# 正交函数族在逼近中的应用

董波
数学科学学院
大连理工大学

# 正交函数

向量（离散）内积：

（1）$(f,f)\geq 0$，$(f,f)=0 \Leftrightarrow f\equiv 0$

（2）$(f,g)=(g,f)$;

（3）$(\lambda f,g)=\lambda\cdot(f,g)$;

（4）$(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$。

向量正交（垂直）：

$$f=(f_1,f_2,\dots,f_n),$$
$$g=(g_1,g_2,\dots,g_n)$$

$$f\perp g \Leftrightarrow (f,g)=0$$

连续函数内积：

(1) $(f,f)\geq 0,(f,f)=0 \Leftrightarrow f\equiv 0$

(2) $(f,g)=(g,f)$;

(3) $(\lambda f,g)=\lambda\cdot(f,g)$;

(4) $(f+g,h)=(f,h)+(g,h)$

$f(x)$ 和 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交

$$(f,g)=0$$

# 连续型内积

**连续型内积**

对于$[a,b]$上的连续函数 $f(x)$, $g(x)$，定义连续型内积：

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

其中可积函数$\rho(x)\geqslant 0$（$x\in[a,b]$）是权函数。

# 正交多项式系

Schmidt正交化构造正交多项式

特别取多项式系 $1, x, \cdots, x^n, \cdots$ 进行正交化即得正交多项式系：令

$$\mu_m = \int_a^b \rho(x) \cdot x^m dx, \quad m = 0, 1, \cdots;$$

取

$$\phi_0(x) = 1, \; \phi_i(x) = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{i-1} & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_i & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i-1} & x^i \end{vmatrix} \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

则 $\phi_0(x), \phi_i(x), \quad i = 1, 2, \cdots$ 构成正交多项式系。

# 标准正交多项式系

令

$$\Delta_i = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_i \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_{i+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i} \end{vmatrix}, \qquad i = 0,1,\dots$$

$$\begin{cases} \psi_0(x) = \dfrac{\phi_0(x)}{\sqrt{(\phi_0,\phi_0)}} = \dfrac{1}{\sqrt{\Delta_0}}, \\ \psi_i(x) = \dfrac{\phi_i(x)}{\sqrt{(\phi_i,\phi_i)}} = \dfrac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}, \quad i = 0,1,\dots \end{cases}$$

则 $\psi_0(x),\psi_1(x),\dots,\psi_n(x)$成为标准正交多项式系

# Chebyshev多项式

例 令 $T_0(x)=1,\ T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad x\in[-1,1]$ 称 $T_n(x)$ 为$n$次Chebyshev多项式.

$$T_1(x)=x,$$

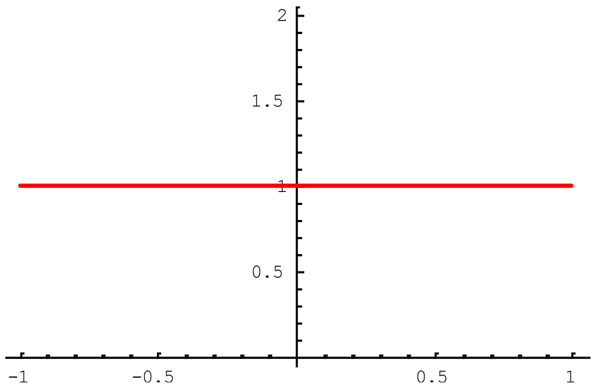
$$T_2(x)=2x^2-1,$$

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

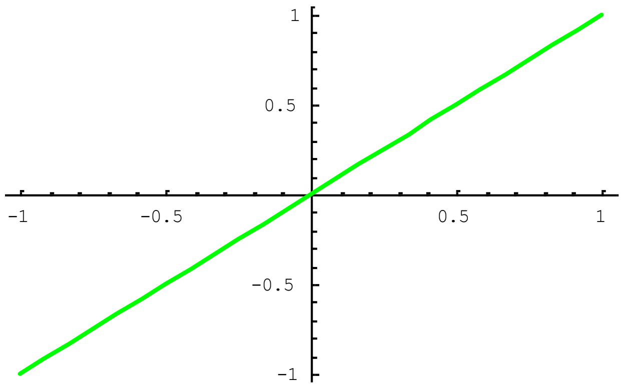
$$T_4(x)=8x^4-8x^2+1,$$

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

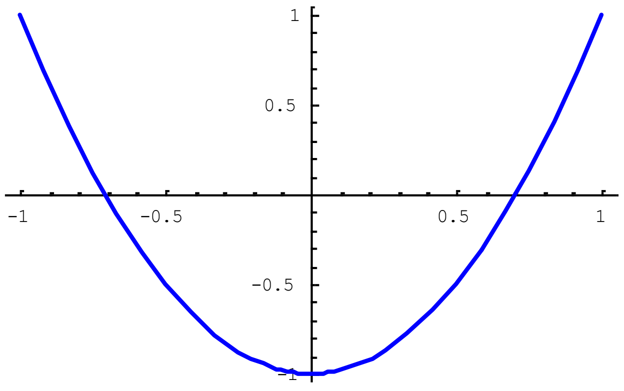
# Chebyshev多项式图像



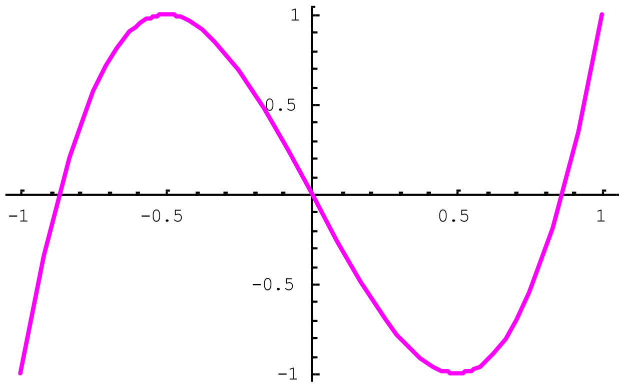

$$T_0(x)=1,$$

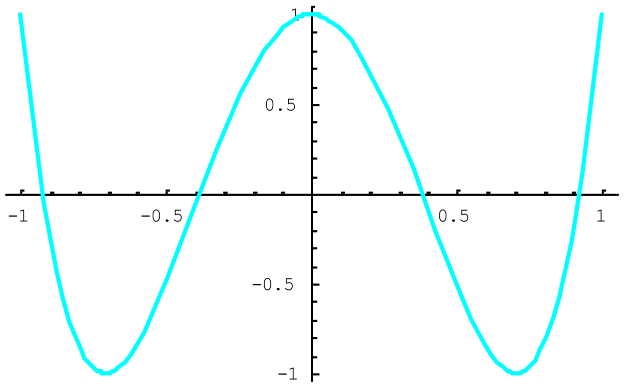


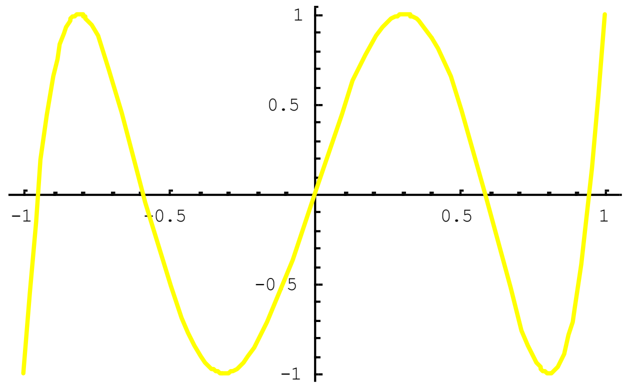

$$T_1(x)=x,$$




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




$$T_3(x)=4x^3-3x,\quad T_4(x)=8x^4-8x^2+1,\quad T_5(x)=16x^5-20x^3+5x,$$

# Chebyshev多项式性质

由三角恒等式 $\cos(n+1)\theta+\cos(n-1)\theta=2\cos n\theta\cdot\cos\theta,$

得三项递推式 $T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x),\quad n=1,2,\ldots$

$T_n(x)$ 是$n$次多项式，其零点落在(-1,1)中

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi,\quad k=1,2,\ldots,n$$

$T_n(x)$ 是[-1,1] 上以 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 为权函数的正交多项式系

$$\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}T_i(x)T_j(x)dx=0,\quad i\neq j$$

$\tilde{T}_n(x)=\dfrac{1}{2^{n-1}}T_n(x)\,(n\geq 1)$ 首项系数为1的n次Chebyshev多项式系

# 例题

例 求 $[-1,1]$上关于 $\rho(x)=1$ 二次正交多项式族。

解 取 $\mu_0=\int_{-1}^{1} 1\,dx=2$

$$\mu_1=\int_{-1}^{1} x^1\,dx=0 \qquad \mu_2=\int_{-1}^{1} x^2\,dx=\frac{2}{3} \qquad \mu_3=\int_{-1}^{1} x^3\,dx=0$$

$$\phi_0(x)=1 \qquad \phi_1(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & 1\\ \mu_1 & x\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}2 & 1\\ 0 & x\end{vmatrix}=2x$$

$$\phi_2(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & \mu_1 & 1\\ \mu_1 & \mu_2 & x\\ \mu_2 & \mu_3 & x^2\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}2 & 0 & 1\\ 0 & \frac{2}{3} & x\\ \frac{2}{3} & 0 & x^2\end{vmatrix}=\frac{4}{3}x^2-\frac{4}{9}=\frac{4}{9}\left(3x^2-1\right)$$

# 练习

例　求 $[0,1]$ 上关于 $\rho(x)=x$ 二次正交多项式族。

# Legendre多项式

[-1,1] 上以$\rho(x)=1$为权函数的正交多项式系为Legendre多项式

$n$次Legendre多项式的一般表达式为

$$L_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\cdot\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n],\quad n=0,1,2,\ldots$$

$$L_0(x)=1,\qquad L_1(x)=x,\quad L_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),$$

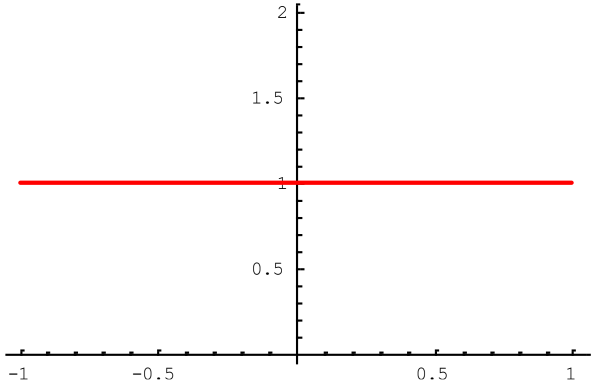
$$L_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x),\quad L_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3),$$

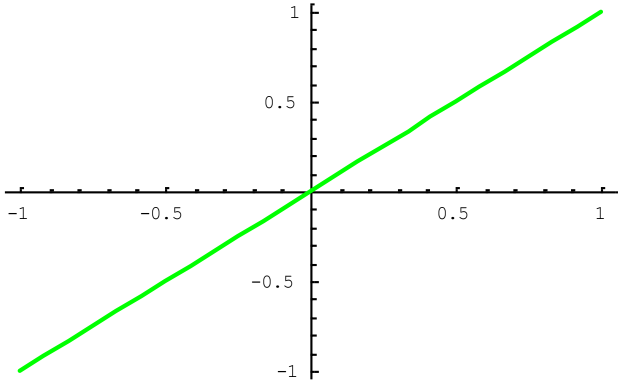
$$L_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x),$$

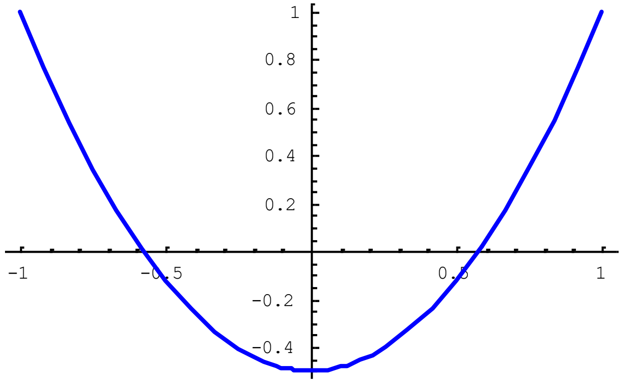
三项递推式

$$L_n(x)=\frac{2n-1}{n}xL_{n-1}(x)-\frac{n-1}{n}L_{n-2}(x),\quad n=2,3,\ldots$$

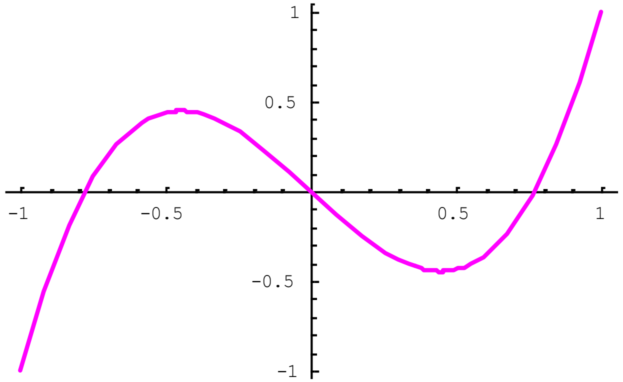
# Legendre多项式图像

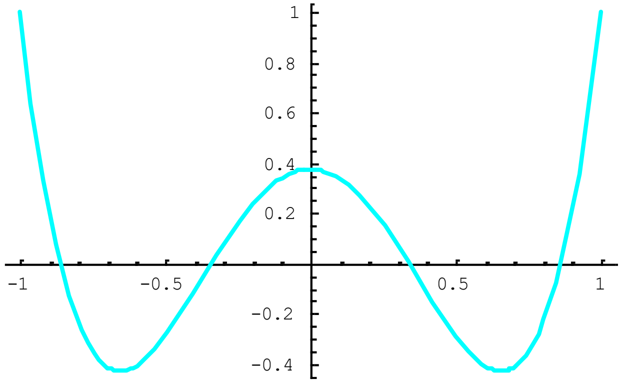


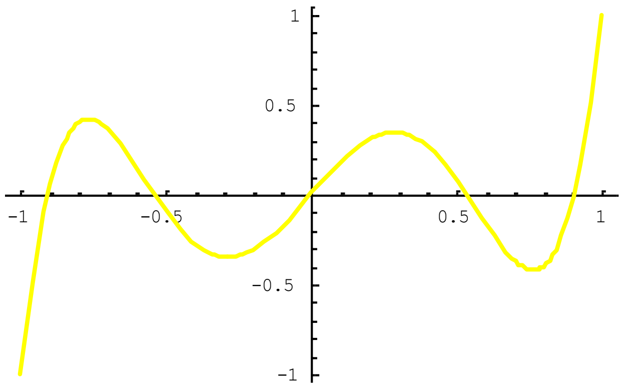




$$L_0(x)=1, \qquad L_1(x)=x, \qquad L_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1),$$




$$L_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x), \quad L_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3), \quad L_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x),$$

# 例题

例 求 $[-1,1]$上关于 $\rho(x)=|x|$ 二次正交多项式族。

解　取 $\mu_0=\int_{-1}^{1}|x|\,dx=1$

$$\mu_1=\int_{-1}^{1}|x|\cdot x^1\,dx=0 \quad \mu_2=\int_{-1}^{1}|x|\cdot x^2\,dx=\frac{1}{2} \quad \mu_3=\int_{-1}^{1}|x|\cdot x^3\,dx=0$$

$$\phi_0(x)=1 \qquad \phi_1(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & 1\\ \mu_1 & x\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 1\\ 0 & x\end{vmatrix}=x$$

$$\phi_2(x)=\begin{vmatrix}\mu_0 & \mu_1 & 1\\ \mu_1 & \mu_2 & x\\ \mu_2 & \mu_3 & x^2\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & \frac{1}{2} & x\\ \frac{1}{2} & 0 & x^2\end{vmatrix}=\frac{1}{2}x^2-\frac{1}{4}=\frac{1}{4}\left(2x^2-1\right)$$

# 正交多项式的一些重要性质

性质 1　$\phi_n(x)$恰好是$n$次多项式，$\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ 是 $\mathbf{P}_n$ 的一组基底函数。

性质 2　$\phi_n(x)$与次数低于 $n$ 次的所有多项式正交。

性质 3　$\phi_n(x)$ 在$(a, b)$内恰有 $n$个互异零点。

性质2和性质3是构造Gauss型求积公式的重要依据

# 数据拟合的最小二乘法

假设有变量 $x, y$ 的一组数据

$$(x_i, y_i) \qquad (i = 0, 1, \cdots, m)$$

这些数据往往带有随机的误差，如果利用这些数据按插值法求函数关系

$$y = f(x)$$

的近似表达式，必然将误差带入函数关系式中，甚至可能得到与实际不符的结果。

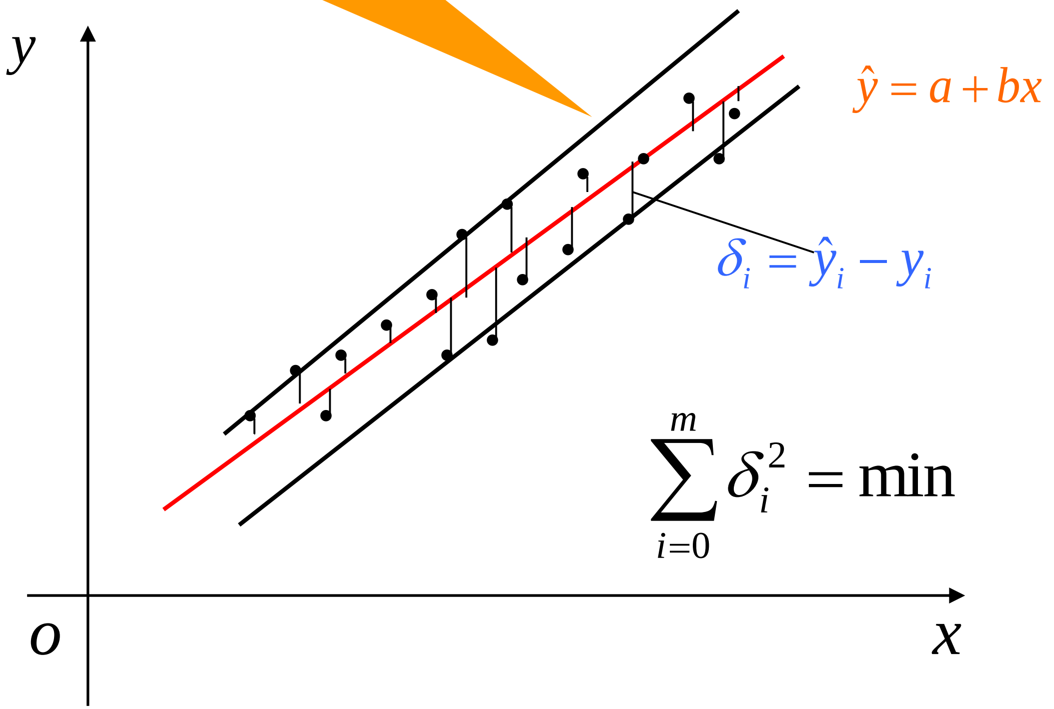
# 两参数情形

例如，假设 $x, y$ 满足线性关系 $y = a + bx$

在$xOy$坐标平面上将以这组数据为坐标的点描出来，这些点可能并不共线，因此插值多项式不会是线性函数。只能另选办法确定关系式 $y = a + bx$

**最小二乘法**是处理这类数据拟合问题的好方法。

## 最小二乘法的几何意义



设 $(x_i, y_i)\ (i=0,1,\cdots,m)$ 为给定的一组数据求一个函数

$$\hat{y}=a+bx$$

使其满足

$$\min=\sum_{i=0}^{m}(\hat{y}(x_i)-y_i)^2$$

则称按上述条件求 $\hat{y}(x)$ 的方法为离散数据拟合 $\{x_i,\ y_i\}_{i=0}^{m}$ 的最小二乘法,简称**最小二乘法**，并称 $\hat{y}(x)$为**最小二乘解。**

求解 $\hat{y}(x)$ 等价于求多元数

$$E(a,b)=\sum_{i=0}^{m}(\hat{y}(x_i)-y_i)^2=\sum_{i=0}^{m}((a+bx_i)-y_i)^2$$

的最小值点$(a^*,b^*)$

令 $\dfrac{\partial E(a,b)}{\partial a}=0$， $\dfrac{\partial E(a,b)}{\partial b}=0$， 得

$$\sum_{i=0}^{m} 2\cdot[(a+bx_i)-y_i]\cdot 1=0, \qquad \sum_{i=0}^{m} 2\cdot[(a+bx_i)-y_i]\cdot x_i=0,$$

即 $$\sum_{i=0}^{m}[(a+bx_i)-y_i]=0, \quad \sum_{i=0}^{m}[(a+bx_i)\cdot x_i-x_i\cdot y_i]=0$$

进一步有，

$$\left(\sum_{i=0}^{m}1\right)a+\left(\sum_{i=0}^{m}x_i\right)b=\sum_{i=0}^{m}y_i$$

$$\left(\sum_{i=0}^{m}x_i\right)a+\left(\sum_{i=0}^{m}x_i^2\right)b=\sum_{i=0}^{m}x_i\cdot y_i$$

写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^{m}x_i \\ \sum_{i=0}^{m}x_i & \sum_{i=0}^{m}x_i^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{m}y_i \\ \sum_{i=0}^{m}x_i\cdot y_i \end{pmatrix}$$

称此方程组为**法方程组**。

# 一般情形

设 $(x_i, y_i)(i=0,1,\ldots,m)$ 为给定数据，$\omega_i > 0$为各点的权系数，函数空间 $S=\text{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$，求

$$s^*(x)=\sum_{k=0}^{n} a_k^*\varphi_k(x)\in S$$

使得

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

称按条件求函数 $s^*(x)$ 的方法为数据拟合的最小二乘法；

称 $s^*(x)$为最小二乘解；

$\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s^*(x_i)-y_i)^2$ 称为最小二乘解 $s^*(x)$的平方误差；

$\sqrt{\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s^*(x_i)-y_i)^2}$ 称为均方误差。

求解$s^*(x)$ 等价于求多元函数

$$E(a_0,a_1,\ldots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(s(x_i)-y_i)^2=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i)^2$$

的最小值点 $(a_0^*,a_1^*,\ldots,a_n^*)$ ，利用多元函数求极值的必要条件

$$\frac{\partial E}{\partial a_j}=0,\ \ j=0,1,\ldots,n \Leftrightarrow 2\sum_{i=0}^{m}\omega_i(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i)\varphi_j(x_i)=0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=0}^{n}(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i))a_k=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_j(x_i)$$

法方程组

# 法方程组构造

$$\sum_{k=0}^{n}\left(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\phi_k(x_i)\phi_j(x_i)\right)a_k=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\phi_j(x_i)$$

定义函数的离散型内积

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

则法方程组可写为

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

矩阵形式为

$$\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\ (f,\varphi_1)\\ \vdots\\ (f,\varphi_n)\end{pmatrix}$$

系数矩阵非奇异等价于$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$线性无关

用最小二乘法做数据拟合问题的步骤是:

- 根据散点图中散点的分布情况或根据经验确定拟合的曲线的类型;
- 建立并求解法方程组。

# 例题

例　求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y=a+bx$。

| $x_i$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | $-2.1$ | $-0.9$ | $-0.1$ | 1.1 | 1.9 |

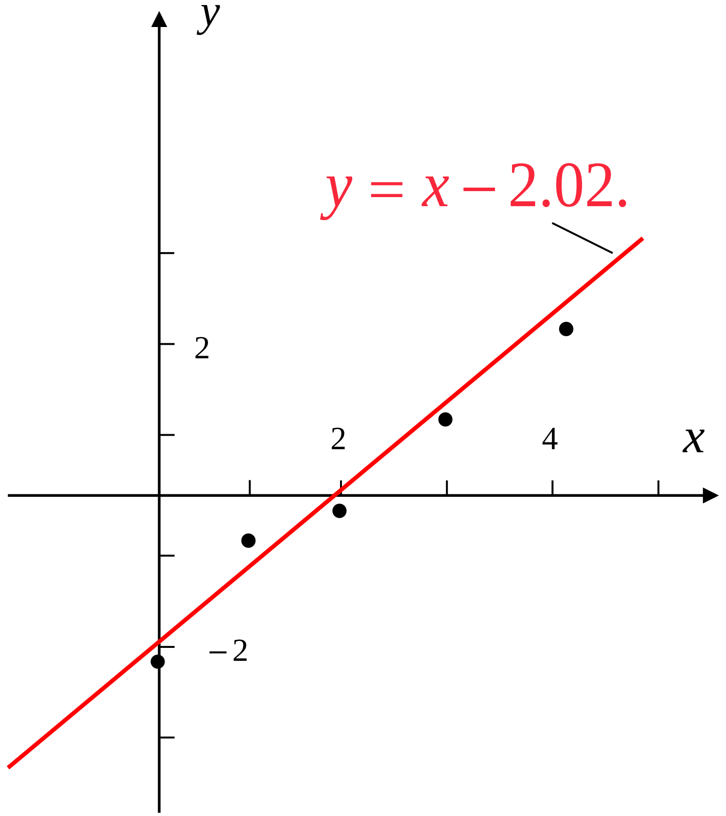
解：法方程组为：

$$\begin{pmatrix} 5 & \sum_{i=1}^{5} x_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i & \sum_{i=1}^{5} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{5} y_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot y_i \end{pmatrix} \text{ 即 } \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 9.8 \end{pmatrix}$$

解得　$a=-2.02,\quad b=1$

故所求直线方程是 $y=x-2.02.$

# 拟合数据的最小二乘曲线示意图




要拟合数据表

| $x_i$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | $-2.1$ | $-0.9$ | $-0.1$ | 1.1 | 1.9 |

$y = x - 2.02$ 为最小二乘曲线

# 非线性情形

例如，已知拟合曲线方程的形式为

$$y = ce^{bx} \quad \text{或} \quad y = cx^{b}$$

此时法方程组是非线性方程组（求解比较困难）：

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=0}^{m} c\left(e^{bx_i}\right)^2 - y_i e^{bx_i} = 0 \\ \sum\limits_{i=0}^{m} c^2 \cdot x_i \cdot \left(e^{bx_i}\right)^2 - c \cdot x_i \cdot y_i e^{bx_i} = 0 \end{cases} \quad \text{和} \quad \begin{cases} \sum\limits_{i=0}^{m} c\left(x_i^b\right)^2 - y_i \cdot x_i^b = 0 \\ \sum\limits_{i=0}^{m} c^2 \cdot \left(x_i^b\right)^2 \cdot \ln x_i - c \cdot x_i^b \cdot y_i \cdot \ln x_i = 0 \end{cases}$$

# 非线性转为线性

$$y = cx^b$$

两边取对数 $\ln y = \ln c + b \cdot \ln x$

变量替换 $z = a + bt$

$z = \ln y, t = \ln x, a = \ln c$

线性问题

由观测数据

$(t_i, z_i) = (\ln y_i, \ln x_i)$

求最小二乘拟合曲线

$z = a + bt$

$$y = ce^{bx}$$

$\ln y = \ln c + bx$

$z = a + bx$

$z = \ln y, a = \ln c$

由观测数据

$(x_i, z_i) = (x_i, \ln y_i)$

求最小二乘拟合曲线

$z = a + bx$

# 例题

例 求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y = ce^{bx}$

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $x_i$ | 1.00 | + 1.25 | + 1.50 + | 1.75 + | 2.00 | = 7.50 |
| $y_i$ | 5.10 | 5.79 | 6.53 | 7.45 | 8.46 | |
| $\ln y_i$ | 1.629 + | 1.756 + | 1.876 + | 2.008 + | 2.135 | = 9.404 |

解 取 $\ln y = bx + \ln c$, 令 $z = \ln y$, $a = \ln c$ 则上述问题化为

求最小二乘拟合曲线, $z = a + bx$。

$$\begin{pmatrix} 5 & \sum_{i=1}^{5} x_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i & \sum_{i=1}^{5} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{5} \ln y_i \\ \sum_{i=1}^{5} x_i \cdot \ln y_i \end{pmatrix}$$ 即 $$\begin{pmatrix} 5 & 7.50 \\ 7.50 & 11.875 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.404 \\ 14.422 \end{pmatrix}$$

解得 $a = 1.122, b = 0.5056$, 又 $c = e^a \approx 3.071$ 有 $y = 3.071e^{0.5056x}$

又例如，拟合曲线方程的形式为

$$y=\frac{1}{a+bx} \quad 或 \quad y=a+\frac{b}{x}$$

可设

$$Y=\frac{1}{y}\text{，则得 } Y=a+bx$$

又设

$$X=\frac{1}{x}\text{，则得 } y=a+bX$$