

§5.4 函数的最佳平方逼近

- 1 内积空间
- 2 最小二乘拟合
- 3 正交多项式
- 4 最佳平方逼近
- 5 用正交函数作最佳平方逼近

§5.4 函数逼近

/* Approximation Theory */

逼近误差的度量常用标准有：

➤ $\|f(x) - y(x)\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - y(x)|$

一致逼近

/* uniform Approximation */

➤ $\|f(x) - y(x)\|_2^2 = \int_a^b \rho(x) [f(x) - y(x)]^2 dx$

平方逼近

/* Least_Squares Approximation */

➤ 1 内积空间 /* Inner product space */

定义 设在区间 (a, b) 上**非负函数** $\rho(x)$, 满足条件:

- 1) $\int_a^b |x|^n \rho(x) dx$ 存在 $(n=0, 1, \dots)$,
- 2) 对非负的连续函数 $g(x)$, 若 $\int_a^b g(x) \rho(x) dx = 0$.

则在 (a, b) 上 $g(x) \equiv 0$, $\rho(x)$ 就称为区间 (a, b) 上的**权函数**。

常见的权函数

$$(1) \rho(x) = 1, x \in [a, b];$$

$$(2) \rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, x \in (-1, 1);$$

$$(3) \rho(x) = e^{-x}, x \in [0, +\infty);$$

$$(4) \rho(x) = e^{-x^2}, x \in (-\infty, +\infty).$$

➤ 1 内积空间 /* Inner product space */

定义

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

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

称为函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上的内积。

四条公理:

- 1) $(f, g) = (g, f)$
- 2) $(cf, g) = c(f, g), c$ 为常数
- 3) $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$
- 4) $(f, f) \geq 0$, 当且仅当 $f = 0$ 时 $(f, f) = 0$

设 \vec{f}, \vec{g} 是 R^n 中的向量, 则

$$\vec{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T, \vec{g} = (g_1, g_2, \dots, g_n)^T$$

其内积定义是 $(\vec{f}, \vec{g}) = \sum_{k=1}^n f_k g_k$

向量 $\vec{f} \in R^n$ 的模 (范数) 定义为 $\|\vec{f}\|_2 = (\sum_{k=1}^n f_k^2)^{\frac{1}{2}}$

将它推广到任何内积空间中。

➤ 1 内积空间 /* Inner product space */

满足内积定义的函数空间称为内积空间。因此，连续函数空间 $C[a, b]$ 上定义了内积就形成一个内积空间。



定义 $f(x) \in C[a, b]$, 量

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx} = \sqrt{(f, f)}$$

称为 $f(x)$ 的欧氏范数。

定理

对任何 $f, g \in C[a, b]$, 下列结论成立

$$(1) \quad |(f, g)| \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

此式称为柯西—许瓦兹 (Cauchy-Schwarz) 不等式

$$(2) \quad \|f + g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2 \quad (\text{三角不等式})$$

$$(3) \quad \|f + g\|_2^2 + \|f - g\|_2^2 = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2) \quad (\text{平行四边形定律})$$

证明1. 若 $g = 0$, 则柯西-许瓦兹 (Cauchy-Schwarz) 不等式显然**成立**, 现考虑 $g \neq 0$, 对任何实数 λ , 有

$$0 \leq (f + \lambda g, f + \lambda g) = (f, f) + 2\lambda(f, g) + \lambda^2(g, g)$$

现取 $\lambda = -\frac{(f, g)}{\|g\|_2^2}$, 代入上式得

$$\|f\|_2^2 - 2\frac{|(f, g)|^2}{\|g\|_2^2} + \frac{|(f, g)|^2}{\|g\|_2^2} \geq 0$$

即 $|f, g|^2 \leq \|f\|_2^2 \|g\|_2^2$, 两边开平方即得(1). ■

定理

对任何 $f, g \in C[a, b]$, 下列结论成立

$$(1) \quad |(f, g)| \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

此式称为柯西—许瓦兹 (Cauchy-Schwarz) 不等式

$$(2) \quad \|f + g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2 \quad (\text{三角不等式})$$

$$(3) \quad \|f + g\|_2^2 + \|f - g\|_2^2 = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2) \quad (\text{平行四边形定律})$$

证明2: 利用 (1) 考虑

$$\begin{aligned} \|f + g\|_2^2 &= (f + g, f + g) = (f, f) + 2(f, g) + (g, g) \\ &\leq \|f\|_2^2 + 2|(f, g)| + \|g\|_2^2 \leq \|f\|_2^2 + 2\|f\|_2 \|g\|_2 + \|g\|_2^2 \\ &= (\|f\|_2 + \|g\|_2)^2 \quad \text{两边开方则得 (2).} \end{aligned}$$

定理

对任何 $f, g \in C[a, b]$, 下列结论成立

$$(1) \quad |(f, g)| \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

此式称为柯西—许瓦兹 (Cauchy-Schwarz) 不等式

$$(2) \quad \|f + g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2 \quad (\text{三角不等式})$$

$$(3) \quad \|f + g\|_2^2 + \|f - g\|_2^2 = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2) \quad (\text{平行四边形法则})$$

证明3: 平行四边形法则可直接计算得

$$\begin{aligned} \|f + g\|_2^2 + \|f - g\|_2^2 &= (f + g, f + g) + (f - g, f - g) \\ &= (f, f) + 2(f, g) + (g, g) + (f, f) - 2(f, g) + (g, g) \\ &= 2[(f, f) + (g, g)] = 2(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2) \quad \text{证毕} \end{aligned}$$

➤ 1 内积空间 /* Inner product space */

定义 若 $f(x), g(x) \in C[a, b]$, 满足

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

则称 f 与 g 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交。

若函数族

$$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$$

满足关系

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

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

若 $A_k \equiv 1$, 就称之为标准正交函数族。

➤ 1 内积空间 /* Inner product space */

在 R^n 空间中任一向量都可用它的一组线性无关的基表示，
对内积空间的任一元素 $f(x) \in C[a, b]$ 也同样可用线性无关的基表示。

例如 三角函数族 $1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots$ ，
就是在区间 $[-\pi, \pi]$ 上的正交函数族，因为

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

$$(\sin kx, \sin kx) = \int_{-\pi}^{\pi} \sin^2 kx dx = \pi, (\cos kx, \cos kx) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 kx dx = \pi$$

$$(k = 1, 2, \dots)$$

而对 $j \neq k$ 时

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cos jx dx = 0, \int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \sin jx ds = 0, \int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \sin jx dx = 0 \quad \blacksquare$$

➤ 1 内积空间 /* Inner product space */

定义 线性无关/* linearly independent */函数族 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots\}$ 满足条件：其中任意函数的线性组合
 $a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_{n-1}\varphi_{n-1}(x) = 0$ 对任意 $x \in [a, b]$ 成立
 当且仅当 $a_0 = a_1 = \dots = a_{n-1} = 0$ 时成立，则称在 $[a, b]$ 上是**线性无关**的，若函数族 $\{\varphi_k\} (k = 0, 1, \dots)$ 中的任何有限个 φ_k 线性无关，
 则称 $\{\varphi_k\}$ 为**线性无关函数族**。

例如： $1, x, \dots, x^n, \dots$ 就是 $[a, b]$ 上线性无关函数族。

若 $\varphi_0(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 是 $C[a, b]$ 中的线性无关函数，且 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} 是任意实数，则

$$s(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_{n-1}\varphi_{n-1}(x)$$

的全体是 $C[a, b]$ 中的一个子集，记作 $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}\}$

判断函数族 $\{\phi_k\}$ ($k = 0, 1, \dots, n-1$)线性无关的充要条件

定理

$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 在 $[a, b]$ 上线性无关的

充要条件是它的克莱姆Cramer行列式 $G_{n-1} \neq 0$,

其中

$$G_{n-1} = G(\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}) = \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_{n-1}) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_{n-1}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\varphi_{n-1}, \varphi_0) & (\varphi_{n-1}, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1}) \end{vmatrix}$$

证 (反证法)

\Rightarrow 假设 $G_{n-1} = 0$, 则齐次线性方程组

$$\sum_{k=0}^{n-1} \beta_k (\varphi_k, \varphi_j) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, n-1.$$

有非零解 $(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{n-1})^T$ 其中 $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_{n-1}$ 不全为零

$$\text{令 } \psi(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \varphi_k(x)$$

$$\text{则有 } (\psi, \varphi_j) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k (\varphi_k, \varphi_j) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, n-1.$$

§1

ance

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \varphi_k(x)$$

因而有

β_j 不全为0

$$(\psi, \psi) = \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j (\psi, \varphi_j) = 0. \implies \psi(x) \equiv 0, \quad a \leq x \leq b.$$

这与 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 在 $[a, b]$ 上线性无关矛盾。

\Leftarrow 若函数系 $\{\varphi_i\} (i = 0, 1, \dots, n-1)$ 线性相关, 则由定义可知有不全为0的数值 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} 使得

$$\sum_{i=0}^{n-1} a_i \varphi_i = 0.$$

于是将此式两边乘以 $\rho \varphi_0, \rho \varphi_1, \dots, \rho \varphi_{n-1}$ 之后再积分, 便得到方程组

$$\sum_{i=0}^{n-1} a_i (\varphi_i, \varphi_j) = 0. (j = 0, 1, \dots, n-1).$$

既然上面的齐次方程组有非零解 $(a_0, a_1, \dots, a_{n-1})$. 故其系数行列式的值一定为0; 亦即 $G_{n-1} = 0$ 这与 $G_{n-1} \neq 0$ 矛盾。■



➤ 2 最小二乘拟合 /*Discrete L-S approximating */

已知 $x_1 \dots x_N; y_1 \dots y_N$, 求一个简单易算的近似函数 $P(x) \approx f(x)$ 。

但是 ① N 很大;

② y_i 本身是测量值, 不准确, 即 $y_i \neq f(x_i)$

这时没必要取 $P(x_i) = y_i$, 而要使 $P(x_i) - y_i$ 总体上尽可能小。

常见做法:

➤ 使 $\max_{1 \leq i \leq N} |P(x_i) - y_i|$ 最小 /* minimax problem */

➤ 使 $\sum_{i=1}^N |P(x_i) - y_i|$ 最小

➤ 使 $\sum_{i=1}^N |P(x_i) - y_i|^2$ 最小 /* Least-Squares method */

➤ 2 最小二乘拟合

问题一般的提法是：对于给定的数据 $(x_i, y_i)(i = 1, 2, \dots, N)$ ，选取线性无关的函数族 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_m$ 及权函数 $\omega(x)$ ，要求在函数类 $\Phi = \text{Span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ 中寻找一个函数

$$\varphi^*(x) = a_0^* \varphi_0 + a_1^* \varphi_1 + \dots + a_m^* \varphi_m \quad (m < N) \quad , \quad \text{使}$$

$$I = \sum_{i=1}^N \omega(x_i) [y_i - \varphi(x_i)]^2$$

达到极小，显然上式是 $m+1$ 个变量 a_0, a_1, \dots, a_m 的二次函数

$$I(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^N \omega(x_i) [y_i - \sum_{k=0}^m a_k \varphi_k(x_i)]^2$$

由多元函数极值的必要条件，有

$$\frac{1}{2} \frac{\partial I}{\partial a_j} = \sum_{i=1}^N \omega(x_i) \varphi_j(x_i) [y_i - \sum_{k=0}^m a_k \varphi_k(x_i)] = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, m)$$

引入内积

$$(f, g) = \sum_{i=1}^N \omega(x_i) f(x_i) g(x_i)$$

/*discrete type */

方程组 $\sum_{i=1}^N \omega(x_i) \varphi_j(x_i) [y_i - \sum_{k=0}^m a_k \varphi_k(x_i)] = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, m)$ 可以表示为

$$a_0(\varphi_j, \varphi_0) + a_1(\varphi_j, \varphi_1) + \dots + a_m(\varphi_j, \varphi_m) = (\varphi_j, y) \quad (j = 0, 1, \dots, m)$$

即有

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_m) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_m, \varphi_0) & (\varphi_m, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_m, \varphi_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, y) \\ (\varphi_1, y) \\ \vdots \\ (\varphi_m, y) \end{bmatrix}$$

这个方程组称为法方程或正规方程组，若用 $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ 构成 $N \times (m+1)$ 的矩阵A，即

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=1}^N \omega(x_i) \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i)$$

$$(\varphi_j, y) = \sum_{i=1}^N \omega(x_i) \varphi_j(x_i) y_i$$

又引入向量 $\alpha = (a_0, a_1, \dots, a_m)^T$, $Y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$, 权 $w=1$
则法方程组可写成以下矩阵形式:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \alpha = \mathbf{A}^T \mathbf{Y}$$

由于 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_m$ 线性无关, 可知法方程存在唯一解

$$a_0 = a_0^*, a_1 = a_1^*, \dots, a_m = a_m^*$$

从而得到函数

$$\varphi^*(x) = a_0^* \varphi_0 + a_1^* \varphi_1 + \dots + a_m^* \varphi_m$$

类似连续型的证明, 可知 $\varphi^*(x)$ 使 J 取最小值。

最小平方误差为

$$\delta^2 = \|y - \varphi^*\|_2^2 = (y - \varphi^*, y - \varphi^*) = \|y\|_2^2 - \sum_{j=0}^m a_j^* (\varphi_j, y)$$

➤ 最小二乘拟合多项式 /* L-S approximating polynomials */

若取 $\varphi_0 = 1, \varphi_1 = x, \dots, \varphi_m = x^m$, 即取 $\{1, x, \dots, x^m\}$ 为基函数的代数多项式拟合时, 相应的法方程组就是

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N \omega_i & \sum_{i=1}^N \omega_i x_i & \cdots & \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^m \\ \sum_{i=1}^N \omega_i x_i & \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^m & \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^{m+1} & \cdots & \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N \omega_i y_i \\ \sum_{i=1}^N \omega_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N \omega_i x_i^m y_i \end{bmatrix}$$

求出法方程组的解 a_0, a_1, \dots, a_m , 就可得到拟合多项式

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m$$

例：设有一组数据为表中第 (2) , (3) 两列所示，求一代数多项式拟合这组数据

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)
i	x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2	$x_i^2 y_i$	x_i^3	x_i^4
1	1	10	10	1	10	1	1
2	3	5	15	9	45	1	81
3	4	4	16	16	64	27	256
4	5	2	10	25	50	81	625
5	6	1	6	36	36	64	1296
6	7	1	7	49	49	256	2401
7	8	2	16	64	128	125	4096
8	9	3	27	81	243	625	6561
9	10	4	40	100	400	216	10000
$\sum_{i=1}^9$	53	32	147	381	1025	1296	25317

解 通常可按下列步骤求解:

(1) 绘草图

由已知数据描出粗略的图形从图

看出近似为一条抛物线

(2) 造型

从草图可设拟合曲线为

$$y = \varphi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

(3) 建立包含未知数的正规方程组, 为此列表算出以下各数值

$$\sum_{i=1}^9 x_i, \sum_{i=1}^9 x_i^2, \sum_{i=1}^9 x_i^3, \sum_{i=1}^9 x_i^4, \sum_{i=1}^9 y_i, \sum_{i=1}^9 x_i y_i, \sum_{i=1}^9 x_i^2 y_i$$

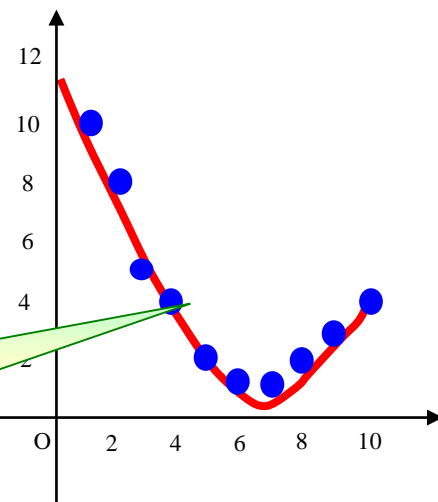
由表的最后一行的数值可得正规方程组

$$\begin{cases} 9a_0 + 53a_1 + 381a_2 = 32 \\ 53a_0 + 381a_1 + 3017a_2 = 147 \\ 381a_0 + 3017a_1 + 25317a_2 = 1025 \end{cases} \quad (4) \text{ 求解正规方程组得}$$



$$\begin{aligned} a_0 &= 13.45966, \\ a_1 &= -3.60531, \\ a_2 &= 0.26757 \end{aligned}$$

故所求的二次拟合多项式为 $y = \varphi(x) = 13.45966 - 3.60531x + 0.26757x^2$ 21



例：用 $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 来拟合 $\begin{array}{c|c|c|c|c} x & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline y & 4 & 10 & 18 & 26 \end{array}, \omega = 1$

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

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=1}^4 1 \cdot 1 = 4 \quad (\varphi_1, \varphi_2) = \sum_{i=1}^4 x_i \cdot x_i^2 = 100$$

$$(\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=1}^4 1 \cdot x_i = 10 \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=1}^4 x_i^2 = 30$$

$$(\varphi_0, \varphi_2) = \sum_{i=1}^4 1 \cdot x_i^2 = 30 \quad (\varphi_2, \varphi_2) = \sum_{i=1}^4 x_i^4 = 354$$

$$(\varphi_0, y) = \sum_{i=1}^4 1 \cdot y_i = 58 \quad (\varphi_1, y) = 182 \quad (\varphi_2, y) = 622$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 58 \\ 182 \\ 622 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{aligned} a_0 &= -\frac{3}{2}, a_1 = \frac{49}{10}, a_2 = \frac{1}{2} \\ y = P(x) &= \frac{1}{2}x^2 + \frac{49}{10}x - \frac{3}{2} \end{aligned}$$

$$\|B\|_{\infty} = 484, \quad \|B^{-1}\|_{\infty} = \frac{63}{4} \Rightarrow \text{cond}(B)_{\infty} = 7623$$

例 试分别用二次和三次多项式以最小二乘拟合表中的数据, 并比较优劣。

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	-0.1	0.1	0.4	0.9	1.6

解: 设二次拟合函数为

$$y(x) = a_1 + a_2x + a_3x^2$$

利用法方程

$$A^T A a = A^T Y$$

其中 $\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x, \varphi_2(x) = x^2$, $a = (a_1, a_2, a_3)^T$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$Y = (-0.1, 0.1, 0.4, 0.9, 1.6)^T$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{bmatrix}$$

$$A^T Y = \begin{bmatrix} 2.9 \\ 4.2 \\ 7 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.9 \\ 4.2 \\ 7 \end{bmatrix}$$



$$a_1 = 0.4086,$$

$$a_2 = 0.42,$$

$$a_3 = 0.0857$$

故所求得二次多项式为

$$y(x) = 0.4086 + 0.42x + 0.0857x^2$$

误差平方和

$$\sigma_2 = Y^T (Y - Aa) = 0.00116$$



同样可以求得三次多项式为

$$y(x) = 0.4086 + 0.39167x + 0.0857x^2 + 0.00833x^3$$

误差平方和为

$$\sigma_3 = Y^T (Y - Aa) = 0.000194$$

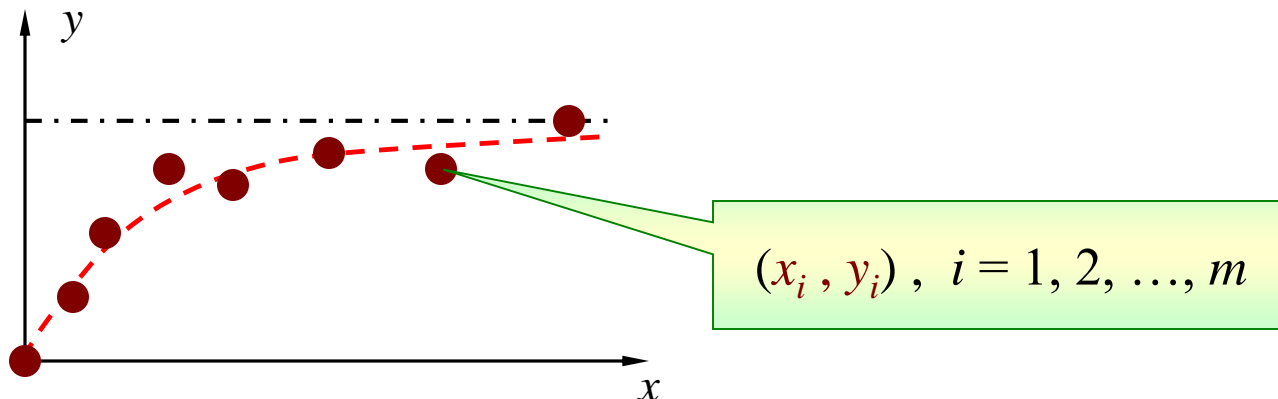


显然三次多项式的精度要好些。

$$\sigma = (Y - Aa)^T (Y - Aa) = Y^T (Y - Aa)$$

$$\text{因 } a^T A^T Aa - a^T A^T Y = a^T (A^T Aa - A^T Y) = 0$$

例:



方案一：设 $y \approx P(x) = \frac{x}{ax + b}$

求 a 和 b 使得 $\varphi(a, b) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{x_i}{ax_i + b} - y_i \right)^2$ 最小。

线性化 /* linearization */: 令 $Y = \frac{1}{y}$, $X = \frac{1}{x}$, 则

$Y \approx a + bX$ 就是个线性问题

将 (x_i, y_i) 化为 (X_i, Y_i) 后易解 a 和 b 。

方案二：设 $y \approx P(x) = a e^{-b/x}$ ($a > 0, b > 0$)

线性化：由 $\ln y \approx \ln a - \frac{b}{x}$ 可做变换

$$Y = \ln y, \quad X = \frac{1}{x}, \quad A = \ln a, \quad B = -b$$

$Y \approx A + BX$ 就是个线性问题

将 (x_i, y_i) 化为 (X_i, Y_i) 后易解 A 和 B

$$\longrightarrow a = e^A, \quad b = -B, \quad P(x) = a e^{-b/x}$$





➤ 3 正交多项式/* Orthogonal Polynomials */

定义 首项系数 $a_k \neq 0$ 的 n 次多项式 $g_n(x)$, 满足

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

就称多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \dots$ 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。

定理 设 $g_i(x) (i = 0, 1, \dots)$ 是 i 次多项式, 则多项式系 $\{g_i(x)\}$

是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式的充分必要条件是对任何次数不超过 $i - 1$ 的多项式 $P(x)$, 都有 $\int_a^b \rho(x) P(x) g_i(x) dx = 0$, ($i = 0, 1, \dots$) 即 $g_i(x)$ 与任何次数不超过 $i - 1$ 的多项式 $P(x)$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交。

➤ 3 正交多项式/* Orthogonal Polynomials */

正交多项式的性质

设 $\{g_k(x)\}$ 为 $[a, b]$ 上的正交多项式序列, 其中 $g_k(x)$ 为 k 次正交多项式, 则具有下列基本性质。

- 性质1 $g_k(x)$ 是线性无关的。
- 性质2 $g_k(x)$ 的 k 个零点都是实的、相异的 (即单重的), 且全部在区间 (a, b) 内部。
- 性质3 最高项系数为1的正交多项式 $\{g_k(x)\}$ 中任何相邻三个多项式 $g_{k-1}(x), g_k(x), g_{k+1}(x)$ 存在如下的三项递推关系:

$$g_{k+1}(x) = (x - a_{k+1})g_k(x) - b_k g_{k-1}(x) \quad (k = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

其中 a_k, b_k 都是与 x 无关的常数, 且

$$\begin{cases} a_{k+1} = \frac{(xg_k, g_k)}{(g_k, g_k)}, & b_0 = 0, & b_k = \frac{(g_k, g_k)}{(g_{k-1}, g_{k-1})}, k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

勒让德*Legendre*\多项式

当区间为 $[-1, 1]$, 权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 时, 由 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$ 正交化得到的多项式就称为 Legendre 多项式, 并用 $P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x), \dots$ 表示,

$$P_0(x) = 1$$

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

由于 $(x^2 - 1)^n$ 是 $2n$ 次多项式, 求 n 阶导数后得

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

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

$$a_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$$

最高项系数为1的勒让德多项式



勒让德多项式有下述几个重要性质：

性质1 正交性

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

性质2 奇偶性

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

性质3 在所有最高项系数为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。

性质4 $P_n(x)$ 在区间 $[-1, 1]$ 内有 n 个不同的实零点。

性质5 递推性 当 $n \geq 1$ 时, 有

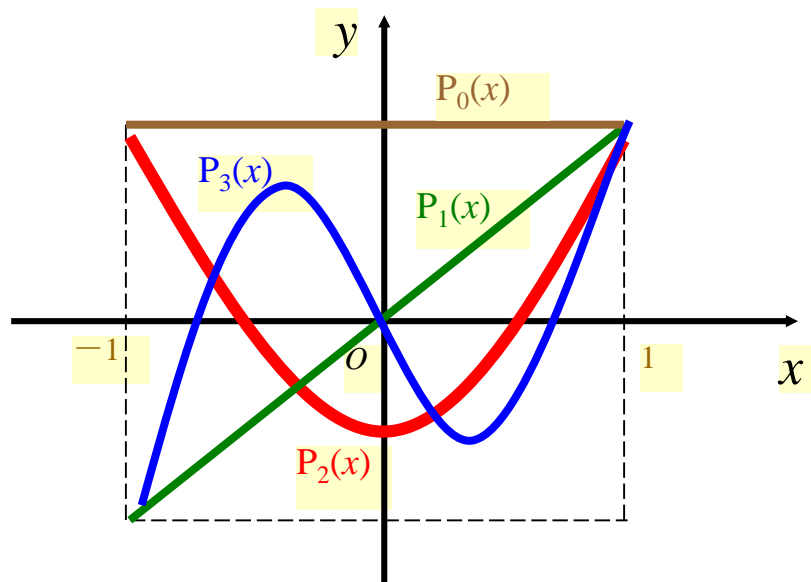
$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x), (n=1, 2, \dots)$$

由 $P_0(x)=1$, $P_1(x)=x$, 利用递推关系就可推出

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

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

在 $[-1, 1]$ 上的图形如下:



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, 由序列 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$ 正交化得到的正交多项式就是Chebyshev多项式, 它可表为

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

若令 $x = \cos \theta$, 则 $T_n(x) = \cos n\theta$, $0 \leq \theta \leq \pi$.



Chebyshev多项式有以下重要性质:

性质1 Chebyshev多项式 $\{T_n(x)\}$ 在区间 $[-1, 1]$ 上带权

$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交, 且

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

性质2 递推关系

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

性质3 $T_{2k}(x)$ 只含 x 的偶次方, $T_{2k+1}(x)$ 只含 x 的奇次方, 这性质由递推关系可直接得到。

性质4 $T_n(x)$ 在区间 $[-1, 1]$ 上有 n 个零点

$$x_k = \cos \frac{2k+1}{2n} \pi, \quad k = 0, 1, \cdots, n-1$$

由递推关系可得

$$T_0(x) = 1,$$

$$T_1(x) = x,$$

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

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

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

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



➤ 4 函数的最佳平方逼近/* Least_Squares Approximation */

设函数 $f(x) \in C[a, b]$, 用 n 次多项式 $s(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k$ 作最佳平方逼近, 就是要求得以 $a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*$ 为系数的多项式

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

使

$$\|f(x) - s^*(x)\|_2^2 = \int_a^b [f(x) - s^*(x)]^2 dx = \min_{s(x) \in H_n} \|f(x) - s(x)\|_2^2$$

推广到一般的情况, 就是对于给定的权函数 $\rho(x)$, 要求得 $a_k^* (k = 0, 1, \dots, n)$ 使

$$\|f(x) - s^*(x)\|_2^2 = \int_a^b \rho(x) [f(x) - s^*(x)]^2 dx = \min_{s(x) \in H_n} \|f(x) - s(x)\|_2^2$$

n 次多项式 $s(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k$, 以 $1, x, \dots, x^n$ 为基函数所作的线性

组合构成的一类函数。进一步推广可将 x^k 改为一般的线性无关的

连续函数 $\varphi_k(x)$ 以 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 为线性组合 $s(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x)$ 的全体构成 $C[a, b]$ 的子空间 Φ , 即 $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$

最佳平方逼近的提法可叙述为：求 a_k^* ($k = 0, 1, \dots, n$) 使

$$\|f(x) - s^*(x)\|_2^2 = \left\| f(x) - \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k(x) \right\|_2^2 = \min_{s(x) \in \Phi} \|f(x) - s(x)\|_2^2$$

称 $s^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k(x)$ 为 $f(x) \in C[a, b]$ 在子集 $\Phi \subset C[a, b]$ 中的最佳平方逼近函数，为了求得 $s^*(x)$ ，这个问题等价于关于 a_0, a_1, \dots, a_n 的多元函数

$$I(a_0, a_1, \dots, a_n) = \int_a^b \rho(x) \left[f(x) - \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x) \right]^2 dx$$

的最小值问题。

为了确定参数 a_k ($k = 0, 1, \dots, n$)，由多元函数极值存在的必要条件，有

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

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

$$(k = 0, 1, \dots, n)$$

即有

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

这是关于未知数 a_0, a_1, \dots, a_n 的线性代数方程组, 称为法方程, 由于 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 线性无关, 故系数行列式 $G(\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n) \neq 0$, 于是方程组有唯一解 $a_k = a_k^* \quad (k = 0, 1, \dots, n)$ 从而得到

$$s^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + \dots + a_n^* \varphi_n(x)$$

下证 $s^*(x)$ 是所求解, 即对任何 $s(x) \in \Phi$, 有

$$\int_a^b \rho(x) [f(x) - s^*(x)]^2 dx \leq \int_a^b \rho(x) [f(x) - s(x)]^2 dx$$

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

为此只要考虑

$$\begin{aligned} D &= \int_a^b \rho(x)[f(x) - s(x)]^2 dx - \int_a^b \rho(x)[f(x) - s^*(x)]^2 dx \geq 0 \\ &= \int_a^b \rho(x)[s(x) - s^*(x)]^2 dx + 2 \int_a^b \rho(x)[s^*(x) - s(x)][f(x) - s^*(x)] dx \geq 0 \end{aligned}$$

这就证明了 $s^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近函数。

如果令 $\delta = f(x) - s^*(x)$, 由法方程易知 $(f - s^*, s^*) = 0$ 则平方误差为:

$$\begin{aligned} \|\delta\|_2^2 &= (f - s^*, f - s^*) = (f, f) - (s^*, f) \\ &= \|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^n a_k^* (\varphi_k, f) \end{aligned}$$

若取 $\varphi(x) = x^k, \rho(x) \equiv 1, f(x) \in C[0, 1]$, 要在 H_n 中求 n 次最佳平方逼近多项式 $s^*(x) = a_0^* + a_1^* x + \cdots + a_n^* x^n$

这时

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

$$(f, \varphi_k) = \int_0^1 x^k f(x) dx = d_k$$

于是法方程组的系数矩阵为

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

Hilbert阵!

记 $\mathbf{d} = (d_0, d_1, \dots, d_n)^T$, $\mathbf{a} = (a_0, a_1, \dots, a_n)^T$, 则

$$H\mathbf{a} = \mathbf{d}$$

的解 $a_k = a_k^*$ ($k = 0, 1, \dots, n$) 即为所求.

例 定义内积 $(f, g) = \int_0^1 f(x)g(x)dx$, 试在 $H_1 = \text{span}\{1, x\}$ 中寻求对于 $f(x) = \sqrt{x}$ 的最佳平方逼近元素 $P(x)$ 。

解 $d_0 = (f, 1) = \int_0^1 \sqrt{x} dx = \frac{2}{3}$, $d_1 = (f, x) = \int_0^1 x\sqrt{x} dx = \frac{2}{5}$

这里实际上要求的是 $(0, 1)$ 上的一次最佳平方逼近多项式

例 定义内积 $(f, g) = \int_0^1 f(x)g(x)dx$, 试在 $H_1 = \text{span}\{1, x\}$ 中寻求对于 $f(x) = \sqrt{x}$ 的最佳平方逼近元素 $P(x)$ 。

解 $d_0 = (f, 1) = \int_0^1 \sqrt{x}dx = \frac{2}{3}$, $d_1 = (f, x) = \int_0^1 x\sqrt{x}dx = \frac{2}{5}$

这里实际上要求的是(0, 1)上的一次最佳平方逼近多项式

得法方程组为

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{2}{5} \end{bmatrix}$$

解得 $a_0^* = \frac{4}{15}$, $a_1^* = \frac{12}{15}$, 所求的最佳平方逼近元素为

$$P(x) = \frac{4}{15} + \frac{12}{15}x \quad 0 \leq x \leq 1$$

平方误差

$$\begin{aligned} \|\delta\|_2^2 &= (f, f) - \sum_{k=0}^1 a_k^* (f, \varphi_k) = \int_0^1 x dx - \sum_{k=0}^1 a_k^* d_k \\ &= \frac{1}{2} - \frac{4}{15} \times \frac{2}{3} - \frac{12}{15} \times \frac{2}{5} = 0.002222 \end{aligned}$$

对于一般的基底 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$, 当 n 稍大时, 计算法方程组中的 (φ_k, φ_j) 以及求解法方程组的计算量都是很大的, 若采用 $1, x, \dots, x^n$ 作基底, 当 $\rho(x) \equiv 1$ 时, 虽然 $(\varphi_k, \varphi_j) = (x^k, x^j)$ 容易计算, 但由此形成的法方程组系数矩阵当 $n \geq 4$ 时是病态矩阵, 用单字长在计算机上求解法方程组, 其结果往往不太可靠, 如何解决?

注意看法方程

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

若要法方程非对角线上元素为零,

$\varphi_k (k = 0, 1, \dots, n)$ 应怎么取?

可采用正交基底. 为此, 我们先介绍正交多项式

➤ 5 用正交函数系作最佳平方逼近

/* Orthogonal Polynomials And L-S Approximation */

若 $\{g_k(x)\} (k=0,1,\dots,n)$ 是带权 $\rho(x)$ 正交的函数系, 即

$$(g_k, g_j) = \int_a^b \rho(x) g_k(x) g_j(x) dx = 0 \quad (j \neq k)$$

那么, 由法方程组 $\sum_{k=0}^n (g_k, g_j) a_j = (f, g_j)$ 的各个方程可以独立地解得

$$a_j^* = \frac{(g_j, f)}{(g_j, g_j)} \quad (j=0,1,\dots,n)$$

从而得出最佳平方逼近函数

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

这里的每个 a_j^* 与 n 是无关的, 因此对于函数 $f(x) \in C[a,b]$ 与正交基函数系 g_0, g_1, \dots , 只要按公式逐个计算出 $a_j^* (j=0,1,2,\dots)$ 即可以得出一个级数

$$a_0^* g_0(x) + a_1^* g_1(x) \cdots$$

这个级数称为 $f(x)$ 对应于基函数系 $\{g_k(x)\}_0^\infty$ 的广义Fourier级数,

系数 a_k^* 称为广义Fourier系数, 对任意固定的 n , 其部分和 $s_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* g_k(x)$ 称为广义多项式, 就是所求的最佳平方逼近多项式。

当 $f(x) \in C[-1, 1]$ 时, 可以用勒让德多项式作基函数 $\{g_k\} = \{P_k(x)\}$,

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

其中
$$a_k^* = \frac{(P_k, f)}{(P_k, P_k)} = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_k(x) dx \quad (k = 0, 1, \dots, n)$$

则 a_k^* 是使 $\left\| f(x) - \sum_{k=0}^n a_k^* P_k(x) \right\|_2^2$ 最小的最佳平方逼近多项式。

这时的平方误差为

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

例 求 $f(x) = e^x$ 在 $[-1, 1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式，
要求用 $\{P_0, P_1, P_2, P_3\}$ 作基函数。

解 先计算 (P_k, f) ($k = 0, 1, 2, 3$)

$$(P_0, f) = \int_{-1}^1 e^x dx = e - \frac{1}{e} = 2.3504 \quad (P_1, f) = \int_{-1}^1 x e^x dx = 2e^{-1} = 0.7358$$

$$(P_2, f) = \int_{-1}^1 \left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \right) e^x dx = e - \frac{7}{e} = 0.02013$$

$$(P_3, f) = \int_{-1}^1 \left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2} \right) e^x dx = 37\frac{1}{e} - 5e = 0.02013$$

$$a_0^* = \frac{(P_0, f)}{2} = 1.1752, \quad a_1^* = \frac{3}{2}(P_1, f) = 1.1036$$

$$a_2^* = \frac{5}{2}(P_2, f) = 0.3578, \quad a_3^* = \frac{7}{2}(P_3, f) = 0.07046$$

于是得

$$s_3^*(x) = 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3$$

平方误差

$$\|\delta_3\|_2^2 = \|e^x - s_3^*(x)\|_2^2 = \int_{-1}^1 e^{2x} dx - \sum_{k=0}^3 \frac{2}{2k+1} a_k^{*2} = 0.88 \times 10^{-4}$$

例 求 $f(x) = \sqrt{x}$ 在区间 $[0, 1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式

解 令 $x = \frac{1}{2}(1+t)$, 则

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1+t} = \varphi(t), \quad -1 \leq t \leq 1$$

先求 $\varphi(t)$ 在区间 $[-1, 1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式 $q_1(t)$, 由

$$a_0^* = \frac{1}{2}(\varphi, P_0) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1+t} dt = \frac{2}{3}$$

$$a_1^* = \frac{3}{2}(\varphi, P_1) = \frac{3}{2} \int_{-1}^1 \frac{t}{\sqrt{2}} \sqrt{1+t} dt = \frac{6}{15}$$

可知

$$q_1(t) = \frac{2}{3}P_0(t) + \frac{6}{15}P_1(t) = \frac{2}{3} + \frac{6}{15}t, \quad -1 \leq t \leq 1$$

将 $t = 2x - 1$ 代入 $q_1(t)$, 就得 \sqrt{x} 在区间 $[0, 1]$ 上的一次最佳平方逼近多项式

$$s_1^*(x) = \frac{2}{3} + \frac{6}{15}(2x - 1) = \frac{4}{15} + \frac{12}{15}x$$

Algorithm: Orthogonal Polynomials Approximation

To approximate a given function by a polynomial with error bounded by a given tolerance.

Input: number of data m ; $x[m]$; $y[m]$; weight $w[m]$; tolerance TOL ;
maximum degree of polynomial Max_n .

Output: coefficients of the approximating polynomial.

Step 1 Set $\varphi_0(x) \equiv 1$; $a_0 = (\varphi_0, y)/(\varphi_0, \varphi_0)$; $P(x) = a_0 \varphi_0(x)$; $err = (y, y) - a_0 (\varphi_0, y)$;

Step 2 Set $\alpha_1 = (x \varphi_0, \varphi_0)/(\varphi_0, \varphi_0)$; $\varphi_1(x) = (x - \alpha_1) \varphi_0(x)$;

$a_1 = (\varphi_1, y)/(\varphi_1, \varphi_1)$; $P(x) += a_1 \varphi_1(x)$; $err -= a_1 (\varphi_1, y)$;

Step 3 Set $k = 1$;

Step 4 While $((k < Max_n) \&\&(|err| \geq TOL))$ do steps 5-7

Step 5 $k ++$;

Step 6 $\alpha_k = (x \varphi_1, \varphi_1)/(\varphi_1, \varphi_1)$; $\beta_{k-1} = (\varphi_1, \varphi_1)/(\varphi_0, \varphi_0)$;

$\varphi_2(x) = (x - \alpha_k) \varphi_1(x) - \beta_{k-1} \varphi_0(x)$; $a_k = (\varphi_2, y)/(\varphi_2, \varphi_2)$;

$P(x) += a_k \varphi_2(x)$; $err -= a_k (\varphi_2, y)$;

Step 7 Set $\varphi_0(x) = \varphi_1(x)$; $\varphi_1(x) = \varphi_2(x)$;

Step 8 Output (); STOP.

注: $err = \|P - y\|^2 = (P - y, P - y) = \left(\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k - y, \sum_{i=0}^n a_i \varphi_i - y \right)$

$$= \sum_{k=0}^n a_k^2 (\varphi_k, \varphi_k) - 2 \sum_{k=0}^n a_k (\varphi_k, y) + (y, y) = (y, y) - \sum_{k=0}^n a_k (\varphi_k, y)$$

例：用 $y = c_0 + c_1x + c_2x^2$ 来拟合 $\begin{array}{c|c|c|c|c} x & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline y & 4 & 10 & 18 & 26 \end{array}, \omega \equiv 1$

解：通过正交多项式 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x)$ 求解

设 $y = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + a_2\varphi_2(x)$

$$a_k = \frac{(\varphi_k, y)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

$$\varphi_0(x) = 1 \quad a_0 = \frac{(\varphi_0, y)}{(\varphi_0, \varphi_0)} = \frac{29}{2}$$

$$\alpha_1 = \frac{(x\varphi_0, \varphi_0)}{(\varphi_0, \varphi_0)} = \frac{5}{2} \quad \varphi_1(x) = (x - \alpha_1)\varphi_0(x) = x - \frac{5}{2} \quad a_1 = \frac{(\varphi_1, y)}{(\varphi_1, \varphi_1)} = \frac{37}{5}$$

$$\alpha_2 = \frac{(x\varphi_1, \varphi_1)}{(\varphi_1, \varphi_1)} = \frac{5}{2} \quad \beta_1 = \frac{(\varphi_1, \varphi_1)}{(\varphi_0, \varphi_0)} = \frac{5}{4}$$

$$\varphi_2(x) = (x - \frac{5}{2})\varphi_1(x) - \frac{5}{4}\varphi_0(x) = x^2 - 5x + 5 \quad a_2 = \frac{(\varphi_2, y)}{(\varphi_2, \varphi_2)} = \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow y &= \frac{29}{2} \times 1 + \frac{37}{5} \left(x - \frac{5}{2}\right) + \frac{1}{2} (x^2 - 5x + 5) \\ &= \frac{1}{2}x^2 + \frac{49}{10}x - \frac{3}{2} \end{aligned}$$

与前例结果一致。

注：手算时也可用待定系数法确定函数族。

