南京大學 NANJING UNIVERSITY 工程管理学院 SCHOOL OF MANAGEMENT & ENGINEERING

函数逼近与计算

温丹苹

邮箱：dpwen@nju.edu.cn

办公室：工管院协鑫楼306

目录

1 基本概念

- **函数逼近**

目 标：在给定精度下求计算次数最少的近似公式，这就是函数逼近与计算要解决的问题。

- 对于函数类A中给定的函数$f(x)$，要求在另一类较简单的便于计算的函数类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。

注：

* 本章研究的函数类A通常为区间[a,b]上的连续函数，记C[a,b]。

* 函数类B通常是代数**多项式或三角多项式**。

1 基本概念

- 函数逼近 vs 函数插值

函数逼近：给定 f(x)，在某个简单易算的函数类中找一个 p(x)， 使得 p(x) 在某种度量下距离 f(x) 最近。

函数逼近中的两个关键点：

(1) **函数空间**，即用什么样的函数来逼近 $f(x)$

(2) **度量标准**，即采用什么样的评判标准

函数插值：给定数据表，寻找到一个简单易算的 p(x)，使得 $p(x_i)=y_i$。

x	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
$\ln(x)$	-0.9163	-0.6931	-0.5108	-0.3567	-0.2231

1 基本概念

■ Weierstrass（魏尔施特拉斯）定理

若函数 $p(x) \in H_n$,

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \cdots a_n x^n, \quad \text{其中}a_i\text{为实数}$$

$p(x)$ 由系数唯一确定。$1, x, \cdots, x^n$ 线性无关，是 H_n 的一组基，

$H_n = \mathrm{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$ 是 $n+1$ 维的，$(a_0, a_1, \cdots, a_n)$为 $p(x)$ 的坐标。

- **Weierstrass定理：**

设 $f(x) \in C[a, b]$，则对任何 $\epsilon > 0$，总存在一个代数多项式 $p(x)$，使

$$\max_{a \leqslant x \leqslant b} |f(x) - p(x)| < \epsilon$$

在 $[a, b]$ 上一致成立。

1 基本概念

- **函数的范数：**

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

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

$\|\cdot\|_\infty$称为∞-范数，它满足范数$\|\cdot\|$的三个性质：

(1) $\|f\|\geqslant 0$，当且仅当$f\equiv 0$时才有$\|f\|=0$；

(2) $\|af\|=|a|\,\|f\|$对于任意$f\in C[a,b]$成立，a为任意实数；

(3) 对于任意$f,g\in C[a,b]$，有

$$\|f+g\|\leqslant\|f\|+\|g\|.$$

正定

齐次

三角不等式

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.

- **函数的范数：**

$C[a, b]$: $f \in C[a, b]$，可定义三种常用范数

- ∞-范数或最大范数

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

- 1-范数

$$\|f\|_1 = \int_\Omega |f(x)| \mathrm{d}x$$

- 2-范数

$$\|f\|_2 = \left(\int_\Omega f(x)^2 \mathrm{d}x \right)^{1/2}$$

1 基本概念

- **两种常用度量标准**

①一致逼近，或均匀逼近：

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

②平方逼近，或均方逼近：

$$\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\|_2=\sqrt{\int_{\boldsymbol{a}}^{\boldsymbol{b}}[f(x)-P(x)]^2\mathbf{d}\boldsymbol{x}}$$

注：

* 用于度量代数多项式$\mathrm{P}_n(x)$逼近$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\in\boldsymbol{C}[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$

1 基本概念

• 内积与内积空间：

设 X 是数域 $K(\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C})$ 上的线性空间，$\forall u, v \in X$，有 K 中一个数与之对应，记为 (u, v)，满足条件：

(1) $(u, v) = \overline{(v, u)}, \forall u, v \in X$;	对称性
(2) $(\alpha u, v) = \alpha(u, v), \alpha \in K, u, v \in X$;	齐次性
(3) $(u + v, w) = (u, w) + (v, w), \forall u, v, w \in X$	可加性
(4) $(u, u) \geqslant 0$, 当且仅当 $u = 0$ 时 , $(u, u) = 0$.	正定性

则称 (u, v) 为 X 上 u 与 v 的内积。

内积空间：定义了内积的线性空间。当 $K = \mathbb{R}$，(1) 即 $(u, v) = (v, u)$ 共轭

如果 $(u, v) = 0$，则称 u 与 v正交，这是向量垂直概念的推广。

- **内积与内积空间：**

例: $\mathbb{R}^n$ 的内积

设 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$， $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T, \boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$, 则其内积定义为

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$$

由此导出向量 2-范数

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{1/2}.$$

一般地，若给定实数 $\omega_i > 0(i = 1, 2, \cdots, n)$，称之为权系数，则可以定义加权内积

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} \omega_i x_i^2\right)^{1/2}.$$

- **函数——内积与内积空间：**

例: $C[a,b]$ 的内积

设函数 $f, g \in C[a,b]$，则其内积定义为

$$(f,g) = \int_a^b fg\mathrm{d}x.$$

由此导出 2-范数

$$\|f\|_2 = (f,f)^{1/2} = \left(\int_a^b f(x)^2 \mathrm{d}x\right)^{1/2}.$$

1 基本概念

- **Gram（格拉姆）矩阵：**

Gram矩阵是两两向量的内积组成，Gram矩阵可以反映出该组向量中各个向量之间的某种关系。

定理

设 X 为内积空间，$u_1, u_2, \cdots, u_n \in X$，Gram 矩阵

$$G = \begin{pmatrix} (u_1, u_1) & (u_2, u_1) & \cdots & (u_n, u_1) \\ (u_1, u_2) & (u_2, u_2) & \cdots & (u_n, u_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (u_1, u_n) & (u_2, u_n) & \cdots & (u_n, u_n) \end{pmatrix}$$

非奇异的充分必要条件是 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ 线性无关。

对称矩阵

证明：G 非奇异等价于行列式 $\det G \neq 0$，等价于关于 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ 的线性方程组

$$\left(\sum_{j=1}^{n} \alpha_j u_j, u_k\right) = \sum_{j=1}^{n} (\alpha_j u_j, u_k) = 0, \ \ k = 1, 2, \cdots, n$$

只有零解。

1 基本概念

注意到上式

$$\left(\sum_{j=1}^{n}\alpha_j u_j, u_k\right)=0,\quad k=1,2,\cdots,n$$

$$\Leftrightarrow\left(\sum_{j=1}^{n}\alpha_j u_j,\sum_{j=1}^{n}\alpha_j u_j\right)=0$$

$$\Leftrightarrow\sum_{j=1}^{n}\alpha_j u_j=\alpha_1 u_1+\alpha_2 u_2+\cdots+\alpha_n u_n=0.$$

线性无关意味着上式只有零解 $\alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_n=0$，证毕。
内积空间上可以由内积导出一种范数，即

$$\|u\|=\sqrt{(u,u)},\quad u\in X$$

容易验证满足范数定义的三个条件。（满足正定、齐次、三角不等式）

1 基本概念

■ **内积与内积空间：**

- Cauchy-Schwarz不等式定理：

  设X为内积空间，对$\forall u, v \in X$，有

  $|(u,v)|^2 \leq (u,u)(v,v)$， 即 $|(u,v)|^2 \leq \|u\|_2 \cdot \|f\|_2$.

证明.

当 $v = 0$ 时，显然成立。设 $v \neq 0$，对任何数 λ 有
$0 \leqslant (u + \lambda v, u + \lambda v) = (u, u) + 2\lambda(u, v) + \lambda^2(v, v)$. 取 $\lambda = -(u, v)/(v, v)$, 代人右端, 得

$$(u, u) - 2\frac{|(u, v)|^2}{(v, v)} + \frac{|(u, v)|^2}{(v, v)} \geqslant 0,$$

由此即得 $v \neq 0$ 时

$$|(u, v)|^2 \leqslant (u, u)(v, v).$$

1 基本概念

- **权函数：**

定义 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° $\int_a^b |x|^n\rho(x)\mathrm{d}x \ (n=0,1,\cdots)$ 存在；

2° 对于非负的连续函数$g(x)$，若

$$\int_a^b g(x)\rho(x)\mathrm{d}x=0,$$

则在(a,b)内$g(x)\equiv 0$.

* 引入权函数的概念来对区间上每一点的重要性（权重）进行区分。

1 基本概念

- **带权的函数内积和范数：**

例 2 $C[a,b]$上的内积. 设 $f(x),g(x)\in C[a,b]$，$\rho(x)$是$[a,b]$上给定的权函数，则可定义内积

$$(f(x),g(x))=\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)\mathrm{d}x. \tag{1.15}$$

容易验证它满足内积定义的四条性质，由此内积导出的范数为

$$\| f(x)\|_2=(f(x),f(x))^{\frac{1}{2}}=\left[\int_a^b \rho(x)f^2(x)\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{1.16}$$

称(1.15)式和(1.16)式分别为带权 $\rho(x)$的内积和范数，特别常用的是 $\rho(x)\equiv 1$ 的情形，即

$$(f(x),g(x))=\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x,$$

$\rho(x)=1$ **意味着所有区间中的点具有同等重要性。**

$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ **则意味着靠近区间端点处的点更加重要而区间中点处的点最不重要。**

1 基本概念

- **最佳逼近多项式：**

如果是在多项式中找最佳逼近，那就是最佳多项式逼近。

定义：记 H_n 为所有次数不超过 n 的多项式组成的集合，给定函数 $f(x)\in C[a, b]$，若 $p^*(x)\in H_n$ 使得

$$\|f(x)-p^*(x)\| = \min_{p(x)\in H_n} \|f(x)-p(x)\|$$

则称 $p^*(x)$为 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的 n 次最佳逼近多项式。

† 取不同的范数，可以定义不同的最佳逼近方式。

1 基本概念

- **常用最佳逼近：**

①最佳一致逼近多项式：

$$\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{P}*(\boldsymbol{x})\|_\infty=\min_{P(x)\in H_n(x)}\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})\|_\infty$$

$$=\min_{P(x)\in H_n(x)}\max_{\boldsymbol{a}\le x\le b}|f(x)-P(x)|$$

②最佳平方逼近多项式：

$$\|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{P}*(\boldsymbol{x})\|_2=\min_{P(x)\in H_n(x)}\sqrt{\int_{\boldsymbol{a}}^{\boldsymbol{b}}[f(x)-P(x)]^2\mathbf{d}\boldsymbol{x}}$$

1 基本概念

- **最小二乘拟合：**

x	x_0	x_1	…	x_m
$f(x)$	y_0	y_1	…	y_m

什么是最小二乘拟合

给定数据表，寻找 $g^*(x) \in \Phi$，使得

$$\sum_{i=1}^{m} \left| y_i - g^*(x_i) \right|^2 = \min_{g \in \Phi} \sum_{i=1}^{m} \left| y_i - g(x_i) \right|^2$$

称 $g^*(x)$为 $f(x)$ 的最小二乘拟合函数。

若 $\Phi = H_n$，则称 $g^*(x)$ 为 n 次最小二乘拟合多项式。

† 最小二乘是数据拟合方法中常用的一种方法。

2 正交多项式

■ 函数的正交

定义：设 $f(x), g(x) \in C[a, b]$，$\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，若

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

则称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上 带权 $\rho(x)$ 正交。

2 正交多项式

■ 正交函数族

定义：设函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_k(x), \ldots \in C[a, b]$，

$\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，若

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ A_i \neq 0, & i = j \end{cases}$$

则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 是 $[a, b]$ 上 带权 $\rho(x)$ 的正交函数族。

- 若所有$A_i = 1$，则称为 **标准正交函数族**。

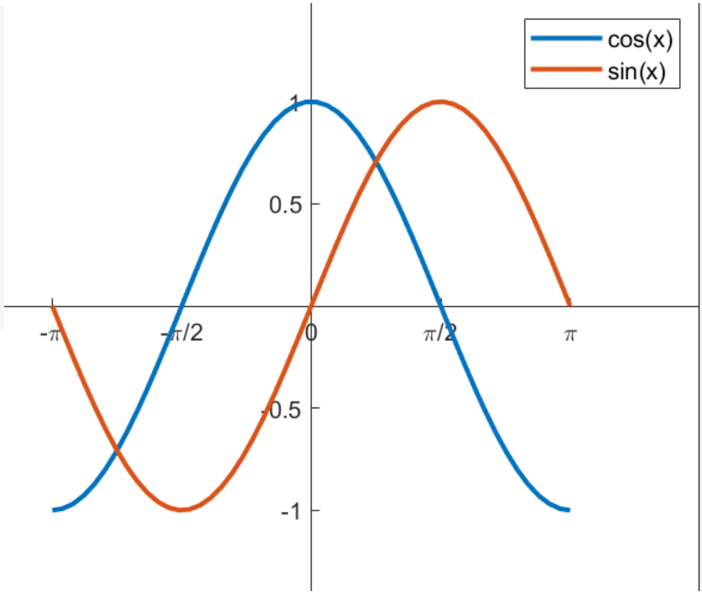
2 正交多项式

■ 正交函数例子

例：三角函数系

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

在 $[-\pi, \pi]$ 上是带权 $\rho(x)=1$ 的正交函数族。



证：通过直接计算可得

$$(1,\ 1)=\int_{-\pi}^{\pi} dx = 2\pi,$$

$$(1,\cos mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\cos mx\ dx=0,\quad (1,\sin mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\sin mx\ dx=0$$

$(m=1, 2, 3, \ldots)$

$$(\cos nx,\cos mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\cos mx\ dx=\pi\cdot\delta_{nm}$$

$$(\sin nx,\sin mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\sin nx\sin mx\ dx=\pi\cdot\delta_{nm}\qquad (m, n=1, 2, 3, \ldots)$$

$$(\cos nx,\sin mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\sin mx\ dx=0\qquad (m, n=1, 2, 3, \ldots)$$

Trigonometric_function.m

■ 正交多项式

定义： 设 $\varphi_k(x)$ 是首项系数不为 0 的 k 次多项式，$\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，若

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ A_i \neq 0, & i = j \end{cases}$$

则称 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交，称 $\varphi_k(x)$ 为 k 次正交多项式。

多项式序列

2 正交多项式

■ 当权函数$\rho(x)$及区间[a, b]给定之后，可由线性无关的一组基$\{1, x, x^2, \ldots, x^n, \ldots\}$并利用正交化方法构造出**正交多项式序列** $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$：

$$\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_n(x) = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x^n, \varphi_j(x),)}{(\varphi_j(x), \varphi_j(x),)} \cdot \varphi_j(x), n = 1,2, \ldots$$

- $\boldsymbol{\varphi_n(x)}$是最高项系数为1的n次多项式。
- 若$\{\boldsymbol{\varphi_n(x)}\}_0^\infty$是正交多项式，则$\varphi_0(x)$，$\varphi_1(x)$，…，$\varphi_n(x)$线性无关。

证：

若$c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + \ldots + c_n\varphi_n(x) = 0$，

用$\rho(x)\varphi_j(x)(j = 1,2, \ldots, n)$乘以上式，并积分得：

$$c_0 \int_a^b \rho(x)\varphi_0(x)\varphi_j(x)dx + c_1 \int_a^b \rho(x)\varphi_1(x)\varphi_j(x)dx + \cdots +$$
$$c_j \int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_j(x)dx + \ldots + c_n \int_a^b \rho(x)\varphi_n(x)\varphi_j(x)dx = 0;$$

利用正交性，则

$$c_j \int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_j(x)dx = 0,$$

由于$(\varphi_j, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_j(x)dx > 0$,则$\boldsymbol{c_j = 0}$**对**$\boldsymbol{j = 1, 2, \ldots, n}$**成立**。

因此：$\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$,…, $\varphi_n(x)$线性无关。

正交多项式性质

性质 1: 设 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式, H_n 表示所有次数不超过 n 的多项式组成的线性空间, 则

$$\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$$

构成 H_n 的一组基，即对任何 $P(x) \in H_n$,

$$P(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j(x)$$

■ 正交多项式性质

性质 2：设 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，则对 $\forall p(x) \in H_{n-1}$，有

$$(p(x), \varphi_n(x)) = \int_a^b \rho(x) p(x) \varphi_n(x)\, dx = 0$$

即 φ_n 与所有次数小于 n 的多项式正交。

■ 正交多项式性质

性质 3 (三项递推关系)：设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，且首项系数均为 1，则

$$\varphi_{n+1}(x) = (x - \alpha_n)\,\varphi_n(x) - \beta_n\varphi_{n-1}(x) \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

其中 $(x\varphi_n(x), \varphi_n(x)) = \int_a^b \rho(x) x \varphi_n^2(x) dx$

$$\varphi_{-1} = 0, \quad \varphi_0 = 1, \quad \alpha_n = \frac{(x\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_n, \varphi_n)}, \quad \beta_n = \frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}$$

性质 4：设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，则 $\varphi_n(x)$ 在 (a, b) 内有 n 个不同的零点。

■ 重要的正交多项式

- 勒让德（Legendre）多项式

当区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 时，由 $\{1, x, \cdots, x^k, \cdots\}$ 正交化得到的多项式称为Legendre 多项式：

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

由于$(x^2-1)^n$是$2n$次多项式，求n阶导数后得，

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

首项系数

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

令

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

则 $\tilde{P}_n(x)$ 是首项系数为 1 的 Legendre 多项式.

■ 重要的正交多项式

- **勒让德（Legendre）多项式**

性质 1

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

性质 2（奇偶性）

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

n为偶数，则为偶函数；
N为奇数，则为奇函数.

性质 3（递推公式）

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \cdots$$

，且 $p_0(x) = 1, p_1(x) = x$

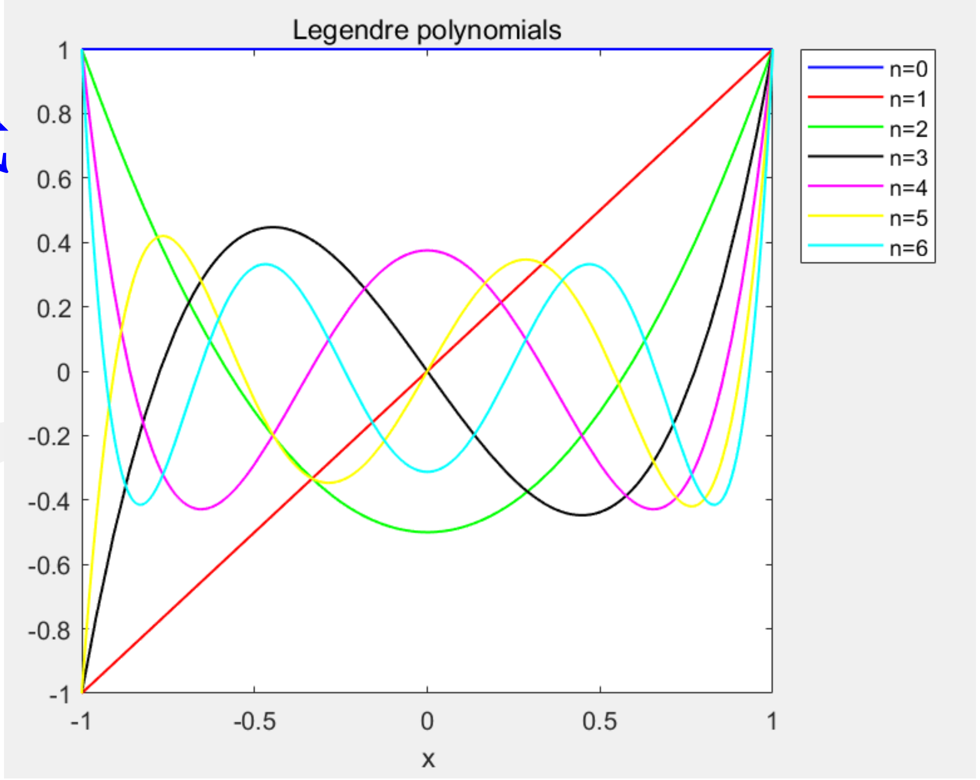
性质 4: $P_n(x)$ 在 (-1,1) 内有 n 个不同的零点。

证明：见李庆扬《数值分析》第5版，2018.

2 正交多项式

■ 重要的正交多项式

- 勒让德（Legendre）多项式



$P_0(x)=1,\ P_1(x)=x,$ 通过递推得

$$P_2(x)=\left(3x^2-1\right)/2$$
$$P_3(x)=\left(5x^3-3x\right)/2$$
$$P_4(x)=\left(35x^4-30x^2+3\right)/8$$
$$P_5(x)=\left(63x^5-70x^3+15x\right)/8$$
$$P_6(x)=\left(231x^5-315x^4+105x^2-5\right)/16$$
$$\vdots$$

Approxi_Legendre.m

2 正交多项式

■ 重要的正交多项式

- 切比雪夫（Chebyshev）多项式
- 余弦的n倍角公式

$$\cos n\theta = A_n = \begin{vmatrix} \cos\theta & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 2\cos\theta & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2\cos\theta & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1 & 2\cos\theta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2\cos\theta & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2\cos\theta \end{vmatrix}_{n\times n}$$

$$\cos(0) = 1$$

$$\cos(x) = \cos x$$

$$\cos(2x) = 2\cos^2 x - 1$$

$$\cos(3x) = 4\cos^3 x - 3\cos x$$

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

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

■ 重要的正交多项式

- 切比雪夫（Chebyshev）多项式

区间为 [-1,1], 权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$,

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

若令 $x = \cos\theta$, 则 $T_n(x) = \cos n\theta$, $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$. 由三角恒等式

$$\cos(n+1)\theta = 2\cos\theta\cos n\theta - \cos(n-1)\theta, \quad n = 1, 2, \cdots$$

性质1(递推关系)

$$\left.\begin{array}{l} T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \cdots, \\ T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x. \end{array}\right\}$$

■ 重要的正交多项式

- 切比雪夫（Chebyshev）多项式

区间为 [-1,1], 权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$,

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

若令 $x = \cos\theta$, 则 $T_n(x) = \cos n\theta$, $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$. 由三角恒等式

$$\cos(n+1)\theta = 2\cos\theta\cos n\theta - \cos(n-1)\theta, \quad n = 1, 2, \cdots$$

性质1(递推关系)

$$\left.\begin{aligned} &T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \cdots, \\ &T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x. \end{aligned}\right\}$$

■ 重要的正交多项式

- 切比雪夫（**Chebyshev**）多项式性质

性质 (1)： 正交性

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

性质 (2)： 奇偶性

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

即：$T_{2n}(x)$ 只含偶次幂，$T_{2n+1}(x)$ 只含奇次幂。

■ 重要的正交多项式

- 切比雪夫（Chebyshev）多项式性质

性质 (3)：递推公式

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

其中 $T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x$

* 前两项与 Legendre 多项式相同，但递推公式不同。

2 正交多项式

■ **重要的正交多项式**

- **切比雪夫（Chebyshev）多项式性质**

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

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

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

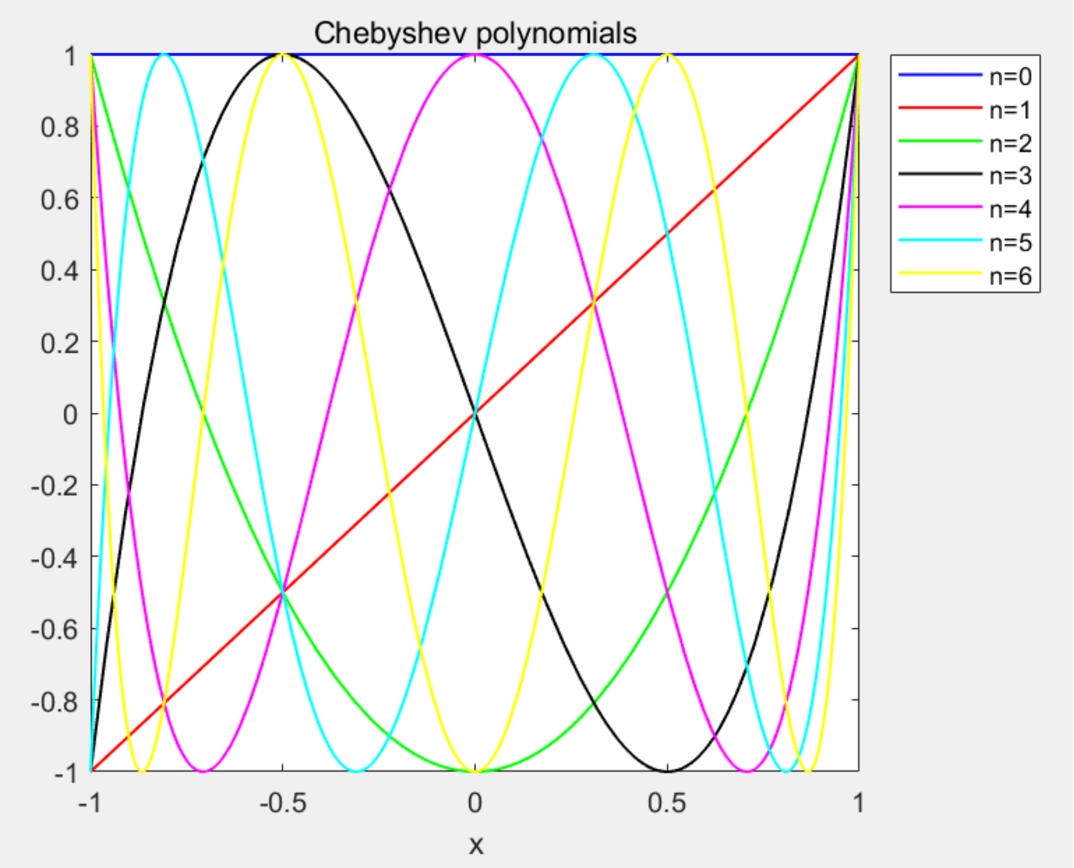
$$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$$

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

$$\vdots$$

$T_n(x)$的最高项系数为$2^{n-1}, n \geq 1$

Approxi_Chebyshev.m



■ 重要的正交多项式

• 切比雪夫（Chebyshev）多项式

性质 (4)： $T_n(x)$ 在 $(-1,1)$ 内有 n 个不同的零点

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right) \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

① $T_n(x)$ 的零点都在 $(-1,1)$ 内

② $T_n(x)=0$ 的根都是实数

■ 重要的正交多项式

- 切比雪夫（Chebyshev）多项式

性质(5)： $T_n(x)$对零的偏差最小。

- $T_n(x)$的最高项系数$a_n = 2^{n-1}$,(n=1,2,...）

令$\tilde{T}_0(x) = 1$，$\tilde{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ (n=1,2,...）

则$\tilde{T}_n(x)$是首项系数为1的Chebyshev多项式。

■ 重要的正交多项式

- 首项系数为1的切比雪夫（Chebyshev）多项式

定理：$\widetilde{H}_n$ 是 [-1,1] 上次数 $\leqslant n$ 的首项系数为 1 的多项式全体. 则对 $\forall\, p(x)\in \tilde{H}_n$，都有

$$\max_{-1\le x\le 1}\left|\tilde{T}_n(x)\right| \le \max_{-1\le x\le 1}\left|p(x)\right|$$

且 $\max\limits_{-1\le x\le 1}\left|\tilde{T}_n(x)\right| = \dfrac{1}{2^{n-1}}$

证明详见：徐利治，王仁宏，周蕴时. 函数逼近的理论与方法. 北京：科学出版社，1979.

等价描述：$\max\limits_{-1\leqslant x\leqslant 1}|\widetilde{T}_n(x)| = \min\limits_{P\in\widetilde{H}_n}\max\limits_{-1\leqslant x\leqslant 1}|P(x)| = \dfrac{1}{2^{n-1}}.$

$$\left\|\tilde{T}_n(x)\right\|_\infty \le \left\|p(x)\right\|_\infty, \quad \forall\, p(x)\in \tilde{H}_n$$

最佳一致逼近多项式度量一致

即 $\tilde{T}_n(x)$ 在集合 $\tilde{H}_n$ 中无穷范数最小：$\tilde{T}_n(x) = \arg\min\limits_{p\in\tilde{H}_n(x)}\left\|p(x)\right\|_\infty$

2 正交多项式

■ 重要的正交多项式

- 首项系数为1的切比雪夫（Chebyshev）多项式

几点注记

① 这里的无穷范数是指 $C[-1, 1]$ 上的无穷范数

② 定理中的结论可推广为“在所有次数不超过 n 的首项系数为 1 的多项式中，$\tilde{T}_n(x)$ 的无穷范数最小”

③ 该结论可用于计算 n 次多项式在 $[-1,1]$ 上的 n-1 次最佳一致逼近多项式

性质：设 $f(x)\in H_n$，且首项系数为 $a_n\neq 0$，则 $f(x)$ 在 $[-1,1]$ 上的 n-1 次最佳一致逼近多项式为

$$f(x)-a_n\tilde{T}_n(x)$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

其中 $T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x$

$$\widetilde{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x), n = 1, 2, \cdots$$

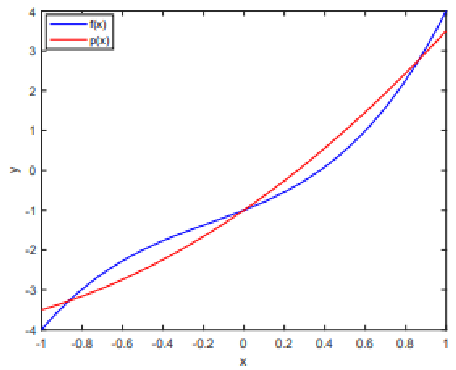
■ 重要的正交多项式

• 切比雪夫（Chebyshev）多项式

例 求 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[-1, 1]$ 上的二次最佳一致逼近多项式。

解:

$$\begin{aligned} p(x) &= f(x) - a_3\widetilde{T}_3(x) \\ &= 2x^3 + x^2 + 2x - 1 - 2\left(x^3 - \frac{3}{4}x\right) \\ &= x^2 + \frac{7}{2}x - 1 \end{aligned}$$



注: 计算 n 次多项式在$[a, b]$上的 $n-1$ 次最佳一致逼近多项式需先作变量替换

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t \qquad , t \in [-1,1]$$

3 最佳平方逼近

- 怎么计算最佳平方逼近函数
- 最佳平方逼近多项式
- 正交多项式与最佳平方逼近多项式

3 最佳平方逼近

设 $f(x)\in C[a,b]$，$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\in C[a,b]$ 线性无关，令

$$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$$

求 $S^*(x)\in\Phi$，使得

$$\|f(x)-S^*(x)\|_2^2 = \min_{s(x)\in\Phi}\|f(x)-S(x)\|_2^2$$

我们称 $S^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中的 **最佳平方逼近**。

† 这里的范数是带权内积导出范数，即

$$\|f(x)-S(x)\|_2^2 = \int_a^b \rho(x)\big(f(x)-S(x)\big)^2\,\mathrm{d}x$$

■ 最佳平方逼近函数计算

$$\|f(x)-S(x)\|_2^2=\int_a^b \rho(x)\big(f(x)-S(x)\big)^2\,\mathrm{d}x$$

对任意 $S(x)\in\Phi$，可设

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

则“求 $S^*(x)$”等价于“求下面的多元函数的最小值点”

$$\boxed{I(a_0,a_1,\ldots,a_n)=\int_a^b \rho(x)\left(f(x)-\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x)\right)^2\mathrm{d}x}$$

$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$ 是关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的多元二次函数。

最小值点 $\Longleftrightarrow$ $\dfrac{\partial I}{\partial a_k}=0$ $\quad k=0,1,\ldots,n$

■ 最佳平方逼近函数计算

即 $\dfrac{\partial I}{\partial a_k} = 2\int_a^b \rho(x)\left(f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)\right)\varphi_k(x)\mathrm{d}x = 0$

$\Longleftrightarrow$ $\sum_{j=0}^{n} a_j (\varphi_k, \varphi_j) = (\varphi_k, f)$ $k = 0, 1, \ldots, n$

法方程

法方程 关于 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的线性方程组

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

记为: $\boxed{Ga = d}$

■ 最佳平方逼近函数计算

法方程存在唯一解 $\Longleftrightarrow$ $\det(G) \neq 0$

$\Longleftrightarrow$ $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 线性无关

设法方程的解为：$a_0^*, a_1^*, \ldots, a_n^*$，并令

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

定理：$S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 Φ 中的唯一最佳平方逼近函数，且逼近误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x) - S^*(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_j, f)$$

■ 最佳平方逼近函数计算

定理： 假设 Y 是内积空间 X 的一个线性子空间，$f \in X$，那么 $y^* \in Y$ 是 f 的一个最佳逼近元当且仅当

$$\langle f - y^*, y \rangle = 0, \quad \forall y \in Y.$$

注： f 在线性子空间 Y 上的最佳逼近元就是**f在Y上的正交投影**。

3 最佳平方逼近

法方程

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\(\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \vdots & & \ddots & \vdots\\(\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\a_1\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}d_0\\d_1\\\vdots\\d_n\end{bmatrix}$$

记为：$\boxed{Ga=d}$

■ Hn中最佳平方逼近

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

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

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

$$(f,\varphi_k)=\int_0^1 f(x)x^k\,\mathrm{d}x\equiv d_k.$$

G 为Hilbert 矩阵

$$H=\begin{pmatrix}1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1)\\1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2)\\\vdots & \vdots & & \vdots\\1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1)\end{pmatrix}.$$

- 当 n 较大时，Hilbert 矩阵高度病态，选用 $\{1,x,\cdots,x^n\}$ 作基直接求解较困难，通常采用正交基。

- 该方法只适合求低次最佳平方逼近。

■ 例子

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

解： $d_0=(\varphi_0, f)=(1, f)=\int_0^1 \sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x \approx 1.147$

$d_1=(\varphi_1, f)=(x, f)=\int_0^1 x\sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x \approx 0.609$

法方程

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \end{bmatrix}$$

$a_0 \approx 0.934,\ \ a_1 \approx 0.426$

$$\boxed{S_1^*(x) \approx 0.934+0.426x}$$

误差估计：$\|\delta(x)\|_2^2=\|f(x)\|_2^2-\sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_j, f) \approx 0.0026$

$\|\delta(x)\|_\infty \approx 0.066$

3 最佳平方逼近

定义：设函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x), \dots \in C[a,b]$，$\rho(x)$ 是 $[a,b]$ 上的权函数，若

$$(\varphi_i,\varphi_j)=\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & i\neq j\\ A_i\neq 0, & i=j\end{cases}$$

则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 是 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交函数族。

■ 用正交基（函数族）求最佳平方逼近

设$f(x)\epsilon C[a,b], \varphi=span\{\varphi_0,\varphi_1,\dots,\varphi_n\}$.若$\varphi_0,\varphi_1,\dots,\varphi_n$是正交函数族，则$(\varphi_i,\varphi_j)=0, i\neq j$,而$(\varphi_j,\varphi_j)>0$.
因此，法方程的系数矩阵$G_n=\{\varphi_0,\varphi_1,\dots,\varphi_n\}$为非奇异对角阵，且解为：

若 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 正交，则法方程的解为

$$a_k^*=\frac{(\varphi_k,f)}{(\varphi_k,\varphi_k)} \qquad k=0,1,\dots,n$$

$$\boxed{S^*(x)=\frac{(\varphi_0,f)}{(\varphi_0,\varphi_0)}\varphi_0(x)+\frac{(\varphi_1,f)}{(\varphi_1,\varphi_1)}\varphi_1(x)+\cdots+\frac{(\varphi_n,f)}{(\varphi_n,\varphi_n)}\varphi_n(x)}$$

误差估计

$$\|\delta(x)\|_2^2=\|f(x)\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}\frac{(\varphi_k,f)^2}{(\varphi_k,\varphi_k)}$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{n}\frac{(\varphi_k,f)^2}{(\varphi_k,\varphi_k)}\leq\|f(x)\|_2^2$$

Bessel 不等式

3 最佳平方逼近

■ 用正交基(函数族）求最佳平方逼近

- 广义Fourier（傅里叶）级数

设 $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \ldots$ 是正交函数族，则称

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k^* \varphi_k(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + a_2^* \varphi_2(x) + \cdots$$

为 $f(x)$ 的 广义 Fourier 级数。 其中

$$a_k^* = \frac{(\varphi_k, f)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

为广义 Fourier 系数。

3 最佳平方逼近

■ 用正交基(函数族）求最佳平方逼近

- 广义Fourier（傅里叶）级数

定理：若 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 是正交多项式族，$S_n^*(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式，则

$$\lim_{n\to\infty}\left\|f(x)-S_n^*(x)\right\|_2=0$$

■ Legendre最佳平方逼近

设 $f(x)\in C[-1,1]$，$\rho(x)=1$，则 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式为

$$S_n^*(x)=a_0^*\mathrm{P}_0(x)+a_1^*\mathrm{P}_1(x)+\cdots+a_n^*\mathrm{P}_n(x)$$

其中 $a_k^*=\dfrac{(\mathrm{P}_k,f)}{(\mathrm{P}_k,\mathrm{P}_k)}=\dfrac{2k+1}{2}\displaystyle\int_{-1}^{1}\mathrm{P}_k(x)f(x)\,\mathrm{d}x$

误差估计

$$\|\delta_n(x)\|_2^2=\|f(x)\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}\frac{(\mathrm{P}_k,f)^2}{(\mathrm{P}_k,\mathrm{P}_k)}=\int_{-1}^{1}f^2(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{k=0}^{n}\frac{2}{2k+1}(a_k^*)^2$$

■ Legendre最佳平方逼近

例: 求 $f(x)=\mathrm{e}^x$ 在 $[-1,1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式, 并估计误差。

解:

$$(f(x),P_0(x))=\int_{-1}^{1}\mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x=\mathrm{e}-\mathrm{e}^{-1}\approx 2.3504$$
$$(f(x),P_1(x))=\int_{-1}^{1}x\mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x=2\mathrm{e}^{-1}\approx 0.7358$$
$$(f(x),P_2(x))=\int_{-1}^{1}\left(\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2}\right)\mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x=\mathrm{e}-7\mathrm{e}^{-1}\approx 0.1431$$
$$(f(x),P_3(x))=\int_{-1}^{1}\left(\frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x\right)\mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x=37\mathrm{e}^{-1}-5\mathrm{e}\approx 0.02013.$$

$$a_0^*=(f(x),P_0(x))/2\approx 1.1752$$
$$a_1^*=3\,(f(x),P_1(x))/2\approx 1.1036$$
$$a_2^*=5\,(f(x),P_2(x))/2\approx 0.3578$$
$$a_3^*=7\,(f(x),P_3(x))/2\approx 0.0706$$

代入得

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

$$\|\delta_n(x)\|_2=\|\mathrm{e}^x-S_3^*(x)\|_2\leqslant 0.0084$$

$$\|\delta_n(x)\|_\infty=\|\mathrm{e}^x-S_3^*(x)\|_\infty\leqslant 0.0112$$

3 最佳平方逼近

■ 一般区间上的最佳平方逼近

设 $f(x)\in C[a,b]$，$\rho(x)=1$，

计算 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的最佳平方逼近多项式。

基本思想：变量代换

$$x=\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}$$

$$[a,b]\longrightarrow[-1,1]$$

$$\begin{tikzcd}
f(x) \arrow[r] & f\left(\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}\right) \arrow[d] \\
S^*\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right) & S^*(t) \arrow[l]
\end{tikzcd}$$

* 通常采用 Legendre展开得到最佳平方逼近多项式，与直接法得到的多项式一 致；

* Legendre展开不用解线性方程组，计算较方便，避免了n较大时，法函数出现的病态方程。

3 最佳平方逼近

设 $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \ldots$ 是正交函数族，则称

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k^* \varphi_k(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + a_2^* \varphi_2(x) + \cdots$$

为 $f(x)$ 的 广义 Fourier 级数。 其中

$$a_k^* = \frac{(\varphi_k, f)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

为广义 Fourier 系数。

■ Chebyshev级数

- 设$f(x) \in [-1,1]$，按$\{T_k(x)\}_0^\infty$展成广义Fourier级数（取 $\varphi_k = T_k$），可得**Chebyshev级数：**

$$C^*(x) = \frac{C_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} C_k^* T_k(x)$$

其中系数$C_k^* = \frac{(T_k(x), f(x))}{(T_k(x), T_k(x))} = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{T_k(x) f(x)}{\sqrt{1-x^2}} \mathrm{d}x$，$k = 0,1,2, \ldots$

$$T_k(x) = \cos(k \arccos x), |x| \le 1。$$

- 若令$x = \cos\theta, 0 \le \theta \le \pi$，则**Chebyshev级数系数**可表示为：

$$C_k^* = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} f(\cos\theta) \cos k\theta \, \mathrm{d}\theta, k = 0,1,2, \ldots$$

■ Chebyshev级数

- 根据 Fourier 级数理论知，若$f''(x)$在 [−1, 1] 上分段连续，则 $f(x)$在 [−1, 1] 上的 Chebyshev 级数一致收敛于$f(x)$，有

$$\boldsymbol{f(x)=\frac{C_0^*}{2}+\sum_{k=1}^{\infty} C_k^* T_k(x)}$$

■ Chebyshev级数

部分和

$$C_n^*(x) = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{n} a_k^* T_k(x)$$

误差

$$f(x) - C_n^*(x) \approx a_{n+1}^* T_{n+1}(x)$$

结论：$C_n^*(x)$ 可看作是 $f(x)$ 在 $[-1, 1]$ 上的 n 次近似最佳一致逼近多项式。

4 曲线拟合的最小二乘法

- 曲线拟合 vs 曲线拟合的最小二乘法
- 曲线拟合的最小二乘法计算
- 正交多项式与最小二乘拟合
- 非线性最小二乘拟合

■ 曲线拟合 vs 曲线拟合的最小二乘法

给定一组数据：

x	x_0	x_1	$\cdots$	x_m
$f(x)$	y_0	y_1	$\cdots$	y_m

在某类函数族 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$ 中寻找函数 $S^*(x)$，使得 $S^*(x)$ 距离 $f(x)$ 最近。

$m \gg n$

如何定义“最近”？

$$\sum_{i=0}^{m} \left|S^*(x_i) - y_i\right|^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} \left|S(x_i) - y_i\right|^2$$

误差平方和最小 $\Rightarrow$ 曲线拟合的最小二乘法

■ 带权最小二乘数据拟合

† 记 $\delta(S)=\left[S(x_0)-y_0,\ S(x_1)-y_1,\ \dots,\ S(x_m)-y_m\right]$，则

$$\|\delta(S)\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}|S(x_i)-y_i|^2,\quad \|\delta(S)\|_\infty=\max_{0\le i\le m}|S(x_i)-y_i|,\quad \|\delta(S)\|_1=\sum_{i=0}^{m}|S(x_i)-y_i|$$

- 为了更具有一般性，通常**考虑权函数（表示不同点处的数据比重不同），构建最小二乘法的误差平方和**：

在函数空间 Φ 中求 $S^*(x)$，使得

$$\sum_{i=0}^{m}\omega_i[S^*(x_i)-y_i]^2=\min_{s(x)\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\omega_i\left[S(x_i)-y_i\right]^2$$

其中 $\omega_1,\omega_2,\dots,\omega_n$ 为正实数，表示点 x_i 处的权系数。

■ 曲线拟合的最小二乘法计算

观察发现：该问题可以看作是最佳平方逼近问题的离散形式。

对任意 $S(x) \in \Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$，可设

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \quad (n < m)$$

则求 $S^*(x)$ 等价于求下面的多元函数的最小值点

$$I(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i [S(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i\right]^2$$

最小值点 $\Longleftrightarrow$ $\dfrac{\partial I}{\partial a_k} = 0$ $\quad k = 0, 1, \ldots, n$

■ 曲线拟合的最小二乘法计算

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

引入记号：

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i), \quad (f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i y_i \varphi_k(x_i)$$

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0 \Longleftrightarrow \sum_{j=0}^{n} (\varphi_j, \varphi_k) a_j = (f, \varphi_k) \quad (k = 0, 1, \ldots, n)$$

法方程

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

记为：$\boxed{Ga = d}$

$$d_k = (\varphi_k, f)$$

■ 解的存在唯一性

法方程存在唯一解 $\Longleftrightarrow$ $\det(G) \neq 0$

? $\Longleftrightarrow$ $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 线性无关

定义 1

设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$ 的任意线性组合在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m (m \geqslant n)$ 上至多只有 n 个不同的零点，则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 满足 Haar 条件.

定理 2

$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 满足 *Haar* 条件，则法方程系数矩阵非奇异，即法方程存在唯一解 $a_k = a_k^* \ (k = 0, 1, \cdots, n)$。

* 若取$\varphi_n = x^n$，则 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$满足 Haar 条件。

■ 多项式最小二乘曲线拟合

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

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

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

- 当 n 较大时，Hilbert 矩阵高度病态，选用 $\{1,x,\cdots,x^n\}$ 作基直接求解较困难，通常采用正交基。

G 为Hilbert 矩阵

$$H=\begin{pmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{pmatrix}.$$

■ 多项式最小二乘曲线拟合

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

取 $\Phi=H_n=\text{span}\{1,x,\ldots,x^n\}$, 即 $\varphi_i=x^i$, 则相应的法方程为

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i f_i \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i f_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n f_i \end{bmatrix}$$

此时 $S^*(x)=\sum_{k=0}^{n}a_k^*x^k$ 就称为 $f(x)$ 的 n 次最小二乘拟合多项式。

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

例 求下列数据的拟合曲线

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

解 画散点图看到各点在一条直线附近，可用线性函数作拟合曲线。
$S_1(x)=a_0+a_1x$， $m=4$, $n=1$, $\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$。

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

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i^2=74,\quad (\varphi_0,f)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i f_i=47$$

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

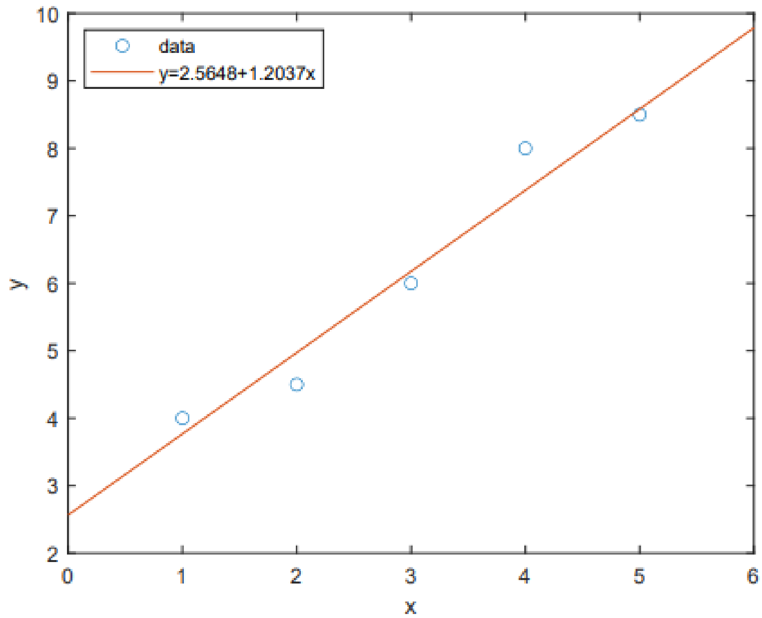
Curve_Fitting.m

解线性方程组

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

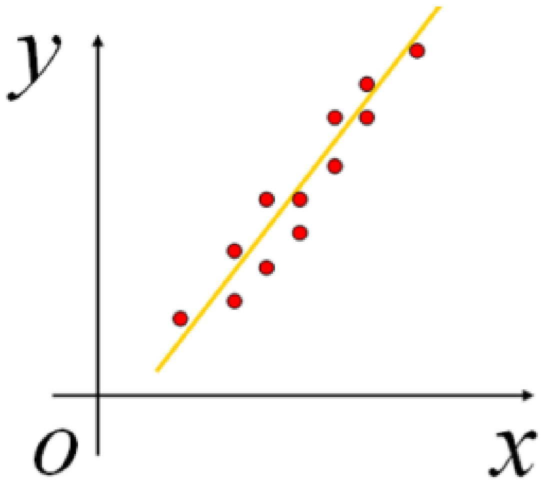
解出 $a_0 = 0.934,\ a_1 = 0.426$, 故

$$S_1^*(x) = 2.5648 + 1.2037x.$$

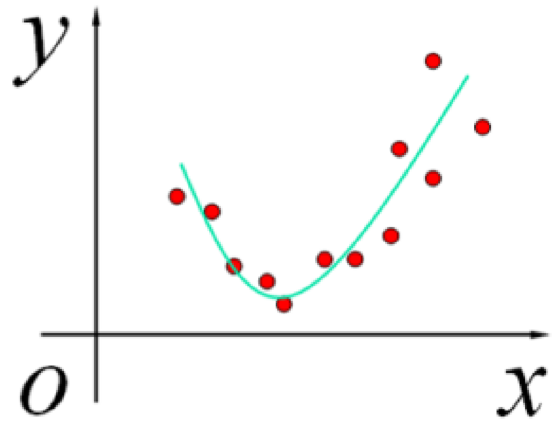


4 曲线拟合的最小二乘法

对于数据拟合问题，如何选择数学模型很重要，即函数空间 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$ 的选取，通常需要根据物理意义，或所给数据的分布情况来确定。



$y = ax + b$



$y = ax^2 + bx + c$

■ 非线性最小二乘拟合

有时需要非线性函数，如指数函数、对数函数、幂函数等拟合给定的数据，这时建立的法方程是一个非线性方程组，这类拟合问题称为非线性最小二乘拟合。

思路：作变量代换，转化为线性拟合

- $S(x) = ae^{bx}$

  令 $\bar{y} = \ln y$, 则 $\bar{y}(x) = bx + A$，其中 $A = \ln a$，即 $a = \mathrm{e}^A$.

- $S(x) = a\ln x + b$

  令 $\bar{x} = \ln x$, 则 $y(x) = a\bar{x} + b$

- $S(x) = ax^b$

  令 $\bar{y} = \ln y$, $\bar{x} = \ln x$, 则 $\bar{y}(x) = b\bar{x} + A$，其中 $A = \ln a$，即 $a = \mathrm{e}^A$.

■ 非线性最小二乘拟合

例 10 设数据$(x_i, y_i)(i=0,1,2,3,4)$由表 3-2 给出，表中第 4 行为 $\ln y_i = \bar{y}_i$，可以看出数学模型为 $y=ae^{bx}$，用最小二乘法确定 a 及 b.

表 3-2 数据表

i	0	1	2	3	4
x_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46
$\bar{y}_i$	1.629	1.756	1.876	2.008	2.135

Curve_Fitting.m

■ 非线性最小二乘拟合

解 画散点图确定曲线方程为 $y=ae^{bx}$，两边取对数得 $\ln y=\ln a+bx$, 若令 $\bar{y}=\ln y, A=\ln a$, 则得 $\bar{y}=A+bx$, 确定 A, b, 先将 (x_i, y_i) 转化为 $(x_i, \bar{y}_i)$

$$(\varphi_0,\varphi_0)=5,\quad (\varphi_0,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}x_i=7.5,\quad (\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}x^i=11.875,$$

$$(\varphi_0,\bar{y})=\sum_{i=0}^{4}\bar{y}_i=9.404,\quad (\varphi_1,\bar{y})=\sum_{i=0}^{4}x_i\bar{y}_i=14.422.$$

$$\boxed{(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)},\quad \boxed{(f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k(x_i)}$$

■ 非线性最小二乘拟合

法方程

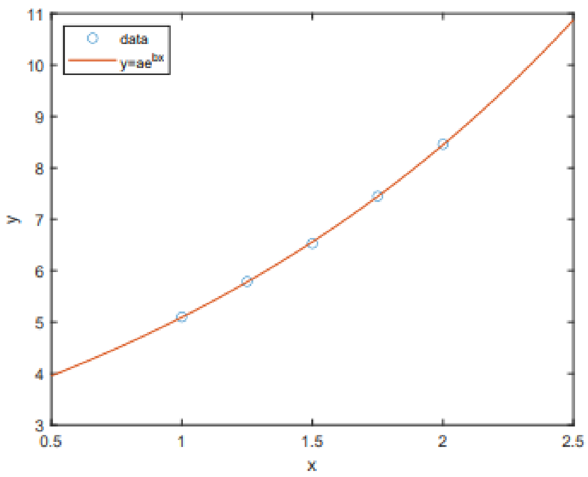
$$\begin{cases} 5A + 7.50b = 9.404 \\ 7.50A + 11.875b = 14.422 \end{cases}$$

解得

$$A = 1.122,\ b = 0.505,\ a = \mathrm{e}^A = 3.071$$

最小二乘法拟合曲线为

$$y = 3.071\mathrm{e}^{0.505x}$$



用正交多项式做最小二乘

- 点集带权正交的函数族

给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 以及各点的权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$，如果函数族 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 满足

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

则称 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$ 正交。

若 φ_k 是首项系数非零的 k 次多项式，则为离散正交多项式族。

4 曲线拟合的最小二乘法

■ 用正交多项式做最小二乘

设多项式 $p_0, p_1, \ldots, p_n$ 关于点集 $x_0, x_1, \ldots, x_m$ 带权 $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_m$ 正交，则 $f(x)$ 在 H_n 中的最小二乘拟合多项式为

$$S^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + a_2^* p_2(x) + \cdots + a_n^* p_n(x)$$

其中 $a_k^* = \dfrac{(p_k, f)}{(p_k, p_k)}$，$k = 0, 1, \ldots, n$。

- 最佳平方逼近函数为

$S^*(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(f(x),\varphi_k(x))}{\|\varphi_k(x)\|_2^2} \varphi_k(x)$

- 最佳平方逼近误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} \frac{(f(x), \varphi_k(x))^2}{(\varphi_k(x), \varphi_k(x))}$$

■ 用正交多项式做最小二乘

- 带权正交多项式的构造

给定 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 和权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$，如何构造正交多项式族 $\{p_k(x)\}_{k=0}^{n}$ ？

三项递推公式：

$$\begin{cases} p_0(x)=1,\ \ p_1(x)=x-\alpha_0 \\ p_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)p_k(x)-\beta_k p_{k-1}(x)\,, \quad k=1,\ldots,n\text{-}1 \end{cases}$$

$$\text{其中} \begin{cases} \alpha_k=(xp_k,p_k)/(p_k,p_k)\,, \quad k=0,1,\ldots,n\text{-}1 \\ \beta_k=(p_k,p_k)/(p_{k-1},p_{k-1})\,, \quad k=1,2,\ldots,n\text{-}1 \end{cases}$$

可以证明，由上述递推方法构造出来的 $\{p_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$ 正交。

■ 用正交多项式做最小二乘

- 总结

$$\begin{cases} p_0(x)=1, \ \ p_1(x)=x-\alpha_0 \\ p_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)p_k(x)-\beta_k p_{k-1}(x) \end{cases}$$

$$S^*(x)=a_0^* p_0(x)+a_1^* p_1(x)+a_2^* p_2(x)+\cdots+a_n^* p_n(x), \quad a_k^*=\frac{(p_k, f)}{(p_k, p_k)}$$

① 可以将构造正交多项式族、解法方程、形成拟合多项式穿插进行；

② n 可以事先给定，或在计算过程中根据误差来确定；

③ 该方法非常适合编程实现，只用递推公式，并且当逼近次数增加时，只要相应地增加程序中的循环次数即可。

④ 该方法是目前多项式最小二乘拟合最好的计算方法，有通用程序。

用正交多项式做最小二乘

例 给定数据表，求二次最小二乘拟合多项式

x_i	0	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
y_i	1.00	1.75	1.96	2.19	2.44	2.71	3.00

解

$$(p_0, p_0) = \sum_{i=0}^{6} 1 = 7, (f, p_0) = \sum_{i=1}^{6} y_i = 15.05, \quad (xp_0, p_0) = \sum_{i=1}^{6} x_i = 4.5$$

$$a_0^* = (f, p_0) \,/\, (p_0, p_0) \approx 2.15, \quad \alpha_0 = (xp_0, p_0) \,/\, (p_0, p_0) \approx 0.64$$

$$p_1(x) = x - 0.64 \quad a_1^* \approx 1.98, \quad \alpha_1 \approx 0.36, \quad \beta_1 \approx 0.094$$

$$p_2(x) = x^2 - 0.98x + 0.12 \quad a_2^* \approx 1.00$$

$$S_2^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + a_2^* p_2(x) = x^2 + x + 1$$

Curve_Fitting.m

■ 用正交多项式做最小二乘

- ∗ MATLAB 正交多项式最小二乘拟合函数: **polyfit(x,y,n)**
- ∗ MATLAB 曲线拟合工具箱：**cftool**

具体地，MATLAB 正交多项式最小二乘拟合函数:

p = **polyfit (x,y,n)**

输入参数 $x{:=}[x_0, x_1, \cdots, x_m]$;

$y{:=}[y_0, y_1, \cdots, y_m]$.

返回次数为 n 的多项式 p(x) 的系数。

p 中的系数按降幂排列，p 的长度为 n + 1。

函数逼近与计算

x	x_0	x_1	…	x_m
$f(x)$	y_0	y_1	…	y_m

给定数据表，寻找到一个简单易算的 $p(x)$，使得

$$p(x_i) = y_i$$

函数插值

给定 $f(x)$，在某个简单易算的函数类中找一个 $p(x)$，使得 $p(x)$ 在某种度量下距离 $f(x)$ 最近。

函数逼近

给定数据表（带误差），在某个简单易算的函数类中找一个 $p(x)$，使得 $p(x)$ 在某种度量下距离 $f(x)$ 最近。

曲线拟合 / 数据拟合

† 注意区分三者的区别！

- Q & A
- 谢谢