第三章　函数逼近与曲线拟合

1　函数逼近的基本概念

1.1　函数逼近与函数空间

本章讨论的函数逼近是指对于函数类A中给定函数$f(x)$, 要在另一类简单的便于计算的函数类B中求函数$p(x)$, 使得$p(x)$和$f(x)$的误差在某种度量下达到最小.

通常函数类A是指区间$[a,b]$上的连续函数, 记作$C[a,b]$, 称为连续函数空间. 函数类B通常为n次多项式, 有理函数或者分段低次多项式等.

数学上常把在各种集合中引入某些不同的确定关系称为赋予集合以某种空间结构, 并将这样的集合称为**空间**. 例如所有将所有实n维向量组成的集合, 按向量加法及向量与数的乘法构成实数域上的线性空间, 记作R^n, 称为n维向量空间.

对次数不超过n的实系数多项式全体, 按通常多项式与多项式加法及数与多项式乘法也构成数域R上一个线性空间, 记为H_n, 称为**多项式空间**. 所有定义在$[a,b]$上的连续函数集合，按函数加法和数与函数乘法构成数域R上的线性空间, 记作$C[a,b]$. 类似的, 记$C^p[a,b]$为具有p阶连续导数的函数空间.

定义1　设集合S是数域P上的线性空间, 元素$x_1,\dots,x_n\in S$, 如果存在不全为零的数$\alpha_1,\dots,\alpha_n\in P$, 使得

$$\alpha_1x_1+\cdots+\alpha_nx_n=0,$$

则称$x_1,\dots,x_n$**线性相关**. 否则, 若上式只对$\alpha_1=\cdots=\alpha_n=0$ 成立, 则称$x_1,\dots,x_n$**线性无关**.

若线性空间S是由n个线性无关的元素$x_1,\dots,x_n$生成的, 即对任意$x\in S$都有$x=\alpha_1x_1+\cdots+\alpha_nx_n$, 则$x_1,\dots,x_n$称为空间$S$的一组基, 记为$S=span\{x_1,\dots,x_n\}$, 并称空间$S$为$n$维空间, 系数$\alpha_1,\dots,\alpha_n$ 称为x在基$x_1,\dots,x_n$下的坐标, 记为$(\alpha_1,\dots,\alpha_n)$.

如果S中有无限个线性无关元素$x_1,\dots,x_n,\dots$, 则称S为无限维线性空间.

考察次数不超过n的实系数多项式集合H_n, 其元素$p(x)\in H_n$表示为

$$p(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n,$$

它由$n+1$个系数$(a_0,a_1,\dots,a_n)$唯一确定. $1,x,\dots,x^n$是线性无关的, 它是H_n 的一组基, 故$H_n=span\{1,x,\dots,x^n\}$, 且$(a_0,a_1,\dots,a_n)$是$p(x)$的坐标向量, H_n是$n+1$维的.

对连续函数$f(x)\in C[a,b]$, 它不能用有限个线性无关的函数表示, 故$C[a,b]$是无限维的, 但它的任一元素$f(x)$都可用有限维的$p(x)\in H_n$逼近, 使得误差$\max_{a\le x\le b}|f(x)-p(x)|<\varepsilon$($\varepsilon$是任给的小正数), 这就是著名的魏尔斯特拉斯定理.

更一般的, 可以用一组在$C[a,b]$上线性无关的函数集合$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^n$来逼近$f(x)\in C[a,b]$, 此时元素

$$\varphi(x)\in\Phi=span\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\dots,\varphi_n(x)\}\subset C[a,b]$$

可表示为

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

函数逼近问题就是对任意$f(x) \in C[a,b]$, 在子空间Φ中找一个元素$\varphi^*(x) \in \Phi$, 是$f(x) - \varphi^*(x)$在某种意义下最小.

1.2 范数与赋范线性空间

为了对线性空间中元素大小进行衡量, 需要引进范数定义, 它是R^n空间中向量长度概念的直接推广.

定义2 设S为线性空间, $x \in S$, 若存在唯一实数$\|\cdot\|$, 满足条件:

(1) $\|x\| \geq 0$, 当且仅当$x = 0$时, $\|x\| = 0$; (正定性)

(2) $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|, \ \alpha \in R$; (齐次性)

(3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \ x, y \in S$. (三角不等式)

则称$\|\cdot\|$为线性空间S上的**范数**, S与$\|\cdot\|$一起称为**赋范线性空间**, 记为X.

例如, 在R^n上的向量$x = (x_1, \ldots, x_n)^T \in R^n$, 三种常用的范数是

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|, \qquad \text{称为}\infty\text{范数或最大范数},$$

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \qquad \text{称为1-范数},$$

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \qquad \text{称为2-范数}.$$

实际上任何向量的实值函数, 只要满足上述三个条件, 就可以定义成一种向量范数. 所以说，范数是对向量长度的度量，度量方式不同，结果也不一样，但不同范数之间是存在等价关系的.

类似的, 对于连续函数空间$C[a,b]$, 若$f(x) \in C[a,b]$, 可定义三种常用的范数是

$$\|f\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|, \qquad \text{称为}\infty\text{范数},$$

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx, \qquad \text{称为1-范数},$$

$$\|f\|_2 = \left(\int_a^b f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}, \qquad \text{称为2-范数}.$$

1.3 内积与内积空间

在线性代数中, R^n上的两个向量$x = (x_1, \ldots, x_n)^T$和$y = (y_1, \ldots, y_n)^T$ 的内积定义为$(x, y) = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n$. 若将它推广到一般的线性空间$X$, 则有下面的定义

定义3 X是数域K(R或C)上的线性空间, 对任意$u, v \in X$, 有K 中一个数与之对应, 记为(u, v), 它满足以下条件:

(1) $(u,v)=\bar{(v,u)}$, $\forall u,v\in X$;

(2) $(\alpha u,v)=\alpha(u,v)$, $\forall\alpha\in K$, $u,v\in X$;

(3) $(u+v,w)=(u,w)+(v,w)$, $\forall u,v,w\in X$;

(4) $(u,u)\geq 0$, 当且仅当$u=0$时, $(u,u)=0$.

则称(u,v)为X上u与v的**内积**. 定义了内积的线性空间称为**内积空间**. 如果$(u,v)=0$, 则称u与v**正交**，这是向量相互垂直概念的推广.

定理1 设X为一个内积空间, 则$\forall u,v\in X$, 有

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

称为柯西-施瓦茨(Cauchu-Schwarz)不等式.

证明 $v=0$显然成立. 现设$v\neq 0$, 则$(v,v)>0$, 且对任意数λ有

$$0\leq(u+\lambda v,u+\lambda v)=(u,u)+2\lambda(u,v)+\lambda^2(v,v).$$

取$\lambda=-(u,v)/(v,v)$即得.

定理2 设X为一个内积空间, $u_1,\ldots,u_n\in X$, 矩阵

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

称为格拉姆(Gram)矩阵, 则G非奇异的充分必要条件是$u_1,\ldots,u_n$线性无关.

证明 $u_1,\ldots,u_n$线性无关等价于

$$\alpha_1u_1+\cdots+\alpha_nu_n=0$$

只有零解$\alpha_1=\cdots=\alpha_n=0$. 再注意到

$$\sum_{j=1}^n\alpha_ju_j=0\Leftrightarrow(\sum_{j=1}^n\alpha_ju_j,u_k)=0,\quad k=1,2,\ldots,n.$$

上式等价于$G[\alpha_1,\ldots,\alpha_n]^T=0$. 因此$u_1,\ldots,u_n$线性无关等价于$G$非奇异.

在内积空间X上可以由内积导出一种范数, 即对于$u\in X$, 记

$$\|u\|=\sqrt{(u,u)},$$

则容易验证$\|u\|$是一个范数.

例1 设$x=(x_1,\ldots,x_n)^T$和$y=(y_1,\ldots,y_n)^T\in R^n$, 则其内积定义为$(x,y)=x_1y_1+\cdots+x_ny_n$. 由此导出的范数就是向量的2-范数. 若给定实数$\omega_i>0(i=1,2,\ldots,n)$, 称$\{\omega_i\}$为权系数, 则在$R^n$ 上可定义**加权内积**为

$$(x,y)=\omega_1x_1y_1+\cdots+\omega_nx_ny_n,$$

对应的范数为

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

如果$x, y \in C^n$, 带权内积定义为

$$(x, y) = \omega_1 x_1 \bar{y}_1 + \cdots + \omega_n x_n \bar{y}_n,$$

这里ω_i仍然是正实数.

在$C[a,b]$上可以类似定义带权内积, 为此先给出权函数的定义.

定义4 设$[a,b]$是有限或无限区间，在$[a,b]$上的非负函数$\rho(x)$满足条件:

(1) $\int_a^b x^k \rho(x)dx$存在且为有限值$(k = 0, 1, \ldots)$;

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

则称$\rho(x)$为$[a,b]$上的一个**权函数**.

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

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

由此内积导出的范数为

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

称为带权$\rho(x)$的内积和范数.

若$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$是$C[a,b]$中的线性无关函数族, 记$\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$, 它的格拉姆矩阵为

$$G = G(\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n) = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix}.$$

由定理2可知$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$线性无关的充要条件是$\det(G) \neq 0$.

2 正交多项式

2.1 正交函数族与正交多项式

定义5 若$f(x), g(x) \in C[a,b]$, $\rho(x)$为$[a,b]$上的权函数, 且满足

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

则称$f(x)$与$g(x)$在$[a,b]$上带权$\rho(x)$**正交**. 若函数族$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x),\ldots$满足关系

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

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

例如, 三角函数族

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

就是区间$[-\pi,\pi]$上的正交函数族.

定义6 设$\varphi_n(x)$是$[a,b]$上首项系数不为零的n次多项式, $\rho(x)$为$[a,b]$上的权函数, 如果多项式序列$\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$满足上面的关系式, 则称多项式序列$\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$为在$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交, 称$\varphi_n(x)$为在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的$n$次正交多项式.

只要给定区间$[a,b]$及权函数$\rho(x)$, 均可由一组线性无关的幂函数$\{1,x,\ldots,x^n,\ldots\}$, 利用Gram-Schdmit正交化过程构造出正交多项式序列$\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$:

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

这样得到的正交多项式序列有如下性质:

(1) $\varphi_n(x)$是具有最高次项系数为1的n次多项式;

(2) 任何n次多项式$P_n(x)\in H_n$均可表示为$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$的线性组合;

(3)当$k\neq j$时, $(\varphi_j(x),\varphi_k(x))=0$, 且$\varphi_k(x)$与任一次数小于$k$ 的多项式正交;

(4) 成立递推关系式$\varphi_{n+1}(x)=(x-\alpha_n)\varphi_n(x)-\beta_n\varphi_{n-1}(x)$, 其中

$$\varphi_{-1}(x)=0,\quad \varphi_1(x)=1,$$

$$\alpha_n=(x\varphi_n(x),\varphi_n(x))/(\varphi_n(x),\varphi_n(x)),\quad \beta_n=(\varphi_n(x),\varphi_n(x))/(\varphi_{n-1}(x),\varphi_{n-1}(x)).$$

(5) 设$\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$是在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式序列, 则$\varphi_n(x)$的$n$个根都是在区间$(a,b)$内的单重实根.

2.2 勒让德Legendre多项式

当区间为$[-1,1]$, 权函数$\rho(x)=1$时, 由$\{1,x,\ldots,x^n,\ldots\}$正交化得到的多项式就称为**勒让德Legendre多项式**, 并且用$P_n(x)$来表示. 另一种简单的表达式为

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\{(x^2-1)^n\}.$$

容易计算出$P_n(x)$的首项x^n的系数为$a_n=\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$. 显然最高项系数为1的勒让德多项式为

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

勒让德多项式具有如下性质:

(1) 正交性:

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

(2) 奇偶性:

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

(3) 递推关系:

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x).$$

由$P_0(x) = 1, P_1(x) = x$, 利用上面的递推关系式可得

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

(4) $P_n(x)$在区间$[-1,1]$内有n个不同的实零点.

2.3 切比雪夫Chebyshev多项式

当区间为$[-1,1]$, 权函数$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$时, 由$\{1, x, \ldots, x^n, \ldots\}$正交化得到的多项式就称为**切比雪夫Chebyshev多项式**, 可以表示为

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

若令$x = \cos\theta$, 则$T_n(x) = \cos n\theta, 0 \leq \theta \leq \pi$. 它有如下性质:

(1) 递推关系

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

利用上面的递推关系式可计算出

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

还可以得到$T_n(x)$的最高次项x^n的系数是2^{n-1}.

(2) 切比雪夫多项式在区间[-1,1]上带权$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交, 且

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

(3) $T_{2k}(x)$只含有x的偶数次幂, $T_{2k+1}(x)$只含有x的奇数次幂.
(4) $T_n(x)$在区间[-1,1]上有n个零点$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi$.
(5) x^n可以表示为$T_0(x),T_1(x),\ldots,T_n(x)$的线性组合如下:

$$x^n=2^{1-n}\sum_{k=0}^{[n/2]}\binom{n}{k}T_{n-2k}(x).$$

2.4 第二类切比雪夫多项式

区间$[-1,1]$上带权$\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$的正交多项式就称为**第二类切比雪夫Chebyshev多项式**, 可以表示为

$$U_n(x)=\frac{\sin((n+1)\arccos x)}{\sqrt{1-x^2}},\qquad |x|\le 1.$$

它们的正交关系为

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

其递推关系式为

$$U_0(x)=1,\quad U_1(x)=2x,\quad U_{n+1}(x)=2xU_n(x)-U_{n-1}(x).$$

2.5 拉盖尔Laguerre多项式

区间$[0,+\infty]$上带权$\rho(x)=e^{-x}$的正交多项式就称为**拉盖尔Laguerre多项式**, 其表达式为

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

它们的正交关系为

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

其递推关系式为

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

2.6 埃尔米特Hermite多项式

区间$[-\infty,+\infty]$上带权$\rho(x)=e^{-x^2}$的正交多项式就称为**埃尔米特Hermite多项式**, 可以表示为

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

它们的正交关系为

$$\int_{-1}^{1}e^{-x^2}H_n(x)H_m(x)dx=\begin{cases}0, & n\neq m;\\ 2^nn!\sqrt{\pi}, & n=m.\end{cases}$$

其递推关系式为

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

3 最佳一致逼近多项式

定义7 设$P_n(x)\in H_n$, $f(x)\in C[a,b]$, 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.

定义8 假定$f(x)\in C[a,b]$, 若存在$P_n^*(x)\in H_n$使得

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

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

可以证明最佳一致逼近多项式一定存在.

定义9 假定$f(x)\in C[a,b]$, $P_n(x)\in H_n$, 若在$x=x_0$上有

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

则称x_0是$P_n(x)$的**偏差点**. 若$P_n(x_0)-f(x_0)=\mu$, 则称x_0是**正偏差点**; 若$P_n(x_0)-f(x_0)=-\mu$, 则称x_0是**负偏差点**.

定理4 $P(x)\in H_n$是$f(x)\in C[a,b]$的最佳逼近多项式的充分必要条件是$P(x)$在$[a,b]$上至少有$n+2$个轮流为"正""负"的偏差点, 即有$n+2$个点$a\le x_1<x_2<\cdots<x_{n+2}\le b$, 使得

$$P(x_k)-f(x_k)=(-1)^k\sigma\|P(x)-f(x)\|_\infty,\quad \sigma=\pm1,$$

这样的点组称为**切比雪夫交错点组**.

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

定理5 在区间[-1,1]上所有最高次项系数为1的n次多项式中, $\omega_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$与零的偏差最小, 其偏差为$\frac{1}{2^{n-1}}$.

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

$$\max_{-1\le x\le 1}|\omega_n(x)|=\frac{1}{2^{n-1}}\max_{-1\le x\le 1}|T_n(x)|=\frac{1}{2^{n-1}},$$

且点$x_k=\cos\frac{k\pi}{n}(k=0,1,\dots,n)$是$T_n(x)$的切比雪夫交错点组. 由定理4可知区间[-1,1]上x^n在H_{n-1}中最佳逼近多项式为$P_{n-1}^*(x)$, 即$\omega_n(x)$是与零的偏差最小的多项式.

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

解 由定理5可知, 要求的最佳逼近多项式$P_2^*(x)$应满足

$$f(x)-P_2^*(x)=\frac{1}{2}T_3(x)=2x^3-\frac{3}{2}x,$$

因此就有$P_2^*(x)=f(x)-\frac{1}{2}T_3(x)=x^2+\frac{7}{2}x-1$.

3.1 最佳一次逼近多项式

假定$f(x) \in C^2[a,b]$, 且$f''(x)$**在(a,b)内不变号**, 我们要求$f(x)$在$[a,b]$ 上的最佳一次逼近多项式$P_1(x) = a_0 + a_1 x$.

由定理4可知至少存在3个点$a \le x_1 < x_2 < x_3 \le b$, 使得

$$P_1(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \|P_1(x) - f(x)\|_\infty, \quad \sigma = \pm 1, k = 1, 2, 3.$$

根据假设, $f''(x)$在(a,b)内不变号, 即$f'(x)$单调, 从而$f'(x) - a_1 (= f'(x) - P_1'(x))$ 也是单调的, 在(a,b)内最多只有一个零点. 因此x_2就是这个零点, 即$f'(x_2) - a_1 = 0$, 而$x_1 = a, x_3 = b$, 而且满足

$$P_1(a) - f(a) = P_1(b) - f(b) = f(x_2) - P_1(x_2).$$

由此可得关于a_0, a_1和x_2的三个方程

$$\begin{aligned}
&a_0 + a_1 a - f(a) = a_0 + a_1 b - f(b),\\
&a_0 + a_1 a - f(a) = f(x_2) - a_0 - a_1 x_2,\\
&f'(x_2) = a_1.
\end{aligned}$$

由第一个方程可解得

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

然后由第三个方程可解得x_2, 再代入第二个方程可解出a_0. 从而可计算出$P_1(x) = a_0 + a_1 x$.

例4 求$f(x) = \sqrt{1 + x^2}$在[0,1]上的最佳一次逼近多项式.

解 在这个例子中$a = 0, b = 1$, 因此就有

$$a_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} = \sqrt{2} - 1 \approx 0.414.$$

由方程$f'(x_2) = a_1$可得$\frac{x_2}{\sqrt{1+x_2^2}} = \sqrt{2} - 1$, 解得

$$x_2 = \sqrt{\frac{\sqrt{2} - 1}{2}} \approx 0.4551.$$

再由方程$a_0 + a_1 a - f(a) = f(x_2) - a_0 - a_1 x_2$可解出

$$a_0 = \frac{1 + f(x_2)}{2} - a_1 \frac{x_2}{2} \approx 0.955.$$

因此可得$\sqrt{1 + x^2}$的最佳一次逼近多项式为

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

注: 若令$x = b/a \le 1$, 则可得一个近似公式:

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

4 最佳平方逼近

对于$f(x) \in C[a,b]$及$C[a,b]$上的一个子集$\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$, 若存在$S^*(x) \in \Phi$, 使得

$$\|f(x) - S^*(x)\|_2^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \|f(x) - S(x)\|_2^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \int_a^b \rho(x)(f(x) - S(x))^2 dx,$$

则称$S^*(x)$是$f(x)$在子集Φ中的**最佳平方逼近函数**.

求最佳平方逼近函数等价于求

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

的最小值. 由于$I(a_0, a_1, \ldots, a_n)$是关于$a_0, a_1, \ldots, a_n$的二次函数, 利用多元函数求极值的必要条件

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

即

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

于是就有

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k(x), \varphi_j(x))a_j = (f(x), \varphi_k(x)).$$

这是关于$a_0, a_1, \ldots, a_n$的线性方程组, 称为**法方程**. 由于$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$线性无关, 故系数矩阵非奇异, 从而法方程有唯一解$a_k = a_k^*$, 从而可得到

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

下面证明这样的$S^*(x)$就是所求, 即对任意$S(x) \in \Phi$, 有

$$\|f(x) - S^*(x)\|_2^2 \le \|f(x) - S(x)\|_2^2.$$

注意到

$$\begin{aligned}\|f(x) - S(x)\|_2^2 - \|f(x) - S^*(x)\|_2^2 &= \|S^*(x) - S(x)\|_2^2 + 2(S^*(x) - S(x), f(x) - S^*(x)) \\ &= \|S^*(x) - S(x)\|_2^2 \ge 0,\end{aligned}$$

这说明$S^*(x)$确实是要求的最佳平方逼近函数.

若令$\delta(x) = f(x) - S^*(x)$, 则平方误差为

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

若取$\varphi_k(x) = x^k, \rho(x) = 1$, 要在$H_n$中求给定$f(x)$的$n$次最佳平方逼近多项式

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

此时

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

若用H表示$G(1,x,\ldots,x^n)$对应的格雷姆矩阵, 即

$$H=\begin{bmatrix}1 & 1/2 & \ldots & 1/(n+1)\\ 1/2 & 1/3 & \ldots & 1/(n+2)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \ldots & 1/(2n+1)\end{bmatrix}=(\frac{1}{i+j-1})_{(n+1)\times(n+1)},$$

称为希尔伯特Hilbert矩阵. 记$a=(a_0,a_1,\ldots,a_n)^T, d=(d_0,d_1,\ldots,d_n)^T$, 则由方程组$Ha=d$解出的解$a^*$即为所求.

例5 设$f(x)=\sqrt{1+x^2}$, 求[0,1]上的一次最佳平方逼近多项式.

解 利用前面的结论可得

$$d_0=\int_0^1\sqrt{1+x^2}dx=\frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2})+\frac{\sqrt{2}}{2}\approx 1.147,$$
$$d_1=\int_0^1 x\sqrt{1+x^2}dx=\frac{1}{3}(1+x^2)^{3/2}\Big|_0^1=\frac{2\sqrt{2}-1}{3}\approx 0.609,$$

由此可得方程组

$$\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ 1/2 & 1/3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.147\\ 0.609\end{bmatrix},$$

由此解得$a_0=0.934, a_1=0.426$, 因此所求的一次最佳平方逼近多项式为

$$S_1^*(x)=0.934+0.426x.$$

用$\{1,x,\ldots,x^n\}$做基来找最佳平方逼近多项式, 当n比较大时, 对应的系数矩阵Hilbert矩阵H是高度病态的. 可以采用正交多项式做基来解决这个问题.

4.1 用正交函数族做最佳平方逼近

设$f(x)\in C[a,b]$, $\Phi=span\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$, 若$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$是正交函数族, 则对于$i\neq j$, $(\varphi_i(x),\varphi_j(x))=0$, 而$(\varphi_j(x),\varphi_j(x))>0$, 因此法方程里的系数矩阵$G$是非奇异对角矩阵, 从而可得到解为:

$$a_k^*=(f(x),\varphi_k(x))/(\varphi_k(x),\varphi_k(x)),$$

于是$f(x)$在Φ中的最佳平方逼近函数为

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

平方误差为

$$\|\delta_n(x)\|_2^2 = \|f(x) - S_n^*(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{(f(x), \varphi_k(x))}{\|\varphi_k(x)\|_2} \right)^2.$$

下面考虑$f(x) \in C[-1,1]$, 按勒让德多项式$\{P_n(x)\}$展开, 可得

$$S_n^*(x) = a_0^* P_0(x) + a_1^* P_1(x) + \cdots + a_n^* P_n(x),$$

其中

$$a_k^* = \frac{(f(x), P_k(x))}{(P_k(x), P_k(x))} = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^{1} f(x) P_k(x) dx.$$

平方误差为

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

定理6 在所有最高次项系数为1的n次多项式中, 勒让德多项式$\tilde{P}_n(x)$ 在[-1,1]上与零的平方误差最小.

证明 设$Q_n(x)$是任意一个最高次项系数为1的n次多项式, 它可以表示为

$$Q_n(x) = \tilde{P}_n(x) + \sum_{k=0}^{n-1} a_k \tilde{P}_k(x),$$

于是

$$\begin{aligned}
\|Q_n(x)\|_2^2 = (Q_n(x), Q_n(x)) &= \int_{-1}^{1} Q_n^2(x) dx \\
&= (\tilde{P}_n(x), \tilde{P}_n(x)) + \sum_{k=0}^{n-1} a_k^2 (\tilde{P}_k(x), \tilde{P}_k(x)) \geq (\tilde{P}_n(x), \tilde{P}_n(x)) = \|\tilde{P}_n(x)\|_2^2,
\end{aligned}$$

且等号当且仅当$a_0 = a_1 = \cdots = a_{n-1} = 0$时成立, 即当$Q_n(x) = \tilde{P}_n(x)$时平方误差最小.

例6 求$f(x) = e^x$在[-1,1]上的三次最佳平方逼近多项式.

解 计算可得

$$\begin{aligned}
(f(x), P_0(x)) &= \int_{-1}^{1} e^x dx = e - 1/e \approx 2.3504; \\
(f(x), P_1(x)) &= \int_{-1}^{1} x e^x dx = 2/e \approx 0.7358; \\
(f(x), P_2(x)) &= \int_{-1}^{1} \left(\frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2} \right) e^x dx = e - 7/e \approx 0.1431; \\
(f(x), P_3(x)) &= \int_{-1}^{1} \left(\frac{5}{2} x^3 - \frac{3}{2} x \right) e^x dx = 37/e - 5e \approx 0.02013.
\end{aligned}$$

由此解得

$$\begin{aligned}
a_0^* &= (f(x), P_0(x))/2 = 1.1752, \\
a_1^* &= 3(f(x), P_1(x))/2 = 1.1036, \\
a_2^* &= 5(f(x), P_2(x))/2 = 0.3578, \\
a_3^* &= 7(f(x), P_3(x))/2 = 0.07046.
\end{aligned}$$

由此可得所求的三次最佳平方逼近多项式为

$$\begin{aligned}S_3^*(x) &= 1.1752 + 1.1036x + 0.3578\left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}\right) + 0.07046\left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x\right) \\ &= 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3.\end{aligned}$$

如果$f(x) \in C[a,b]$, 要求$[a,b]$上的最佳平方逼近多项式, 可以利用变量替换

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2} \qquad (-1 \le t \le 1),$$

于是$F(t) = f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$在[-1,1]上可用勒让德多项式做最佳平方逼近多项式$S_n^*(t)$, 从而可以得到$f(x)$在$[a,b]$上的最佳平方逼近多项式$S_n^*(\frac{2x-a-b}{b-a})$.

5 曲线拟合的最小二乘法

在函数的最佳平方逼近中$f(x) \in C[a,b]$, 如果$f(x)$只在离散点集$\{x_i, i = 0, 1, \ldots, m\}$上给定, 这就是科学实验中常见到的实验数据$\{(x_i, y_i), i = 0, 1, \ldots, m\}$的曲线拟合, 这里$y_i = f(x_i)$. 给定一组线性无关函数族$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$, 要在$\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$中找一个函数

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

使得$\sum_{i=0}^{m}(S(x_i) - y_i)^2$达到最小, 这就是曲线拟合的**最小二乘问题**.

记

$$A = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_0(x_m) & \varphi_1(x_m) & \cdots & \varphi_n(x_m) \end{bmatrix}, \quad a = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix},$$

则最小二乘问题可以表示为求

$$\min_{a \in \mathbf{R}^n \|Aa-b\|_2^2}.$$

如果矩阵A列满秩, 则可以证明上述最小二乘问题的解唯一. 利用求导数的技巧可以得到最小二乘问题的解a^*是下列方程组的唯一解:

$$A^T A a^* = A^T b.$$

例7 已知一组实验数据如下, 求它的拟合直线.

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

解 设要求的拟合直线为$y=a_0+a_1x$, 则

$$A=\begin{bmatrix}1&1\\1&2\\1&3\\1&4\\1&5\end{bmatrix},\quad a=\begin{bmatrix}a_0\\a_1\end{bmatrix},\quad b=\begin{bmatrix}4\\4.5\\6\\8\\8.5\end{bmatrix}.$$

因此法方程$A^TAa=A^Tb$为

$$\begin{bmatrix}5&15\\15&55\end{bmatrix}a=\begin{bmatrix}31\\105.5\end{bmatrix},$$

由此解得$a=\begin{bmatrix}2.45\\1.25\end{bmatrix}$, 即所求的拟合直线为

$$y=2.45+1.25x.$$

例8 设数据(x_i,y_i)有下表给出, 数学模型为$y=ke^{px}$, 用最小二乘方法确定k,p.

解 把方程$y=ke^{px}$两边取对数可得$\ln y=\ln k+px$. 把数据(x_i,y_i) 先转化为$(x_i,\ln(y_i))$: 因

x_i	1	1.25	1.5	1.75	2
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46
$\ln(y_i)$	1.629	1.756	1.876	2.008	2.135

此就有

$$A=\begin{bmatrix}1&1\\1&1.25\\1&1.5\\1&1.75\\1&2\end{bmatrix},\quad a=\begin{bmatrix}\ln k\\p\end{bmatrix},\quad b=\begin{bmatrix}1.629\\1.756\\1.876\\2.008\\2.135\end{bmatrix}.$$

解法方程$A^TAa=A^Tb$可得$a=\begin{bmatrix}1.122\\0.505\end{bmatrix}$, $k=e^{1.122}=3.071$, 于是得到最小二乘拟合曲线为

$$y=3.071e^{0.505x}.$$

6 最佳平方三角逼近与快速傅立叶变换

6.1 最佳平方三角逼近与三角插值

设$f(x)$是以2π为周期的平方可积函数, 用三角多项式

$$S_n(x)=\frac{1}{2}a_0+a_1\cos x+b_1\sin x+\cdots+a_n\cos nx+b_n\sin nx$$

做最佳平方逼近函数, 由于三角函数族$1, \cos x, \sin x, \ldots, \cos kx, \sin kx, \cdots$在$[0, 2\pi]$上是正交函数族, 容易计算出$S_n(x)$的系数为

$$
\begin{aligned}
a_k &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\cos kx dx, \quad k = 0, 1, \ldots, n \\
b_k &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\sin kx dx, \quad k = 1, 2, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

a_k, b_k称为傅立叶系数. 这实际上就是傅立叶级数的有限项.

如果函数$f(x)$只在给定的离散点集$\{x_j = 2\pi j/N, j = 0, 1, \ldots, N-1\}$上已知时, 则可以得到离散点集的正交性和相应的离散傅立叶系数. 为方便起见, 我们假设$N = 2m+1$是奇数. 令

$$
x_j = \frac{2\pi j}{2m+1}, \qquad j = 0, 1, \ldots, 2m,
$$

可以证明对任意$0 \le k, l \le m$成立

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j=0}^{2m} \sin lx_j \sin kx_j = \begin{cases} 0, & l \ne k, l = k = 0; \\ \frac{2m+1}{2}, & l = k \ne 0, \end{cases} \\
&\sum_{j=0}^{2m} \cos lx_j \cos kx_j = \begin{cases} 0, & l \ne k; \\ \frac{2m+1}{2}, & l = k \ne 0; \\ 2m+1, & l = k = 0, \end{cases} \\
&\sum_{j=0}^{2m} \cos lx_j \sin kx_j = 0.
\end{aligned}
$$

这表明函数族$1, \cos x, \sin x, \ldots, \cos mx, \sin mx$在点集$x_j = \frac{2\pi j}{2m+1}$上正交. 若令$f_j = f(x_j), j = 0, 1, \ldots, 2m$, 则$f(x)$的最小二乘三角逼近为

$$
S_n(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{n}(a_k \cos kx + b_k \sin kx), \quad n < m,
$$

其中

$$
\begin{aligned}
a_k &= \frac{2}{2m+1}\sum_{j=0}^{2m} f_j \cos\frac{2\pi jk}{2m+1}, \quad k = 0, 1, \ldots, n \\
b_k &= \frac{2}{2m+1}\sum_{j=0}^{2m} f_j \sin\frac{2\pi jk}{2m+1}, \quad k = 1, 2, \ldots, n.
\end{aligned}
$$

当$n = m$时, 可以证明$S_m(x_j) = f_j, (j = 0, 1, \ldots, 2m)$. 于是

$$
S_m(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{m}(a_k \cos kx + b_k \sin kx)
$$

就是三角插值多项式.

更一般的情形, 假定$f(x)$是以2π为周期的复函数, 给定在N个等分点$\{x_j = 2\pi j/N, j = 0,1,\ldots,N-1\}$上的值$f_j = f(x_j)$, 由于

$$e^{ijx} = \cos(jx) + i\sin(jx),$$

函数族$1, e^{ix}, \ldots, e^{i(N-1)x}$在区间$[0,2\pi]$上是正交的. 函数$e^{ijx}$在等距点集$\{x_j = 2\pi j/N, j = 0,1,\ldots,N-1\}$ 上的值e^{ijx_k}组成的向量记作

$$\phi_j = (1, e^{ij\frac{2\pi}{N}}, \ldots, e^{ij\frac{2\pi}{N}(N-1)})^T.$$

可以证明这N个复向量$\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{N-1}$具有如下的正交性:

$$(\phi_l, \phi_s) = \sum_{k=0}^{N-1} e^{il\frac{2\pi}{N}k} e^{-is\frac{2\pi}{N}k} = \begin{cases} 0, & l \neq s; \\ N, & l = s. \end{cases}$$

因此$f(x)$在N个点$\{x_j = 2\pi j/N, j = 0,1,\ldots,N-1\}$上的最小二乘傅立叶逼近为

$$S(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k e^{ikx}, \qquad n \leq N,$$

其中

$$c_k = \frac{1}{N}\sum_{j=0}^{n-1} f_j e^{-ikj\frac{2\pi}{N}}, \quad k = 0,1,\ldots,n-1.$$

当$n = N$时, $S(x)$就是$f(x)$在x_j点的插值三角函数, 即$f(x_j) = S(x_j)$, 于是就有

$$f_j = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{ikj\frac{2\pi}{N}} \quad j = 0,1,\ldots,N-1.$$

上述由f_j计算c_k的过程, 称为$f(x)$的离散傅立叶变换(Discrete Fourier Transformation,DFT), 由c_k计算f_j的过程称为反变换.

6.2 快速傅立叶变换FFT

上述离散傅立叶变换或反变换都可以归结为: 已知复数序列$x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}$, 要计算

$$c_j = \sum_{k=0}^{N-1} x_k \omega^{kj}, \qquad j = 0,1,\ldots,N-1,$$

其中$\omega = e^{-i2\pi/N}$(正变换)或$\omega = e^{i2\pi/N}$(反变换), 都满足$\omega^N = 1$. 直接计算需要N^2次乘法和N^2次加法. 但实际上利用ω的特殊性质, 可以把运算量降到$O(N\log_2 N)$.

以$N=8$为例, 即

$$
\begin{aligned}
c_0 &= x_0 + x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7,\\
c_1 &= x_0 + x_1\omega + x_2\omega^2 + x_3\omega^3 + x_4\omega^4 + x_5\omega^5 + x_6\omega^6 + x_7\omega^7,\\
c_2 &= x_0 + x_1\omega^2 + x_2\omega^4 + x_3\omega^6 + x_4\omega^8 + x_5\omega^{10} + x_6\omega^{12} + x_7\omega^{14},\\
c_3 &= x_0 + x_1\omega^3 + x_2\omega^6 + x_3\omega^9 + x_4\omega^{12} + x_5\omega^{15} + x_6\omega^{18} + x_7\omega^{21},\\
c_4 &= x_0 + x_1\omega^4 + x_2\omega^8 + x_3\omega^{12} + x_4\omega^{16} + x_5\omega^{20} + x_6\omega^{24} + x_7\omega^{28},\\
c_5 &= x_0 + x_1\omega^5 + x_2\omega^{10} + x_3\omega^{15} + x_4\omega^{20} + x_5\omega^{25} + x_6\omega^{30} + x_7\omega^{35},\\
c_6 &= x_0 + x_1\omega^6 + x_2\omega^{12} + x_3\omega^{18} + x_4\omega^{24} + x_5\omega^{30} + x_6\omega^{36} + x_7\omega^{42},\\
c_7 &= x_0 + x_1\omega^7 + x_2\omega^{14} + x_3\omega^{21} + x_4\omega^{28} + x_5\omega^{35} + x_6\omega^{42} + x_7\omega^{49}.
\end{aligned}
$$

利用$\omega^8=1$, 上式可以改写为

$$
\begin{aligned}
c_0 &= x_0 + x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7,\\
c_1 &= x_0 + x_1\omega + x_2\omega^2 + x_3\omega^3 + x_4\omega^4 + x_5\omega^5 + x_6\omega^6 + x_7\omega^7,\\
c_2 &= x_0 + x_1\omega^2 + x_2\omega^4 + x_3\omega^6 + x_4 + x_5\omega^2 + x_6\omega^4 + x_7\omega^6,\\
c_3 &= x_0 + x_1\omega^3 + x_2\omega^6 + x_3\omega^1 + x_4\omega^4 + x_5\omega^7 + x_6\omega^2 + x_7\omega^5,\\
c_4 &= x_0 + x_1\omega^4 + x_2 + x_3\omega^4 + x_4 + x_5\omega^4 + x_6 + x_7\omega^4,\\
c_5 &= x_0 + x_1\omega^5 + x_2\omega^2 + x_3\omega^7 + x_4\omega^4 + x_5\omega + x_6\omega^6 + x_7\omega^3,\\
c_6 &= x_0 + x_1\omega^6 + x_2\omega^4 + x_3\omega^2 + x_4 + x_5\omega^6 + x_6\omega^4 + x_7\omega^2,\\
c_7 &= x_0 + x_1\omega^7 + x_2\omega^6 + x_3\omega^5 + x_4\omega^4 + x_5\omega^3 + x_6\omega^2 + x_7\omega^1.
\end{aligned}
$$

利用$\omega^4=-1$, 可以继续改写为

$$
\begin{aligned}
c_0 &= (x_0 + x_4) + (x_2 + x_6) + (x_1 + x_5) + (x_3 + x_7),\\
c_1 &= (x_0 - x_4) + (x_2 - x_6)\omega^2 + (x_1 - x_5)\omega + (x_3 - x_7)\omega^3,\\
c_2 &= (x_0 + x_4) - (x_2 + x_6) + (x_1 + x_5)\omega^2 - (x_3 + x_7)\omega^2,\\
c_3 &= (x_0 - x_4) - (x_2 - x_6)\omega^2 + (x_1 - x_5)\omega^3 + (x_3 - x_7)\omega,\\
c_4 &= (x_0 + x_4) + (x_2 + x_6) - (x_1 + x_5) - (x_3 + x_7),\\
c_5 &= (x_0 - x_4) + (x_2 - x_6)\omega^2 - (x_1 - x_5)\omega - (x_3 - x_7)\omega^3,\\
c_6 &= (x_0 + x_4) - (x_2 + x_6) - (x_1 + x_5)\omega^2 + (x_3 + x_7)\omega^2,\\
c_7 &= (x_0 - x_4) - (x_2 - x_6)\omega^2 - (x_1 - x_5)\omega^3 - (x_3 - x_7)\omega.
\end{aligned}
$$

因此c_j可以按照下面的步骤计算出:

$$\begin{aligned}
a_0 &= x_0 + x_4 & b_0 &= a_0 + a_2 & c_0 &= b_0 + b_4\\
a_1 &= x_0 - x_4 & b_1 &= a_1 + a_3\omega^2 & c_1 &= b_1 + b_5\omega\\
a_2 &= x_2 + x_6 & b_2 &= a_0 - a_2 & c_2 &= b_2 + b_6\omega^2\\
a_3 &= x_2 - x_6 & b_3 &= a_1 - a_3\omega^2 & c_3 &= b_3 + b_7\omega^3\\
a_4 &= x_1 + x_5 & b_4 &= a_4 + a_6 & c_4 &= b_0 - b_4\\
a_5 &= x_1 - x_5 & b_5 &= a_5 + a_7\omega^2 & c_5 &= b_1 - b_5\omega\\
a_6 &= x_3 + x_7 & b_6 &= a_4 - a_6 & c_6 &= b_2 - b_6\omega^2\\
a_7 &= x_3 - x_7 & b_7 &= a_5 - a_7\omega^2 & c_7 &= b_3 - b_7\omega^3
\end{aligned}$$

注意这里一共需要3(=$\log_2 N$)个步骤, 每个步骤需要4($= N/2$)乘法和8($= N$)个加法. 也就是说总的运算量为$\frac{3}{2}N\log_2 N$. 注意比较一下普通方法需要的运算量为$2N^2$.

7 有理逼近

7.1 有理逼近与连分式

当函数在某点附近无界时用多项式逼近效果很差, 用有理函数逼近则有比较好的效果. 有理函数逼近是指用形如

$$R_{nm}(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \frac{\sum_{k=0}^n a_k x^k}{\sum_{k=0}^m b_k x^k}$$

的函数逼近$f(x)$. 如果$\|f(x) - R_{nm}(x)\|_\infty$达到最小就是最佳有理一致逼近, 如果$\|f(x) - R_{nm}(x)\|_2$达到最小就是最佳有理平方逼近.

本节主要讨论利用函数的Taylor展开得到有理逼近函数的方法. 对$\ln(1+x)$做Taylor展开

$$\ln(1+x) = \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k-1}\frac{x^k}{k}, \quad x \in [-1,1].$$

去部分和

$$S_n(x) = \sum_{k=1}^{n}(-1)^{k-1}\frac{x^k}{k} \approx \ln(1+x).$$

另一方面利用辗转相除可以得到$\ln(1+x)$的一种连分式展开:

$$\begin{aligned}
\ln(1+x) &= \cfrac{x}{1+\cfrac{x}{2+\cfrac{x}{3+\cfrac{4x}{4+\cfrac{4x}{5+\cdots}}}}}\\
&= \frac{x}{1_+}\frac{x}{2_+}\frac{x}{3_+}\frac{4x}{4_+}\frac{4x}{5_+}\cdots.
\end{aligned}$$

取前几项, 可得

$$R_{11}(x)=\frac{2x}{2+x},\qquad R_{22}(x)=\frac{6x+3x^2}{6+6x+x^2},$$
$$R_{33}(x)=\frac{60x+60x^2+11x^3}{60+90x+36x^2+3x^3},$$
$$R_{44}(x)=\frac{420x+630x^2+260x^3+25x^4}{420+840x+540x^2+120x^3+6x^4}.$$

如果用同样多项的Taylor展开部分和$S_{2n}(x)$来逼近$\ln(1+x)$, 并计算$x=1$处的值$S_{2n}(1), R_{nn}(1)$, 结果如下:

n	$S_{2n}(1)$	$\lvert\ln 2-S_{2n}(1)\rvert$	$R_{nn}(1)$	$\lvert\ln 2-R_{nn}(1)\rvert$
1	0.50	0.19	0.667	0.026
2	0.58	0.11	0.69231	0.00084
3	0.617	0.076	0.693122	0.000025
4	0.634	0.058	0.69314642	0.00000076

可以看出$R_{44}(1)$的精度比$S_8(1)$高近10万倍, 而他们的计算量是相当的. 在计算机上计算有理函数值时可以转化为连分式, 这样能节省乘除法的计算次数.

例9 用辗转相除法把有理函数

$$R_{43}(x)=\frac{1511+1353x+381x^2+45x^3+2x^4}{409+157x+21x^2+x^3}$$

化为连分式.

解 利用辗转相除法逐步可得

$$R_{43}(x)=2x+3+\frac{4x^2+64x+284}{x^3+21x^2+157x+409}=2x+3+\frac{4}{x+5+\frac{6(x+9)}{x^2+16x+71}}$$
$$=2x+3+\frac{4}{x+5+\frac{6}{x+7+\frac{8}{x+9}}}=2x+3+\frac{4}{x+5}{}_{+}\frac{6}{x+7}{}_{+}\frac{8}{x+9}.$$

这样计算$R_{43}(x)$的值只需要3次除法, 1次乘法和7次加法. 直接计算则需要6次乘法, 1次除法和7次加法. 一般的, 都可以把一个有理函数转化为连分式, 利用连分式的乘除法运算只需要$\max(m,n)$次, 而直接用有理函数计算乘除法次数为$m+n$次.

7.2 帕德Padé逼近

设$f(x)$在$x=0$点的Taylor展开为

$$f(x)=\sum_{k=0}^{N}\frac{1}{k!}f^{(k)}(0)x^k+\frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!}x^{N+1},$$

它的部分和记作

$$P(x)=\sum_{k=0}^{N}\frac{1}{k!}f^{(k)}(0)x^k=\sum_{k=0}^{N}c_kx^k.$$

定义11 设$f \in C^{(N+1)}(-a,a), N=n+m$, 如果有理函数

$$R_{nm}(x)=\frac{a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n}{1+b_1x+\cdots+b_mx^m}=\frac{P_n(x)}{Q_m(x)},$$

其中$P_n(x), Q_m(x)$无公因式, 且满足条件

$$R_{nm}^{(k)}(0)=f^{(k)}(0), \qquad k=0,1,\ldots,N,$$

则称$R_{nm}(x)$为函数$f(x)$在$x=0$处的(n,m)阶**帕德Padé逼近**.

根据定义, 若令$h(x)=P(x)Q_m(x)-P_n(x)$, 则上述条件等价于

$$h^{(k)}(0)=0, \qquad k=0,1,\ldots,N,$$

即

$$h^{(k)}(0)=k!\sum_{j=0}^{k}c_jb_{k-j}-k!a_k=0, \quad k=0,1,\ldots,N,$$

这里$c_j=f^{(j)}(0)/j!$. 对于$k=n+1,\ldots,N=(n+m)$, 上面的线性方程组就是

$$-\sum_{j=0}^{k-1}c_jb_{k-j}=c_k, \quad k=n+1,\ldots,n+m,$$

由这m个方程可以解出$b_1,\ldots,b_m$. 然后对于$k=0,1,\ldots,n$, 可以由

$$a_k=\sum_{j=0}^{k-1}c_jb_{k-j}+c_k, \quad k=0,1,\ldots,n$$

解出$a_0,a_1,\ldots,a_n$. 这样就得到了帕德逼近函数$R_{nm}(x)$.

例10 求$f(x)=\ln(1+x)$的帕德逼近$R_{22}(x), R_{33}(x)$.

解: 由$\ln(1+x)$的Taylor展开

$$\ln(1+x)=x-\frac{1}{2}x^2+\frac{1}{3}x^3-\frac{1}{4}x^4+\cdots$$

可得$c_0=0, c_1=1, c_2=-1/2, c_3=1/3, c_4=-1/4,\cdots$. 当$n=m=2$时, 关于$b_1,b_2$ 的线性方程组为

$$-b_2+b_1/2=1/3,$$
$$b_2/2-b_1/3=-1/4.$$

由此解得$b_1=1, b_2=1/6$. 然后可计算得到$a_0=0, a_1=1, a_2=1/2$, 于是得到

$$R_{22}(x)=\frac{x+\frac{1}{2}x^2}{1+x+\frac{1}{6}x^2}=\frac{6x+3x^2}{6+6x+x^2}.$$

类似可求得

$$R_{33}(x)=\frac{x+x^2+\frac{11}{60}x^3}{1+\frac{3}{2}x+\frac{3}{5}x^2+\frac{1}{20}x^3}=\frac{60x+60x^2+11x^3}{60+90x+36x^2+3x^3}.$$