第八章 函数逼近

殷东生
yindongsheng@tsinghua.edu.cn

清华大学数学科学系

2023年秋季学期

设 X是区间$[a,b]$某类函数组成的线性空间，M为X的子集。函数逼近问题可以叙述如下：

定义 (函数逼近)

设$f\in X$，求 $p\in M$使得

$$\|p-f\|=\min_{s\in M}\|f-s\|$$

通常取 $C[a,b]$，M为便于计算的函数集合。一般取M为代数多项式、三角多项式或有理多项式组。

- 代数多项式： $M=\mathcal{P}_n([a,b])$；
- 三角函数：e^{ikx}, $sinkx$, $coskx$, $k=0,1,\cdots$；
- 有理多项式：

$$\frac{p_m(x)}{q_n(x)}, p_m\in\mathcal{P}_m([a,b]),\ p_n\in\mathcal{P}_n([a,b]).$$

常用的度量有：

- 极大范数逼近为 一致逼近–uniform approximation：

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

- 平方范数逼近 称为平方逼近–least-squares approximation：

$$\|f-p\|_2 = \Big[\int_a^b |f(x)-p(x)|^2 dx\Big]^{\frac{1}{2}}$$

- 1-范数逼近

$$\|f-p\|_1 = \int_a^b |f(x)-p(x)| dx.$$

设ρ是 $[a,b]$上的权函数，定义

$$L^2_\rho[a,b]=\left\{f:\|f\|_2=\sqrt{\int_a^b \rho(x)[f(x)]^2dx}\right\}$$

$L^2_\rho[a,b]$是$\mathbb{R}$上的线性空间，若$\rho(x)\equiv 1$，则为$L^2[a,b]$。

定义 (函数系的线性无关)

设$\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\in L^2_\rho[a,b]$，若没有$n+1$个不全为零的数$c_j,j=0,1,\cdots,n$ 使得

$$\|c_0\varphi_0+c_1\varphi_1+\cdots+c_n\varphi_n\|_2=0,$$

则称函数系$\{\varphi_j,j=0,1\cdots,n\}$在$L^2_\rho[a,b]$上线性无关。

设 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$是$L^2_\rho[a,b]$上线性无关的函数， 则

$$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n\}$$

是这些函数张成的线性空间。$\forall s \in \Phi$可以写成

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

定义 (最佳平方逼近)

设$f \in L^2_\rho[a,b]$,若$\exists s^* \in \Phi$使得

$$\|f - s^*\|_2 = \min_{s \in \Phi} \|f - s\|_2,$$

则称 s^*为 f在Φ中的最佳平方逼近函数。

求最佳平方逼近s^*等价于求下面的多元函数

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

的极小值，则由多元函数函数取极值的必要条件有

$$\begin{aligned} & \frac{\partial F(a_0, a_1, \cdots, a_n)}{\partial a_k} \\ = \ & 2\int_a^b \rho(x)[f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x)]\varphi_k(x)dx = 0, \quad 0 \le k \le n \end{aligned}$$

由此可得

$$\sum_{j=0}^{n} (\varphi_j, \varphi_k) a_j = (f, \varphi_k), k = 0, 1, \cdots, n. \tag{0.1}$$

(0.1)称为法方程–normal equation。

法方程

写成矩阵形式有：

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

其中内积定义为

$$\begin{aligned} (\varphi_k,\varphi_j) &= \int_a^b \rho(x)\varphi_k(x)\varphi_j(x)dx, \\ (f,\varphi_k) &= \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx = d_k. \end{aligned}$$

定理

设$\mathbb{X}$是内积空间，$(\cdot,\cdot)$是其上的内积，对于$x_1, x_2, \cdots, x_n \in \mathbb{X}$，若

$$G_n = \Big(G_{ij} = (x_i, x_j)\Big)_{n\times n},$$

则$\det G_n \neq 0 \iff x_1, x_2, \cdots, x_n$线性无关。

Galerkin 正交性

引理

若 $s^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* \varphi_k(x)$ 是法方程 *(0.1)*的解，则有

$$(f(x) - s^*(x), s(x)) = 0, \quad \forall s(x) \in \Phi.$$

法方程 (0.1)存在唯一解

$$a_k = a_k^*,\ k = 0, 1, \cdots, n \Longrightarrow s^* = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_k(x).$$

定理

$s^*(x)$是$f(x)$在Φ中的最佳平方逼近，即

$$\|f - s^*\|_2 \leq \|f - s\|_2,\ \ \forall s \in \Phi.$$

定理

$s^*(x)$是$f(x)$在Φ中的最佳平方逼近当且仅当$s^*(x)$是$f(x)$在Φ中的正交投影，即

$$(f(x)-s^*(x), s(x)) = 0, \quad \forall s(x) \in \Phi.$$

令

$$\delta(x) = f(x) - s^*(x),$$

则 $\|\delta\|_2$称为最佳平方逼近的误差，

$$\|\delta\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_j, f).$$

有限元方法

考虑一维Poisson方程：

$$
\begin{aligned}
&-u''(x) = f(x), \quad 0 < x < 1,\\
&u(0) = u(1) = 0.
\end{aligned}
$$

设$v(x)$是定义在$[0,1]$上满足$v(0) = v(1) = 0$的函数，在Poisson方程两边同乘于$v(x)$并分部积分：

$$
\begin{aligned}
-\int_0^1 u''v dx &= -\int_0^1 v du' = -u'v\Big|_0^1 + \int_0^1 u'v' dx\\
&= \int_0^1 u'v' dx = \int_0^1 fv dx
\end{aligned}
$$

令

$$
a(u,v) = \int_0^1 u'v' dx, \quad (f,v) = \int_0^1 fv dx
$$

引理

如上定义的$a(u,v)$是一个内积。

定义空间

$$V=\left\{v\in L^2([0,1]),\quad a(v,v)<+\infty,\quad v(0)=v(1)=0\right\},$$

则Poisson方程等价的转化为如下的变分问题：

$$\begin{aligned}&\text{求}\quad u(x)\in V,\\&\text{使得}\quad a(u,v)=(f,v),\qquad \forall v(x)\in V\end{aligned}$$

此处V是无穷维空间，无法直接求解，必须考虑其有限维子空间V_h中的近似问题：

$$\begin{aligned}&\text{求}\quad u_h(x)\in V_h,\\&\text{使得}\quad a(u_h,v_h)=(f,v_h),\qquad \forall v_h(x)\in V_h\end{aligned}\tag{0.2}$$

有Galerkin正交关系

$$a(u-u_h,v_h)=0,\quad \forall v_h\in V_h.$$

有限元空间

有限元方法就是选取V_h为有限元空间，考虑$[0,1]$的一个剖分

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{i-1} < x_i < \cdots < x_n = 1$$

其中 x_i称为网格节点，$h_i = x_i - x_{i-1}, 1 \le i \le n$，而 $h = \max_{1\le i\le n} h_i$。定义线性有限元空间

$$V_h = \left\{ v \in C([0,1]), v(0) = v(1) = 0, \ \ v\big|_{[x_{i-1},x_i]} \in \mathcal{P}_1 \right\}$$

此空间其实是分片线性函数空间，其基函数即为分片线性插值的节点基函数$\phi_i, 1 \le i \le n-1$。

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \dfrac{x - x_{i-1}}{h_i}, & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \dfrac{x_{i+1} - x}{h_{i+1}}, & x \in [x_i, x_{i+1}], \end{cases} \qquad \phi_i(x) = 0, \ x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}]$$

对$\forall v_h \in V_h$，令

$$v_i = v_h(x_i), \quad 1 \le i \le n-1,$$

则

$$v_h(x) = v_1\phi_1(x) + v_2\phi_2(x) + \cdots + v_{n-1}\phi_{n-1}(x)$$

同理有

$$u_h(x) = \sum_{i=1}^{n-1} u_i\phi_i(x), \qquad \text{其中} \quad u_i = u_h(x_i)$$

(0.2)对任意的$v_h \in V_h$成立，只需对V_h的基底$\phi_i(x), 1 \le i \le n-1$成立：

$$a(u_h, \phi_i) = (f, \phi_i), \quad 1 \le i \le n-1.$$

亦即

$$a(\phi_1, \phi_i)u_1 + a(\phi_2, \phi_i)u_2 + \cdots + a(\phi_{n-1}, \phi_i)u_{n-1} = (f, \phi_i),$$
$$1 \le i \le n-1.$$

令

$$
\begin{aligned}
k_{ij} &= a(\phi_j, \phi_i) = \int_0^1 \phi_j' \phi_i' dx, \\
f_i &= (f, \phi_i) = \int_0^1 f \phi_i dx
\end{aligned}
$$

和

$$
K = (k_{ij}) \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}, \quad F = (f_i) \in \mathbb{R}^{n-1}, \qquad U = (u_i) \in \mathbb{R}^{n-1}
$$

可得法方程

$$
KU = F \tag{0.3}
$$

此处K称为刚度矩阵，F为荷载向量。
当x_i和x_j不相邻时

$$
a(\phi_i, \phi_j) = 0,
$$

所以K是稀疏矩阵。

刚度矩阵的计算

经过简单的计算有

$$\begin{aligned}
\int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_i' \phi_i' dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h_i^2} dx = \frac{1}{h_i}, \\
\int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_{i-1}' \phi_{i-1}' dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h_i^2} dx = \frac{1}{h_i}, \\
\int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_i' \phi_{i-1}' dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} -\frac{1}{h_i^2} dx = -\frac{1}{h_i}.
\end{aligned}$$

则

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \phi_i' \phi_i' dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_i' \phi_i' dx + \int_{x_i}^{x_i+1} \phi_i' \phi_i' dx = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}}, \\
\int_0^1 \phi_i' \phi_{i-1}' dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_i' \phi_{i-1}' dx = -\frac{1}{h_i}.
\end{aligned}$$

刚度矩阵

$$
\begin{aligned}
a(\phi_i, \phi_i) &= \int_0^1 \phi_i'\phi_i' dx = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}}, \\
a(\phi_i, \phi_{i-1}) &= \int_0^1 \phi_i'\phi_{i-1}' dx = -\frac{1}{h_i}.
\end{aligned}
$$

刚度矩阵

$$
K = \begin{pmatrix}
\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} & -\frac{1}{h_2} & & & & \\
-\frac{1}{h_1} & \frac{1}{h_2} + \frac{1}{h_3} & -\frac{1}{h_3} & & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & & \\
& & -\frac{1}{h_i} & \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} & -\frac{1}{h_{i+1}} & \\
& & & \ddots & \ddots & \ddots \\
& & & & -\frac{1}{h_{n-2}} & \frac{1}{h_{n-2}} + \frac{1}{h_{n-1}}
\end{pmatrix}
$$

例

考虑$[0,1]$上连续函数$f(x)$的最佳平方逼近，取$\rho(x)=1$，

$$\varphi_k(x)=x^k, k=0,1\cdots,n,$$

求f在$\mathcal{P}_n[0,1]$中的最佳平方逼近多项式。

计算法方程的系数矩阵和右端，有

$$\begin{aligned}(\varphi_j,\varphi_k) &= \int_0^1 x^{j+k}dx=\frac{1}{j+k+1},\ k,j=0,1\cdots,n,\\ (f,\varphi_k) &= \int_0^1 f(x)x^k dx=d_k, k=0,1,\cdots,n.\end{aligned}$$

则法方程的系数矩阵为

$$H_{n+1}(0,1)=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \cdots & \frac{1}{2n+1} \end{bmatrix}$$

H_{n+1}被称为Hilbert矩阵。
求解法方程可得最佳平方逼近函数：

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

Hilbert矩阵是病态的，因此直接从法方程求

$$a_j^*,\quad j=0,1\cdots,n$$

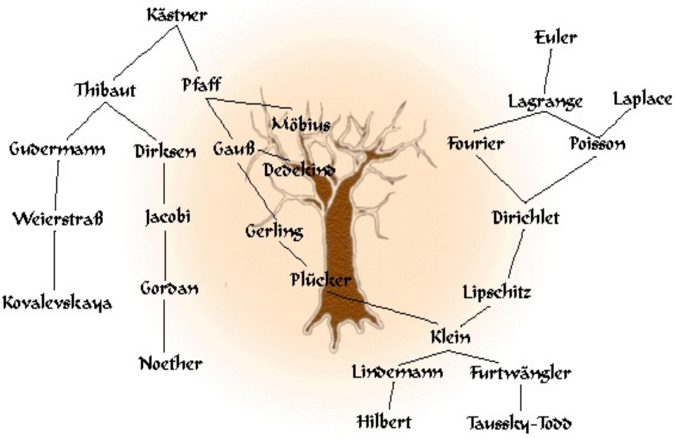
是相当困难的。

数学家简介 (Hilbert)

希尔伯特（*1862–1943*），德国数学家，於代数不变量、代数数论、几何基础、变分法、*Hilbert* 空间等方面都有了不起的贡献，堪称他那时代最伟大的数学家。他提倡数学公理化，还有提出「*Hilbert 23*问题」，对於二十世纪的数学发展影响甚大。希尔伯特去世时，德国《自然》杂志发表过这样的观点：现在世界上难得有一位数学家的工作不是以某种途径导源于希尔伯特的工作。他像是数学世界的亚历山大，在整个数学版图上，留下了他那显赫的名字。*1900*年，希尔伯特在巴黎数学家大会上提出了*23*个最重要的问题供二十世纪的数学家们去研究，这就是著名的"希尔伯特*23*个问题"。*1976*年，在美国数学家评选的自*1940*年以来美国数学的十大成就中，有三项就是希尔伯特第*1*、第*5*、第*10*问题的解决。由此可见，能解决希尔伯特问题，是当代数学家的无上光荣。

他的学生有：Hermann Weyl, Richard Courant等。

Mathematics Genealogy



设

$$f(x) \in L_\rho^2[a,b], \Phi = \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\},$$

其中 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$是满足如下关系的多项式族：

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \varphi_1(x)\varphi_j(x)\rho(x)dx = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ A_j > 0 & i = j \end{cases}$$

所以法方程(0.1)的系数矩阵为

$$G_n = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix}$$

直接求解可得

$$a_k^* = \frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}, k = 0, 1, \cdots, n.$$

因此f在 Φ中的最佳平方逼近函数为

$$s_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} \frac{(f,\varphi_j)}{\|\varphi_j\|_2^2}\varphi_j(x). \tag{0.4}$$

定义 (权函数)

设定义在$[a,b]$上的函数 ρ满足：

1. $\rho(x) \geq 0,\ \forall x \in (a,b)$,
2. $\int_a^b x^k \rho(x) dx$存在且是有限的$(k = 0, 1 \cdots)$,
3. 若对$[a,b]$上连续的$g \geq 0$有

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

   则$g(x) \equiv 0$。

则称ρ是$[a,b]$上的一个**权函数**–*weight funtion*。

定义 (带权内积)

设$f, g \in C[a,b]$, ρ是 $[a,b]$上的权函数，由下式定义的内积：

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

称为带权ρ的内积，而相应的L^2范数

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

称为带权的 L^2范数。

定义

设$f,g\in C[a,b]$,ρ为 $[a,b]$上的权函数，若

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

则称f与g在$[a,b]$上带权正交。

定义 (正交多项式–orthogonal polynomial)

设φ_n是$[a,b]$上的首项系数$a_n\neq 0$的n次多项式，ρ为$[a,b]$上的权函数，如果多项式序列$\{\varphi_n, n\geq 0\}$满足

$$(\varphi_i,\varphi_j)=\int_a^b \rho(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)dx=\begin{cases}0, & i\neq j,\\ A_i, & i=j,\end{cases}$$

则称多项式序列$\{\varphi_n, n\geq 0\}$在$[a,b]$上带权ρ正交，并称φ_n为 $[a,b]$上带权ρ的n次正交多项式。

Gram-Schmidt正交化构造正交多项式

利用Gram-Schmidt方法可以构造出在$[a,b]$上带权ρ正交的多项式序列$\{\varphi_n, n \geq 0\}$，设

$$\psi_j(x) = x^j, j = 0, 1, \cdots, n$$

令

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1, \\ \varphi_k(x) = \psi_k(x) - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\psi_k, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)} \varphi_j(x), k = 1, 2, \cdots, n. \end{cases}$$

这样构造的$\{\varphi_k : k \geq 0\}$具有下面的基本性质：

1. φ_k是最高次项的系数为1的k次多项式，
2. 任何k次多项式均可表示成前$k+1$个$\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_k$的线性组合，
3. 对于任何$k \neq l$有$(\varphi_k, \varphi_l) = 0$，并且$\varphi_k$与任一次数小于$k$的多项式正交。

定理

设$\{\varphi_n, n \geq 0\}$是$[a,b]$上带权ρ的正交多项式序列，则φ_n在区间(a,b) 内恰有n个不同的实零点。

定理 (三项递推关系)

设$\{\varphi_n, n \geq 0\}$是 $[a,b]$上带权ρ的正交多项式序列，对于 $n \geq 1$有

$$
\begin{aligned}
\varphi_{n+1}(x) &= (\alpha_n x + \beta_n)\varphi_n(x) + \gamma_{n-1}\varphi_{n-1}(x), \\
\varphi_n(x) &= a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0, \\
\alpha_n &= \frac{a_{n+1}}{a_n}, \quad \beta_n = -\frac{a_{n+1}}{a_n}\frac{(\varphi_n, x\varphi_n)}{(\varphi_n, \varphi_n)}, \\
\gamma_{n-1} &= -\frac{a_{n+1}a_{n-1}}{a_n^2}\frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}.
\end{aligned}
$$

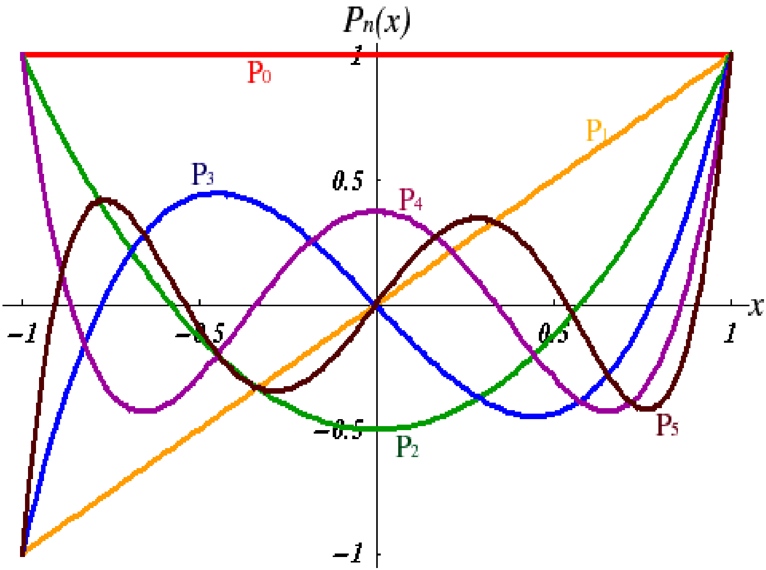
在区间$[-1,1]$上权函数$\rho=1$，称多项式

$$\begin{cases} P_0(x)=1, \\ P_n(x)=\dfrac{1}{2^n n!}\dfrac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n], n\geq 1, \end{cases}$$

为 Legendre多项式。显然P_n的首项系数为$\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$。令

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

则$\tilde{P}_n$中x^n的系数为1，称$\tilde{P}_n$为首项系数为1的Legendre多项式。



Pn(x)
1
P0
P1
P3
0.5
P4
x
−1
−0.5
0.5
1
−0.5
P2
P5
−1

Legendre多项式的性质

1. 正交性：

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

2. 递推关系：

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

3. 奇偶性：

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

可用归纳法证明。

首1的Legendre多项式

首项系数为1的Legendre多项式的递推关系：

$$\begin{cases} \tilde{P}_0 = 1, \tilde{P}_1(x) = x, \\ \tilde{P}_{n+1}(x) = x\tilde{P}_n(x) - \dfrac{n^2}{(2n+1)(2n-1)}\tilde{P}_{n-1}(x), n = 1, 2, \cdots . \end{cases}$$

利用$\tilde{P}_0 = 1$以及上面的递推公式有：

$$\begin{cases} \tilde{P}_1(x) = x, \\ \tilde{P}_2(x) = x^2 - \frac{1}{3} \\ \tilde{P}_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x \\ \tilde{P}_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35} \\ \ldots \end{cases}$$

除了用递推公式，还可以用Gram-Schmidt正交化来得到首1的正交多项式：

$$
\begin{aligned}
\tilde{P}_0(x) &= 1,\ (\tilde{P}_0,\tilde{P}_0) = \int_{-1}^{1} 1dx = 2, \\
(x,\tilde{P}_0) &= \int_{-1}^{1} x\cdot 1dx = 0,\ \tilde{P}_1(x) = x - \frac{(x,\tilde{P}_0)}{(\tilde{P}_0,\tilde{P}_0)} = x, \\
(x^2,\tilde{P}_0) &= \int_{-1}^{1} x^2dx = \frac{2}{3},\ (x^2,\tilde{P}_1) = \int_{-1}^{1} x^3dx = 0, \\
(\tilde{P}_1,\tilde{P}_1) &= \int_{-1}^{1} x^2dx = \frac{2}{3}, \\
\tilde{P}_2(x) &= x^2 - \frac{(x^2,\tilde{P}_1)}{(\tilde{P}_1,\tilde{P}_1)}\tilde{P}_1(x) - \frac{(x^2,\tilde{P}_0)}{(\tilde{P}_0,\tilde{P}_0)} = x^2 - \frac{1}{3},
\end{aligned}
$$

数学家简介 (Legendre)

勒让德（*1752-1833*），法国数学家。提出了对素数定理和二次互反律的猜测并发表了初等几何教科书。将几何理论算术化、代数化，证明了圆周率π的无理性，《数论》论述了二次互反律及其应用，给出连分数理论及素数个数的经验公式等，使他成为解析数论的先驱者之一；提出三类基本椭圆积分，证明每个椭圆积分可以表示为这三类积分的组合，并编制了详尽的椭圆积分数值表，使他成为椭圆积分理论的奠基人之一。其他贡献有：确定极值函数存在的“勒让德条件”，创立并发展了测地线（大地测量）理论（*1787*），提出球面三角形的有关定理，还发表了关於彗星轨道的著作。*1805*年独立发现高斯（*Gauss*）不久前使用过的最小二乘法原理等等。

Legendre 函数
Legendre 变换
Gauss－Legendre algorithm等

于$x \in [-1,1]$，称n次多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), n = 0, 1, \cdots.$$

为Chebyshev多项式。 等价的有

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

$\left\{T_n, n \geq 0\right\}$是$[-1,1]$上带权$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$的正交多项式序列。

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

Chebyshev多项式的性质

1. $T_n(-x) = (-1)^n T_n(x), n = 0, 1, 2, \cdots$.
2. T_n的首项系数为$2^{n-1}, n = 1, 2, \cdots$.
3. $T_n(x)$在$(-1, 1)$上有n个不同的零点

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

4. T_n的极值点为

$$\bar{x}_k = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right),\ k = 0, 1, \cdots, n$$

并且

$$T_n(\bar{x}_k) = (-1)^k, k = 0, 1, \cdots, n$$

Lagurre多项式

在区间$(0,+\infty]$上权函数为$\rho(x)=e^{-x}$的正交多项式为Lagurre多项式

$$L_n(x)=e^x\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n e^{-x}),n=0,1,\cdots,$$

可递推定义为

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

其正交性为

$$\int_0^\infty e^{-x}L_n(x)L_m(x)=\begin{cases}0, & m\neq n,\\(n!)^2, & m=n.\end{cases}$$

Hermite多项式

在$(-\infty,\infty)$上带权$\rho(x)=\exp(-x^2)$的正交多项式是Hermite多项式

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2},\ n=0,1,\cdots.$$

其递推关系为

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

正交性

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

例

在$[0,1]$上用权$\rho(x)=1$的正交多项式对$f(x)=\sin\pi x, x\in[0,1]$做二次最佳逼近。

解：用Gram-Schmidt正交化构造正交多项式$\varphi_0,\varphi_1,\varphi_2$，

$$
\begin{aligned}
\varphi_0(x) &= 1,\\
(\varphi_0,\varphi_0) &= 1, (x,\varphi_0)=\frac{1}{2}, \varphi_1(x)=x-\frac{1}{2}\\
(\varphi_1,\varphi_1) &= \frac{1}{12},\\
(x^2,\varphi_1) &= \frac{1}{12},\\
(x^2,\varphi_0) &= \frac{1}{3},\\
\varphi_2(x) &= = x^2-\frac{(x^2,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}\varphi_1-\frac{(x^2,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}\varphi_0 = x^2-x+\frac{1}{6}.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(f,\varphi_0) &= \int_0^1 \sin\pi x dx = \frac{2}{\pi}, \\
(f,\varphi_1) &= \int_0^1 (x-\frac{1}{2}\sin\pi x)dx = 0, \\
(f,\varphi_2) &= \int_0^1 (x^2-x+\frac{1}{6})\sin\pi x dx = -\frac{4}{\pi^3}+\frac{1}{3\pi}, \\
(\varphi_2,\varphi_2) &= \int_0^1 (x^2-x+\frac{1}{6})^2 dx = \frac{1}{180}
\end{aligned}
$$

所以

$$
\begin{aligned}
a_0^* &= \frac{(f,\varphi_0)}{\|\varphi_0\|_2^2} = \frac{2}{\pi} \\
a_1^* &= \frac{(f,\varphi_1)}{\|\varphi_1\|_2^2} = 0, \\
a_2^* &= \frac{(f,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)} = 180\Big(\frac{1}{3\pi} - \frac{4}{\pi^3}\Big) \\
s_2^* &= a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + a_2^*\varphi_2(x) \\
&= \frac{2}{\pi} + 180\Big(\frac{1}{3\pi} - \frac{4}{\pi^3}\Big)\Big(x^2 - x + \frac{1}{6}\Big) \\
&= 180\Big(\frac{1}{3\pi} - \frac{4}{\pi^3}\Big)x^2 - 180\Big(\frac{1}{3\pi} - \frac{4}{\pi^3}\Big)x \\
&\quad + \frac{2}{\pi} + 30\Big(\frac{1}{3\pi} - \frac{4}{\pi^3}\Big)
\end{aligned}
$$

定理

设$f \in C[a,b]$, s_n^*是f的最佳平方逼近多项式，而$\{\varphi_j\}_{j\geq 0}$是正交多项式组，则有

$$\lim_{n\to\infty} \|f - s_n^*\|_2 = 0.$$

对于 $f \in C[a,b]$ 由Parseval等式

$$\|f\|_2^2 = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{(f,\varphi_j)}{\|\varphi_j\|_2} \right)^2.$$

对于首项系数为1 的Legendre多项式 $\tilde{P}_n$有

定理

在所有首项系数为*1*的*n*次多项式中，*Legendre*多项式在$[-1,1]$上与零的平方误差最小。

例

用*Legendre*多项式展开求$f(x)=e^x$在$[-1,1]$上的最佳平方逼近多项式($取n=1,3$)。

解:

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

则

$$\begin{aligned} (f,P_0) &= \int_{-1}^{1} e^x dx \approx 2.3504,\ (f,P_1)=\int_{-1}^{1} xe^x dx \approx 0.7358, \\ (f,P_2) &= \int_{-1}^{1} (\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2})e^x dx \approx 0.1432 \\ (f,P_3) &= \int_{-1}^{1} (\frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x)e^x dx \approx 0.02013. \end{aligned}$$

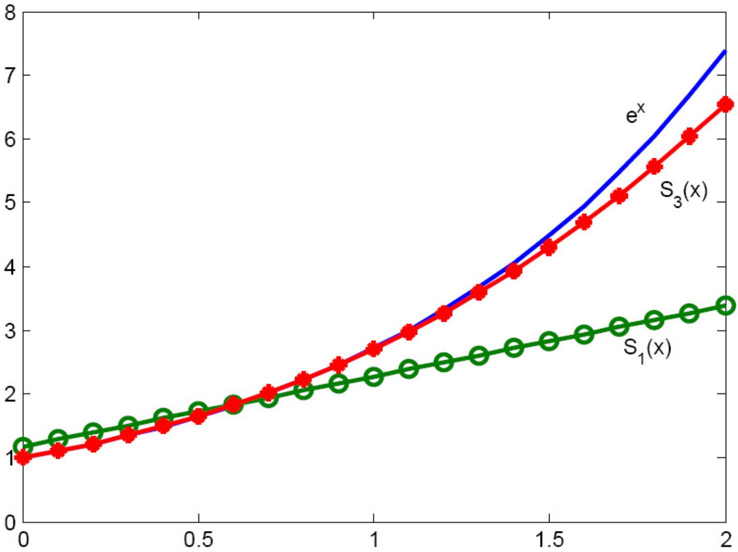
$$\int_{-1}^{1}[P_j(x)]^2dx = \frac{2}{2j+1}, \; j = 0, 1, 2, \cdots,$$

则

$$\begin{aligned} a_0^* &= 1.1752, \;\; a_1^* = 1.1036, \\ a_2^* &= 0.3578, \;\; a_3^* = 0.07046. \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} S_1^*(x) &= 1.1752 + 1.1036x, \\ S_3^*(x) &= 1.1752 + 1.1036x + 0.3578(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}) \\ &\quad +0.07046(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x) \\ &\approx 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3 \end{aligned}$$



8
7
6
5
4
3
2
1
0
0
0.5
1
1.5
2
e^x
$S_3(x)$
$S_1(x)$

Chebyshev多项式零点插值

Lagrange插值的余项为

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x), \quad x \in [a,b]$$

这里$\xi(x) \in (a,b)$，节点多项式

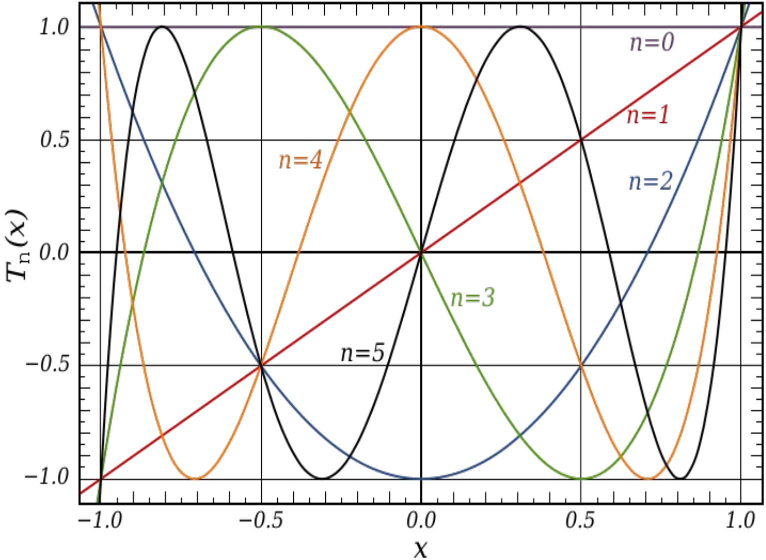
$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \in \mathcal{P}_{n+1}$$

在微分方程数值解等计算中，插值节点x_i, $0 \le i \le n$可以自由选取，此时是否能

$$\min \|f(x) - L_n(x)\|_\infty = \frac{1}{(n+1)!}\min \max_{x_i} |f^{(n+1)}(\xi)\omega_{n+1}(x)|,$$

这里$f^{(n+1)}(\xi)$和f本身的性质和节点的选取有关，很难精确估算，但节点多项式$\omega_{n+1}(x)$可以通过 Chebyshev 多项式零点插值来达到。

Chebyshev多项式



定理

若$p_n(x)$是首项系数为1 的n次多项式，则

$$\max_{-1\leq x\leq 1} |p_n(x)| \geq 2^{1-n}.$$

由Chebyshev多项式的性质知：

$$\max_{-1\le x\le 1}|\tilde{T}_n| = \max_{-1\le x\le 1}\left|\frac{1}{2^{n-1}}T_n\right| = 2^{1-n}.$$

因此在插值时，有：

$$\max_{x\in[-1,1]}|\tilde{T}_{n+1}(x)| \le \max_{x\in[-1,1]}|(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)|$$

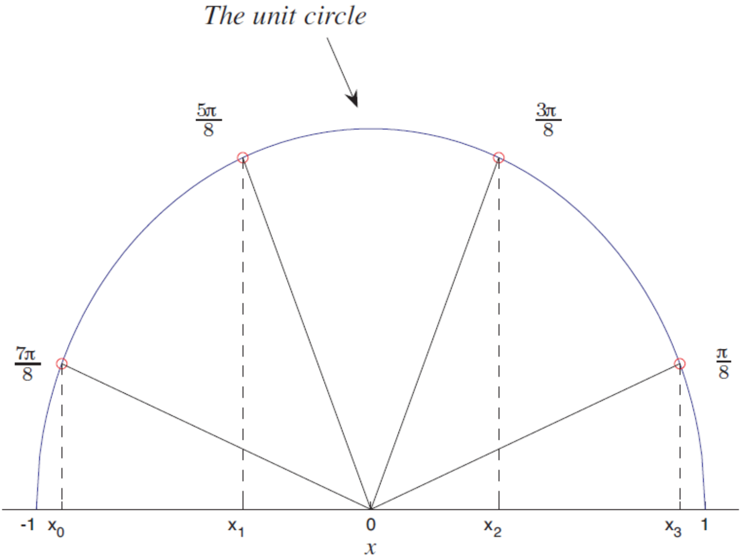
若要使得$\max|\omega_{n+1}(x)|$达到极小，则$x_i,\ 0\le i\le n$应为$T_{n+1}(x)$的零点

$$x_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2n+2}\pi\right),\quad 0\le i\le n.$$

此时

$$|f(x)-L_n(x)| \le \frac{1}{2^n(n+1)!}\max_{|\xi|\le 1}|f^{(n+1)}(\xi)|,\quad \forall -1\le x\le 1.$$

Chebyshev多项式的零点



若$x \in [a,b]$，可通过变换

$$x = \frac{(b-a)t}{2} + \frac{a+b}{2}, \quad t \in [-1,1]$$

来实现Chebyshev零点插值。

定理

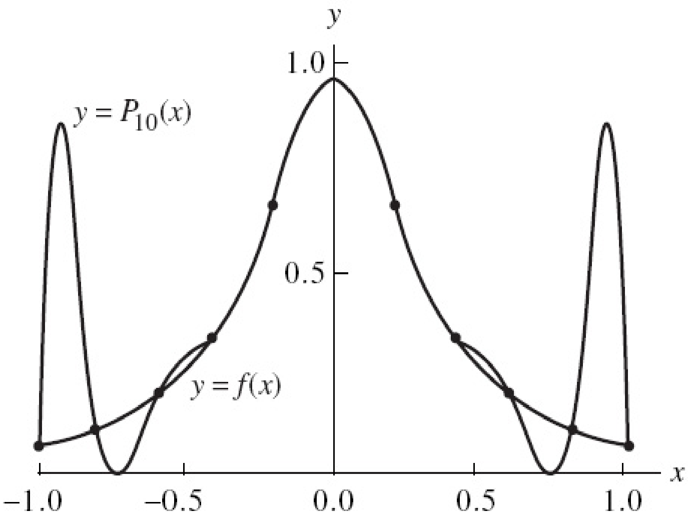
设$f \in C^{n+1}[a,b]$，$L_n(x) \in \mathcal{P}_n$是$f(x)$的n次Lagrange插值多项式，插值节点为

$$x_i = \frac{1}{2}(b-a)\cos\frac{(i+1/2)\pi}{n+1} + \frac{1}{2}(b+a), \ \ 0 \le i \le n,$$

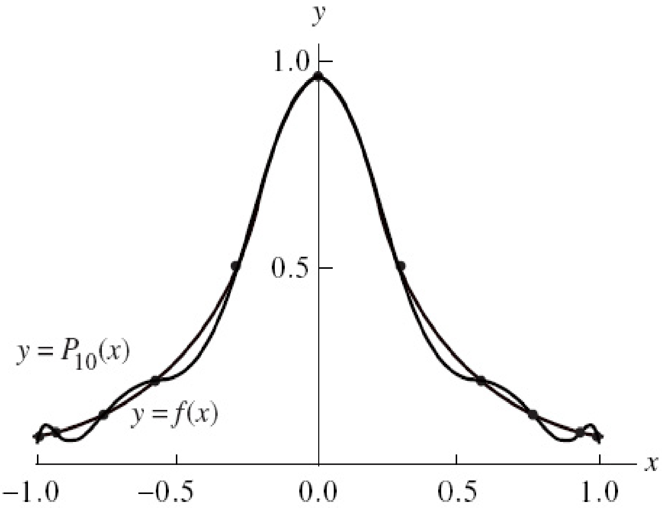
则有

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

等距节点插值

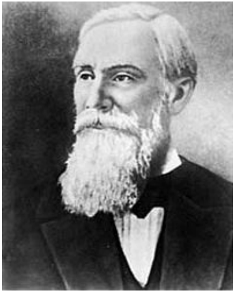


Chebyshev多项式零点插值



数学家简介 (Chebyshev)

卡切比雪夫（*1821–1894*），俄罗斯数学家、力学家，俄罗斯数学的奠基人之一。他的学生有*Lyapunov*和*Markov*等。他的研究内容涉及数论、概率论、函数逼近论、积分学等方面。他证明了贝尔特兰公式，自然数列中素数分布的定理，大数定律的一般公式以及中心极限定理。在力学方面，他主要从事这些数学问题的应用研究。他在一系列专论中对最佳近似函数进行了解析研究，并把成果用来研究机构理论。他首次解决了直动机构（将旋转运动转化成直线运动的机构）的理论计算方法，并由此创立了机构和机器的理论，提出了有关传动机械的结构公式。



最小二乘法（回归）

已知函数$f(x)$在一些离散点上的值

$$(x_k, f(x_k)),\quad k = 0, 1, \cdots, n,$$

来构造$f(x)$的逼近多项式除了前面的插值法外还有最小二乘多项式拟合法。这种方法对 具有下列特点的数据非常有效：

1. 数据本身就有误差(如物理试验中的观测数据就不可避免的会有误差)。
2. 数据量很大。
3. 数据的采样分布能基本反映函数的变化趋势。

对于这样的数据，插值法是不合适的，亦即放弃让所构造的逼近函数$P(x)$满足插值条件 $P(x_i) = f(x_i)$的要求。

设$\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n$是$L^2_\rho[a,b]$上的线性无关函数组。令

$$\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\},$$

而f为在$m+1$个节点$a=x_0<x_1<\cdots<x_m=b$给定的离散函数，亦即f有函数表

$$(x_k,f(x_k)),\ \ k=0,1,\cdots,m$$

定义 (最小二乘法–least square method)

设f为在$m+1$个节点上给定的离散函数，最小二乘法为求$s^*\in\Phi$使得

$$\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)-s^*(x_j)]^2=\min_{s\in\Phi}\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)-s(x_j)]^2$$

s^*称为f在$m+1$个节点上的最小二乘解，也称为最小二乘曲线拟合。

上述定义中

$$s(x)=\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x),x\in[a,b],$$

是待求的$a_0,a_1,\cdot,a_n$的线性函数，因而亦称上述问题为线性最小二乘问题。

定义离散函数f,g的内积和范数为

$$(f,g)=\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)f(x_j)g(x_j),\qquad \|f\|_2=\sqrt{\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)]^2}.$$

则最小二乘问题实际上是一个最佳平方逼近：

注记

求$s^*\in\Phi$使得

$$\|f-s^*\|_2=\min_{s\in\Phi}\|f-s\|_2,$$

因此 $a_0, a_1, \cdots, a_n$满足法方程

$$\sum_{i=0}^{n} (\varphi_k, \varphi_i) a_i = d_k, \quad k = 0, 1, \cdots, n. \tag{0.5}$$

其中$d_k = (f, \varphi_k) = \sum_{j=0}^{m} \rho(x_j) f(x_j) \varphi_k(x_j)$，具体写成方程组的形式为

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

这个方程组为法方程，记其系数矩阵为B，其中

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \sum_{k=0}^{m} \rho(x_k) \varphi_i(x_k) \varphi_j(x_k)$$

记

$$A = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_m) & \varphi_1(x_m) & \cdots & \varphi_n(x_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+1)\times n},$$

$$\Lambda = \mathrm{diag}(\rho(x_0), \rho(x_1), \cdots, \rho(x_m))$$

则法方程的系数矩阵

$$B = A^T \Lambda A$$

若$\rho(x) = 1$则

$$B = A^T A = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_0(x_1) & \cdots & \varphi_0(x_m) \\ \varphi_1(x_0) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_1(x_m) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(x_0) & \varphi_n(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_n(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_m) & \varphi_1(x_m) & \cdots & \varphi_n(x_m) \end{bmatrix}$$

记

$$\boldsymbol{b} = (f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_m))^T \in \mathbb{R}^{m+1}, \quad \boldsymbol{x} = (a_0, a_1, \cdots, a_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

因为$d_k = (f, \varphi_k) = \sum_{j=0}^{m} \rho(x_j) f(x_j) \varphi_k(x_j)$，记

$$\boldsymbol{d} = (d_0, d_1, \cdots, d_n) = \Lambda A^T \boldsymbol{b}$$

且对 $s(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x)$ 有

$$\sum_{j=0}^{m} \rho(x_j)[f(x_j) - s(x_j)]^2 = \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2^2$$

则

定义 (线性最小二乘)

给定矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$及向量$\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$，确定$\boldsymbol{x}$使得

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2 = \|\boldsymbol{r}(x)\|_2 = \min_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{r}(\boldsymbol{y})\|_2 = \min_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n} \|A\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|_2$$

称该问题为线性最小二乘问题。

定理

设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \geq n$，假定$A$为列满秩的，则$\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$有

$$\|A\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}\|_2 \leq \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2 \Longleftrightarrow A^T A\boldsymbol{x}^* = A^T\boldsymbol{b},$$

若法方程中的系数矩阵非奇异，则可得唯一的解

$$a^* = (a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*)^T \in \mathbb{R}^{n+1},$$

相应的最小二乘解为

$$s^*(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i^* \varphi_i(x).$$

类似于正交平方逼近可得

$$\|s^* - f\|_2 \leq \|f - s\|_2, \ \forall x \in \Phi.$$

相应的最小二乘拟合的误差为

$$\|\delta^*\|_2^2 = \|s^* - f\|_2 = \|f\|_2^2 - (f, s^*) = \|f\|_2^2 - \sum_{i=0}^{n} a_i^* (f, \varphi_i).$$

取$\Phi = \text{span}(1, x, x^2, \cdots, x^n)$，此时称为多项式曲线拟合.

定理

多项式拟合中，法方程有唯一解。

例

由下列数据，试用一次、二次、三次和四次多项式进行曲线拟合，并给出相应的误差

j	0	1	2	3	4
x_j	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_j)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

先考虑二次多项式逼近，此时$n=2, m=4$，法方程为

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.562 \\ 1.875 & 1.562 & 1.382 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix}$$

解得$a_0 = 1.0051, a_1 = 0.86468, a_2 = 0.84316$。则二次拟合多项式为

$$s^* = P_2^* = 1.0051 + 0.86468x + 0.84316x^2$$

其误差为

$$\delta_2^* = \sqrt{\sum_{j=0}^{4} [f(x_j) - P_2^*(x_j)]^2} = 1.66 \times 10^{-2}$$

用一次多项式进行拟合，$n=1, m=4$，可得

$$P_1^*(x) = 0.8997 + 1.7078x$$

类似的$n=3, m=4$有

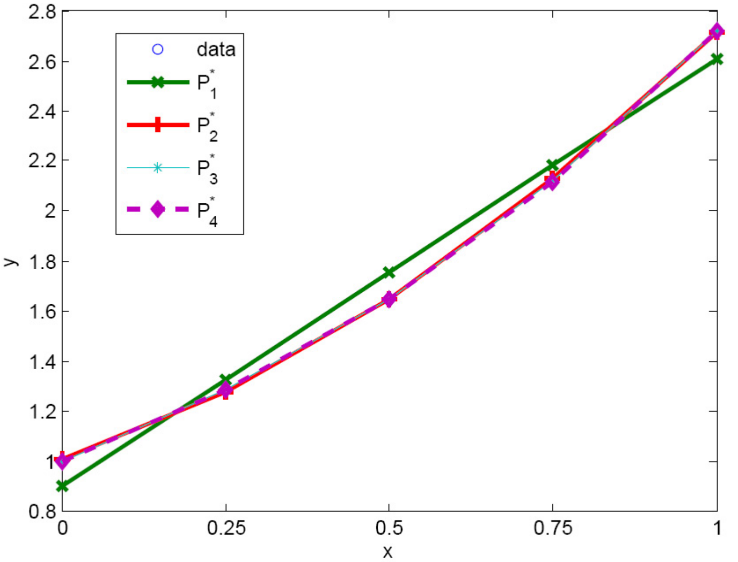
$$P_3^*(x) = 1.0000 + 1.0141x + 0.4253x^2 + 0.2789x^3$$

同样地$n=4, m=4$有

$$P_4^* = 1.0000 + 0.99868x + 0.5101x^2 + 0.1403x^3 + 0.0693x^4$$

相应的误差为

$$\begin{aligned} \delta_1^* &= = 0.916 \\ \delta_3^* &= 7.769 \times 10^{-3}. \end{aligned}$$


data
P_1^*
P_2^*
P_3^*
P_4^*
y
x
2.8
2.6
2.4
2.2
2
1.8
1.6
1.4
1.2
1
0.8
0
0.25
0.5
0.75
1

当A为列满秩的假设下，A^TA为对称正定矩阵，因此可以用Cholesky方法求解。

1. 计算$C = A^TA, \boldsymbol{d} = A^T\boldsymbol{b}$;
2. 作Cholesky分解$C = LL^T$;
3. 求解三角方程组$L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{d}$和$L^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$。

计算量为$n^2m + \frac{1}{3}n^3$，一般$m \gg n$，所以主要的计算量为n^2m。
算法的精度比较差，

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{bmatrix} \Rightarrow A^TA = \begin{bmatrix} 1+\epsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1+\epsilon^2 \end{bmatrix}$$

从条件数的角度考虑

$$\mathrm{cond}_2(A^TA) = [\mathrm{cond}_2(A)]^2$$

一般来说最小二乘问题条件数不会很好！
很多时候借助于QR分解来求解最小二乘问题。

定理

设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \geq n$是列满秩的，则存在一个唯一的正交阵$Q \in \mathbb{R}^{m\times n}(Q^TQ = I \in I^{n\times n})$和唯一的具有正对角元$r_{ii} > 0$的上三角阵$R \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得

$$A = QR$$

设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \geq n$列满秩，$A = QR$， 将$Q \in \mathbb{R}^{m\times n}$加上$m-n$个相互正交的列得到

$$[\underbrace{Q}_{n}, \underbrace{\tilde{Q}}_{m-n}]$$

则

$$\begin{aligned}
\|A\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2 &= \|[Q,\tilde{Q}]^T(A\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{bmatrix} Q^T \\ \tilde{Q}^T \end{bmatrix} (QR\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}) \right\|_2 \\
&= \left\| \begin{bmatrix} I^{n\times n} \\ O^{(m-n)\times n} \end{bmatrix} R\boldsymbol{x} - \begin{bmatrix} Q^T\boldsymbol{b} \\ \tilde{Q}^T\boldsymbol{b} \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{bmatrix} R\boldsymbol{x}-Q^T\boldsymbol{b} \\ \tilde{Q}^T\boldsymbol{b} \end{bmatrix} \right\|_2 \\
&= \|R\boldsymbol{x}-Q^T\boldsymbol{b}\|_2^2 + \|\tilde{Q}^T\boldsymbol{b}\|_2^2 \\
&\geq \|\tilde{Q}^T\boldsymbol{b}\|_2^2
\end{aligned}$$

因而$\boldsymbol{x}^*$是原来最小二乘问题的解当且仅当$\boldsymbol{x}^*$是下面问题的解

$$R\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}_1 = Q^T\boldsymbol{b}.$$

利用法方程也可以导出最小二乘解

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x} &= (A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{b} \\
&= (R^TQ^TQR)^{-1}R^TQ^T\boldsymbol{b} \\
&= (R^TR)^{-1}R^TQ^T\boldsymbol{b} \\
&= R^{-1}R^{-T}R^TQ^T\boldsymbol{b} \\
&= R^{-1}Q^T\boldsymbol{b}
\end{aligned}$$

基于QR分解的最小二乘法

从上面的推导得到利用QR分解求解最小二乘法的算法

用QR分解求解线性最小二乘问题

1. 计算A的QR分解$A = QR$;
2. 计算$\boldsymbol{c}_1 = Q^T\boldsymbol{b}$;
3. 求解上三角方程 $R\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}_1$来得到线性最小二乘解。

QR分解求解线性最小二乘问题的计算量为

$$2n^2m - \frac{2}{3}n^3$$

如果$m \gg n$，其计算量为法方程的2倍;
若$m = n$则计算量相同。

正则化

随着模型复杂度的增加，即逼近空间的基底的个数增长，模型会过拟合。一个克服过拟合的方法是正则化，误差函数加上正则项

$$E(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2^2 + \lambda E_r(\boldsymbol{x})$$

其中$E_r(\boldsymbol{x})$是正则项，λ是正则参数。通常

$$E_r(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x}\|_2^2, \qquad \text{岭回归(ridge regression)}$$

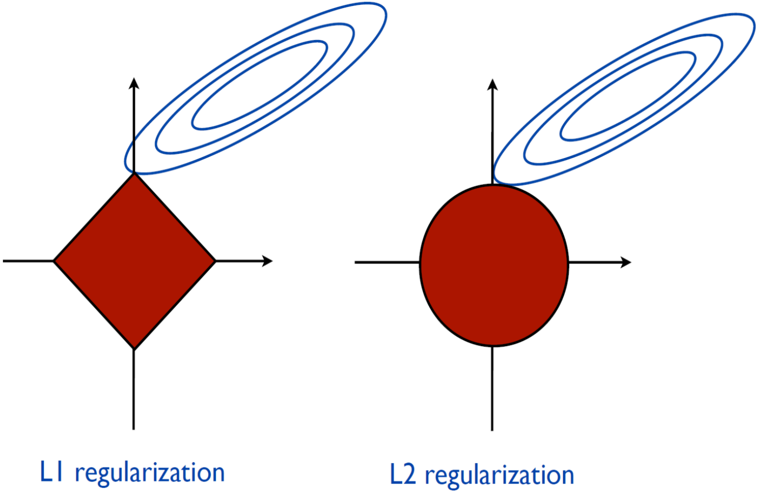
此时法方程的系数矩阵变为

$$A^T A + \lambda I$$

为了得到稀疏解，可取

$$E_r(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x}\|_1, \qquad \text{Lasso}$$

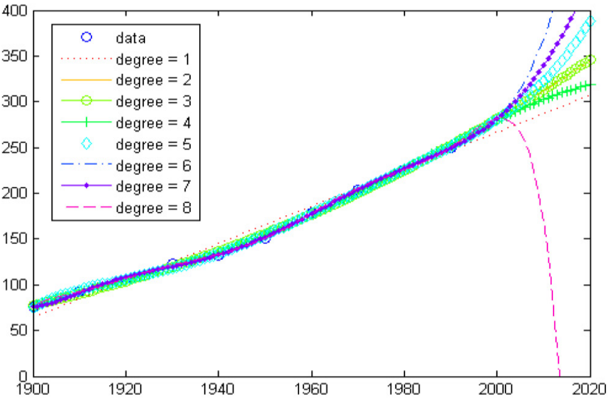
稀疏正则化



模型与参数的选取

1. 线性最小二乘拟合的成功与否，与所选取的模型有很大的关系。
    - 模型所含的参数越多，平方误差会越小。
    - 若参数个数等于数据点个数，平方误差为零，但这并不意味模型很准，因为数据有噪音。
2. 完全吻合数据的模型亦代表此模型受噪音的影响最大，预测的准确度也会很差(过拟合)。
3. 「模型复杂度」（即可变参数的个数）和「预测准确度」是相互抗衡的两个因素。

美国人口预测



从上图可以看出，当多项式的次数越來越高时，「外插」(预测)常会出现不可信的结果。这说明选用的模型参数太多，虽然误差的平方和变小了，但是预测的可靠度也下降了

合适的模型

从上面的推导和例子看出，对于给定的数据$(x_k, f(x_k))$，
$k = 0, 1, \cdots, m$，选择合适的模型，亦即合适的函数空间Φ以及参数的个数至关重要。如果对给定的数据分布有一个大致的了解，对选用合适的模型有很大的帮助。
如果数据呈指数分布，即

$$s(x) = be^{ax},$$

这是一个非线性的模型。如果直接用曲线拟合的最小二乘法确定a, b:

$$F(a, b) = \sum_{j=0}^{m} \rho(x_j)[f(x_j) - be^{ax_j}]^2$$

极值的必要条件

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial b} &= 2\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)-be^{ax_j}](-e^{ax_j})=0\\ \frac{\partial F}{\partial a} &= 2\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)-be^{ax_j}](-bx_je^{ax_j})=0\end{aligned}$$

得到一个非线性方程组

$$\begin{cases}\sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)-be^{ax_j}]e^{ax_j}=0\\ \sum_{j=0}^{m}\rho(x_j)[f(x_j)-be^{ax_j}]bx_je^{ax_j}=0\end{cases}$$

若数据呈指数分布的情况，可两边取对数

$$\ln s(x) = \ln b + ax$$

求出a和$\ln b$是一个线性问题，取$\Phi = \mathrm{span}(1, x)$，用线性最小二乘拟合得到$\ln s^*(x)$，变换回去得到

$$s^*(x) = e^{\ln s^*(x)}$$

注记

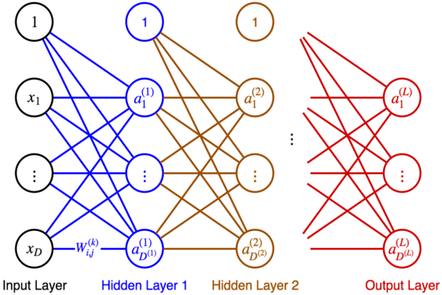
非线性的模型形式多样，在很多情况下可以通过变换变成线性模型，以及数据线性化，然后对线性化的数据有线性的最小二乘拟合。教材*P263*表*7.4* 给出了一些常用的可线性化的模型。

神经网络

前馈神经网络或多层感知机是用如下的函数复合形式

$$\hat{\boldsymbol{y}} = f^{(L)}(\cdots f^{(2)}(f^{(1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}^{(1)}); \boldsymbol{\theta}^{(2)}); \boldsymbol{\theta}^{(L)})$$

来近似目标函数 f^*。
参数 $\boldsymbol{\theta}^{(1)}, \cdots \boldsymbol{\theta}^{(L)}$ 需从数据集 $\mathbb{X}$ 学习得到。

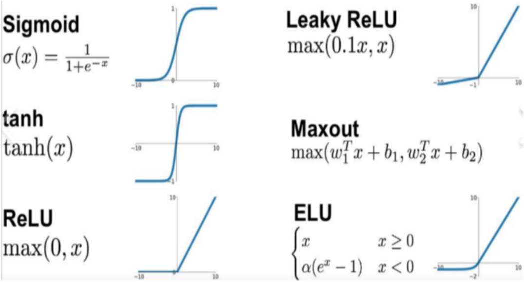


激发函数

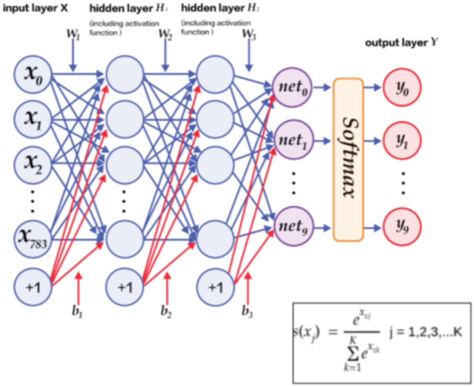
在每层 k，函数 $f^{(k)}(\cdot;W^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)})$ 是非线性的，其输出形式为

$$\boldsymbol{a}^{(k)}=\mathrm{act}^{(k)}(W^{(k)T}\boldsymbol{a}^{(k-1}+\boldsymbol{b}^{(k)}).$$

此处$\mathrm{act}^{(i)}$ 被称为激发函数。



深度学习(deep learning)

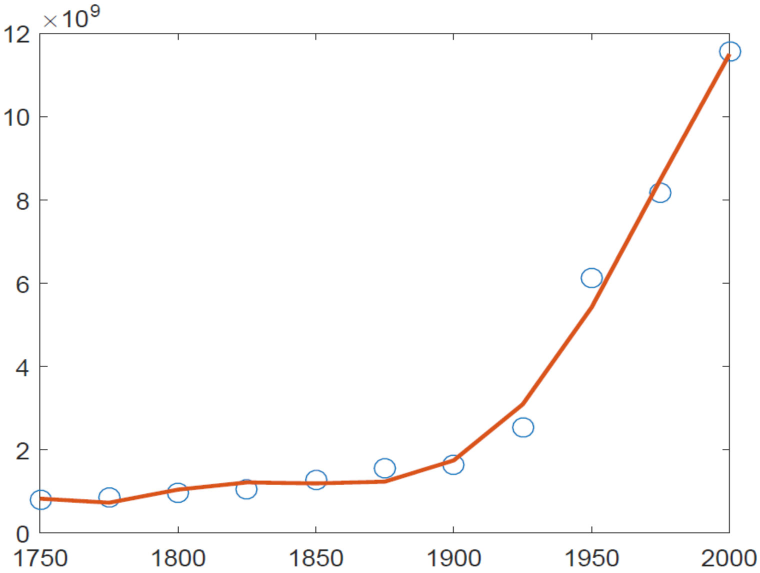


Matlab中作多项式曲线拟合的命令是polyfit

```
year = (1750:25:2000)';
pop = 1e6*[791 856 978 1050 1262 1544 1650 2532 6122 8170 11560]';
T = table(year, pop);
plot(year,pop,'o')
[p, ,mu] = polyfit(T.year, T.pop, 5);
f = polyval(p,year,[],mu);
hold on
plot(year,f)
hold off
```

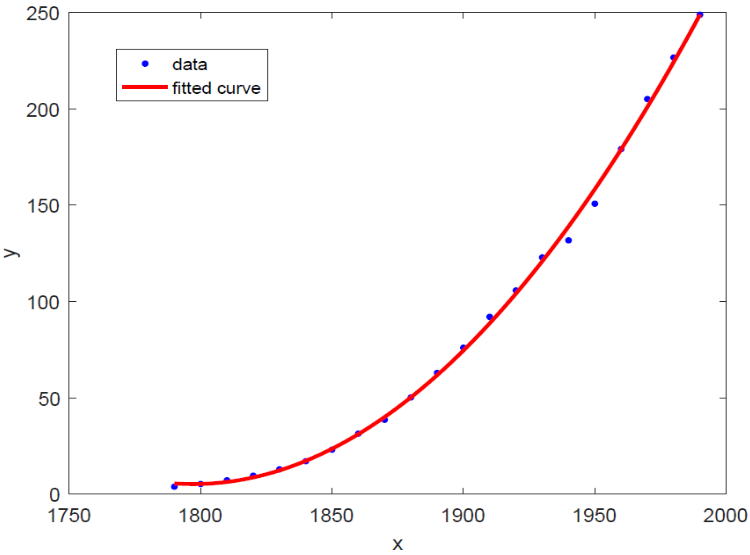
注记

Matlab 还有曲线拟合工具箱 *Curve Fitting Toolbox*。在*Matlab*中输入*cftool*即可。


×10^9
12
10
8
6
4
2
0
1750
1800
1850
1900
1950
2000

统计学中更一般的是fit命令:

load census;
f=fit(cdate,pop,'poly2')
plot(f,cdate,pop)
f = Linear model Poly2:
$f(x) = p1 * x^2 + p2 * x + p3$
Coefficients (with 95% confidence bounds):
$p1 = 0.006541(0.006124, 0.006958)$
$p2 = -23.51(-25.09, -21.93)$
$p3 = 2.113e+04(1.964e+04, 2.262e+04)$


250
200
150
100
50
0
1750
1800
1850
1900
1950
2000
y
x
data
fitted curve

fit命令可以拟合二维曲面:

load franke

sf = fit([x, y],z,'poly23')

plot(sf,[x,y],z)

Linear model Poly23:

$sf(x,y) = p00 + p10*x + p01*y + p20*x^2 + p11*x*y + p02*y^2 + p21*x^2*y + p12*x*y^2 + p03*y^3$

Coefficients (with 95% confidence bounds):

p00 = 1.118 (0.9149, 1.321)

p10 = -0.0002941 (-0.000502, -8.623e-05)

p01 = 1.533 (0.7032, 2.364)

p20 = -1.966e-08 (-7.084e-08, 3.152e-08)

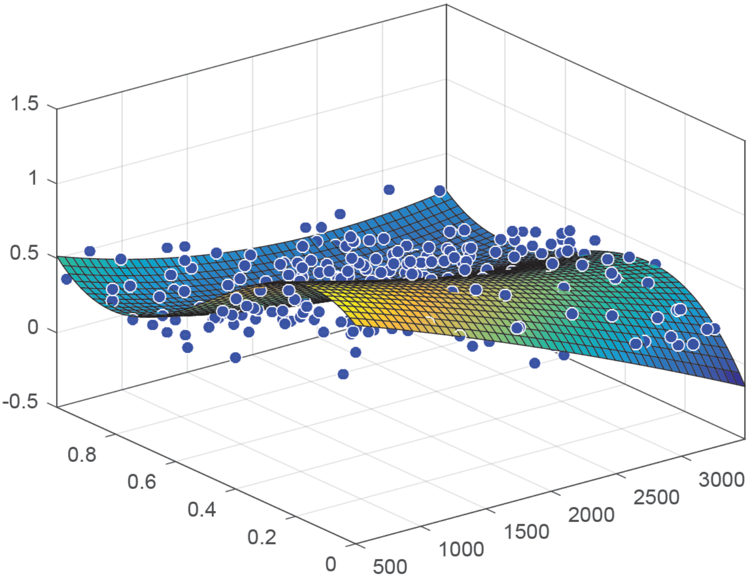
p11 = 0.0003427 (-0.0001009, 0.0007863)

p02 = -6.951 (-8.421, -5.481)

p21 = 9.563e-08 (6.276e-09, 1.85e-07)

p12 = -0.0004401 (-0.0007082, -0.0001721)

p03 = 4.999 (4.082, 5.917)


1.5
1
0.5
0
-0.5
0.8
0.6
0.4
0.2
0
500
1000
1500
2000
2500
3000

对线性的最小二乘问题，有

定理

设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \geq n$，假定$A$为列满秩的，则$\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$有

$$\|A\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}\|_2 \leq \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2 \Longleftrightarrow A^T A\boldsymbol{x}^* = A^T\boldsymbol{b},$$

若A不是列满秩的，法方程的解不唯一。此时则转而求解下面的极小化问题

$$\begin{array}{rl} \text{given} & A \in \mathbb{R}^{m\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m, \\ \min\limits_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^m} \|\boldsymbol{x}\|_2 & \text{使得}\ \ \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2 \leq \|A\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|_2, \forall \hat{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^m \end{array}$$

这个问题可以用奇异值分解（SVD, singular value decomposition）来求解。

定理 (奇异值分解)

任意矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，令 $r = rank(A)$，则存在正交矩阵$U \in \mathbb{R}^{m\times r}$ 和 $V \in \mathbb{R}^{n\times r}$ 使得

$$A = U\Sigma V^T,$$

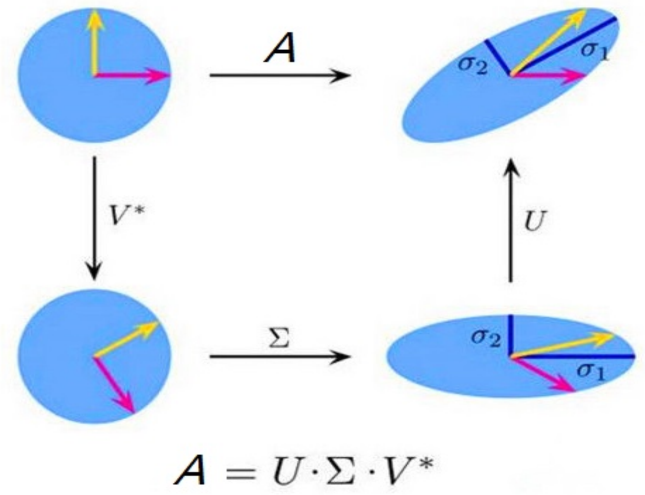
这里$\Sigma \in \mathbb{R}^{r\times r}$是对角阵，其对角元

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0,$$

此处

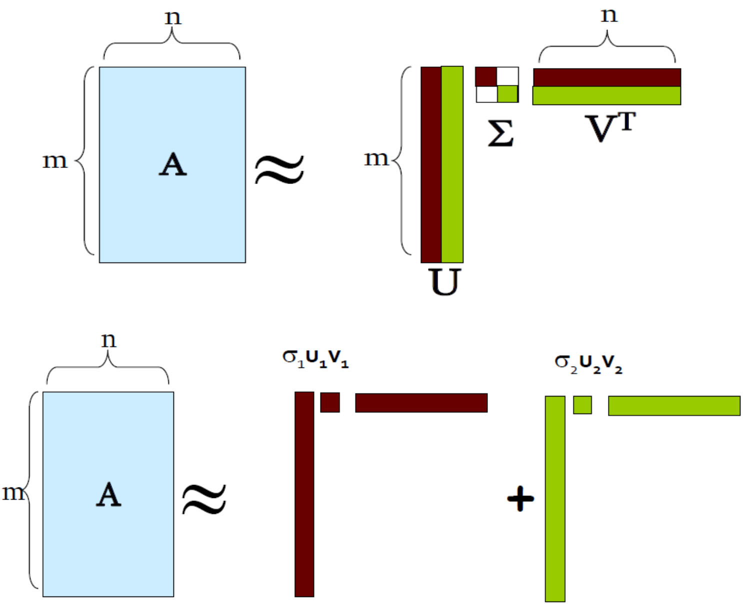
- $\sigma_i, i = 1, \cdots, r$称为$A$的奇异值；
- 相应的分解称为奇异值分解；
- U的列向量称为左奇异向量；
- V的列向量称为右奇异向量。

A的SVD把$\mathbb{R}^n$中的球变为椭球，椭球的半径就是奇异值。



SVD的性质

- $\mathrm{rank}(A) = r$，r是非零奇异值的个数。
- 矩阵A有奇异值展开
$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \boldsymbol{v}_i^T .$$
- $\|A\|_2 = \sigma_1 =$最大的奇异值。
- $\|A\|_F = (\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2)^{1/2}$。
- 若$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$非奇异，则$\|A^{-1}\|_2 = 1/\sigma_r$。


n
m
A
≈
m
U
Σ
V^T
n
n
m
A
≈
σ1u1v1
+
σ2u2v2

奇异向量

左奇异向量和右奇异向量分别满足

$$
\begin{aligned}
A\boldsymbol{v}_i &= \sigma_i \boldsymbol{u}_i, \\
A^T\boldsymbol{u}_j &= \sigma_j \boldsymbol{v}_j.
\end{aligned}
$$

则有

$$
\begin{aligned}
A^TA\boldsymbol{v}_i &= V\Sigma U^T U\Sigma V^T \boldsymbol{v}_i = \sigma_i^2 \boldsymbol{v}_i, \\
AA^T\boldsymbol{u}_i &= U\Sigma V^T V\Sigma U^T \boldsymbol{u}_i = \sigma_i^2 \boldsymbol{u}_i.
\end{aligned}
$$

- 右奇异向量$\boldsymbol{v}_i$是A^TA的特征向量。
- 左奇异向量$\boldsymbol{u}_i$是AA^T的特征向量。
- 可以通过求解A^TA和AA^T的特征值问题来得到奇异值分解。但是？

最小二乘问题中，若A是秩亏损的有下面的结论

推论

假定$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \geq n,$而$rank(A) = r < n$。则存在一个$n-r$维的向量$\boldsymbol{x}$的集合极小化 $\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$。

证明： 因为满足方程$Az = 0$的解空间为$n-r$维，如果$\boldsymbol{x}$极小化$\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$则

$$\|A(\boldsymbol{x} + z) - \boldsymbol{b}\|_2 = \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$$

同样也是极小解。

注记

这说明当A不满秩时，最小二乘解不唯一。

若A秩亏损，即$A = U\Sigma V^T$的秩$r < n$，则A可表示为

$$A = [U, U_1] \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} [V, V_1]^T = U\Sigma V^T$$

这里

$$[U, U_1] \in \mathbb{R}^{m\times m}, \qquad [V, V_1] \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

是正交矩阵。

$$\begin{aligned}
\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2 &= \left\| \begin{bmatrix} U^T \\ U_1^T \end{bmatrix} (A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}) \right\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{bmatrix} U^T \\ U_1^T \end{bmatrix} (U\Sigma V^T\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}) \right\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{bmatrix} \Sigma V^T\boldsymbol{x} - U^T\boldsymbol{b} \\ U_1^T\boldsymbol{b} \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\
&= \|\Sigma V^T\boldsymbol{x} - U^T\boldsymbol{b}\|_2^2 + \|U_1^T\boldsymbol{b}\|_2^2
\end{aligned}$$

从上面的式子可知当

$$\Sigma V^T \boldsymbol{x} = U^T \boldsymbol{b}, \text{ 或者 } \boldsymbol{x} = V\Sigma^{-1}U^T\boldsymbol{b} + V_1\boldsymbol{z}$$

时$\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$达到极小，这里用到了

$$V^T V_1 \boldsymbol{z} = 0, \forall \boldsymbol{z}.$$

因为V和V_1相互正交，所以

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \|V\Sigma^{-1}U^T\boldsymbol{b}\|_2^2 + \|V_1\boldsymbol{z}\|_2^2$$

则

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{x}\|_2^2 &= \min_{\boldsymbol{x}} \left\{ \|V\Sigma^{-1}U^T\boldsymbol{b}\|_2^2 + \|V_1\boldsymbol{z}\|_2^2 \right\} \\ &= \|V\Sigma^{-1}U^T\boldsymbol{b}\|_2^2 \end{aligned}$$

亦即当$\boldsymbol{z} = 0$时$\|\boldsymbol{x}\|_2$达到极小。

最小二乘问题的极小模解为

$$\boldsymbol{x} \quad = \quad V\Sigma^{-1}U^T\boldsymbol{b} = A^+\boldsymbol{b}.$$

此处

定义 (Moore-Penrose 逆 （pseudo-inverse 伪逆，广义逆))

假设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$有奇异值分解$A = U\Sigma V^T$，则$A$的伪逆定义为

$$A^+ = V\Sigma^{-1}U^T,$$

易验证

$$A^+A \quad = \quad V\Sigma^{-1}\Sigma V^T = VI_rV^T = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^T$$

$$AA^+ \quad = \quad U\Sigma\Sigma^{-1}U^T = UI_rU^T = \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^T$$

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^T, \qquad A^+ = \sum_{i=1}^{r} \frac{1}{\sigma_i} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{u}_i^T,$$

$$AA^+A = A, \qquad A^+AA^+ = A^+$$

且AA^+和A^+A是对称矩阵。
当A列满秩时，最小二乘解为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x} &= (A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{b} \\
&= (V\Sigma^2V^T)^{-1}A^T\boldsymbol{b} \\
&= V\Sigma^{-2}V^TV\Sigma U^T\boldsymbol{b} \\
&= V\Sigma^{-1}U^T\boldsymbol{b} \\
&= A^+\boldsymbol{b}.
\end{aligned}$$

最小二乘问题的条件数

假定测量数据有误差，亦即实际计算的是$\boldsymbol{b}+\boldsymbol{\delta b}$，则对最小二乘解有什么影响？

因为

$$(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\delta x}) = V\Sigma^{-1}U^T(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{\delta b}),$$

所以有

$$\boldsymbol{\delta x} = V\Sigma^{-1}U\boldsymbol{\delta b}$$

而

$$\begin{aligned} \|V\Sigma^{-1}U\boldsymbol{\delta b}\|_2 &\leq \|\Sigma^{-1}\|_2\|\delta\boldsymbol{b}\|_2 \\ &= \delta\boldsymbol{b}/\sigma_r \end{aligned}$$

其中σ_r是最小奇异值。

Q：最小二乘问题是否是病态问题？

周期函数的最佳平方逼近

设 $f \in C(\mathbb{R})$ 是周期函数，即 $f(x+2\pi) = f(x), x \in \mathbb{R}$，这样的函数全体构成一个线性空间 $X_{2\pi}$。$X_{2\pi}$ 上可定义内积，从而诱导出2-范数。

$$(f,g) = \int_0^{2\pi} f(x)g(x)\mathrm{d}x, \quad \|f\|_2 = \sqrt{(f,f)}.$$

逼近空间可取三角函数空间

$$\Phi = \{1, \cos x, \sin x, \cdots, \cos nx, \sin nx\} \subset X_{2\pi}.$$

f 在 Φ 中的最佳平方逼近多项式为

$$s_n^*(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{j=1}^{n} (a_j \cos jx + b_j \sin jx).$$

因为

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \sin lx \mathrm{d}x = 0.$$

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \cos lx \mathrm{d}x = \begin{cases} 2\pi, & k = l = 0, \\ \pi, & k = l \neq 0, \\ 0, & k \neq l, \end{cases}$$

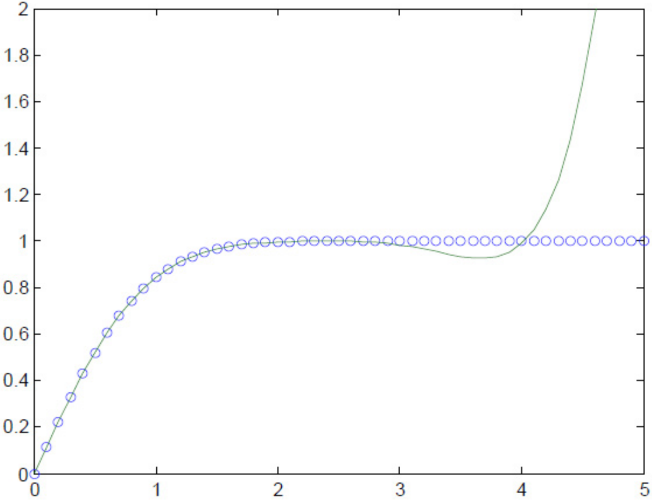
$$\int_0^{2\pi} \sin kx \sin lx \mathrm{d}x = \begin{cases} \pi, & k = l \neq 0, \\ 0, & k \neq l \end{cases}$$

定理

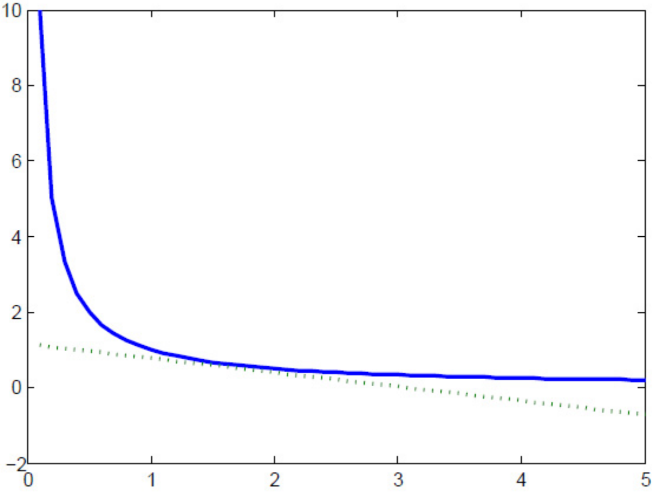
s_n^* 是 f 在 Φ 中的最佳平方逼近当且仅当

$$\begin{aligned} a_j &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\cos jx \mathrm{d}x, \ \ j = 0, 1, \cdots, n, \\ b_j &= \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\sin jx \mathrm{d}x, \ \ j = 1, 2, \cdots, n. \end{aligned}$$

虽然多项式逼近有很多优点，但是因为多项式具有振荡的特性，这就常常导致误差的界远远 大于平均误差。



$\lim_{x\to 0} f(x) = +\infty$, $\lim_{x\to+\infty} f(x) = 0$,任何一个多项式或者多项式插值都不具有这样的性质。



首先定义有理分式

$$R_{n,m}(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)},$$

其中

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k, \quad Q_m(x) = \sum_{k=0}^{m} b_k x^k$$

分别是n次和m次多项式。$R_{n,m}$有$m+n+1$个自由度。函数$R_{n,m}$的全体记为$R(n,m)$。

定义 (有理插值)

给定$m+n+1$对点列$(x_i, f(x_i)), i = 0, \cdots, m+n$，若$R_{n,m}(x) \in R(n,m)$满足

$$R_{n,m}(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \cdots, m+n.$$

则称$R_{n,m}$为点列$(x_i, f(x_i))$的有理插值。

设$f(x)$在$x=0$的Taylor展开为

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

f的部分和

$$S_n=\sum_{k=0}^{n}\frac{1}{k!}f^k(0)x^k$$

是$f(x)$的多项式逼近。且满足

$$f^{(k)}(0)=S_n^{(k)}(0), k=0,1,2,\cdots,n. \tag{0.6}$$

类似可以定义有理函数$R_{m,n}(x)$使得它满足条件(0.6)，这就是 Padé逼近。

定义 (Padé逼近)

设$f(x) \in C^N[-a,a], N = n+m+1$，如果有理函数

$$R_{n,m} = \frac{a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n}{1 + b_1 x + \cdots + b_m x^m} = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)}, \tag{0.7}$$

其中$P_n(x)$与$Q_m(x)$互质，且满足

$$R_{n,m}^{(k)}(0) = f^{(k)}(0), \quad k = 0, 1, \cdots, n+m. \tag{0.8}$$

或者

$$f(x) - R_{n,m} = f(x) - \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = O(x^N).$$

称$R_{n,m}$为$f(x)$在$x=0$处的(n,m)阶*Padé*逼近。

Padé逼近是Taylor展开多项式逼近的推广，当$Q_m(x)=1$时，就是Taylor展开。

对已知函数

$$f(x) \in C^N[a,b], N = n+m+1,$$

如何构造Padé逼近$R_{n,m}$?

$$R_{n,m}(x) = \frac{a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n}{1 + b_1 x + \cdots + b_m x^m} = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)}$$

有$n+m+1$个未知数

$$a_0, a_1, \cdots, a_n, \quad b_1, b_2, \cdots, b_m,$$

有$n+m+1$个方程:

$$R_{n,m}^{(k)}(0) = f^{(k)}(0), k = 0, 1, \cdots, n+m$$

这样就可以根据方程确定未知数。

根据定义有下面的等价的定理：

定理

设$f(x)$充分光滑，$R_{n,m}(x)$是$f(x)$的Padé逼近，则有

$$f(x)Q_m(x) - P_n(x) = \sum_{j=n+m+1}^{\infty} c_j x^j.$$

实际上根据上面的定理，如果

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j$$

则有

$$\begin{aligned} &(c_0 + c_1 x + \cdots)(1 + b_1 x + \cdots + b_m x^m) - \\ &(a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n) = c_{n+m+1} x^{n+m+1} + \cdots \end{aligned}$$

比较x^j的系数就有

$$\begin{cases} x^0 & c_0 - a_0 = 0, \\ x^1 & b_1 c_0 + c_1 - a_1 = 0, \\ x^2 & b_2 c_0 + b_1 c_1 + c_2 - a_2 = 0 \\ \vdots & \\ x^n & b_m c_{n-m} + b_{m-1} c_{n-m+1} + \cdots + c_n - a_n = 0 \end{cases}$$

$$
\begin{cases}
x^{n+1} & b_m c_{n-m+1} + b_{m-1} c_{n-m+2} + \cdots + b_1 c_n + c_{n+1} = 0, \\
x^{n+2} & b_m c_{n-m+2} + b_{m-1} c_{n-m+3} + \cdots + b_1 c_{n+1} + c_{n+2} = 0 \\
\vdots & \\
x^{n+m} & b_m c_n + b_{m-1} c_{n+1} + \cdots + b_1 c_{n+m-1} + c_{n+m} = 0
\end{cases}
$$

写成矩阵的形式就有

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & -c_0 \\
0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & -c_0 & -c_1 \\
\vdots & \vdots & \ddots & 1 & -c_{n-m} & \cdots & -c_{n-2} & -c_{n-1} \\
0 & 0 & \cdots & 0 & -c_{n-m+1} & \cdots & -c_{n-1} & -c_n \\
0 & 0 & \cdots & 0 & -c_{n-m+2} & \cdots & -c_n & -c_{n+1} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & 0 & -c_n & \cdots & -c_{n+m-2} & -c_{n+m-1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ b_m \\ b_{m-1} \\ \vdots \\ b_1
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ c_{n+1} \\ c_{n+1} \\ \vdots \\ c_{n+m}
\end{bmatrix}
$$

从方程的结构可以看出，若记m阶方阵$\mathbf{H}$为

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -c_{n-m+1} & \cdots & -c_{n-1} & -c_n \\ -c_{n-m+2} & \cdots & -c_n & -c_{n+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -c_n & \cdots & -c_{n+m-2} & -c_{n+m-1} \end{bmatrix}$$

若$\mathbf{H}$非奇异，则由上面的方程组可以看出解存在唯一，且$b_1, \cdots, b_m$可从子方程得到

$$\mathbf{H}\boldsymbol{b} = \tilde{\boldsymbol{c}}$$

其中

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b} &= (b_m, b_{m-1}, b_1)^T, \\ \tilde{\boldsymbol{c}} &= (c_{n+1}, c_{n+2}, \cdots, c_{n+m})^T \end{aligned}$$

解出 $\boldsymbol{b}$之后代入前面的方程就可以求出$a_0, a_1, \cdots, a_n$。

实际应用的时候把各阶Padé逼近列成一张表，称为Padé表。

$n \diagdown m$	0	1	2	3	4	$\cdots$
0	(0,0)	(0,1)	(0,2)	(0,3)	(0,4)	$\cdots$
1	(1,0)	(1,1)	(1,2)	(1,3)	(1,4)	$\cdots$
2	(2,0)	(2,1)	(2,2)	(2,3)	(2,4)	$\cdots$
3	(3,0)	(3,1)	(3,2)	(3,3)	(3,4)	$\cdots$
4	(4,0)	(4,1)	(4,2)	(4,3)	(4,4)	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

表中第一列就是$f(x)$的Taylor展开的部分和。

例

求$f(x)=e^x$的Padé逼近$R_{3,2}$。

解： e^x的Taylor展开

$$\begin{aligned} e^x &= 1+x+\frac{1}{2}x^2+\frac{1}{6}x^3+\frac{1}{24}x^4+\frac{1}{120}x^5+\cdots, \\ Q_2(x) &= 1+b_1x+b_2x^2, \\ P_3(x) &= a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3 \end{aligned}$$

则关于b_1,b_2的方程为

$$\begin{cases} x^4 & \frac{1}{2}b_2+\frac{1}{6}b_1+\frac{1}{24}=0, \\ x^5 & \frac{1}{6}b_2+\frac{1}{24}b_1+\frac{1}{120}=0 \end{cases}$$

解得 $b_1=-\frac{2}{5}, b_2=\frac{1}{20}$。

则关于$a_0,\cdots,a_3$得方程为

$$\begin{cases} x^3 & \frac{1}{6}+\frac{1}{2}b_1+b_2=a_3, \\ x^2 & \frac{1}{2}+b_1+b_2=a_2 \\ x & 1+b_1=a_1 \\ x^0 & 1=a_0 \end{cases}$$

得

$$a_0=1, a_1=\frac{3}{5}, a_2=\frac{3}{20}, a_3=\frac{1}{60}.$$

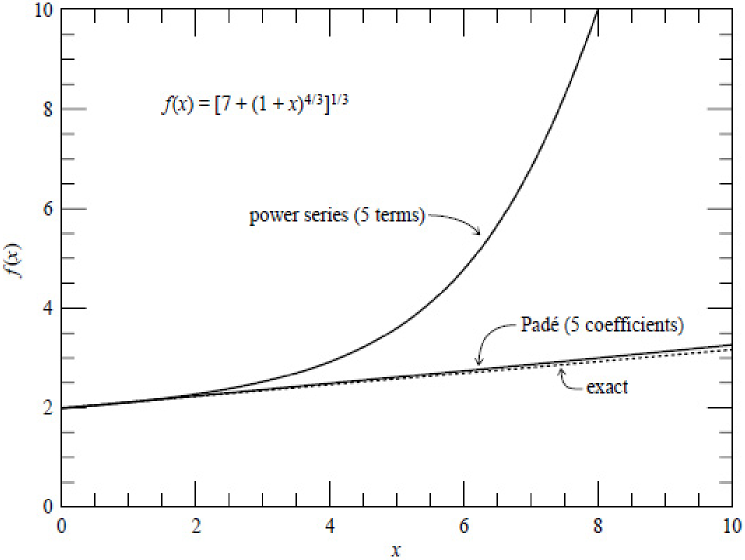
$$\Longrightarrow R_{3,2}(x)=\frac{P_3(x)}{Q_2(x)}=\frac{60+36x+9x^2+x^3}{60-24x+3x^2}$$

考察$x = 0.5$,则

$$\begin{aligned} R_{3,2}(0.5) &= 1.648718, \\ e^{0.5} &= 1.648721, \\ S_5(0.5) &= 1.648698 \end{aligned}$$

Padé逼近比Taylor级数展开计算结果要好。

$n \diagdown m$	0	1	2	3
0	1	$\frac{1}{1-x}$	$\frac{2}{2-2x+x^2}$	$\frac{6}{6-6x+3x^2-x^3}$
1	$1+x$	$\frac{2+x}{2-x}$	$\frac{6+2x}{6-4x+x^2}$	$\frac{24+6x}{24-18x+6x^2-x^3}$
2	$\frac{2+2x^2}{2}$	$\frac{6+4x+x^2}{6-2x}$	$\frac{12+6x+x^2}{12-6x+x^2}$	$\frac{60+24x+3x^2}{60-36x+9x^2-x^3}$
3	$\frac{6+6x+3x^2+x^3}{6}$	$\frac{24+18x+16x^2+x^3}{24-6x}$	$\frac{60+36x+9x^2+x^3}{60-24x+3x^2}$	$\frac{120+60x+12x^2+x^3}{120-60x+12x^2-x^3}$


10
8
6
4
2
0
0
2
4
6
8
10
$f(x)$
x
$f(x) = [7 + (1 + x)^{4/3}]^{1/3}$
power series (5 terms)
Padé (5 coefficients)
exact