第3章 最佳逼近和最小二乘法

3.1内积空间中的最佳逼近

3.2函数的最佳平方逼近

3.3勒让德多项式和切比雪夫多项式

3.4曲线（数据）拟合的最小二乘法

3.5 $C[a,b]$中最佳一致逼近

基本问题

已知一组测量数据(x_j, y_j) $(j=0,1,\cdots,n)$

寻找变量x, y之间函数关系的近似表达式。

通过该函数关系的近似表达式计算其它点

x^*处的函数值。

解决办法　1）插值法

插值法是一种古老而实用的数值方法，也是函数逼近的重要方法之一。

插值法

构造一个（相对简单的）函数 $y = s(x)$，通过全部节点，且

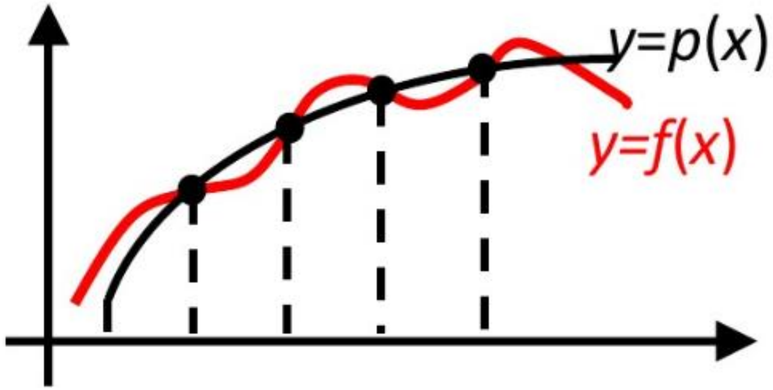
$$s(x_j) = y_j \qquad (j = 0, 1, \cdots, n)$$

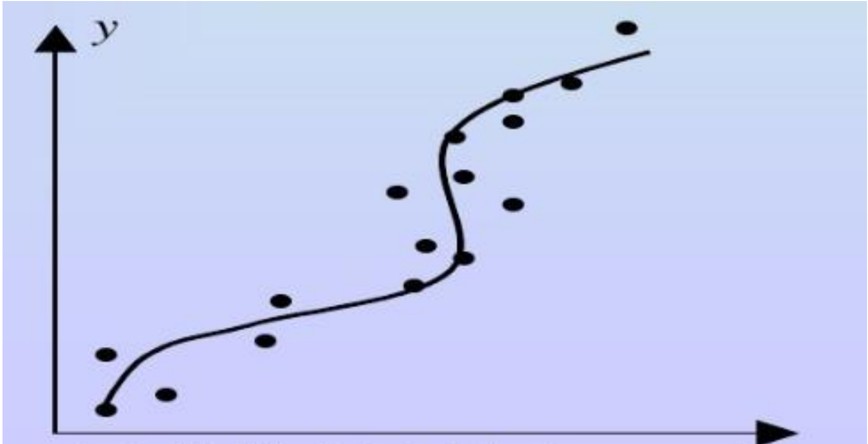
可用 $s(x)$ 求已知点处 $y^* = s(x^*)$.

》由于插值多项式过节点，若测量数据有误差，误差保留在插值多项式中，影响逼近精度，插值效果不理想。

》测量数据众多时，高次插值多项式近似程度不稳定，故缺乏实用价值。

x	x_0	x_1	x_2	……	x_n
y	y_0	y_1	y_2	……	y_n





曲线拟合示意图

2) 函数的最佳逼近(从整体角度考虑)

对于函数 $f(x)$，要求在一个简单函数类 B 中，寻找一个函数 $s(x) \in B$，不一定过全部的点 (x_i, y_i) 使得 $s(x)$ 与 $f(x)$ 的误差在某种度量下达到最小，这一问题称为最佳逼近问题，

$s(x)$ 称为 $f(x)$ 的最佳逼近函数.

简单函数类 B 通常为 n 次多项式、有理函数或分段低次多项式等

- **<u>线性（向量）空间</u>：**

线性空间（数域K）四要素：

非空集合E，数域K和两种运算：加法与数乘，分别满足如下运算规律

$$+\quad E\times E\to E,\begin{cases} x+y=y+x\in E \\ x+(y+z)=(x+y)+z\in E \\ x+0=x \\ x+(-x)=0 \end{cases}$$

$$.\quad K\times E\to E,\begin{cases} \alpha(\beta x)=(\alpha\beta)x\in E \\ 1\cdot x=x,\ 0\cdot x=0 \\ (\alpha+\beta)x=\alpha x+\beta x \\ \alpha(x+y)=\alpha x+\alpha y \end{cases}$$

线性相关、无关：

$x_1, x_2, ..., x_n \in E$，$\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n \in K$,

若$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + ... + \alpha_n x_n = 0$当且仅当$\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_n = 0$

则称$x_1, x_2, ..., x_n$线性无关，否则线性相关。

线性空间的基：

$x_1, x_2, ..., x_n \in E$，且$x_1, x_2, ..., x_n$线性无关，若$\forall x \in E, \exists \alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n \in K$,

$$s.t.\ \ x = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + ... + \alpha_n x_n$$

则称$\{x_1, x_2, ..., x_n\}$为线性空间E 的一组（线性无关）基或标架（坐标系），

称$(\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n)$ 为 x 在基$\{x_1, x_2, ..., x_n\}$下的坐标；

并称线性空间 E 是 n 维空间，记作 $E = span\{x_1, x_2, ..., x_n\}$,

若E中有无限多个线性无关的元素，则称其为无限维线性空间。

例如，

R^n，$\forall x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\in R^n, x=x_1e_1+x_2e_2+\cdots+x_ne_n,$

$e_i=(0,\cdots,1,\cdots,0)^T$, 第$i$个分量为1，其它分量为0.

$H_n=span\left\{1,x,\cdots,x^n\right\}$是$n$+1维线性空间，

$\left\{1,x,\cdots,x^n\right\}$是它的一组线性无关基，

$\forall p\left(x\right)\in H_n$, 有 $p\left(x\right)=a_01+a_1x+\cdots+a_nx^n$

$C[a,b]$, $\left(f+g\right)(x)=f(x)+g(x), C[a,b]$, $\left(\alpha\cdot f\right)(x)=\alpha f(x)$

是实数域上的无穷维线性空间

- **范数和赋范线性空间**

范数：

$$\|\cdot\|: E \to R, \begin{cases} \|x\| \ge 0, \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0, & \text{非负性} \\ \|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, & \text{正齐性} \\ \|x+y\| \le \|x\| + \|y\|, & \text{三角不等式} \end{cases}$$

赋范线性空间：线性空间+范数

例1. R^n $\quad \forall x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \in R^n,$

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

欧氏范数

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} |x_i|$$

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}, p \ge 1$$

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{\text{n}} |x_i|$$

例2.

$C[a,b]$, $\quad \|f(t)\|_\infty = \max_{t\in[a,b]} |f(t)|$

$$\|f(t)\|_1 = \int_a^b |f(t)|\, dt$$

$$\|f(t)\|_2 = \left(\int_a^b |f(t)|^2\, dt\right)^{1/2}$$

Hilbert空间

一、内积空间：线性空间+内积

例：

$$R^n \ ,x=(x_1,\cdots,x_n)^T \ ,y=(y_1,\cdots,y_n)^T \quad (x,y)=\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

$$C^n \ ,x=(x_1,\cdots,x_n)^T \ ,y=(y_1,\cdots,y_n)^T \quad (x,y)=\sum_{i=1}^{n} x_i \overline{y}_i$$

<u>内积</u> $(\cdot,\cdot):E\times E\to C(R)$ 满足：

$(x,x)\ge 0\,,(x,x)=0\Leftrightarrow x=0$ 非负性

$(x,y)=\overline{(y,x)}$ 共轭对称性

$(\alpha x,y)=\alpha(x,y)$

$(x+y,z)=(x,z)+(y,z)$ 第一变元线性性。

Remarks： 内积关于第二变元满足共轭线性性质：

$$(x,\alpha y)=\overline{(\alpha y,x)}=\overline{\alpha(y,x)}=\bar{a}(x,y)$$

$$(x,y+z)=\overline{(y+z,x)}=\overline{(y,x)+(z,x)}=(x,y)+(x,z)$$

例如，

设$w_i>0, i=1,2,\ldots,n,$

$x=(x_1,\cdots,x_n)^T$,$y=(y_1,\cdots,y_n)^T\in C^n$ ， 定义加权的内积

$(x,y)=\sum_{i=1}^{n}w_i x_i\bar{y}_i$， $(w_1,\cdots,w_n)$称为权重。

特例， $w_i=1$， $i=1,2,\ldots,n,$ $(x,y)=\sum_{i=1}^{n}x_i\bar{y}_i$

设$[a,b]$为有限或无限区间，非负函数$\rho(t)$ 满足：

1. $\int_a^b t^k \rho(t)\,dt$存在且有限, $k=0,1,\ldots$

2. 对$[a,b]$上的非负连续函数$g(t)$ ，若$\int_a^b \rho(t)g(t)\,dt=0$ ，则$g(t)\equiv 0$

则称$\rho(t)$为$[a,b]$上的权函数。

$C[a,b],(f(t),g(t))=\int_a^b \rho(t)f(t)g(t)\,dt$

特例，$\rho(t)\equiv 1$,　$(f(t),g(t))=\int_a^b f(t)g(t)\,dt$

内积的性质：设E是K上内积空间

1. 内积满足Cauchy-Schwarz不等式： $|(x,y)|\le (x,x)^{\frac{1}{2}}(y,y)^{\frac{1}{2}}$

证： $\forall x,y\in E,\forall\lambda\in K,\quad (x+\lambda y,x+\lambda y)\ge 0,$

$$(x,x)+\bar{\lambda}(x,y)+\lambda(y,x)+|\lambda|^2(y,y)\ge 0$$

设 $y\ne 0$ 取 $\lambda=-\dfrac{(x,y)}{(y,y)}$

$$(x,x)-\frac{|(x,y)|^2}{(y,y)}\ge 0\Rightarrow |(x,y)|^2\le (x,x).(y,y)$$

y=0 时不等式显然成立。

2. 内积可诱导范数 $\|x\| = \sqrt{(x,x)}$

$$C^n, R^n : x = (x_1, \cdots, x_n)^T \ , y = (y_1, \cdots, y_n)^T$$

$$(x,y) = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \overline{y}_i \to \|x\| = \sqrt{(x,x)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} w_i \left|x_i\right|^2}$$

特例， $w_i = 1, \|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left|x_i\right|^2}$

$$C[a,b], (f(t), g(t)) = \int_a^b \rho(t) f(t) g(t) dt \to \| f(t) \| = \sqrt{\int_a^b \rho(t) \left| f(t) \right|^2 dt}$$

特例， $\rho(t) \equiv 1, \ \| f(t) \| = \sqrt{\int_a^b \left| f(t) \right|^2 dt}$

3. 内积（导出的范数满足平行四边形公式：

$$\|x+y\|^2+\|x-y\|^2=2\left(\|x\|^2+\|y\|^2\right)$$

4. 内积关于两个量连续。

正交投影、正交分解的定义

定义 设 M 为内积空间 U 的线性子空间，

$x \in U$，若$\exists x_0 \in M$，$x_1 \in M^{\perp}$，使得

$$x = x_0 + x_1 \qquad (*)$$

则称x_0为 x 在 M 上的正交投影，（*）式称为 x 关于 M 的正交分解。

正交投影及正交分解的存在唯一性

定理: 设 M 为内积空间 U 中的完备线性子空间，则$\forall x \in U$，必存在唯一的$x_0 \in M$及$x_1 \in M^{\perp}$，使得

$$x = x_0 + x_1$$

函数最佳逼近的理论依据

正交投影的性质（最佳逼近）

性质：设 U 是内积空间，$M \subset U$ 为线性子空间，若 x_0 为 $x \in U$ 在子空间 $M \subset U$ 上的投影，则

$$\|x - x_0\| = \inf_{y \in M} \|x - y\| \qquad (**)$$

而且 x_0 是 M 中使（**）成立的唯一点。

（ $\|x - x_0\| = \inf_{y \in M} \|x - y\|$ 说明 x_0 是 M 中逼近 x 的最佳元）

注：

在内积空间中，当逼近的线性子空间是有限维时，线性子空间完备，此时，最佳逼近元与投影是一回事。

在通常的数值逼近中，选取的子空间如正交多项式子空间、三角多项式子空间、有限元子空间、边界元子空间等都是有限维，所以求最佳逼近元的问题实际就是求投影的问题。

子空间的构造不同和范数的选取不同构成了不同的数值逼近方法。

3.1 内积空间中的最佳逼近

一、最佳逼近元的定义

设 U 是内积空间，$M \overset{\Delta}{=} \text{span}\{x_1, x_2, \cdots, x_n\} = \{\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i, \forall \alpha_i \in k\}$.

对于 $\forall x \in U$，找 M 中的元素 $x^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* x_i$

$$\text{s.t.} \quad \|x - x^*\| = \min_{y \in M} \|x - y\| \le \left\| x - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i \right\|$$

则称 x^*是 x 在 M 中的“最佳逼近”元，M 为 U 的逼近子空间。

二、最佳逼近元的求法

基本思想：内积空间U，n 维线性子空间$M=\mathrm{span}\{x_1,x_2,\dots,x_n\}$

因为M是完备线性子空间（有限维），由投影定理及投影性质

知投影$x^*=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i\in M$就是$x$在$M$中的“最佳逼近”元。

$$x^*\in M,\quad x-x^*\in M^{\perp}\Rightarrow (x-x^*,x_j)=0\quad (j=1,2,\dots,n)$$

$$\Rightarrow (x-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i,x_j)=0\quad (j=1,2,\dots,n)$$

$$\Rightarrow (x,x_j)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^*(x_i,x_j)=0$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{n}(x_j,x_i)\cdot\alpha_i^*=(x,x_j)\quad (j=1,2,\dots,n)$$

$$\sum_{i=1}^{n}(x_j, x_i)\cdot\alpha_i^* = (x, x_j) \quad (j = 1, 2, \ldots, n)$$

写成矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} (x_1, x_1) & (x_1, x_2) & \cdots & (x_1, x_n) \\ (x_2, x_1) & (x_2, x_2) & \cdots & (x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_n, x_1) & (x_n, x_2) & \cdots & (x_n, x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x, x_1) \\ (x, x_2) \\ \vdots \\ (x, x_n) \end{bmatrix}$$

法方程

（或正规方程）

记作 $A\alpha^* = b$

$x_1, x_2, \ldots, x_n$ 线性无关, **A** 可逆

存在唯一解 $\alpha^* = A^{-1}b$, 得最佳逼近元 $x^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i$

$$\begin{bmatrix} (x_1,x_1) & (x_1,x_2) & \cdots & (x_1,x_n) \\ (x_2,x_1) & (x_2,x_2) & \cdots & (x_2,x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_n,x_1) & (x_n,x_2) & \cdots & (x_n,x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x,x_1) \\ (x,x_2) \\ \vdots \\ (x,x_n) \end{bmatrix}$$

特别地

① 如果 $x_1,x_2,\ldots,x_n$ 正交 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{A}$是对角矩阵， $\alpha_i^* = \dfrac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)}{(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_i)}$；

② 如果 $x_1,x_2,\ldots,x_n$ 规范正交 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{A}$是单位矩阵， $\alpha_i^* = (\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)$

最佳逼近元 $x^* = \sum_{i=1}^{n}(x,x_i)x_i$ （广义 Fourier 展开的部分和）

综上：

（1）求最佳逼近问题$\Leftrightarrow$解线性方程组$A\alpha=b$。

（2）矩阵A和b主要取决于内积空间中内积的定义，以及线性子空间（即基）的选取。

（3）若$x_1,x_2,\ldots,x_n$线性无关，解得$\alpha=A^{-1}b$。但解此方程组通常计算量很大，且会使$Ax=b$为病态的（即自变量有很小的扰动时，其解的变化很大）。

（4）若$x_1,x_2,\ldots,x_n$规范正交，解得$\alpha=b$。此方法计算简单，但要先将线性无关组规范正交化，有时计算量也会很大。

注：通常选出正交基即可

三、最佳逼近的误差估计

设$\delta = x - x^*$，则$\|\delta\|$的大小可表示逼近的程度。

$\|\delta\|$的计算取决于该内积空间中**范数**（即**内积**）的定义。

因为$x = x^* + (x - x^*), x^* \in M$，$x - x^* \in M^{\perp}$，

故$||x||^2 = ||x^*||^2 + \|x - x^*\|^2$

误差的平方

$$\|\delta\|^2 = \|x - x^*\|^2 = \|x\|^2 - \|x^*\|^2$$

$$\begin{aligned}
\|\delta\|^2 = \|x - x^*\|^2 &= (x - x^*, x - x^*) \\
&= (x - x^*, x) - (x - x^*, x^*) \\
&= (x - x^*, x) \\
&= (x, x) - (x^*, x) \\
&= (x, x) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* (x_i, x)
\end{aligned}$$

误差

$$\|\delta\| = \|x - x^*\| = \sqrt{\|x\|^2 - \|x^*\|^2}$$

或 $$\|\delta\| = \sqrt{(x,x) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* (x_i, x)}$$

3.2 连续函数的最佳平方逼近

设子空间为$M=\mathrm{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$,

对于$\forall f(x)\in C[a,b]$，求函数$S^*(x)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i^*\varphi_i(x)\in M$,

$$\text{s. t.}\qquad \|f(x)-S^*(x)\|_2=\min_{S(x)\in M}\|f(x)-S(x)\|_2$$

即$\int_a^b p(x)[f(x)-S^*(x)]^2dx=\min_{S(x)\in M}\int_a^b p(x)[f(x)-S(x)]^2dx$

其中$S(x)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i\varphi_i(x)\in M$,

称$S^*(x)$为$f(x)$在M中的最佳平方逼近。

特别地：若线性子空间$M=\mathrm{span}\left\{1, x, x^2, \ldots, x^n\right\}$,

则称$s^*(x)$为$f(x)$在M中的n次最佳平方逼近多项式。

最佳逼近元 $S^*(x)$ 求法

由投影定理知，$S^*(x)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i^*\varphi_i(x)$ 存在且唯一，系数 α_i^* 满足法方程

解法方程 $$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f,\varphi_0) \\ (f,\varphi_1) \\ \vdots \\ (f,\varphi_n) \end{bmatrix}$$

其中 $(\varphi_i,\varphi_j)=\int_a^b p(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)dx$，$(f,\varphi_j)=\int_a^b p(x)f(x)\varphi_j(x)dx$

故 $S^*(x)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i^*\varphi_i(x)$ 为所要求的最佳逼近元。

均方误差 $\|\delta\|_2=\|f-s^*\|_2=\sqrt{(f,f)-\sum_{i=0}^{n}a_i^*(f,\varphi_i)}$

例1 求区间$[-1,1]$上函数$f(x)=|x|$在$M=\text{span}\{1,x^2,x^4\}$中的最佳平方逼近多项式及均方误差。

解： 记$\varphi_0(x)=1,\ \varphi_1(x)=x^2,\ \varphi_2(x)=x^4,\ p(x)=1$

计算得 $(\varphi_0,\varphi_0)=2,\ (\varphi_0,\varphi_1)=2/3,\ (\varphi_0,\varphi_2)=2/5,$

$(\varphi_1,\varphi_1)=2/5,\ (\varphi_1,\varphi_2)=2/7,\ (\varphi_2,\varphi_2)=2/9,$

$(f,\varphi_0)=1,\ (f,\varphi_1)=1/2,\ (f,\varphi_2)=1/3$。

故法方程为
$$\begin{bmatrix} 2 & 2/3 & 2/5 \\ 2/3 & 2/5 & 2/7 \\ 2/5 & 2/7 & 2/9 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1/3 \end{bmatrix}$$

解得

$$\alpha_0^* = \frac{15}{128} \approx 0.1171875,\quad \alpha_1^* = \frac{105}{64} \approx 1.640625,\quad \alpha_2^* = -\frac{105}{128} \approx -0.8203125$$

$\therefore\quad f(x) = |x|$的最佳平方逼近为

$$s^*(x) = 0.1171875 + 1.640625x^2 - 0.8203125x^4$$

误差 $\|\delta\|_2 = \sqrt{(f,f) - \sum_{i=0}^{2} a_i^*(f,\varphi_i)} \approx 0.05119$。

例 2 求[0,1]上函数$f(x)=e^x$ 的一次最佳平方逼近多项式。

分析：最佳平方逼近 $\Rightarrow$ 用2-范数，内积$(x,y)=\int_a^b x(t)y(t)\mathrm{d}t$

一次多项式 $\Rightarrow M=\mathrm{span}\{1,x\}$

解：方法一：

记$\varphi_0(x)=1,\ \varphi_1(x)=x,$ 则 $(\varphi_i,\varphi_j)=\int_0^1 x^i x^j dx=\dfrac{1}{i+j+1}\ (i,j=0,1),$

$$(f,\varphi_0)=\int_0^1 e^x dx=e-1,\quad (f,\varphi_1)=\int_0^1 xe^x dx=1,$$

故法方程为$\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_0\\ \alpha_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}e-1\\ 1\end{bmatrix}\Rightarrow S^*(x)=0.8731+1.6903x$

例 2 求[0,1]上函数$f(x)=e^x$ 的一次最佳平方逼近多项式。

方法二：将$\{\varphi_1(x),\varphi_2(x)\}=\{1,x\}$规范正交化

得$\{e_1(x),e_2(x)\}=\left\{1,\sqrt{3}(2x-1)\right\}$

则法方程为$\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(f,e_1)\\ (f,e_2)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}e-1\\ \sqrt{3}(3-e)\end{bmatrix}$

$$\Rightarrow S^*(x)=\alpha_1 e_1+\alpha_2 e_2=(e-1)e_1+\sqrt{3}(3-e)e_2$$

$$=0.8731+1.6903x$$

若取最佳平方逼近空间$M=\mathrm{span}\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$，

法方程系数矩阵为

$$H=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n+1} \end{bmatrix}$$

$-----$ **Hilbert**矩阵

当n较大时其条件数很大，

用数值方法求解 $Hx=b$ 是不稳定的，避免求解病态方程组！！

子空间中基的选取很重要

正交多项式：若多项式序列$\{\varphi_i(x), x\in[a,b]\}_{i=0}^{\infty}$满足

$$\left(\varphi_j,\varphi_k\right)=\int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)dx=\begin{cases}0, & j\neq k\\ A_k\neq 0, & j=k\end{cases}\quad (j,k=0,1,2,\cdots)$$

则称其为$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交系。

$\varphi_n(x)$是首项系数不为零的n次多项式。

3.3 勒让德多项式和切比雪夫多项式

为了避免求解病态方程组，通常找 一组正交多项式。常用的正交多项式有：**勒让德**多项式，**切比雪夫**多项式，**拉盖尔**多项式，**埃尔米特**多项式等，这里只介绍最佳平方逼近中两种正交多项式：

1、勒让德 (Legendre) 多项式（权为1）

2、切比雪夫 (Tchebichef) 多项式

3.3.1 勒让德多项式

勒让德多项式：区间[–1, 1]上定义的多项式序列

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n] \quad (n=0,1,2,\cdots)$$

$P_n(x)$的首项系数$a_n=\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$,

从而$\tilde{P}_0(x)=1$, $\tilde{P}_n(x)=\dfrac{n!}{(2n)!}\dfrac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]$, $(n=1,2,\cdots)$

是首项系数为1的勒让德多项式。

勒让德多项式的性质：

(1) 正交性：**Legendre**多项式$\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$在$[-1,1]$上带权$\rho(x)=1$正交

可推证：$$(P_n, P_m) = \int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = \begin{cases} \dfrac{2}{2n+1}, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \quad (n, m = 0, 1, \ldots)$$

所以$\left\{ \sqrt{\dfrac{2n+1}{2}} \cdot P_n(x) \right\} (n = 0, 1, 2, \ldots)$是规范正交系。

(2)奇偶性：$P_n(-x)=(-1)^n P_n(x)$,

n为奇数时$P_n(x)$是奇函数;

n为偶数时$P_n(x)$是偶函数。

(3)递推关系：

$$
\begin{cases}
P_0(x)=1 \\
P_1(x)=x \\
P_{n+1}(x)=\dfrac{2n+1}{n+1}xP_n(x)-\dfrac{n}{n+1}P_{n-1}(x),\ (n=1,2,\cdots)
\end{cases}
$$

由递推公式可得到低次**Legendre**多项式$P_n(x)$ 的如下形式：

$$P_0(x)=1$$

$$P_1(x)=x$$

$$P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$$

$$P_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$$

$$P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$

$$P_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x)$$

…

例3 求[−1 , 1]上函数$\sin\frac{\pi}{2}x$的三次最佳平方逼近多项式。

解：由于$f(x)=\sin\frac{\pi}{2}x$是区间[−1, 1]上的连续函数，

故取Legendre正交多项式作为基函数，

$$P_0(x)=1,\ P_1(x)=x,\ P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),\ P_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$$

因为$(P_j,P_j)=\dfrac{2}{2j+1}\quad(j=0,1,2,3)$，$(f,P_0)=\int_{-1}^{1}\sin\frac{\pi x}{2}dx=0$

$$(f,P_1)=\int_{-1}^{1}x\sin\frac{\pi x}{2}dx=\frac{8}{\pi^2},\quad (f,P_2)=\int_{-1}^{1}\frac{1}{2}(3x^2-1)\sin\frac{\pi x}{2}dx=0$$

$$(f,P_3)=\int_{-1}^{1}\frac{1}{2}(5x^2-3x)\sin\frac{\pi x}{2}dx=\frac{48(\pi^2-10)}{\pi^4}$$

故法方程为 $\begin{bmatrix} 2 & & & \\ & \frac{2}{3} & & \\ & & \frac{2}{5} & \\ & & & \frac{2}{7} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{8}{\pi^2} \\ 0 \\ \frac{48(\pi^2-10)}{\pi^4} \end{bmatrix}$

解得： $\alpha_1=0$，$\alpha_2=\frac{12}{\pi^2}$，$\alpha_3=0$，$\alpha_4=\frac{168(\pi^2-10)}{\pi^4}$

求得 $f(x)$的三次最佳平方逼近多项式为

$$S(x)=\frac{12}{\pi^2}x+\frac{168(\pi^2-10)}{\pi^4}\cdot\frac{1}{2}(5x^3-3x)\approx 1.553191x-0.562228x^3$$

法二：取基函数 $\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$, $\varphi_2(x)=x^2$, $\varphi_3(x)=x^3$,
构造法方程（四元线性方程组），求解 $\alpha_i^*(i=0,1,2,3)$

计算量大
可能病态

例 4　求$[0,1]$上函数$y=\arctan x$的一次最佳平方逼近多项式。

解：由于$y=\arctan x\in C[0,1]$，

$$作代换\ x=\frac{1}{2}(t+1),\ y=\arctan\frac{t+1}{2}\in C[-1,1].$$

取Legendre正交基$P_0(t)=1$，$P_1(t)=t$，

计算得$(P_0,P_0)=2$，$(P_1,P_1)=\dfrac{2}{3}$，　$(y,P_0)=\displaystyle\int_{-1}^{1}\arctan\frac{t+1}{2}\mathrm{d}t=\frac{\pi}{2}-\ln 2$

$$(y,P_1)=\int_{-1}^{1}t\cdot\arctan\frac{t+1}{2}\mathrm{d}t=\frac{\pi}{2}-2+\ln 2$$

故$y=\arctan\dfrac{t+1}{2}$在$[-1,1]$上的一次最佳平方逼近多项式为

$$\tilde{y}(t)=(\frac{\pi}{4}-\frac{1}{2}\ln 2)+\frac{3}{2}[\frac{\pi}{2}-2+\ln 2]\cdot t$$

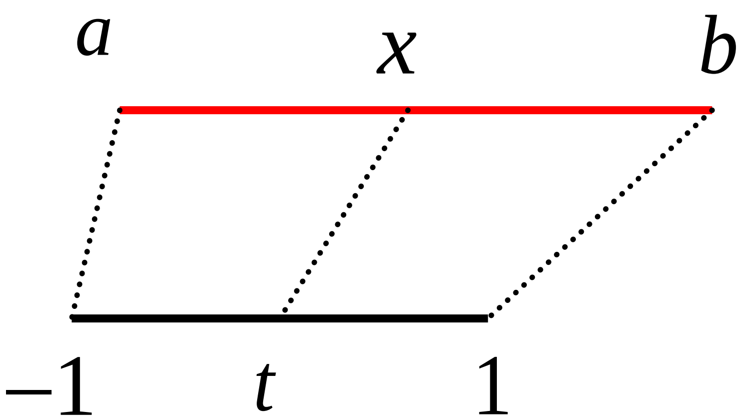
$$\Rightarrow y\approx(\frac{\pi}{4}-\frac{1}{2}\ln 2)+\frac{3}{2}[\frac{\pi}{2}-2+\ln 2](2x-1)$$

$y=\arctan x$在$[0,1]$上一次最佳平方逼近多项式

一般地，求函数$f(x)$在区间$[a, b]$上的n次最佳平方逼近时，

区间$[a,b] \xrightarrow{\text{变换}} [-1,1]$

$$\frac{b-x}{b-a} = \frac{1-t}{1-(-1)}$$



$$\Rightarrow x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2} \text{（换元）}$$

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) \overset{\Delta}{=} g(t)$$

求$g(t)$在区间$[-1, 1]$上的n次最佳平方逼近 $\xrightarrow{\text{代入}\, t=\frac{2x}{b-a}+\frac{a+b}{a-b}}$ $f(x)$在区间$[a, b]$上的n次最佳平方逼近

2.3.2 切比雪夫多项式

在$[-1, 1]$上，带权函数$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交的多项式族。

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad -1\le x\le 1$$

切比雪夫多项式的性质：

（1）$T_n(x)$是一个n次多项式，也可表示为如下递推关系

$$\begin{cases} T_0(x)=1,\ T_1(x)=x, \\ T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x), \quad (n=1,2,\ldots). \end{cases}$$

证明: 显然 $n=0$ 时, $T_0(x)=1$

$$n=1\text{时，}\quad T_1(x)=\cos(\arccos x)=x$$

令$x=\cos\theta$，则$T_n(x)=\cos n\theta$。

由于$\cos(n+1)\theta=2\cos n\theta\cos\theta-\cos(n-1)\theta \quad (n\ge 1)$

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

切比雪夫多项式的性质：$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad -1\le x\le 1$

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

由上述递推关系容易得到$\{T_n(x)\}$如下：

$T_0(x)=1,\qquad T_1(x)=x,$

$T_2(x)=2x^2-1,\qquad T_3(x)=4x^3-3x,$

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

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

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

……………$T_n(x)$的最高次项系数是$2^{n-1}(n\ge 1)$

$$\omega_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$$的最高次项系数是1

函数$1, x, x^2, \dots, x^n$ 也可用$T_1(x), T_1(x), \cdots, T_n(x)$表示

$$1 = T_0(x), \quad x = T_1(x), \quad x^2 = \frac{1}{2}[T_0(x) + T_2(x)]$$

$$x^3 = \frac{1}{4}[3T_1(x) + T_3(x)]$$

$$x^4 = \frac{1}{8}[3T_0(x) + 4T_2(x) + T_4(x)]$$

$$x^5 = \frac{1}{16}[10T_1(x) + 5T_3(x) + T_5(x)]$$

$$x^6 = \frac{1}{32}[10T_0(x) + 15T_2(x) + 6T_4(x) + T_6(x)]$$

$$\dots$$

切比雪夫多项式的性质：$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad -1\le x\le 1$

（2）$T_n(x)$在$[-1,1]$上带权函数$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交，

并且 $(T_0,T_0)=\pi,\quad (T_n,T_n)=\dfrac{\pi}{2}\ \ (n\ge 1)$

证明：令$x=\cos\theta$，则$T_n(x)=\cos(n\theta),\quad 0\le\theta\le\pi$，

$$(T_n,T_m)=\int_{-1}^{1}\frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\int_0^{\pi}\frac{\cos n\theta\cos m\theta}{\sin\theta}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$$

$$=\int_0^{\pi}\cos n\theta\cos m\theta\,\mathrm{d}\theta=\begin{cases}0, & n\ne m;\\ \pi/2, & n=m\ne 0;\\ \pi, & n=m=0.\end{cases}$$

切比雪夫多项式的性质：$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad -1\le x\le 1$

（3）奇偶性

$$\underline{T_n(-x)}=\cos(n\arccos(-x))=\cos(n(\arccos x-\pi))$$

$$=\cos(n\arccos x-n\pi)=(-1)^n\cos(n\arccos x)=\underline{(-1)^n T_n(x)}$$

n为奇数时$T_n(-x)=-T_n(x)$是奇函数；

n为偶数时$T_n(-x)=T_n(x)$是偶函数。

例 5　确定参数a,b,c，使得

$$I(a,b,c)=\int_{-1}^{1}[\sqrt{1-x^2}-(ax^2+bx+c)]^2\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

取得最小值，并计算最小值。

分析：问题等价于求$f(x)=\sqrt{1-x^2}$在$[-1, 1]$上关于权函数$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的二次最佳平方逼近多项式$P_2(x)$.

而最小值即是平方误差 $\|\delta\|_2^2=\|f-P_2\|_2^2$

$$=(f,f)-(f,P_2)$$

例 5 确定参数a,b,c，使得

$$I(a,b,c)=\int_{-1}^{1}[\sqrt{1-x^2}-(ax^2+bx+c)]^2\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

取得最小值，并计算最小值。

解法1：选取切比雪夫基函数$T_0=1,\ T_1=x,\ T_2=2x^2-1$

求出 $(T_0,T_0)=\pi,\ (T_1,T_1)=(T_2,T_2)=\dfrac{\pi}{2}$

$$(f,T_0)=2,\ (f,T_1)=0,\ (f,T_2)=-\frac{2}{3}$$

法方程为
$$\begin{bmatrix}\pi & & \\ & \frac{\pi}{2} & \\ & & \frac{\pi}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \alpha_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\ 0\\ -\frac{2}{3}\end{bmatrix}$$

例 5 确定参数a,b,c，使得

$$I(a,b,c)=\int_{-1}^{1}[\sqrt{1-x^2}-(ax^2+bx+c)]^2\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

取得最小值，并计算最小值。

解得 $\alpha_1=\frac{2}{\pi}$，$\alpha_2=0$，$\alpha_3=-\frac{4}{3\pi}$

故 $f(x)$ 的二次最佳平方逼近多项式为

$$P_2(x)=\sum_{j=0}^{2}\frac{(T_j,f)}{(T_j,T_j)}T_j=\frac{2}{\pi}+0-\frac{4}{3\pi}(2x^2-1)=\frac{10}{3\pi}-\frac{8}{3\pi}x^2$$

求出$a=-\frac{8}{3\pi}$, $b=0$, $c=\frac{10}{3\pi}$. 误差$I(a,b,c)=\|\delta\|_2^2\approx 0.0146$

综上：$a=-\frac{8}{3\pi}$, $b=0$, $c=\frac{10}{\pi}$时, $I(a,b,c)$取得最小值$\frac{\pi}{2}-\frac{44}{9\pi}$

解法2：选取基函数$\varphi_0=1,\ \varphi_1=x,\ \varphi_2=x^2$，则

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx=\pi \qquad (\varphi_1,\varphi_1)=\int_{-1}^{1}\frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}}dx=\frac{\pi}{2}$$

$$(\varphi_0,\varphi_1)=\int_{-1}^{1}\frac{x}{\sqrt{1-x^2}}dx=0 \qquad (\varphi_1,\varphi_2)=\int_{-1}^{1}\frac{x^3}{\sqrt{1-x^2}}dx=0$$

$$(\varphi_0,\varphi_2)=\int_{-1}^{1}\frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}}dx=\frac{\pi}{2} \qquad (\varphi_2,\varphi_2)=\int_{-1}^{1}\frac{x^4}{\sqrt{1-x^2}}dx=\frac{3\pi}{8}$$

$$(f,\varphi_0)=\int_{-1}^{1}\sqrt{1-x^2}\,\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx=2,$$

$$(f,\varphi_1)=\int_{-1}^{1}x\sqrt{1-x^2}\,\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx=0,$$

$$(f,\varphi_2)=\int_{-1}^{1}x^2\sqrt{1-x^2}\,\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx=\frac{2}{3}$$

$$
由\begin{bmatrix} \pi & 0 & \frac{\pi}{2} \\ 0 & \frac{\pi}{2} & 0 \\ \frac{\pi}{2} & 0 & \frac{3\pi}{8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} 解得 \alpha_0 = \frac{10}{3\pi}, \alpha_1 = 0, \alpha_2 = -\frac{8}{3\pi}
$$

$$
P_2(x) = \frac{10}{3\pi} \cdot 1 + 0 \cdot x - \frac{8}{3\pi} \cdot x^2
$$

$$
\Rightarrow a = -\frac{8}{3\pi},\ b = 0,\ c = \frac{10}{3\pi}
$$

$$
而 I(a,b,c) = \|\delta\|_2^2 = \frac{\pi}{2} - \frac{44}{9\pi} \approx 0.0146
$$

2.3.3 其它常用的正交多项式

1. 第二类切比雪夫多项式

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

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

$$\int_{-1}^{1}U_n(x)U_m(x)\sqrt{1-x^2}\,dx=\int_0^{\pi}\sin(n+1)\theta\sin(m+1)\theta d\theta$$

$$=\begin{cases}0, m\neq n\\ \dfrac{\pi}{2}, m=n\end{cases}\begin{cases}U_0(x)=1, U_1(x)=2x,\\ U_{n+1}(x)=2xU_n(x)-U_{n-1}(x), \quad (n=1,2,\cdots).\end{cases}$$

2. 拉盖尔多项式

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

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

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

$$\begin{cases}L_0(x)=1, \quad L_1(x)=1-x\\ L_{n+1}(x)=(1+2n-x)L_n(x)-n^2L_{n-1}(x), \quad (n=1,2,\mathrm{L}\ ).\end{cases}$$

3. 埃尔米特多项式

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

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

$$\int_0^{+\infty} H_n(x)\mathrm{H}_m(x)\mathrm{e}^{-x^2}\,dx=\begin{cases}0, m\neq n\\ 2^n\,\mathrm{n}!\sqrt{\pi}, m=n\end{cases}$$

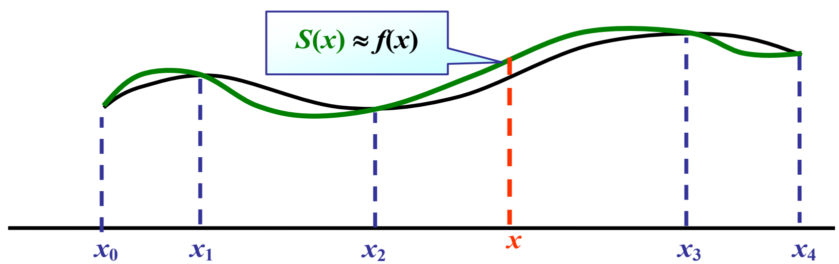
$$\begin{cases}H_0(x)=1, \quad H_1(x)=2x\\ H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x), \quad (n=1,2,\cdots).\end{cases}$$

区间$[a,b]$及权函数不同，得到的正交多项式也不同。

3.4 曲线拟合的最小二乘法

问题：已知数表$(x_i, f(x_i))_{i=1\sim n}$，希望用简单的函数$y=S(x)$近似代替$y=f(x)$。

1. 插值法：求出$y=S(x)$使得$S(x_i)=f(x_i)$，$i=1\sim n$。称$y=S(x)$为函数$y=f(x)$在点$x_1, x_2, \cdots, x_n$处的插值函数。



缺点：通常已知数据有误差；在非节点处误差可能较大；高次插值时计算量大

2．数据拟合法(离散情形的最佳平方逼近)

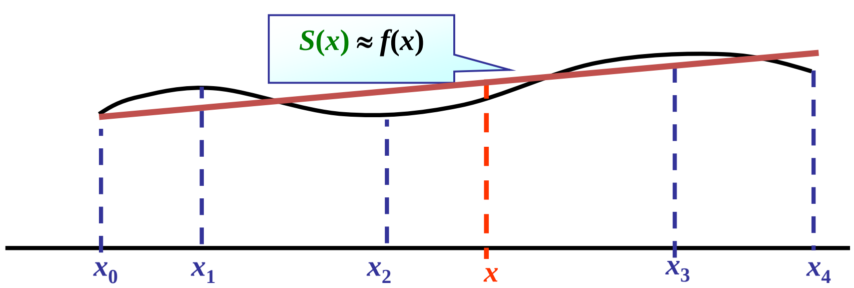
用近似函数 $y=S(x)$ 逼近函数 $y=f(x)$ 时，

不要求在节点处 $S(x_i)=f(x_i)\ (i=1\sim n)$，

只要求 $S(x)$ 能反映数据的基本变化规律，

使整体误差达到最小。常用的方法有：

最佳一致逼近法，**最小二乘法**等。

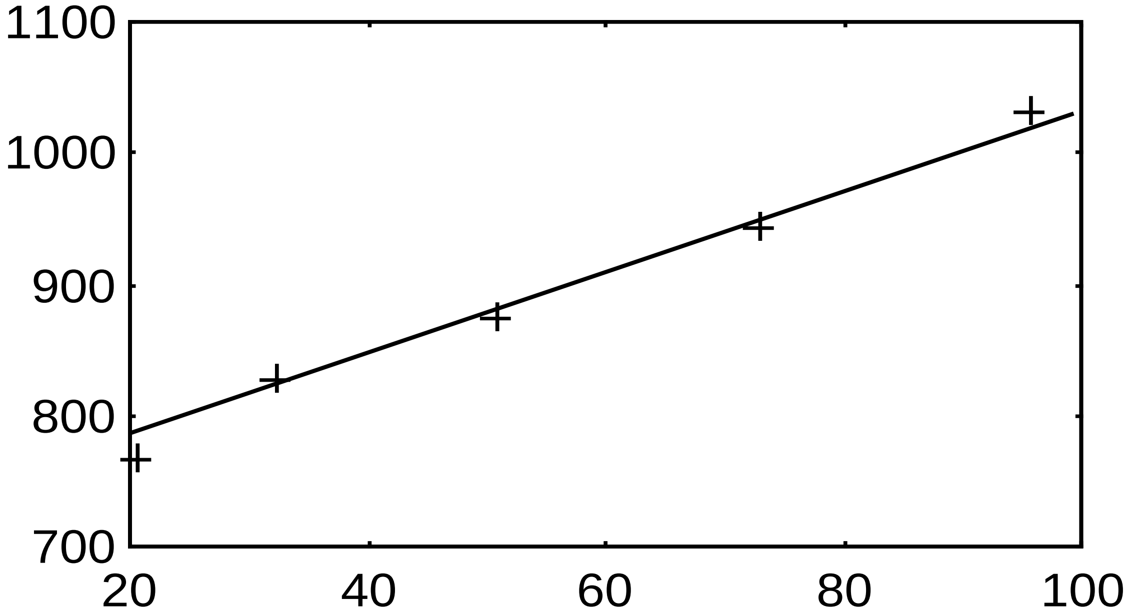


引 例1

已知热敏电阻数据：

温度t(^{0}C)	20.5	32.7	51.0	73.0	95.7
电阻R(Ω)	765	826	873	942	1032

求60^{0}C时的电阻R。



根据数据描绘散点图，近似在一条直线上

故设 S= ***a*** **t+*b***

a*, *b为待定系数

由于 S 不一定是 t 的严格线性函数，而测量数据又有误差，所以无论怎样选取 a 和 b，由公式计算的每一个测试点的 S 值都不可能恰好等于实测值 R_i。

在现实问题中，通常选取的 a 和 b 应使得计算值 S 与实测值 R_i 之间的整体绝对误差最小

$$E_1=\sum_{i=1}^{7}\left|(a+bt_i)-R_i\right| \Leftrightarrow E_2=\sum_{i=1}^{7}[(a+bt_i)-R_i]^2$$

使 E_1 最小的 a、b 不容易计算，通常都要求 E_2 达到最小，由此求得的表示式称为 t_i 与 R_i 之间关系的**一次最小二乘拟合**或**一次最小平方逼近**。

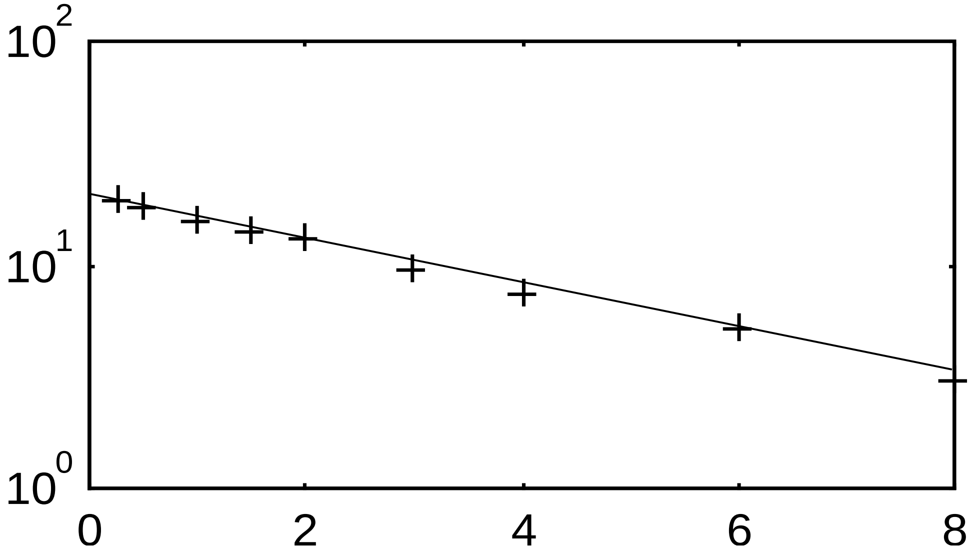
引 例 2

已知一室模型快速静脉注射下的血药浓度数据(t=0注射300mg)

t (h)	0.25	0.5	1	1.5	2	3	4	6	8
c (μg/ml)	19.21	18.15	15.36	14.10	12.89	9.32	7.45	5.24	3.01

求血药浓度随时间的变化规律c(t).

作半对数坐标系(semilogy)下的图形



根据数据描绘散点图，

$$c(t)=c_0e^{-kt}$$

c_0, k为待定系数

最小二乘法

最小二乘法：设$\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$是$C[a,b]$空间中的$n$个

线性无关函数，$M=\mathrm{span}\{\varphi_i\}_{i=0\sim n}$，$S(x)=\sum_{i=0}^{n}\alpha_i\varphi_i(x)\in M$.

实验或测量得$y=f(x)$的一组数$(x_i,f(x_i))_{i=0\sim m}$，

记$\delta=\{\delta_i\}_{i=1\sim n}=\{f(x_i)-S(x_i)\}$，求$S^*(x)=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i^*\varphi_i(x)\in M$，

s.t. $\|\delta^*\|_2^2=\sum_{i=1}^{n}[f(x_i)-S(x_i)]^2=\min_{S(x)\in M}\sum_{i=1}^{n}[f(x_i)-S(x_i)]^2$

即 $\sum_{i=1}^{n}[f(x_i)-\sum_{j=1}^{m}\alpha_j^*\varphi_j(x_i)]^2=\min_{\{\alpha_i\}\in K^m}\sum_{i=1}^{n}[f(x_i)-\sum_{j=1}^{m}\alpha_j\varphi_j(x_i)]^2$

本质上为：

在空间R^n中，

子空间$M = \mathrm{span}\{\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_m\}$

内积为$(y_1, y_2) = \sum_{i=1}^{n} y_1(i) y_2(i)$

范数为欧式范数$\|y\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} y_i^2}$

求最佳逼近元。

例 6：已知数据组

x_i	0.2	0.5	0.7	0.85	1
y_i	1.221	1.649	2.014	2.340	2.718

，试用最小二乘法求 $f(x)$ 的二次近似多项式 $P_2(x)=a_1+a_2x+a_3x^2$

解：$M=\text{span}\{1,x,x^2\}\triangleq\text{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\varphi_2\}$，则 $(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=1}^{5}1\times1=5,$

$$(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=1}^{5}x_i\times1=3.250,\qquad(\varphi_2,\varphi_0)=\sum_{i=1}^{5}x_i^2\times1=2.503,$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=1}^{5}x_i\times x_i=2.503,\qquad(\varphi_2,\varphi_1)=\sum_{i=1}^{5}x_i^2\times x_i=2.090,$$

$$(\varphi_2,\varphi_2)=\sum_{i=1}^{5}x_i^2\times x_i^2=1.826,\qquad(f,\varphi_0)=\sum_{i=1}^{5}y_i\times1=9.942,$$

$$(f,\varphi_1)=\sum_{i=1}^{5}y_i\times x_i=7.185,\qquad(f,\varphi_2)=\sum_{i=1}^{5}y_i\times x_i^2=5.857,$$

例 6：已知数据组

x_i	0.2	0.5	0.7	0.85	1
y_i	1.221	1.649	2.014	2.340	2.718

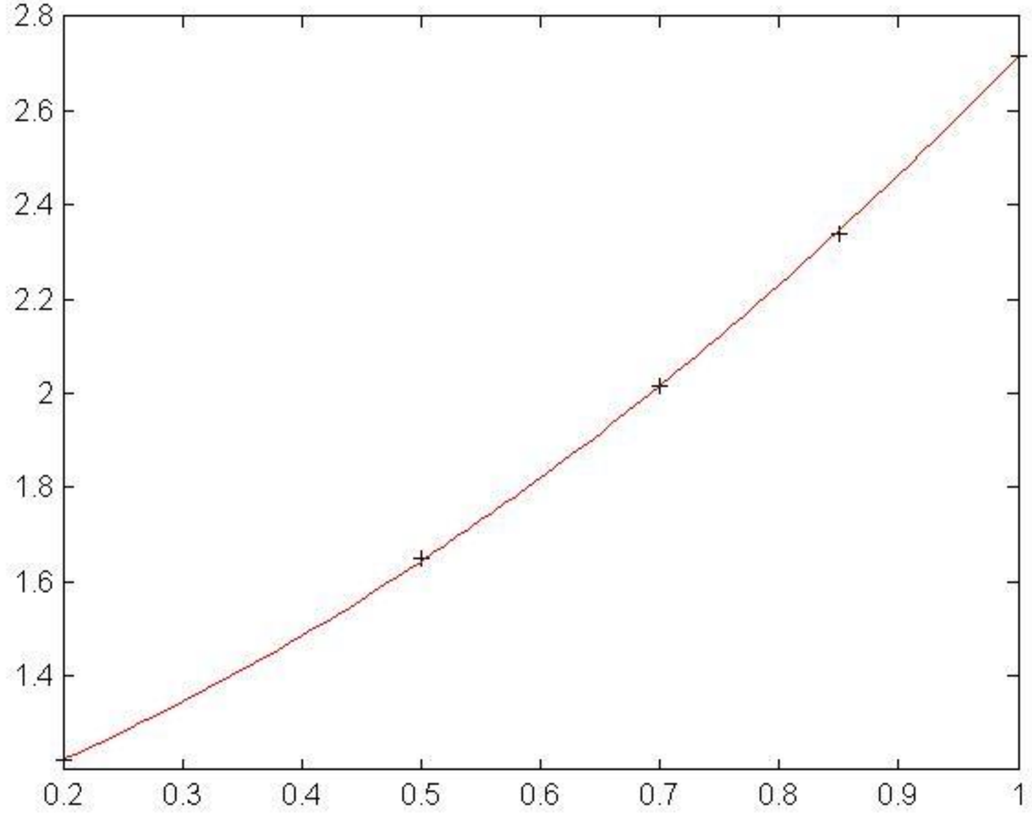
，试用最小二乘法求 $f(x)$ 的二次近似多项式 $P_2(x)=a_1+a_2x+a_3x^2$，并估计误差。

法方程 $\begin{bmatrix} 5 & 3.250 & 2.503 \\ 3.250 & 2.503 & 2.090 \\ 2.503 & 2.090 & 1.826 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 9.942 \\ 7.185 \\ 5.857 \end{bmatrix}.$

$$\Rightarrow a_0=1.036,\ a_1=0.751,\ a_2=0.928.$$

$$\Rightarrow P_2(x)=1.036+0.751x+0.928x^2$$

$$P_2(x) = 1.036 + 0.751x + 0.928x^2$$



均方误差$\|\delta\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{5}[f(x_i) - s^*(x_i)]^2} \approx 0.0086$

最大值误差$\|\delta\|_\infty = \max_{1 \le i \le 5} \left| f(x_i) - s^*(x_i) \right| \approx 0.0055$

加权的最小二乘拟合问题

为了反映某些测试点在所研究问题中所占的比重，

通常用加权的误差标准来衡量最佳逼近问题.

R^n 中带权 $w_i \geq 0 \ \ (i = 1, 2, \ldots, n)$ 的内积和范数

$$(x, y) = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i y_i , \quad \|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} w_i x_i^2}$$

例如 w_i 可表示在 $(x_i, f(x_i))$ 处重复观测的次数

加权的最小二乘拟合问题

设$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$是$C[a,b]$中$n+1$个线性无关函数, $M=\text{span}\{\varphi_i\}_{i=0}^n$

已知 $f(x)$ 在m个相异点的样本值$\{f(x_i)\}_{i=1}^m$，

求 $s^*(x)=\sum_{j=0}^n \alpha_j^*\varphi_j(x)\in M$，

$f(x)$在点x_i处的权

使得 $\sum_{i=1}^m w(x_i)[f(x_i)-s^*(x_i)]^2=\min_{s(x)\in M}\sum_{i=1}^m w(x_i)[f(x_i)-s(x)]^2$

称$s^*(x)$为$f(x)$在M中的加权最小二乘拟合函数，

求$s^*(x)$的方法称为加权的最小二乘法。

加权的最小二乘拟合问题

法方程 $$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_n) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f,\varphi_0) \\ (f,\varphi_1) \\ \vdots \\ (f,\varphi_n) \end{bmatrix}$$

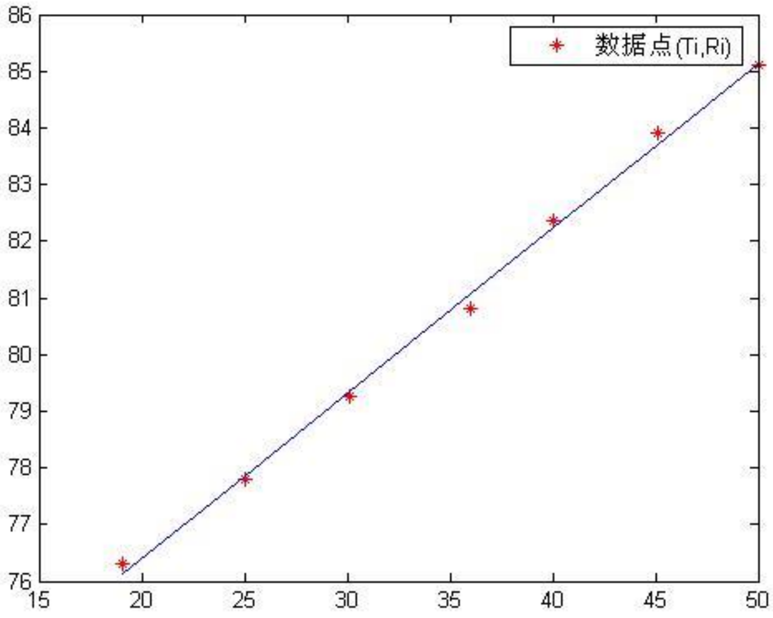
$$\Rightarrow (\alpha_0^*,\ldots,\alpha_n^*) \qquad \Rightarrow s^*(x) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^* \varphi_j(x)$$

均方误差 $\|\delta\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} w(x_i)[f(x_i) - s^*(x_i)]^2}$

例7：测得铜导线在温度T_i时的电阻R_i,求电阻R与温度T的关系

i	1	2	3	4	5	6	7
T_i	19.1	25.0	30.1	36.0	40.0	45.1	50.0
R_i	76.30	77.80	79.25	80.80	82.35	83.90	85.10

$\varphi_0=1,\ \varphi_1=T$



取各点的权

$$w_i=\frac{1}{7}\ (i=1,2,\cdots,7)$$

例7：测得铜导线在温度T_i时的电阻R_i,求电阻R与温度T的关系

i	1	2	3	4	5	6	7
T_i	19.1	25.0	30.1	36.0	40.0	45.1	50.0
R_i	76.30	77.80	79.25	80.80	82.35	83.90	85.10

解： $\varphi_0=1$，$\varphi_1=T$ 　权$w_i=\frac{1}{7}\ (i=1,2,\dots,7)$

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\frac{1}{7}\sum_{i=1}^{7}1\times1=1,\ (\varphi_1,\varphi_0)=\frac{1}{7}\sum_{i=1}^{7}T_i\times1=\frac{245.3}{7},\quad(\varphi_1,\varphi_1)=\frac{1}{7}\sum_{i=1}^{7}T_i\times T_i=\frac{9325.83}{7},$$

$$(R,\varphi_0)=\frac{1}{7}\sum_{i=1}^{7}R_i=\frac{566.5}{7},\quad(R,\varphi_1)=\frac{1}{7}\sum_{i=1}^{7}R_i\times T_i=\frac{20029.445}{7}$$

$$\text{法方程}\begin{cases}7a+245.3b=566.5\\245.3a+9325.83b=20029.445\end{cases}\Rightarrow R\approx70.572+0.291T$$

用最小二乘法解决实际问题的过程包含四个步骤：

（1）由观测数据表中的数值点，画出未知函数的粗略图形——散点图；

（2）从散点图中确定拟合函数类型 Φ；

（3）通过最小二乘原理，确定拟合函数 $\varphi(x)\in\Phi$ 中的未知参数；

（4）通过实验进行验证。

拟合曲线的选择

- 专业知识和经验
- 离散点图的分布形状及特点
- 反复计算比较误差
- 现有的自动选择数学模型的程序

避免病态问题

- 离散数据拟合实质上是连续函数子空间上的极值问题。最小二乘法是计算机数据处理的重要方法，被广泛采用。

- 当m较大时，法方程组是病态的。提高拟合多项式的次数不一定能改善逼近效果。

- 实际计算中常采用不同的低次多项式去拟合不同的分段，称为分段拟合。

避免病态问题

如果$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^{n}$关于采样点$\{x_i\}(i=0,1,\ldots,m)$带权

$w(x_i)\ (i=0,1,\cdots,m)$正交，即

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

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

$$\|\delta\|_2=\|f-s^*\|_2=\sqrt{\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}w_k(a_k^*)^2}$$

带权的首项系数为1的正交多项式构造

$$P_0(x), P_1(x), \ldots, P_n(x) (n \le m)$$

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

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

避免病态问题

$$M = \mathrm{span}\{P_0(x), P_1(x), \ldots, P_n(x)\}$$

$$s^*(x) = \sum_{k=0}^{n} \alpha_k^* P_k(x)$$

$$\alpha_k^* = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{\sum_{i=0}^{m} w(x_i) f(x_i) P_k(x_i)}{\sum_{i=0}^{m} w(x_i) P_k^2(x_i)}$$

构造正交多项式（复杂）；法方程求解简单