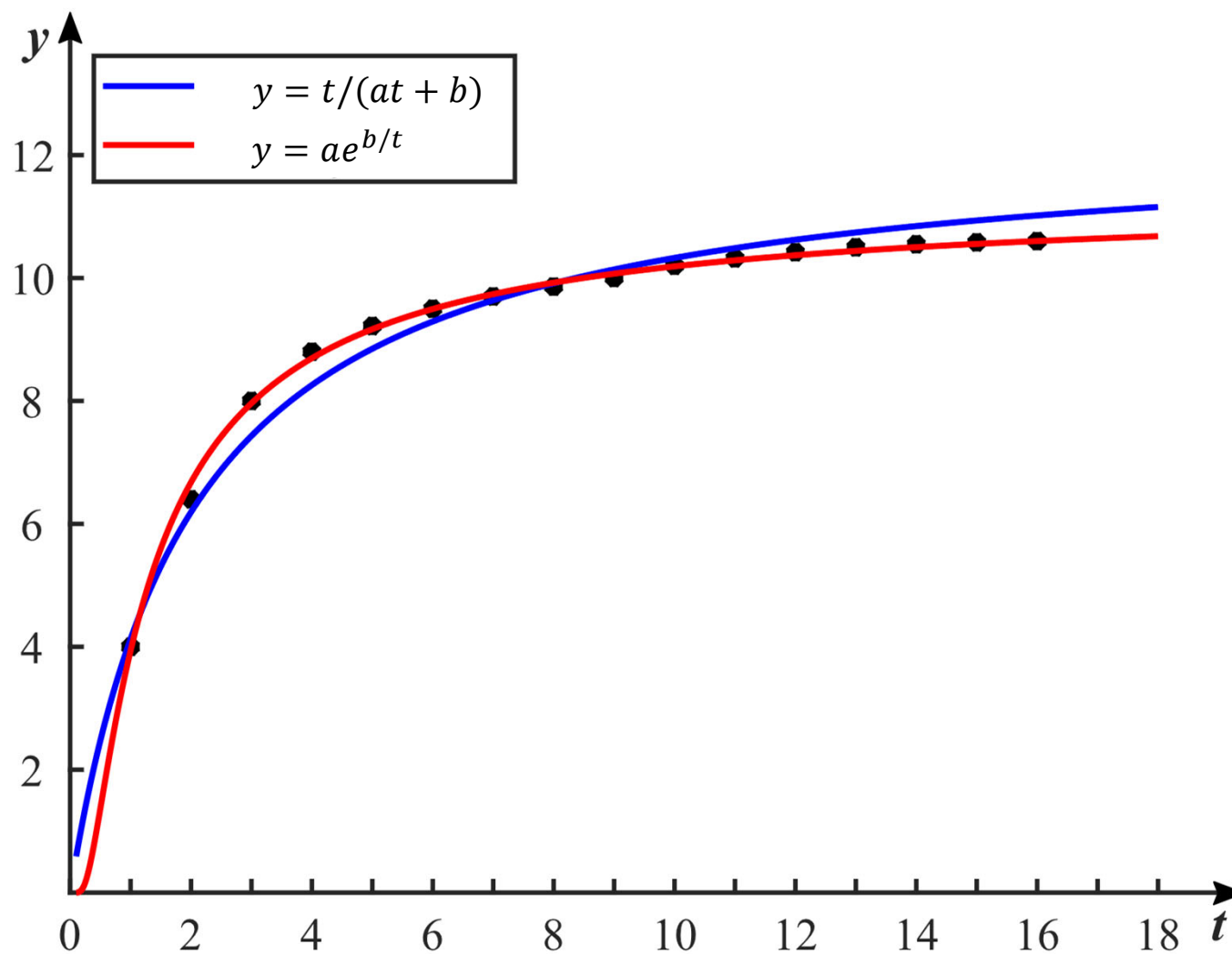
$$\|\delta^{(1)}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m (\delta_i^{(1)})^2} = 1.19 \times 10^{-3}$$

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

$\|\delta^{(2)}\|_2$ 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 $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ $\begin{cases} \text{多项式} \\ \text{指数函数} \\ \text{三角函数} \end{cases}$
 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

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

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

- 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

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

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



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



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

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

■ $P_k(x)$ 是首项系数为1的 k 次多项式, 根据正交性得

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



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



课程主页查看作业!

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