数值分析：函数逼近

张王优

2025-10-29

SCHOOL OF
ARTIFICIAL INTELLIGENCE
上海交通大学人工智能学院

目录

CONTENTS

函数逼近的基础概念

- **基于 Taylor 展开式的部分和进行函数逼近**
  - $p_n(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$
    - 当 $|x - x_0|$ 较小时，误差较小
    - 当 $|x - x_0|$ 较大时，误差会变得很大

例

对于函数 $f(x) = e^x$，在 $[-1, 1]$ 上用 $p_4(x) = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4$ 进行近似，其误差为 $R_4(x) = e^x - p_4(x) = \frac{1}{120}x^5 e^{\varepsilon}, \quad \varepsilon \in (-1, 1)$

$\Rightarrow |R_4(x)| \le \frac{e}{120}|x^5|, \qquad \max_{-1 \le x \le 1} |R_4(x)| \le \frac{e}{120} \approx 0.02265$

函数逼近的基础概念

- **基于 Taylor 展开式的部分和进行函数逼近**
  - $p_n(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$
    - 当 $|x-x_0|$ 较小时，误差较小
    - 当 $|x-x_0|$ 较大时，误差会变得很大
  - 为了取得较高精度，需要在 Taylor 展开式中截取很多项
    - 计算费时，存储占用多
  - **函数逼近**：在给定精度下求计算次数最少的近似公式

函数逼近的基础概念

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
$f(x)$	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

- 函数插值（第二节~第四节内容）

  给定数据表，寻找一个简单函数 $p(x)$，使得 $p(x_i) = f(x_i)$

- 曲线拟合（后续介绍）

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

- **函数逼近**（本节内容）

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

函数逼近的基础概念

- 简单易算的函数类

  ⭐ 代数多项式 $p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$

  2. 分式有理函数 $R_{nm}(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \frac{a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n}{b_0+b_1x+\cdots+b_mx^m}$

  3. 三角多项式 $T(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{N} a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^{N} b_n \sin(nx)$

- 常见的度量标准

  1. 一致逼近（均匀逼近 ） $\|f(x) - p(x)\|_\infty = \max_{a\le x\le b} |f(x) - p(x)|$

  2. 平方逼近（均方逼近） $\|f(x) - p(x)\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - p(x)]^2 \,\mathrm{d}x}$

函数逼近的基础概念

- 连续函数空间
  - 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

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

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

1. **正定性：** $\|f\| \ge 0$，当且仅当 $f \equiv 0$ 时才有 $\|f\| = 0$
2. **齐次性：** $\|cf\| = |c| \cdot \|f\|$，其中 c 为任意实数
3. **三角不等式：** $\|f+g\| \le \|f\| + \|g\|$，其中 $f, g \in C[a,b]$

基于代数多项式的函数逼近

- **存在性问题**

回顾：Runge 现象

- 用 插值法 或 Talyor 展开 求 $f(x) \in C[a,b]$ 的逼近多项式，尽管在某些节点上没有误差，但整个区间上的误差可能很大
- 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 $f(x)$?

Weierstrass 逼近定理（证明见教材第 3.1.2 节）

设 $f(x) \in C[a,b]$，即 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的一个连续函数，

则对任何 $\varepsilon > 0$，总存在一个代数多项式 $p(x)$，使得

$\|f(x) - p(x)\|_\infty < \varepsilon$ 在 $[a,b]$ 上一致成立.

连续函数可以用多项式逼近！

最佳一致逼近多项式

- Weierstrass 逼近定理仅证明了存在性，并没有约束 n 的值
  - 如果 n 过大，则多项式函数 $p(x)$ 复杂，难以计算
- 从另一个角度思考
  - 在给定多项式 $p(x)$ 的次数为 n 的情况下，如何确定最佳逼近?
    - 记 H_n 为所有次数不超过 n 的多项式组成的集合，$H_n \subseteq C[a,b]$

      H_n 上的一组基
    - 也可表示为 $H_n = \mathrm{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$
  - 如何衡量函数逼近的好坏?

最佳一致逼近多项式

- 如何衡量函数逼近的好坏?
- 最佳逼近

定义

记 Φ 为某个函数空间，给定函数 $f \in C[a,b]$，若 $g^*(x) \in \Phi$ 满足

$$\|f(x) - g^*(x)\| = \min_{g(x)\in\Phi} \|f(x) - g(x)\|,$$

则称 $g^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中的 $[a,b]$ 上的最佳逼近函数。

- 若上述 $\Phi = H_n$ 为所有次数不超过 n 的多项式组成的集合，则 $g^*(x)$ 称为 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的 n 次最佳逼近多项式

最佳一致逼近多项式

- 最佳逼近

❑ 最佳平方逼近多项式

$$\|f(x)-p^*(x)\|_2 = \min_{p(x)\in H_n} \|f(x)-p(x)\|_2$$

$$\|f(x)-p^*(x)\|_2^2 = \min_{p(x)\in H_n} \int_a^b [f(x)-p(x)]^2 \,\mathrm{d}x$$

⭐ 最佳一致逼近多项式

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

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

最佳一致逼近多项式：偏差点的性质

定义

已知 $p_n(x) \in H_n$，$f(x) \in C[a,b]$，称

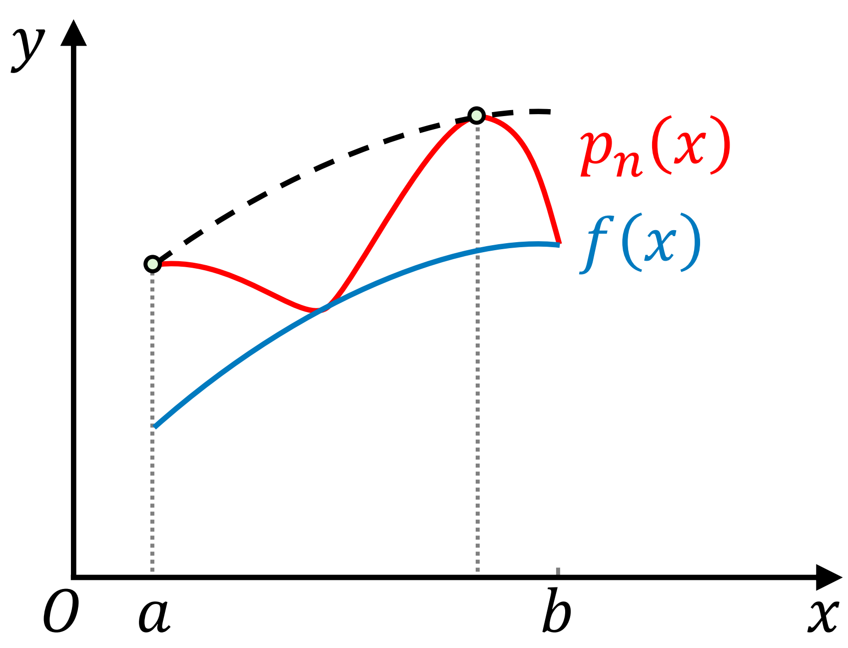
$$\Delta(f, p_n) = \|f - p_n\|_\infty = \max_{a \le x \le b} |f(x) - p_n(x)|$$

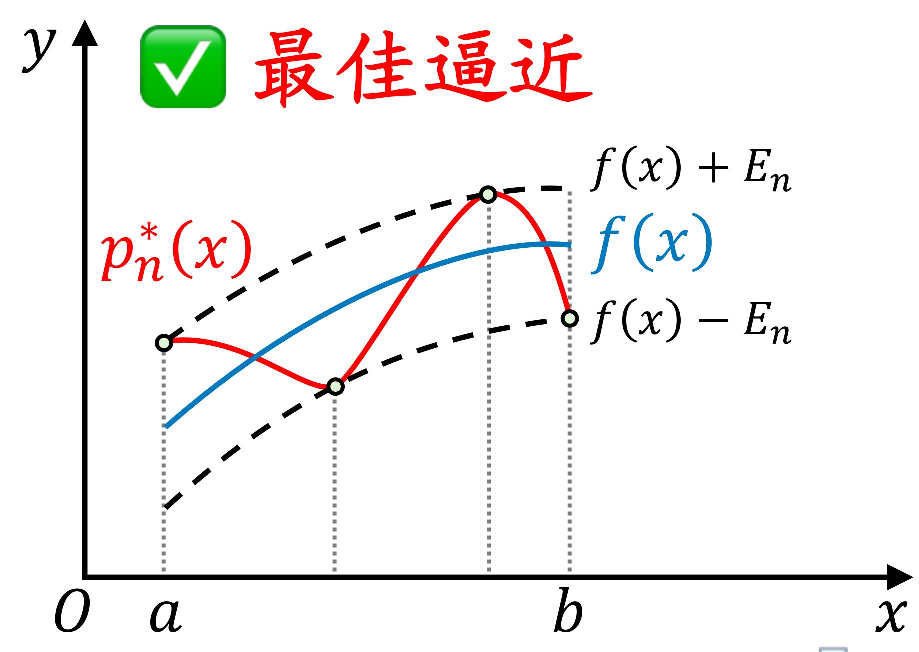
为 $f(x)$ 与 $p_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上的偏差（Deviation）。

- 最小偏差 E_n

⇨ 最佳逼近

$$E_n = \inf_{p_n \in H_n} \{\Delta(f, p_n)\}$$
$$= \inf_{p_n \in H_n} \max_{a \le x \le b} |f(x) - p_n(x)|$$





最佳一致逼近多项式：偏差点的性质

定义

设 $p_n(x) \in H_n$，$f(x) \in C[a,b]$，若在 $x = x_0$ 上有

$$|p_n(x_0) - f(x_0)| = \max_{a \le x \le b} |p_n(x) - f(x)| = \mu,$$

则称 x_0 是 $p_n(x)$ 的偏差点。

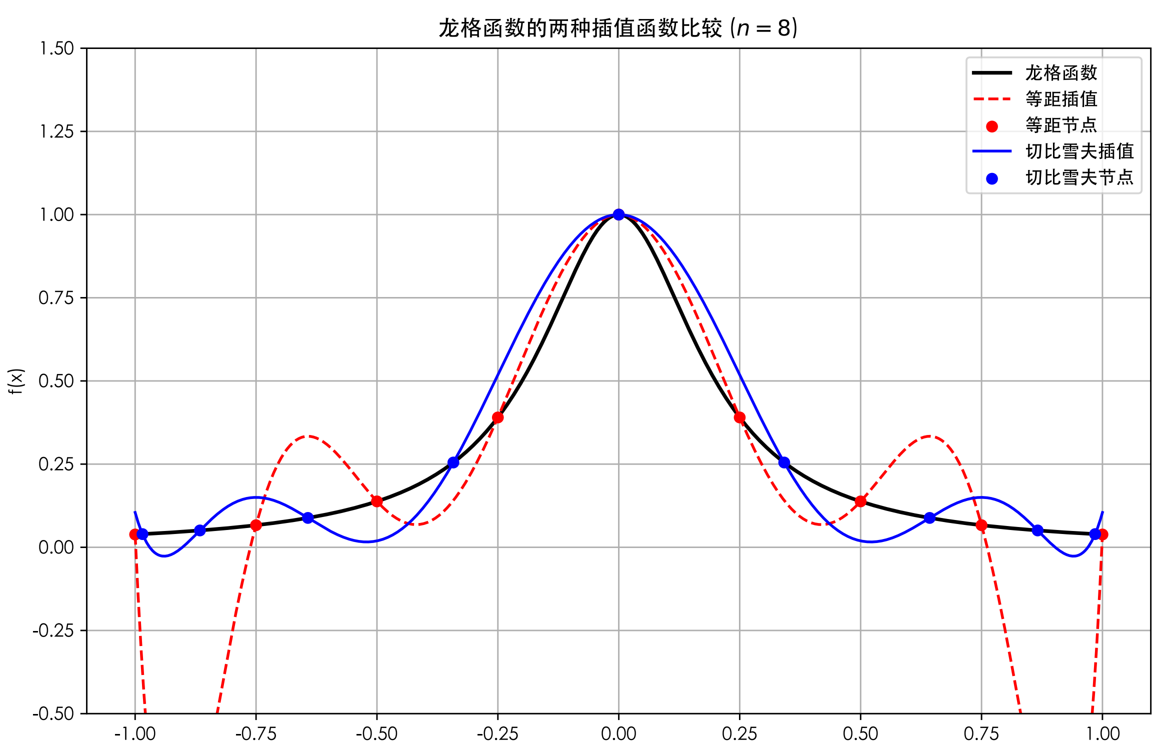
正偏差点：$p_n(x) - f(x) = \mu > 0$　　**负偏差点**：$p_n(x) - f(x) = -\mu < 0$

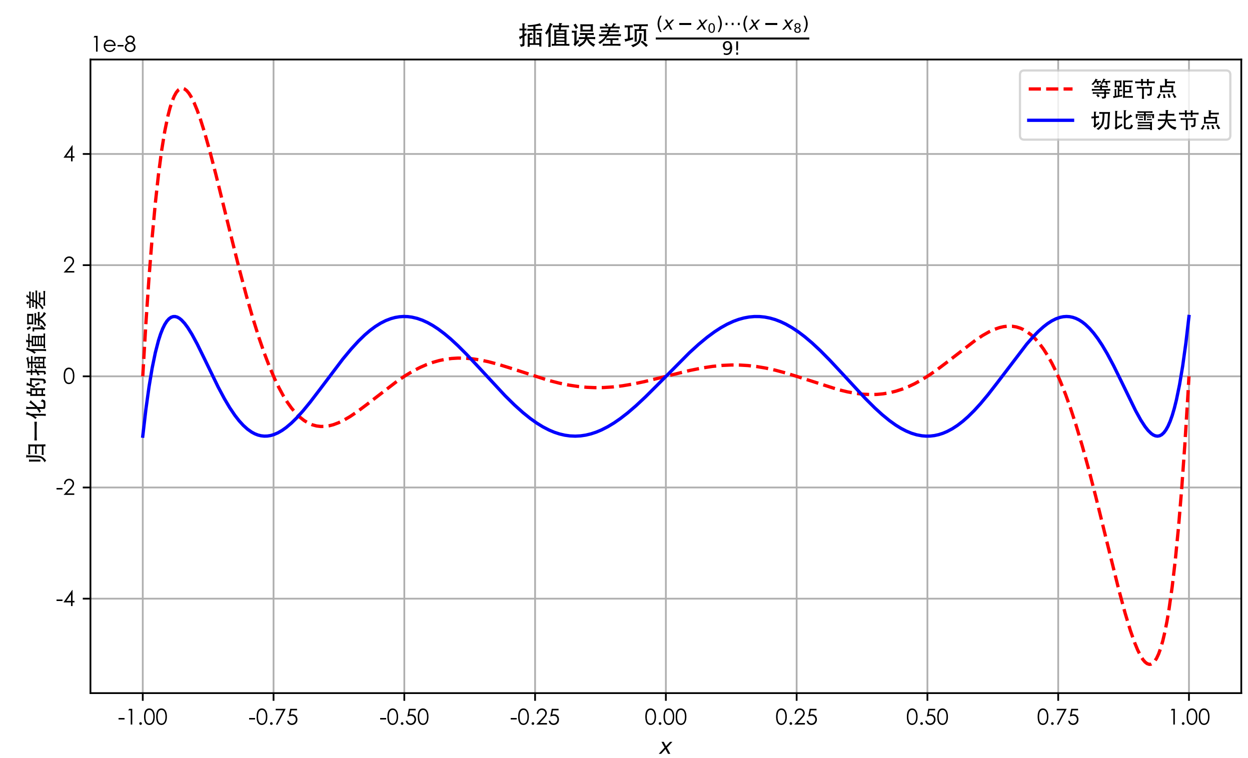
定理（反证法证明，见教材第 3.2.2 节）

若 $p_n(x) \in H_n$ 是函数 $f(x) \in C[a,b]$ 的最佳一致逼近多项式，则 $p_n(x)$ 同时存在正、负偏差点。

Chebyshev 定理

- 回顾：多项式插值方法中，选取节点的位置对插值误差的影响
  - ❑ Lagrange 插值余项 $R_n(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$
  - ❑ 考虑区间 $[-1,1]$ 上的 $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$，选取 9 个插值节点 $(n = 8)$





- 思考：怎样选取节点，可使偏差（误差的最大值）取值**最小**?

Chebyshev 定理

- 最佳一致逼近多项式有什么特征?

Chebyshev 定理（证明见教材第 3.1.2 节）

$p_n(x) \in H_n$ 是 $f(x) \in C[a,b]$ 的最佳一致逼近多项式的**充分必要条件**是 $p_n(x)$ 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 $a \le t_1 < t_2 < \cdots < t_{n+2} \le b$，使得

$$p_n(t_k) - f(t_k) = \pm(-1)^k \|p_n(x) - f(x)\|_\infty, \quad k = 1, 2, \cdots, n+2.$$

这样的点组称为 Chebyshev 交错点组。

Chebyshev 定理

Chebyshev 定理的证明

- 先用反证法证明充分性
  - 假设存在另一个多项式 $q_n(x) \in H_n$，使得
  $$\|q_n(x) - f(x)\|_\infty < \|p_n(x) - f(x)\|_\infty$$
  - 由于 $p_n(x) - q_n(x) = [p_n(x) - f(x)] - [q_n(x) - f(x)]$
  在点 $t_1, t_2, \ldots, t_{n+2}$ 上的符号与 $p_n(t_k) - f(t_k)$ $(k = 1, 2, \cdots, n+2)$ 一致，
  故 $p_n(x) - q_n(x)$ 在 $n+2$ 个点上轮流取正、负号.
  - ⇨ $p_n(x) - q_n(x)$ 在 (a, b) 上有 $n+1$ 个零点（可唯一确定 n 次多项式）
  - ⇨ $p_n(x) \equiv q_n(x)$ ⇨ $\|p_n(x) - f(x)\|_\infty$ 等于最小偏差 E_n
  - ⇨ $p_n(x)$ 是最佳一致逼近多项式 ■

$$p(t_k) - f(t_k) = \pm(-1)^k \|p(x) - f(x)\|_\infty$$

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

Chebyshev 定理

Chebyshev 定理的证明

再用反证法证明必要性

- 已知 $p(x)$ 是 $f \in C[a,b]$ 的最佳一致逼近多项式
- 记 $p(x) - f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的交错点组为 $a \le t_1 < t_2 < \cdots < t_M \le b$
- 假设点组数量 $M = m + 1 \le n + 1$，那么可构造如下 m 次多项式

$$q(x) = \pm(-1)^{m+1} \prod_{i=1}^{m} (x - \tau_i)$$

其中 $\tau_i = \frac{t_i + t_{i+1}}{2}$，$i = 1, 2, \cdots, m$

- 容易验证，对于所有点 t_k $(k = 1, 2, \cdots, M)$，$q(t_k)$ 与 $p(t_k) - f(t_k)$ 同号
- ⇨ 存在 $\lambda \in \mathbb{R}$，使 $\max_{a\le x\le b} |p(x) - f(x) - \lambda q(x)| < \max_{a\le x\le b} |p(x) - f(x)| = E_n$

Chebyshev 定理

Chebyshev 定理的证明

再用反证法证明必要性（续）

- ⇨ 存在 $\lambda \in \mathbb{R}$，使 $\max\limits_{a\le x\le b}|p(x)-f(x)-\lambda q(x)| < \max\limits_{a\le x\le b}|p(x)-f(x)| = E_n$
- ⇨ $p(x)-\lambda q(x)$ 比 $p(x)$ 在 $[a,b]$ 上的偏差更小
- ⇨ $p(x)$ 不是 $f \in C[a,b]$ 的最佳一致逼近多项式，与已知条件矛盾！
- 因此，点组数量 $M = m+1 \le n+1$ 的假设错误，原命题成立 ■

Chebyshev 定理

Chebyshev 定理的推论 1

若 $f(x) \in C[a,b]$，则其 n 次最佳一致逼近多项式存在且唯一。

Chebyshev 定理的推论 2

若 $f(x) \in C[a,b]$，则其 n 次最佳一致逼近多项式是 $f(x)$ 的一个 Lagrange 插值多项式。

Chebyshev 定理

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

推论 1 的证明

- 用反证法证明
  - 设有两个满足条件的最佳一致逼近多项式 P_n 和 Q_n，则它们的平均函数 $R_n(x) = \frac{P_n(x)+Q_n(x)}{2}$ 也是一个最佳一致逼近多项式
  - 对于 R_n 有 Chebyshev 交错点组 $t_1, t_2, \cdots, t_{n+2}$ 使得最小偏差

$$E_n = |R_n(t_k) - f(t_k)| = \frac{1}{2}|[P_n(t_k) - f(t_k)] + [Q_n(t_k) - f(t_k)]|$$

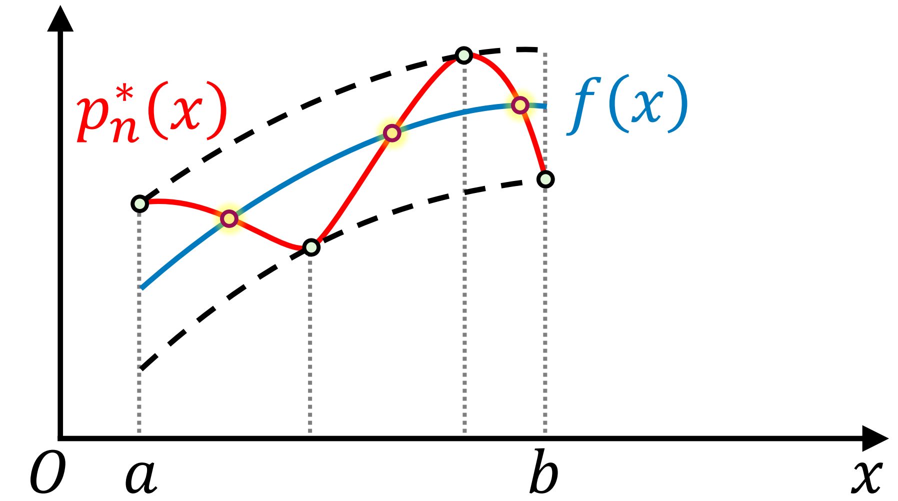
$$\le \frac{1}{2}|P_n(t_k) - f(t_k)| + \frac{1}{2}|Q_n(t_k) - f(t_k)| \le \frac{E_n}{2} + \frac{E_n}{2} = E_n$$

⇨ $|P_n(t_k) - f(t_k)| = |Q_n(t_k) - f(t_k)| = E_n$； $P_n(t_k)$ 和 $Q_n(t_k)$ 同号 (否则 $E_n = 0$)

⇨ $P_n(t_k) - f(t_k) = Q_n(t_k) - f(t_k)$ ⇨ $P_n(t_k) = Q_n(t_k)$, $k = 1, 2, \cdots, n+2$

⇨ $P_n(x) \equiv Q_n(x)$， n 次最佳一致逼近多项式的唯一性得证 ■

1. 最佳一致逼近



Chebyshev 定理

推论 2 的证明

- 由 Chebyshev 定理可知，若 $p_n^*(x)$ 是 $f(x) \in C[a,b]$ 的 n 次最佳一致逼近多项式，则 $p_n^*(x) - f(x)$ 在 $[a,b]$ 上要么 ① 恒为零，要么 ② 至少有 $n+2$ 个轮流取“正”、“负”偏差点 $a \le t_1 < t_2 < \cdots < t_{n+2} \le b$。

❑ 对于情况 ①，$p_n^*(x) \equiv f(x)$，$x \in [a,b]$，显然有推论 2 成立

❑ 对于情况 ②，易得 $p_n^*(x) - f(x)$ 在 $[a,b]$ 上至少有 $n+1$ 个零点，即

$$p_n^*(x_k) = f(x_k)$$

$$t_k \le x_k \le t_{k+1}, \qquad k = 1, 2, \cdots, n+1$$

插值多项式的唯一性

故以 $x_1, x_2, \cdots, x_{n+1}$ 为插值节点的 Lagrange 插值多项式就是 $p_n^*(x)$. ■

⬆ 这些插值节点称为 Chebyshev 节点，它们使得插值误差最小

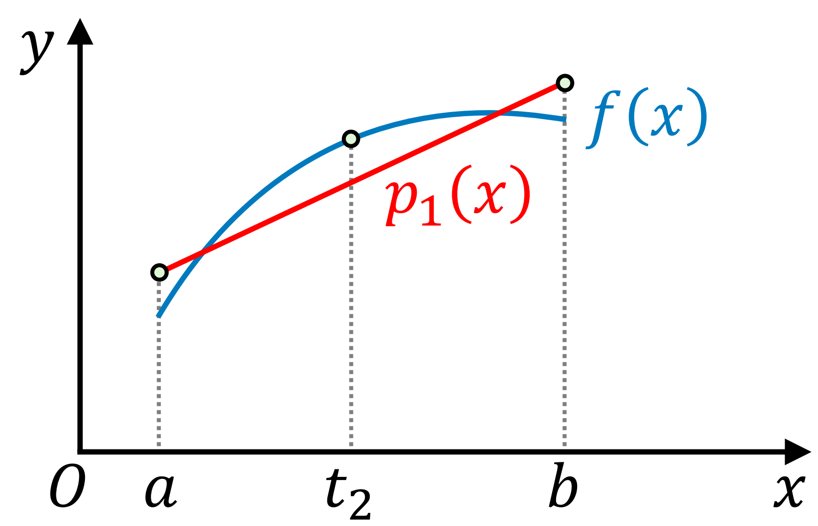
一次最佳一致逼近多项式

- Chebyshev 定理给出了最佳一致逼近多项式 $p_n(x)$ 的特征，但求解 $p_n(x)$ 相当困难
- 下面只讨论最简单的情况（$n = 1$）

函数图像的凹凸性不变

❑ 假设 $f(x) \in C^2[a,b]$，且 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 内**不变号**

假设 $f(x) \in C^2[a,b]$，且 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 内不变号，求一次最佳一致逼近多项式 $p_1(x) = c_0 + c_1 x$.



一次最佳一致逼近多项式

- 由 Chebyshev 定理可知，至少有 3 个偏差点 $a \le t_1 < t_2 < t_3 \le b$ 使得

$$p_1(t_k) - f(t_k) = \pm(-1)^k \max_{a \le x \le b} |c_0 + c_1 x - f(x)| \quad (k = 1, 2, 3)$$

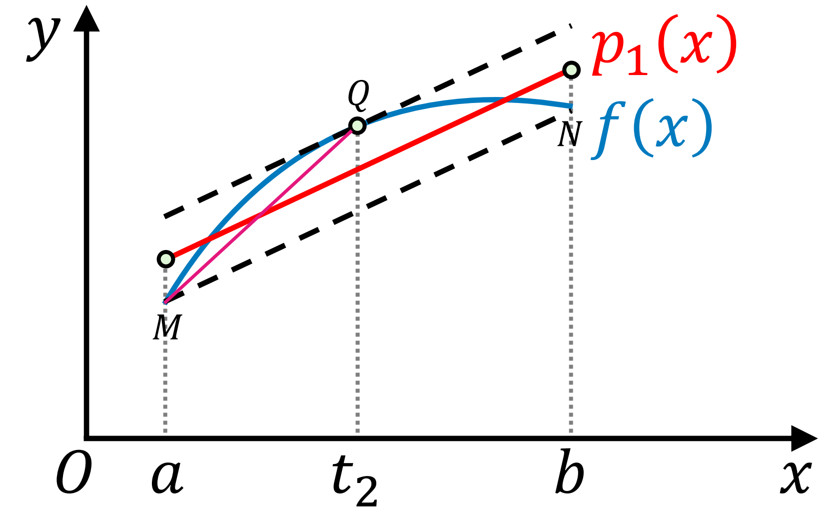
- 由于 $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 内不变号，故 $f'(x)$ 在 $[a, b]$ 内单调

⇨ $f'(x) - c_1$ 在 (a, b) 内只有一个零点，记作 t_2（偏差点）

⇨ $p_1'(t_2) - f'(t_2) = c_1 - f'(t_2) = 0$ ⇨ $f'(t_2) = c_1$

- 另外两个偏差点必在区间端点，即 $t_1 = a$，$t_3 = b$，且满足

$$\begin{aligned} p_1(a) - f(a) &= p_1(b) - f(b) \\ &= -[p_1(t_2) - f(t_2)] \end{aligned}$$



一次最佳一致逼近多项式

- $\Rightarrow \begin{cases} c_0 + c_1 a - f(a) = c_0 + c_1 b - f(b) \\ c_0 + c_1 a - f(a) = -[c_0 + c_1 t_2 - f(t_2)] \end{cases}$
- $\Rightarrow \begin{cases} c_0 = \frac{f(a)+f(t_2)}{2} - \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{a+t_2}{2} \\ c_1 = \frac{f(b)-f(a)}{b-a} = f'(t_2) \end{cases}$

几何意义：$p_1(x)$ 对应的直线与 $f(x)$ 在 a, b 两个端点的连线 MN 平行，且经过线段 MQ 的中点

- 故 $p_1(x) = \frac{f(a)+f(t_2)}{2} + c_1\left(x - \frac{a+t_2}{2}\right)$

❑ 实际计算时，需要手动求出 $f'(x) - c_1$ 在 (a, b) 上的零点 t_2

一次最佳一致逼近多项式

$$p_1(x) = \frac{f(a)+f(t_2)}{2} + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\left(x - \frac{a+t_2}{2}\right)$$

例

求 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$ 在 $[0,1]$ 上的一次最佳一致逼近多项式，并计算误差限.

$\Rightarrow\ c_1 = \frac{f(1)-f(0)}{1-0} = \sqrt{2}-1 \approx 0.4142 \quad \Rightarrow\ f'(x) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}$

令 $f'(t_2) = c_1$，解得 $t_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{2}-1}{2}} \approx 0.4551$

$\Rightarrow\ f(t_2) = \sqrt{\frac{\sqrt{2}+1}{2}} \approx 1.0987$

故 $p_1(x) = \frac{f(0)+f(t_2)}{2} + c_1\left(x - \frac{0+t_2}{2}\right) \approx 0.9551 + 0.4142x,\ 0 \le x \le 1$

误差限为 $\max\limits_{a\le x\le b}\left|p_1(x) - \sqrt{1+x^2}\right| \le |p_1(0)-1| \approx 0.0449$

目录

CONTENTS

最佳平方逼近多项式

- 回顾：最佳平方逼近多项式 $p^*(x)$ 满足以下条件

$$\|f(x)-p^*(x)\|_2 = \min_{p(x)\in H_n} \|f(x)-p(x)\|_2$$
$$\|f(x)-p^*(x)\|_2^2 = \min_{p(x)\in H_n} \|f(x)-p(x)\|_2^2$$

- 若取 2-范数，有 $\|f(x)-p^*(x)\|_2^2 = \min_{p(x)\in H_n} \int_a^b [f(x)-p(x)]^2 \,\mathrm{d}x$
- 考虑更一般的情况（带权范数 ⇦ 权函数 $\rho(x)$ ）：

$$\|f(x)-p^*(x)\|_2^2 = \min_{p(x)\in H_n} \int_a^b \rho(x)[f(x)-p(x)]^2 \,\mathrm{d}x$$

内积空间的基础知识（线性代数）

定义：线性空间

设 V 是一个非空集合，其元素用 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}$ 等表示；K 是一个数域（如 $\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C}$），其元素用 a,b 等表示。若 V 满足

1) （交换律）对任意 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in V$，有 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{u}$.
2) （结合律）对任意 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}\in V$，有 $(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})+\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w})$.
3) （零元律）存在（唯一的）零元素 $\mathbf{0}_V\in V$，满足 $\boldsymbol{u}+\mathbf{0}_V=\boldsymbol{u}$ 对任意 $\boldsymbol{u}\in V$ 成立.
4) （负元律）对任意 $\boldsymbol{u}\in V$，存在 $\boldsymbol{v}\in V$ 满足 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\mathbf{0}_V$.
5) （数因子分配律）对任意 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in V$ 和 $a\in K$，有 $a(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})=a\boldsymbol{u}+a\boldsymbol{v}$.
6) （分配律）对任意 $\boldsymbol{u}\in V$ 和 $a,b\in K$，有 $(a+b)\boldsymbol{u}=a\boldsymbol{u}+b\boldsymbol{u}$.
7) （结合律）对任意 $\boldsymbol{u}\in V$ 和 $a,b\in K$，有 $a(b\boldsymbol{u})=(ab)\boldsymbol{u}$.
8) （恒等律）对任意 $\boldsymbol{u}\in V$，有 $\mathbf{1}_V\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}$.

则称 V 为数域 K 上的**线性空间**（或向量空间），V 中的元素称为“向量”.

内积空间的基础知识（线性代数）

定义：内积

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

1) （共轭对称）对任意 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in V$，有 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})=\overline{(\boldsymbol{v},\boldsymbol{u})}$.
2) （线性）对任意 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in V$ 和 $a\in K$，有 $(a\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})=a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$.
3) （线性）对任意 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}\in V$，有 $(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})=(\boldsymbol{u},\boldsymbol{w})+(\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})$.
4) （非负性）对任意 $\boldsymbol{u}\in V$，满足 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})\geq 0$；当且仅当 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0}_V$ 时 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u})=0$.

则称 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$ 为 V 上 $\boldsymbol{u}$ 与 $\boldsymbol{v}$ 的**内积**，V 为**内积空间**. ⇨ 进而可以定义距离、长度和角度

满足上述定义的内积不唯一

- 若 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})=0$，则称 $\boldsymbol{u}$ 与 $\boldsymbol{v}$ 正交.

内积空间的基础知识（线性代数）

例 1 线性空间 $\mathbb{R}^n$ 上的内积

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

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{n} x_i\, y_i\,. \quad \text{（标准内积）}$$

- ⇨ 向量的 2 范数

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

- 一般地，若给定 n 阶正定对称矩阵 $\mathbf{M}$，则 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})_M \overset{\text{def}}{=} \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{M}\boldsymbol{x}$ 也是内积.
- 若 $\mathbf{M}$ 为对角矩阵，其对角线元素 ω_i 称为权系数，并定义带权内积和带权范数

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})_M \overset{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^{n}\omega_i x_i y_i\,, \qquad \|\boldsymbol{x}\|_M=\left(\sum_{i=1}^{n}\omega_i x_i^2\right)^{1/2}.$$

内积空间的基础知识

例 2 线性空间 $C[a,b]$ 上的内积

- 考虑实数域 $\mathbb{R}$ 上的线性空间 $C[a,b]$，对任意函数 $f,g \in C[a,b]$，定义

$$(f,g) \overset{\text{def}}{=} \int_a^b f(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x\,. \quad \text{（标准内积）}$$

容易验证 (f,g) 是 $C[a,b]$ 上的内积（满足共轭对称、线性、非负性）.

- 直观理解：将函数 $f(x)$ 视作无穷维度的向量 $[f(a), f(a+\mathrm{d}x), \cdots, f(b)]^{\mathrm{T}}$，则可类比向量内积，定义上述函数内积

- ⇨ 连续函数的 2 范数

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

- ⇨ $\|f\|_2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f \equiv 0$

内积空间的基础知识

- 为了在 $C[a,b]$ 上定义带权内积，首先需要定义权函数 $\rho(x)$

定义

设在有限或无限区间 $[a,b]$ 内，非负函数 $\rho(x)$ 满足以下条件:

1) 对于 $k=0,1,2,\cdots$, $\int_a^b |x|^k \rho(x)\,\mathrm{d}x$ 存在且为有限值;
2) 对于 $[a,b]$ 上的非负连续函数 $g(x)$，若

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

   则在 $[a,b]$ 内 $g(x)\equiv 0$.

则称 $\rho(x)$ 为区间 $[a,b]$ 内的**权函数**.

权函数与定义区间相关

内积空间的基础知识

在物理上，权函数 $\rho(x)$ 往往表示密度函数，相应的 $\int_a^b \rho(x)\,\mathrm{d}x$ 表示总质量。

- 常见权函数
  - $\rho(x) = 1$ 是 $[-1, 1]$ 上的权函数
  - $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 是 $[-1, 1]$ 上的权函数
  - $\rho(x) = e^{-x}$ 是 $[0, \infty)$ 上的权函数
  - $\rho(x) = e^{-x^2}$ 是 $(-\infty, \infty)$ 上的权函数
- 为什么引入权函数?
  - 假设测量的函数值 $y_0, y_1, \cdots$ 的各个元素的可靠性不同，可通过权函数给较可靠的测量值赋予更大权重

内积空间的基础知识

- $C[a,b]$ 上的带权内积

定义

设函数 $f(x), g(x) \in C[a,b]$，且 $\rho(x)$ 是 $[a,b]$ 上的权函数，则积分

$$(f,g) = (f,g)_\rho \overset{\text{def}}{=} \int_a^b \rho(x) f(x) g(x)\,\mathrm{d}x$$

称为函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上的（带权）**内积**，$C[a,b]$ 为**内积空间**.

此时 $C[a,b]$ 是一个 Euclid 空间

- 函数 $f(x) \in C[a,b]$ 的 Euclid 范数

$$\|f\|_\rho \overset{\text{def}}{=} (f,f)_\rho^{1/2} = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x)\,\mathrm{d}x}$$

内积空间的基础知识

- 函数正交

定义

若函数 $f(x), g(x) \in C[a,b]$ 满足

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

称为函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ **正交**.

- $1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \cdots$ 在区间 $[-\pi, \pi]$ 上互相正交（权 $\rho(x) \equiv 1$）
  - Fourier 逼近的基函数

正交多项式

定义

设函数 $g_n(x) \in C[a,b]$ 是首项系数不为零的 n 次多项式，如果多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \cdots$ 满足

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

则称多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \cdots$ 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.

- 回顾最佳平方逼近多项式

$$\|f(x) - p^*(x)\|_2^2 = \min_{p(x)\in H_n} \int_a^b \rho(x)[f(x) - p(x)]^2\,\mathrm{d}x$$

  - 若 $p(x)$ 可表示为一组正交多项式的线性组合，则可简化求解过程

正交多项式的性质

$$\|u_k\|_2^2 = (u_k, u_k) = \int_a^b \rho(x) u_k^2(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

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

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

构成 H_n 的**一组基**，即对任何 $p(x) \in H_n$，有

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k \varphi_k(x), \qquad c_0, c_1, \cdots, c_n \in \mathbb{R}.$$

正交多项式的性质

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

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

即 $\varphi_n(x)$ 与所有次数小于 n 的多项式正交。

正交多项式的性质

- **性质 3**：设 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 k 次正交多项式，且首项系数分别为 $\mathrm{a}_k \neq 0$，则对于 $n=0,1,\cdots$，有

$$\alpha_{n+1}\varphi_{n+1}(x) = (x-\beta_n)\varphi_n(x) - \alpha_n\gamma_n\varphi_{n-1}(x)$$

其中

三项递推公式

$$\varphi_{-1} \equiv 0, \qquad \alpha_0 = \gamma_0 = 1, \qquad \alpha_n = \frac{\mathrm{a}_{n-1}}{\mathrm{a}_n},$$

$$\beta_n = \frac{(\varphi_n, x\varphi_n)}{(\varphi_n,\varphi_n)}, \qquad \gamma_n = \frac{(\varphi_n,\varphi_n)}{(\varphi_{n-1},\varphi_{n-1})}.$$

计算正交多项式的重要方法

正交多项式的性质

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

性质 3 的证明

- 根据性质 1，得 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_{n+1}$ 构成 H_{n+1} 的一组基，于是可记

$$x\varphi_n(x) = \sum_{k=0}^{n+1} c_{n,k} \varphi_k(x), \qquad n \geq 0 \qquad (1)$$

其中 $c_{n,k} = \frac{(x\varphi_n, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$. 见性质 1 的推论

- 由内积的定义，易得 $(x\varphi_n, \varphi_k) = (\varphi_n, x\varphi_k)$.
- 根据性质 2，若 $k < n-1$，则 $(\varphi_n, x\varphi_k) = 0$ ⇨ $c_{n,k} = 0 \ \ (k < n-1)$

❑ 代入 (1) 化简得，$x\varphi_n(x) = c_{n,n-1}\varphi_{n-1}(x) + c_{n,n}\varphi_n(x) + c_{n,n+1}\varphi_{n+1}(x)$

⇨ $c_{n,n+1}\varphi_{n+1}(x) = \left(x - c_{n,n}\right)\varphi_n(x) - c_{n,n-1}\varphi_{n-1}(x)$

正交多项式的性质

性质 3 的证明（续）

⇨ $c_{n,n+1}\varphi_{n+1}(x) = (x - c_{n,n})\varphi_n(x) - c_{n,n-1}\varphi_{n-1}(x)$

❑ 设 $\varphi_{n+1}(x), \varphi_n(x), \varphi_{n-1}(x)$ 的首项系数分别为 $\mathrm{a}_{n+1}, \mathrm{a}_n, \mathrm{a}_{n-1}$

1) 比较等号两侧的首项系数，可得

$$c_{n,n+1} \cdot \mathrm{a}_{n+1} = \mathrm{a}_n \qquad \Rightarrow \; c_{n,n+1} = \frac{\mathrm{a}_{n-1}}{\mathrm{a}_n} \triangleq \alpha_n$$

2) 等式两侧同时计算与 $\varphi_n(x)$ 的内积，得

$$0 = c_{n,n+1}(\varphi_n, \varphi_{n+1}) = (\varphi_n, (x - c_{n,n})\varphi_n) - \underbrace{(\varphi_n, c_{n,n-1}\varphi_{n-1})}_{=0}$$

⇨ $c_{n,n} = \dfrac{(\varphi_{n-1}, x\varphi_{n-1})}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})} \triangleq \beta_{n-1}$

正交多项式的性质

性质 3 的证明（续）

⇨ $c_{n,n+1}\varphi_{n+1}(x) = (x - c_{n,n})\varphi_n(x) - c_{n,n-1}\varphi_{n-1}(x)$

❑ 设 $\varphi_{n+1}(x)$，$\varphi_n(x)$，$\varphi_{n-1}(x)$ 的首项系数分别为 a_{n+1}，a_n，a_{n-1}

$$c_{n,n+1} = \frac{\mathrm{a}_{n-1}}{\mathrm{a}_n} \triangleq \alpha_n, \qquad c_{n,n} = \frac{(\varphi_{n-1}, x\varphi_{n-1})}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})} \triangleq \beta_{n+1}$$

3) 根据 $c_{n,k} = \frac{(x\varphi_n, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$，取 $k = n-1$，得

$$c_{n,n-1} = \frac{(x\varphi_n, \varphi_{n-1})}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})} = \frac{(\varphi_n, x\varphi_{n-1})}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})} \overset{\text{正交性}}{=\!=\!=} \frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})} \cdot \frac{\mathrm{a}_{n-1}}{\mathrm{a}_n}$$

⇨ $c_{n,n-1} = \frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}\alpha_n \triangleq \gamma_n \alpha_n$

$$x\varphi_{n-1} = \frac{\mathrm{a}_{n-1}}{\mathrm{a}_n}\varphi_n + \blacksquare\varphi_{n-1} + \cdots + \blacksquare\varphi_0$$

正交多项式的性质

首一多项式

- **性质 3（简化）**：设 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 k 次正交多项式，且首项系数均为 $a_k = 1$，则对于 $n = 0, 1, \cdots$，有

$$\varphi_{n+1}(x) = (x - \beta_n)\varphi_n(x) - \gamma_n \varphi_{n-1}(x)$$

三项递推公式

其中

$$\varphi_{-1} = 0, \qquad \varphi_0 = 1, \qquad \gamma_0 = 1,$$

$$\beta_n = \frac{(\varphi_n, x\varphi_n)}{(\varphi_n, \varphi_n)}, \qquad \gamma_n = \frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}.$$

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

正交多项式的性质

性质 4 的证明

设 t 是 $\varphi_n(x)$ 的任一根，首先证明它是单实根，然后证明 $t \in (a,b)$。

1) 当 $n=1$ 时，显然 t 是单根。当 $n \geq 2$ 时，若 t 是重实根或复数根，则

$$\varphi_n(x) = (x-t)(x-\bar{t})p_{n-2}(x),$$

其中 $\bar{t}$ 是 t 的共轭复数，$p_{n-2}(x)$ 是次数不超过 $n-2$ 的非零多项式。

$$\Rightarrow \quad (\varphi_n, p_{n-2}) = \int_a^b \rho(x)(x-t)(x-\bar{t})p_{n-2}^2(x)\,\mathrm{d}x$$

$$= \int_a^b \rho(x)|x-t|^2\, p_{n-2}^2(x)\ \mathrm{d}x = (g,g) > 0$$

其中 $g(x) = |x-t|p_{n-2}(x)$。这与正交性 $(\varphi_n, p_{n-2}) = 0$ 矛盾！

❑ 故 t 是单实根。

正交多项式的性质

性质 4 的证明（续）

设 t 是 $\varphi_n(x)$ 的任一根，首先证明它是单实根，然后证明 $t \in (a,b)$。

2) 因为 $\varphi_n(x)$ 可以写成 $\varphi_n(x) = (x-t)p_{n-1}(x)$，其中 $p_{n-1}(x)$ 是次数不超过 $n-1$ 的非零多项式。由正交性可知

$$(\varphi_n, p_{n-1}) = \int_a^b \rho(x)(x-t)\,p_{n-1}^2(x)\,\mathrm{d}x = 0$$

- 而根据权函数 $\rho(x)$ 的定义以及 $p_{n-1}(x)$ 为非零多项式，有

$$\int_a^b \rho(x)p_{n-1}^2(x)\,\mathrm{d}x \neq 0$$

- 这表明线性函数 $x-t$ 在区间 $[a,b]$ 上变号，故 $t \in (a,b)$。■

正交多项式

$$\|f(x)-p^*(x)\|_2^2=\min_{p(x)\in H_n}\int_a^b \rho(x)[f(x)-p(x)]^2\,\mathrm{d}x$$

- 若 $p(x)$ 可表示为一组正交多项式的线性组合，则可简化求解过程

$$p^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x) \quad \Rightarrow \quad I(a_0,a_1,\cdots,a_n)\triangleq\int_a^b\rho(x)\left[f(x)-\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x)\right]^2\mathrm{d}x$$

- 令 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$ 取最小值 $\Rightarrow$ $\dfrac{\partial I}{\partial a_k}=0 \quad (k=0,1,\cdots,n)$，则

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

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{j=0}^{n}(\varphi_k,\varphi_j)a_j=(f,\varphi_k)} \xRightarrow{\text{正交性}} a_k=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)} \Rightarrow \boxed{p^*(x)=\sum_{j=0}^{n}\frac{(f,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)}\varphi_j(x)}$$

法方程
（也适用于非正交多项式的基）

（仅适用于正交多项式的基）

最佳平方逼近多项式

求解 n 次最佳平方逼近多项式

方法 1：以 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为基，设 $\rho(x) \equiv 1$，$f(x) \in C[0,1]$

- 直接求解法方程 $\sum_{j=0}^{n} (\varphi_k, \varphi_j) a_j = (f, \varphi_k), \qquad k = 0, 1, \cdots, n$

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

- ⇨ 即求解线性方程组 $\mathbf{H}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{d}$

Hilbert 矩阵

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{bmatrix}, \boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \boldsymbol{d} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

- 最后代入 $p^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)$ 即可

求解 n 次最佳平方逼近多项式

方法 1： 以 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为基，设 $\rho(x) \equiv 1$，$f(x) \in C[0,1]$

- 根据法方程的矩阵形式 $\mathbf{H}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{d}$，易得

法方程具有唯一解 $\Leftrightarrow$ $\det(\mathbf{H}) \neq 0$ $\Leftrightarrow$ $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 线性无关

  - 以 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为基时，最佳平方逼近多项式存在且具有唯一性

- 根据法方程的内积形式 $\sum_{j=0}^{n} (\varphi_k, \varphi_j) a_j = (f, \varphi_k)$，易得

$$(f - p^*, \varphi_k) = 0, \qquad k = 0, 1, \cdots, n$$

求解 n 次最佳平方逼近多项式

$$p^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)$$

方法 1： 以 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为基，设 $\rho(x) \equiv 1$，$f(x) \in C[0,1]$

$$(f - p^*, \varphi_k) = 0, \qquad k = 0, 1, \cdots, n$$

- 平方误差：
$$\begin{aligned}\|\delta(x)\|_2^2 &= (f - p^*, f - p^*) \\ &= (f - p^*, f) - (f - p^*, p^*) \\ &= (f - p^*, f) \\ &= (f, f) - (p^*, f) \\ &= \|f(x)\|_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j (\varphi_j, f)\end{aligned}$$

求解 n 次最佳平方逼近多项式

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

方法 1： 以 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为基，设 $\rho(x) \equiv 1$，$f(x) \in C[0,1]$

例

设函数 $f(x) = \sqrt{1+x^2}$，求 $[0,1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式和误差.

- 根据法方程，有

$$d_0 = (f,1) = \int_0^1 \sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\ln\left(1+\sqrt{2}\right) + \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 1.1478$$

$$d_1 = (f,x) = \int_0^1 x\sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}(1+x^2)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^1 = \frac{2\sqrt{2}-1}{3} \approx 0.6095$$

- 解方程组 $\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \end{bmatrix}$，得 $\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2\sqrt{2}+2\ln\left(1+\sqrt{2}\right)+2 \\ -4-3\ln\left(1+\sqrt{2}\right)+5\sqrt{2} \end{bmatrix}$
- $\Rightarrow$ $a_0 \approx 0.9343, a_1 \approx 0.4269$ $\Rightarrow$ $p_1^*(x) = 0.9342 + 0.4269x$

求解 n 次最佳平方逼近多项式

方法 1： 以 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 为基，设 $\rho(x) \equiv 1$，$f(x) \in C[0,1]$

例

设函数 $f(x) = \sqrt{1+x^2}$，求 $[0,1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式和误差.

- $\Rightarrow \quad a_0 \approx 0.9343, a_1 \approx 0.4269 \quad \Rightarrow \quad p_1^*(x) = 0.9342 + 0.4269x$
- 平方误差 $\|\delta\|_2^2 = (f,f) - (p_1^*, f)$
$$= \int_0^1 (1+x^2)\,\mathrm{d}x - 0.9342 d_0 - 0.4269 d_1 \approx 0.0009$$
- 最大误差 $\|\delta\|_\infty = \max\limits_{0\le x\le 1} \left|\sqrt{1+x^2} - p_1^*(x)\right|$
$$= \max_{0\le x\le 1} \left|\sqrt{1+x^2} - 0.9342 - 0.4269x\right| \approx 0.0658$$

求解 n 次最佳平方逼近多项式

方法 2： 以正交多项式 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 为基

- 根据选定的正交多项式，得到权函数 $\rho(x)$ 的表达式
- 直接求解系数 $a_k = \frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)} \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$，再代入公式

$$p^*(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{(f,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)} \varphi_j(x)$$

- 平方误差：$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x) - p^*(x)\|_2^2 = (f,f) - (p^*,f)$

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

$$\boxed{\sum_{j=0}^{n} \frac{(f,\varphi_j)^2}{(\varphi_j,\varphi_j)} \le \|f(x)\|_2^2}$$

如何构造正交多项式? $(f,g) \overset{\text{def}}{=} \int_a^b \rho(x)f(x)g(x)\,\mathrm{d}x\,,\quad \int_a^b x^n\,\mathrm{d}x = \dfrac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1}$

- 通过**正交化手续**，对 $1, x, x^2, \cdots, x^n$ 进行正交化

$$g_0 = 1, \qquad g_n(x) = x^n - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x^n, g_k)}{(g_k, g_k)} \cdot g_k(x), \qquad n = 1, 2, \cdots$$

将 x^n 减去它在所有已有多项式上的投影

❑ 设权函数 $\rho(x) \equiv 1$，则

- $g_1(x) = x - \dfrac{\int_a^b x\,\mathrm{d}x}{\int_a^b 1\,\mathrm{d}x} = x - \dfrac{\frac{1}{2}(b^2-a^2)}{b-a} = x - \dfrac{(b+a)}{2}$

- $g_2(x) = x^2 - \dfrac{\int_a^b x^2\,\mathrm{d}x}{\int_a^b 1\,\mathrm{d}x} - \dfrac{\int_a^b x^2[x-(b+a)/2]\,\mathrm{d}x}{\int_a^b [x-(b+a)/2]^2\,\mathrm{d}x}\left[x - \dfrac{(b+a)}{2}\right]$

  $= x^2 - \dfrac{a^2+ab+b^2}{3} - (b+a)\left[x - \dfrac{(b+a)}{2}\right]$

- …

常见的正交多项式

1. Legendre 多项式

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

$$P_0(x)=1,\qquad P_n(x)=\frac{1}{2^n\, n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n]\quad (n\geq 1).$$

  - 化简可得

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

  - 首项系数为 $a_n=\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$

- 首一 Legendre 多项式：$\tilde{P}_n(x)=\dfrac{n!}{(2n)!}\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n]$

常见的正交多项式

1. Legendre 多项式

偶 ▪ $P_0(x) = 1$

奇 ▪ $P_1(x) = x$

偶 ▪ $P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$

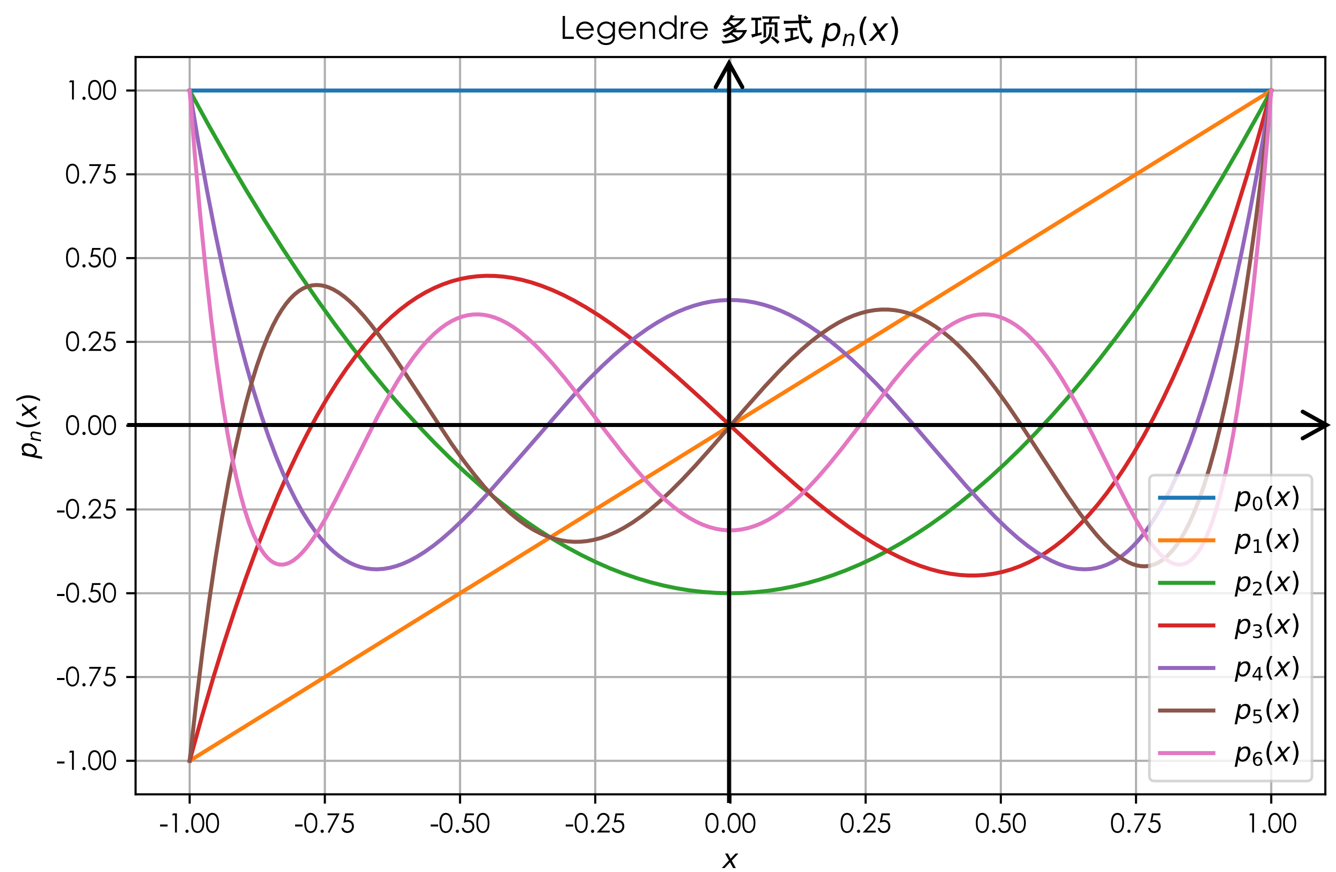
奇 ▪ $P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$

偶 ▪ $P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + x)/8$

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

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

▪ $\dots$



常见的正交多项式

1. Legendre 多项式

- 性质

1) 递推关系

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

2) 正交性

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

3) 奇偶性：$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$

常见的正交多项式

1. Legendre 多项式

定理

在区间 $[-1,1]$ 上所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，$\tilde{P}_n(x)$ 与零的平方逼近误差最小，即 $\left\|\tilde{P}_n(x)\right\|_2 = \min\limits_{p\in\tilde{H}_n,\,\deg(p)=n} \|p_n(x)\|_2$.

证明

设 $Q_n(x)$ 是任意一个最高项系数为 1 的 n 次多项式，它可表示为 $Q_n(x) = \tilde{P}_n(x) + \sum_{k=0}^{n-1} \mathrm{a}_k \tilde{P}_k(x)$，于是

$$(Q_n, Q_n) = \int_{-1}^{1} Q_n^2(x)\,\mathrm{d}x = (\tilde{P}_n, \tilde{P}_n) + \sum_{k=0}^{n-1} \mathrm{a}_k^2 (\tilde{P}_k, \tilde{P}_k) \geq (\tilde{P}_n, \tilde{P}_n)$$

当且仅当 $\mathrm{a}_0 = \mathrm{a}_1 = \cdots = \mathrm{a}_{n-1} = 0$ 时等号成立，即当 $Q_n(x) \equiv \tilde{P}_n(x)$ 时平方误差最小. ■

常见的正交多项式

例 3

求函数 $f(x)=e^x$ 在 $[-1,1]$ 上的最佳三次平方逼近多项式 $S^*(x)$.

思路：以 Legendre 多项式为基

- 已知 $P_0=1$，$P_1(x)=x$，$P_2(x)=\frac{(3x^2-1)}{2}$，$P_3(x)=\frac{(5x^3-3x)}{2}$
- 则 $S^*(x)=\mathrm{a}_0P_0+\mathrm{a}_1P_1+\mathrm{a}_2P_2+\mathrm{a}_3P_3$，其中 $\mathrm{a}_k=\frac{(f,P_k)}{(P_k,P_k)}$
  - 根据 Legendre 多项式的性质（正交性），有 $(P_j,P_k)=\begin{cases}0, & j\neq k,\\ \frac{2}{2k+1}, & j=k.\end{cases}$
  - $(f,P_0)=\int_{-1}^{1}e^x\,\mathrm{d}x=e-\frac{1}{e}$，　$(f,P_1)=\int_{-1}^{1}xe^x\,\mathrm{d}x=\frac{2}{e}$

    $(f,P_2)=\int_{-1}^{1}\frac{3x^2-1}{2}e^x\,\mathrm{d}x=e-\frac{7}{e}$，$(f,P_3)=\int_{-1}^{1}\frac{5x^3-3x}{2}e^x\,\mathrm{d}x=-5e+\frac{37}{e}$
- 故 $\mathrm{a}_0\approx 1.1752$，$\mathrm{a}_1\approx 1.1036$，$\mathrm{a}_2\approx 0.3578$，$\mathrm{a}_3\approx 0.0705$
- ⇨ $S^*(x)=0.1761x^3+0.5367x^2+0.9980x+0.9963$

常见的正交多项式

- 一般区间上的最佳平方逼近多项式

  - 设 $f(x) \in C[a,b]$，$\rho(x) = 1$，计算 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的最佳平方逼近多项式

  思路：变量代换

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

  ⇨ 计算 $f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$ 在区间 $[-1,1]$ 上的最佳平方逼近多项式 $p^*(t)$

  ⇨ $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的最佳平方逼近多项式为 $p^*\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right)$

常见的正交多项式

例 4

求函数 $f(x)=e^x$ 在 $[-2,0]$ 上的最佳三次平方逼近多项式 $S^*(x)$.

思路：以 Legendre 多项式为基，并进行变量代换

- 已知 $a=-2$，$b=0$，令 $x=\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}=t-1$，则 $t=x+1$
- 令 $g(t)=f(x)=e^x=e^{t-1}$，则原问题等价于

  求 $g(t)=e^{t-1}$ 在 $[-1,1]$ 上的最佳三次平方逼近多项式 $\tilde{S}^*(t)$
- 设 $\tilde{S}^*(t)=\mathrm{a}_0P_0+\mathrm{a}_1P_1+\mathrm{a}_2P_2+\mathrm{a}_3P_3$，其中 $\mathrm{a}_k=\frac{(g,P_k)}{(P_j,P_k)}$
- 仿照例 3 的求解过程，可得

$$
\begin{aligned}
\tilde{S}^*(t) &= 0.0648t^3+0.1974t^2+0.3671t+0.3665 \\
&= 0.0648(x+1)^3+0.1974(x+1)^2+0.3671(x+1)+0.3665 \\
&= 0.0648x^3+0.3918x^2+0.9564x+0.9959 \\
&= S^*(x)
\end{aligned}
$$

常见的正交多项式

2. Chebyshev 多项式

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

$$T_n(x)=\cos(n\cdot\arccos x)\,,\qquad |x|\le 1.$$

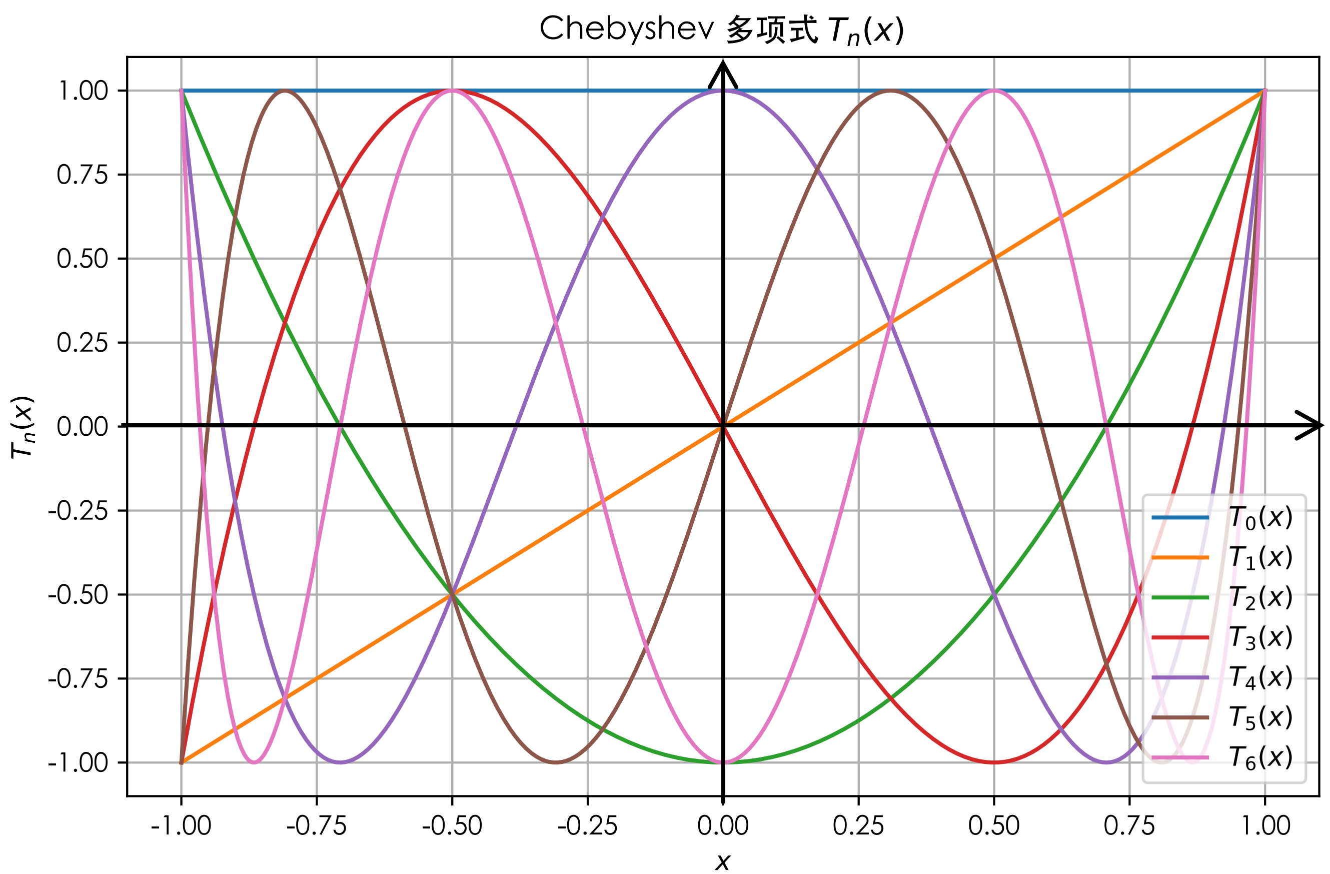
- 若令 $x=\cos\theta$，则

$$T_n(x)=\cos n\theta\,,\qquad 0\le\theta\le\pi.$$

常见的正交多项式

2. Chebyshev 多项式

- 偶 $T_0(x) = 1$
- 奇 $T_1(x) = x$
- 偶 $T_2(x) = 2x^2 - 1$
- 奇 $T_3(x) = 4x^3 - 3x$
- 偶 $T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$
- 奇 $T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$
- 偶 $T_6(x) = 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1$
- …



常见的正交多项式

2. Chebyshev 多项式

- 性质

1) 递推关系

证明思路：$\cos[(n+1)\theta]+\cos[(n-1)\theta]=2\cos\theta\cos(n\theta)$

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

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

- $T_n(x)$ 的最高项系数为 2^{n-1} $(n\geq 1)$

2) 正交性

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

常见的正交多项式

2. Chebyshev 多项式

- 性质

3) $T_{2k}(x)$ 只含 x 的偶次幂，$T_{2k+1}(x)$ 只含 x 的奇次幂

4) T_n 在区间 $(-1,1)$ 上有 n 个零点（都是实数）

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

Chebyshev 节点

5) T_n 在区间 $(-1,1)$ 上有 $n+1$ 个极值点

$$\tilde{x}_k = \cos\frac{k\pi}{n}, \qquad k = 0,1,2,\cdots,n$$

常见的正交多项式

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos x), \qquad |x| \le 1$$

2. Chebyshev 多项式

定理

在区间 $[-1, 1]$ 上所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，$\frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ 与零的偏差最小，其偏差为 $\left\| \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) \right\|_\infty = \max\limits_{-1 \le x \le 1} \left| \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) \right| = \frac{1}{2^{n-1}}$.

证明

显然，$\max\limits_{-1 \le x \le 1} \left| \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) \right| = \frac{1}{2^{n-1}} \max\limits_{-1 \le x \le 1} |T_n(x)| = \frac{1}{2^{n-1}}$。由于 $\frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) = x^n - q_{n-1}(x)$, 且点 $x_k = \cos \frac{k}{n} \pi \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$ 是 $T_n(x)$ 的 Chebyshev 交错点组。

由 Chebyshev 定理可知，在区间 $[-1, 1]$ 上，x^n 在 H_n 中的最佳一致逼近多项式是 $q_{n-1}(x)$，即 $\frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ 是与零偏差最小的多项式。■

常见的正交多项式

对于一般的区间 $[a,b]$，可通过变量代换转换到区间 $[-1,1]$ 上（参考例 4）

2. Chebyshev 多项式

例 5

求函数 $f(x)=c_0+c_1x+c_2x^2+c_3x^3 \quad (c_3\neq 0)$ 在 $[-1,1]$ 上的二次最佳一致逼近多项式 $p_2^*(x)$.

思路：利用 Chebyshev 多项式的性质

- 所求的二次最佳一致逼近多项式应满足

$$\max_{-1\le x\le 1}|f(x)-p_2^*(x)|=E_n \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{p_2\in H_2}\max_{a\le x\le b}|f(x)-p_2(x)|$$

- 根据 Chebyshev 首一多项式 $\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与零的偏差最小的定理可得，当

$$f(x)-p_2^*(x)=\frac{c_3}{2^2}T_3(x)=c_3x^3-\frac{3c_3}{4}x$$

时，与零偏差最小。故所求多项式为 $p_2^*(x)=f(x)-c_3x^3+\frac{3c_3}{4}x$.

常见的正交多项式

2. Chebyshev 多项式

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

$$M_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \max_{a\le x\le b}\left|f^{(n+1)}(x)\right|$$

定理

设函数 $f(x)\in C^{n+1}[-1,1]$，若插值节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 为 Chebyshev 多项式 $T_{n+1}(x)$ 的 $n+1$ 个零点，则插值误差 $\|f(x)-L_n(x)\|_\infty$ 最小，且

$$\|f(x)-L_n(x)\|_\infty = \max_{-1\le x\le 1}|R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\|\omega_{n+1}(x)\|_\infty = \frac{M_{n+1}}{2^n(n+1)!}$$

- 用 Chebyshev 多项式的零点插值，可以使得总体插值误差最小！
- 可通过变量代换，将上述定理推广至区间 $[a,b]$

常见的正交多项式

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$$

$$M_{n+1} \overset{\text{def}}{=} \max_{a \le x \le b} \left|f^{(n+1)}(x)\right|$$

2. Chebyshev 多项式

证明

- 根据插值多项式的唯一性定理，不妨设采用的是 Lagrange 插值。
- 根据 Lagrange 插值余项公式（见第 2 节「Lagrange 插值法的误差分析」），得

$$\|f(x) - L_n(x)\|_\infty = \max_{-1 \le x \le 1} |R_n(x)| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \|\omega_{n+1}(x)\|_\infty$$

- 由于在所有首一多项式（包括 $\omega_{n+1}(x)$）中，Chebyshev 多项式 $\frac{1}{2^n} T_{n+1}(x)$ 与零的偏差最小，可得

$$\|\omega_{n+1}(x)\|_\infty \le \left\|\frac{1}{2^n} T_{n+1}(x)\right\|_\infty \le \frac{1}{2^n}$$

- 故 $\|f(x) - L_n(x)\|_\infty \le \frac{M_{n+1}}{2^n(n+1)!}$. ■

常见的正交多项式

3. Hermite 多项式

- 当区间为 $(-\infty,\infty)$，权函数 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 时，由序列 $\{1,x,x^2,\cdots,x^n,\cdots\}$ 正交化得到的多项式

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

  - 首项系数为 2^n

- 递推关系：$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)$
- 正交性

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

常见的正交多项式

3. Hermite 多项式

Hermite 多项式可用作神经网络的激活函数的一组基[1]

- 偶 ▪ $H_0(x) = 1$
- 奇 ▪ $H_1(x) = 2x$
- 偶 ▪ $H_2(x) = 4x^2 - 2$
- 奇 ▪ $H_3(x) = 8x^3 - 12x$
- 偶 ▪ $H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$
- 奇 ▪ $H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$
- 偶 ▪ $H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$
- ▪ $\dots$

[1] L. Ma, and K. Khorasani, “Constructive feedforward neural networks using Hermite polynomial activation functions,” IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 16, no. 4, pp. 821–833, 2005. DOI: 10.1109/TNN.2005.851786.

「目录」CONTENTS

曲线拟合的基础概念

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
$f(x)$	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

- 函数插值（第二节~第四节内容）

> 给定数据表，寻找一个简单函数 $p(x)$，使得 $p(x_i) = f(x_i)$

- **曲线拟合**（本节内容）

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

- 函数逼近（前置内容）

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

最小二乘逼近

通常 $m \gg n$

- 给定函数 $f(x)$ 在一组离散点 $x_0, x_1, \cdots, x_m$ 上的取值 $y_0, y_1, \cdots, y_m$，在某类函数族 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ 中寻找函数 $S^*(x)$，使得 $S^*(x)$ 距离 $f(x)$ 最近。
  - ⇨ 误差 $\boldsymbol{\delta} = (\delta_0, \delta_1, \cdots, \delta_n)^{\mathrm{T}}$，$\delta_i = S^*(x_i) - y_i \quad (i = 0, 1, \cdots, m)$
  - 如何定义“距离最近”?
    - 思路 1：使 $\|\delta\|_\infty = \max\limits_{0 \le i \le m} |S^*(x_i) - y_i|$ 最小 ⇨ 求解复杂
    - 思路 2：使 $\|\delta\|_1 = \sum_{i=0}^{m} |S^*(x_i) - y_i|$ 最小 ⇨ 不可导，求解困难
    - 思路 3：使 $\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} |S^*(x_i) - y_i|^2$ 最小

最小二乘逼近

通常 $m \gg n$

- 给定函数 $f(x)$ 在一组离散点 $x_0, x_1, \cdots, x_m$ 上的取值，在某类函数族 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ 中寻找函数 $S^*(x)$，使得

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} |S^*(x_i) - f(x_i)|^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} |S(x_i) - f(x_i)|^2$$

  - 其中 $i = 0, 1, \cdots, m$
  - $S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \qquad (n < m)$

- 为使问题更具一般性，通常采用加权平方和的形式定义误差

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} w(x_i)[S(x_i) - f(x_i)]^2$$

最小二乘逼近 $S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \qquad (n < m)$

- 为使问题更具一般性，通常采用加权平方和的形式定义误差

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} w(x_i)[S(x_i) - f(x_i)]^2$$

其中 $w(x) \geq 0$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，表示不同点处的数据比重

- 最小化上述 $\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2$ 的问题等价于求多元函数

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

的极小点 $(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*)$ 问题，其中 $w_i = w(x_i)$ 是正实数

最小二乘逼近

可看作最佳平方逼近问题的离散形式

- 类似正交多项式的法方程推导过程，令多元函数的偏导数为零

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

其中 $k = 0, 1, \cdots, n$

- 记 $(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^{m} w_i \varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)$, $\quad (f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i)\varphi_j(x_i)$

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

法方程

求解最小二乘逼近函数

- **方法 1：** 直接求解法方程 $\sum_{j=0}^{n}(\varphi_k,\varphi_j)a_j=(f,\varphi_k),\qquad k=0,1,\cdots,n$

  其中 $(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=0}^{m}w_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i),\qquad (f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}w_i f(x_i)\varphi_j(x_i)\triangleq d_k$

- ⇨ 即求解线性方程组 $\mathbf{G}\boldsymbol{a}=\boldsymbol{d}$

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

法方程具有唯一解 $\iff$ $\det(\mathbf{G})\neq 0$ $\iff$ $\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n$ 满足 Haar 条件

- ⇨ 求出唯一解 $a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*$ ⇨ $S^*(x)=a_0^*\varphi_0(x)+\cdots+a_n^*\varphi_n(x)$

求解最小二乘逼近函数

方法 1： 直接求解法方程 $\sum_{j=0}^{n}(\varphi_k,\varphi_j)a_j=(f,\varphi_k),\qquad k=0,1,\cdots,n$

定理：Haar 条件

如果 $\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\in C[a,b]$ 的任意（非零）线性组合在点集 $x_0,x_1,\cdots,x_m$ 上至多有 m 个不同的零点，则 $\mathbf{G}$ 非奇异，此时法方程具有唯一解.

- 若取 $\varphi_k=x^k\ (k=0,1,\cdots,n)$，则 $\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n$ 满足 Haar 条件
- 若没有给出数据表中各点的权值 $w_i=w(x_i)$，则默认 $w_i=1$

求解最小二乘逼近函数

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

例 6

给定数据如下表，求 $f(x)$ 的二次最小二乘拟合多项式.

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

- 设二次拟合多项式为

$$p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

- 显然 $m = 4$，$n = 2$。令 $\varphi_k = x^k$ $(k = 0, 1, \cdots, 2)$，权值 $w_i \equiv 1$，则

$$(\varphi_0, \varphi_0) = m + 1 = 5, \quad (\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=0}^{5} x_i = 2.5, \quad (\varphi_0, \varphi_2) = \sum_{i=0}^{5} x_i^2 = 1.875$$

$$(\varphi_1, \varphi_0) = \sum_{i=0}^{5} x_i = 2.5, \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=0}^{5} x_i^2 = 1.875, \quad (\varphi_1, \varphi_2) = \sum_{i=0}^{5} x_i^3 = 1.5625$$

$$(\varphi_2, \varphi_0) = \sum_{i=0}^{5} x_i^2 = 1.875, \quad (\varphi_2, \varphi_1) = \sum_{i=0}^{5} x_i^3 = 1.5625, \quad (\varphi_2, \varphi_2) = \sum_{i=0}^{5} x_i^4 = 1.3828125$$

求解最小二乘逼近函数

$$d_k \triangleq (f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i)\varphi_j(x_i)$$

例 6（续）

给定数据如下表，求 $f(x)$ 的二次最小二乘拟合多项式.

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

$$d_0 = (f, \varphi_0) = \sum_{i=0}^{5} y_i = 8.768$$

$$d_1 = (f, \varphi_1) = \sum_{i=0}^{5} y_i x_i = 5.4514, \qquad d_2 = (f, \varphi_2) = \sum_{i=0}^{5} y_i x_i^2 = 4.4015375$$

- 法方程为

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828125 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.768 \\ 5.4514 \\ 4.4015375 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1.0051 \\ 0.8642 \\ 0.8437 \end{bmatrix}$$

- 故 $f(x)$ 的二次最小二乘拟合多项式为

$$p_2(x) = 1.0051 + 0.8642x + 0.8437x^2$$

3. 曲线拟合的最小二乘法

求解最小二乘逼近函数

方法 2： 用正交多项式作最小二乘拟合

定义：带权正交（离散情况）

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

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

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

若 $\varphi_k(x)$ 是首项系数非零的 k 次多项式，则为离散正交多项式族。

求解最小二乘逼近函数

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

方法 2： 用正交多项式作最小二乘拟合

- 设 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 是关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 带权 $\{w_i\}_{i=0}^{m}$ 正交多项式
- ⇨ 法方程 $\sum_{j=0}^{n}(\varphi_k,\varphi_j)a_j=(f,\varphi_k)$ 可化简为

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

- ⇨ $a_k=\dfrac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}$
- 故最小二乘逼近多项式为

$$p_n^*(x)=\sum_{j=0}^{n}\frac{(f,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)}\varphi_j(x)$$

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

构造带权正交多项式的方法

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

- 三项递推公式

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1, \qquad \varphi_1(x) = x - \alpha_0, \\ \varphi_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)\varphi_k(x) - \beta_k \varphi_{k-1}(x), \qquad k = 1, 2, \cdots, n \end{cases}$$

$$\alpha_k = \frac{(x\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}, \qquad k = 0, 1, \cdots, n-1$$

$$\beta_k = \frac{(\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})}, \qquad k = 1, 2, \cdots, n-1$$

- 由上述方式构造的 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 带权 $\{w_i\}_{i=0}^m$ 正交

求解最小二乘逼近函数

$$(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=0}^{m}w_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i),\qquad (f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}w_if(x_i)\varphi_j(x_i)$$

例 7

给定数据如下表，求 $f(x)$ 的二次最小二乘拟合多项式.

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

- 根据三项递推公式求解正交多项式

$$\varphi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\varphi_k(x)-\beta_k\varphi_{k-1}(x)$$

$$(\varphi_0,\varphi_0)=m+1=5,\qquad (f,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{5}y_i=8.768,\qquad (x\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{5}x_i=2.5$$

$$\alpha_0=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=0.5\qquad\Rightarrow\qquad \varphi_1(x)=x-0.5$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{5}(x_i-0.5)^2=0.625,\qquad (f,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{5}y_i(x_i-0.5)=1.0674,\qquad (x\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{5}x_i(x_i-0.5)^2=0.3125$$

$$\beta_1=\frac{(\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=0.125,\qquad \alpha_1=\frac{(x\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=0.5\qquad\Rightarrow\qquad \varphi_2(x)=(x-0.5)^2-0.125$$

$$=x^2-x+0.125$$

求解最小二乘逼近函数

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

例 7（续）

给定数据如下表，求 $f(x)$ 的二次最小二乘拟合多项式.

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

- 根据三项递推公式求解正交多项式

$$\varphi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\varphi_k(x)-\beta_k\varphi_{k-1}(x)$$

$$(\varphi_2,\varphi_2)=\sum_{i=0}^{5}(x^2-x+0.125)^2=0.0546875,\qquad (f,\varphi_2)=\sum_{i=0}^{5} y_i(x^2-x+0.125)=0.0461375$$

$$a_0^*=\frac{(f,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=1.7536,\qquad a_1^*=\frac{(f,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=1.70784,\qquad a_2^*=\frac{(f,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)}=0.84365714$$

- 故 $p_2^*(x)=a_0^*\varphi_0(x)+a_1^*\varphi_1(x)+a_2^*\varphi_2(x)$

$$=1.7536+1.70784(x-0.5)+0.84365714(x^2-x+0.125)$$

$$\approx 1.0051+0.8642x+0.8437x^2$$

构造带权正交多项式的方法

- 正交多项式是目前为止多项式拟合的最好方法
  - 不需要解线性方程组，给定次数 n，可以根据三项递推公式方便地计算正交多项式
- Python 中的正交多项式最小二乘拟合函数（numpy.polyfit）

```
>>> import numpy as np

>>> x = np.array([0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0])
>>> y = np.array([1.0000, 1.2840, 1.6487, 2.1170, 2.7183])
>>> z = np.polyfit(x, y, 2)
>>> z
array([ 0.84365714, 0.86418286, 1.00513714])
```

课后习题

课后习题（11.19 课间将作业交给助教）

1. （教材第 78 页）习题 7、9、18、22

7. 求 $f(x)=e^x$ 在$[0,1]$上的最佳一次逼近多项式.

（求一次最佳一致逼近多项式）

9. 设 $f(x)=x^4+3x^3-1$，在$[0,1]$上求三次最佳逼近多项式.

（求三次最佳一致逼近多项式）

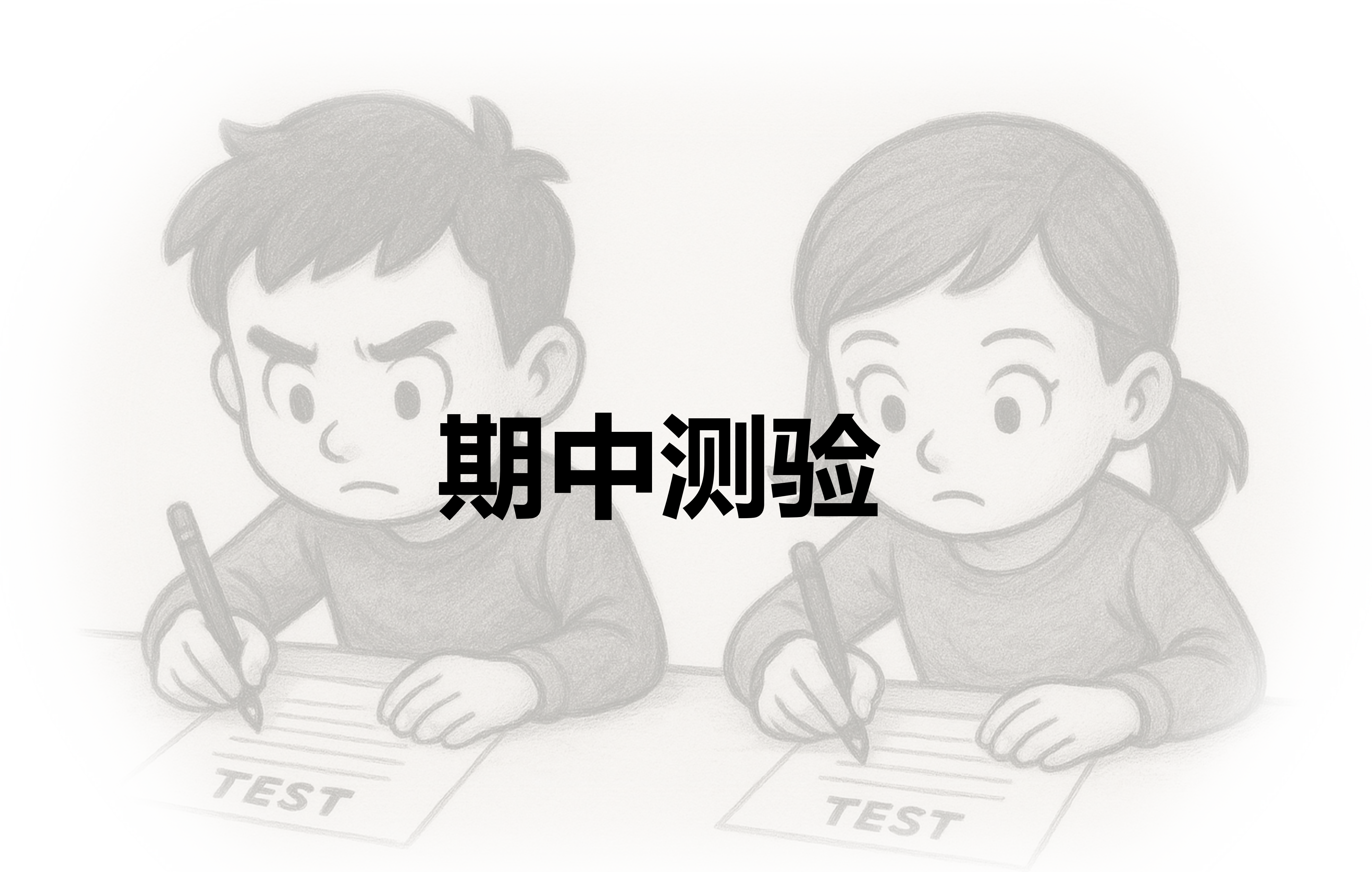
18. $f(x)=|x|$ 在$[-1,1]$上，求在 $\varphi_1=\mathrm{span}\{1,x^2,x^4\}$ 上的最佳平方逼近.

22. 用最小二乘法求一个形如 $y=a+bx^2$ 的经验公式，使它与表 3.6 所示数据相拟合，并求均方误差.

表 3.6

x_i	19	25	31	38	44
y_i	19.0	32.3	49.0	73.3	97.8

期中测验



关于期中测验的说明

- **时间：** 2025 年 11 月 19 日第二堂课（8:55~9:40）
- **地点：** 东上院 312
- **形式：** 随堂测验，开卷
- **考查内容**
  - 第 1~5 节所学内容（有效数字、浮点数、插值法、函数逼近）
- **要求**
  - 请自行准备作业本，用于提交作答结果
  - 允许携带纸质参考资料
  - 允许使用（非联网型）计算器
  - 禁止使用其他电子设备（手机、平板、电脑、智能手表等）