数值分析

计算机科学与技术系
软件所EDA
蔡懿慈
caiyc@tsinghua.edu.cn

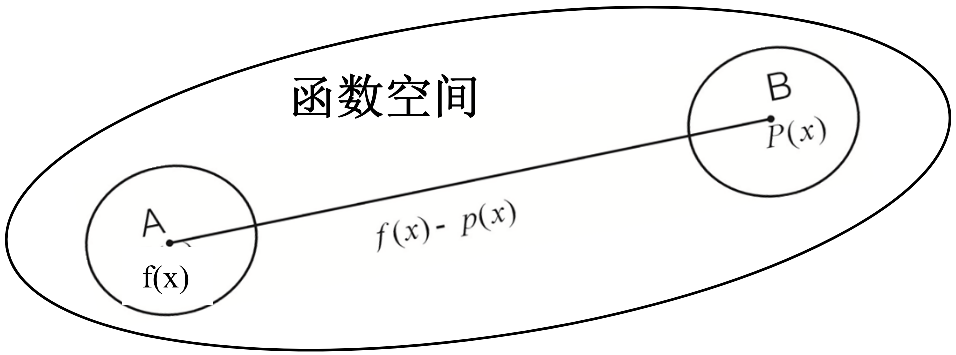
第3章 函数逼近与快速傅里叶变换

§3.1 函数逼近的基本概念

3.1.1 函数逼近与函数空间

一、函数逼近的提法:

大家对函数逼近已经接触过很多了，比如高等数学的Taylor级数展开，付氏级数展开，是函数逼近的重要方法，第2章学习的插值方法，也是函数逼近的一种方法。Taylor级数研究复杂函数用多项式展开的方法，而付氏级数研究复杂函数用三角函数表达的方法。除此，还有许多其它的函数逼近方法，概括地说：“**对函数类*A*，给定的函数*f*(*x*)，在相对简单的函数类*B*中找*P*(*x*)，使在某种度量意义下，误差函数*f*(*x*)-*P*(*x*)最小。**”用图可直观说明如下：



函数类*A*中的$f(x)$，可能是连续函数类中一个比较复杂的函数，希望用较简单函数近似它，也可能是一个表格函数，即知道一系列离散点的函数值，要求配一条连续曲线等，插值逼近以及本章将要讨论的曲线拟合可解决这类函数逼近问题。

简单函数类*B*一般选取：多项式，三角函数，指数函数，有理函数等。

在函数逼近的讨论中，总存在一个问题，如何判断逼近的好与不好。就是说，用一个函数近似另一个函数，总存在**误差函数**：$f(x) \sim p(x)$ ，需要有一种度量标准去衡量误差的大小 。

我们需要对函数这个集合有更深入的认识和了解，这里，我们把函数空间放在一个更广泛、更一般，也更抽象的概念下讨论，就是“线性空间”。

二、线性空间

定义0 S：非空集合，P：数域， $x, y \in S$,

而且对加法与数乘具有封闭性：

$$
\text{加法}\begin{cases}
1、x+y=y+x & \text{可变换} \\
2、(x+y)+z=x+(y+z) & \text{结合} \\
3、x+0=x & \text{存在零元素} \\
4、x+(-x)=0 & \text{存在负元素}
\end{cases}
$$

$$
\text{数乘}\begin{cases}
5、1x=x \\
6、(\alpha\beta)x=\alpha(\beta x) \\
7、\alpha(x+y)=\alpha x+\alpha y \\
8、(\alpha+\beta)x=\alpha x+\beta x
\end{cases}
$$

称S是域P上的线性空间。

定义1　S：数域P上线性空间，$x_1,\cdots x_n \in S$，　$\alpha_1,\cdots,\alpha_n \in p$

有：$\alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n = 0$

（1）$\alpha_1 \ldots\ldots \alpha_n$ 不全为0，称 $x_1, x_2 \cdots, x_n$ 线性相关。

（2）当且仅当 $\alpha_1 = \cdots = \alpha_n = 0$ 成立，称 $x_1,\cdots x_n$ 线性无关，称 $x_1,\cdots x_n$ 为S的一组基。

这时有 $x \in S$ 成立：$x = \alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n$

即S中任一元素可由这组线性无关的基 $x_1,\cdots x_n$ 线性表示出来。

根据上述定义：

$C[a,b]$：$[a,b]$上连续函数全体，按函数加法与函数复数乘法，即可构成一线性空间。

$C^p[a,b]$：$[a,b]$上p阶导数连续函数全体构成的线性空间。

线性空间的上述知识在线性代数中讨论有限维向量空间R^n与C^n时，已经引出过。但这里已做了推广，一个重要的区别是，一般的线性空间的维数可能是无限维的，大家所了解的Taylor展开和付氏展开一般需要无穷多项去逼近它，正是这个道理。

任一个连续函数，总可以用一定次数的多项式逼近到任意好的程度，下面魏尔斯特拉斯（Weieratrass)定理指出了这种性质：

定理1：设 $f(x)\in C[a,b]$，则对任何 $\varepsilon>0$ ，总存在一个多项多p(x)，使 $\|f(x)-p(x)\|_\infty<\varepsilon$ ，在$[a,b]$上一致成立。

3.1.2　范数与赋范线性空间

为了对线性空间的元素大小进行度量，引入如下范数定义：

一、范数定义

定义2　S：线性空间，$x \in S$ ，若某个**实值**函数 $N(x)=\|x\|$ 满足条件：

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

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

（3）　$\|x+y\| \leq \|x\|+\|y\|$

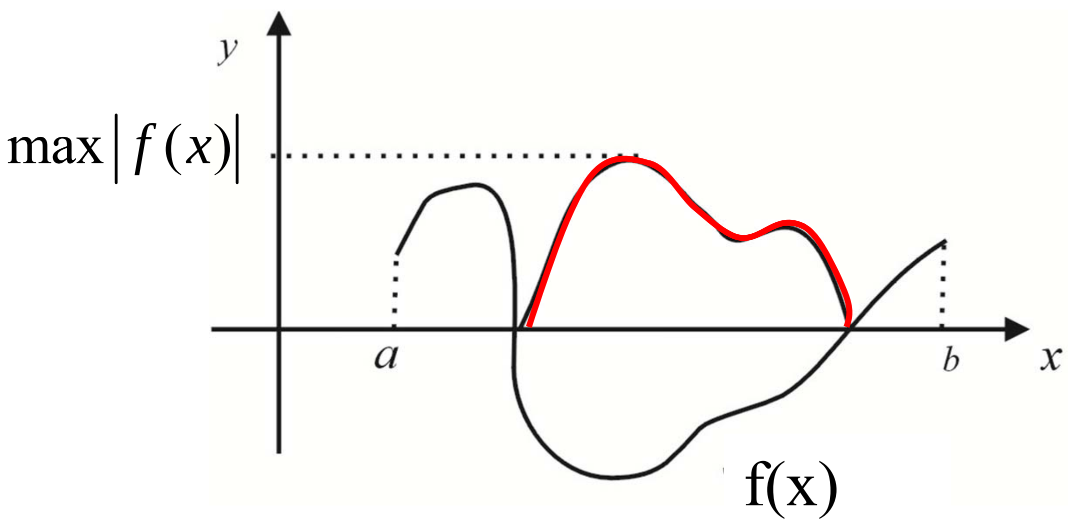
称：$N(x)(=\|\cdot\|)$ 为线性空间S上的范数，S与$\|\cdot\|$一起称赋范线性空间。或者说“定义了范数的线性空间称赋范线性空间。”

常用的**连续函数空间**使用的范数有三种：

二、三种常用范数

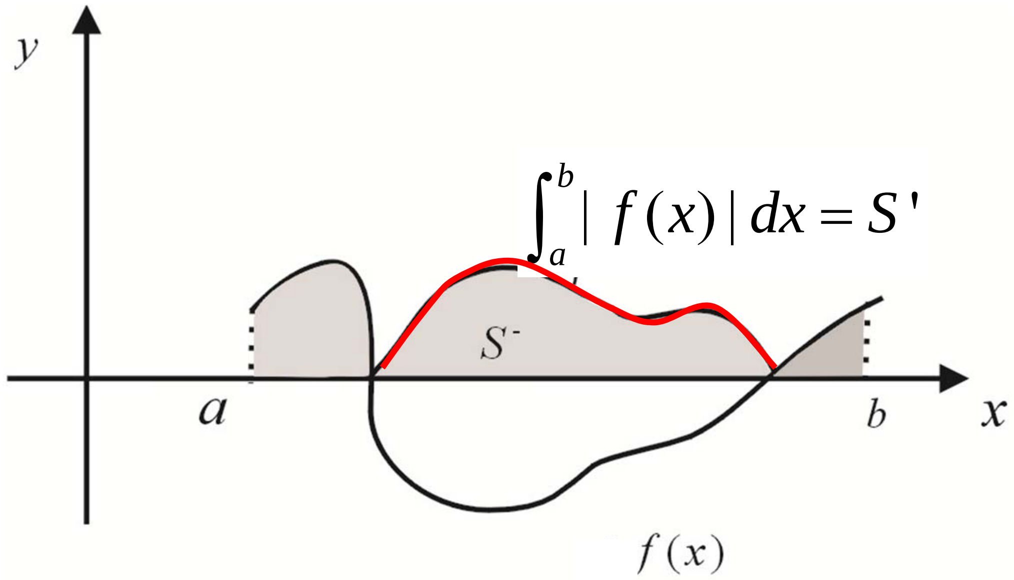
1、∞-范数 $$\|f(x)\|_\infty = \max_{x\in[a,b]} |f(x)|$$

几何意义如下：



2、1-范数 $\quad \| f(x) \|_1 = \int_a^b | f(x) | dx$

几何意义如下：

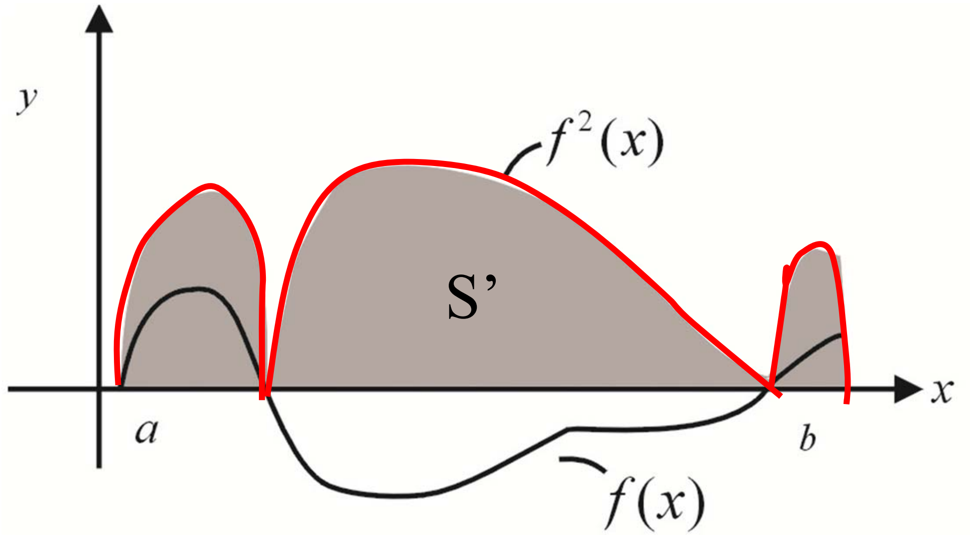


$$\| f(x) \|_1 = \mathrm{S}'$$

3、2-范数

$$\| f(x) \|_2 = \left(\int_a^b f^2(x)dx\right)^{1/2}$$

几何意义如下：



$$\| f(x) \|_2 = (S')^{1/2}$$

3.1.4 最佳逼近

$$\| f(x)-p(x)\|_{\infty} \quad 与 \quad \| f(x)-p(x)\|_{2}$$

这里：$f(x)$：　被逼近函数

$p(x)$：　逼近函数

$f(x)$-$p(x)$：误差函数

我们先考察以∞-范数作为误差度量标准的某些直观含义：

（1）　$\| f(x)-p(x)\|_{\infty} = \max\limits_{x\in[a,b]} | f(x)-p(x)|$

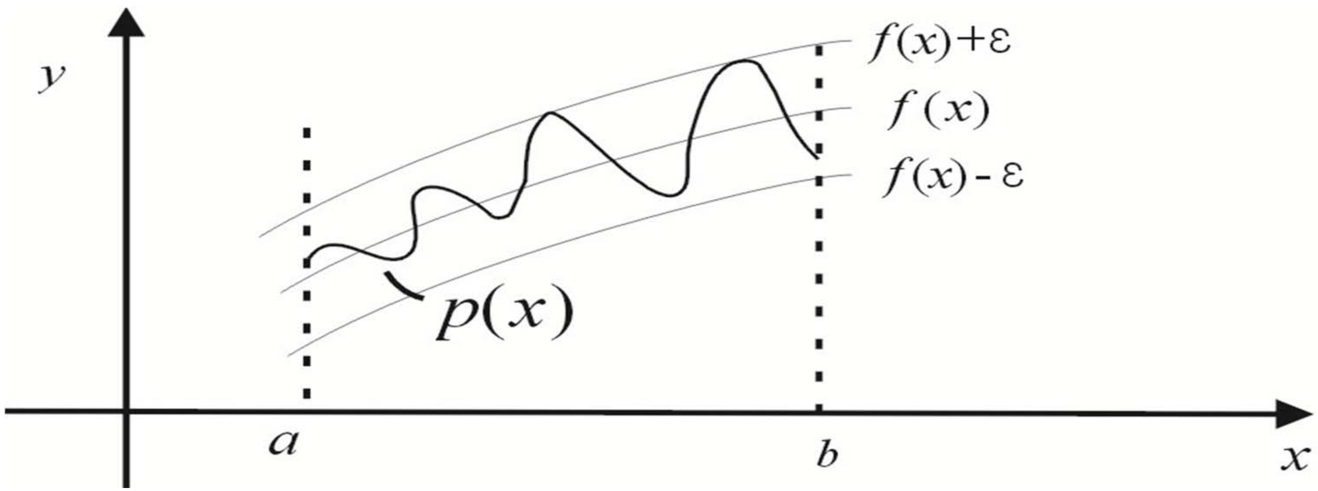
这种度量标准下讨论的函数逼近称“均匀逼近”、“一致逼近”。其中：“均匀”、“一致”带有某种直观的几何意义。

从几何上不难理解：$\| f(x)-p(x)\|_{\infty} \le \varepsilon$ 的含义。

根据范数的定义，上式可写为：$\max\limits_{x\in[a,b]} | f(x)-p(x)| \le \varepsilon$

即，$-\varepsilon \le p(x)-f(x) \le \varepsilon$ 或 $f(x)-\varepsilon \le p(x) \le f(x)+\varepsilon$

图示如下：



从图上可以看出，逼近函数$p(x)$，或近似函数能够比较“均匀”、“一致”地在整个区间上逼近被近似函数$f(x)$。

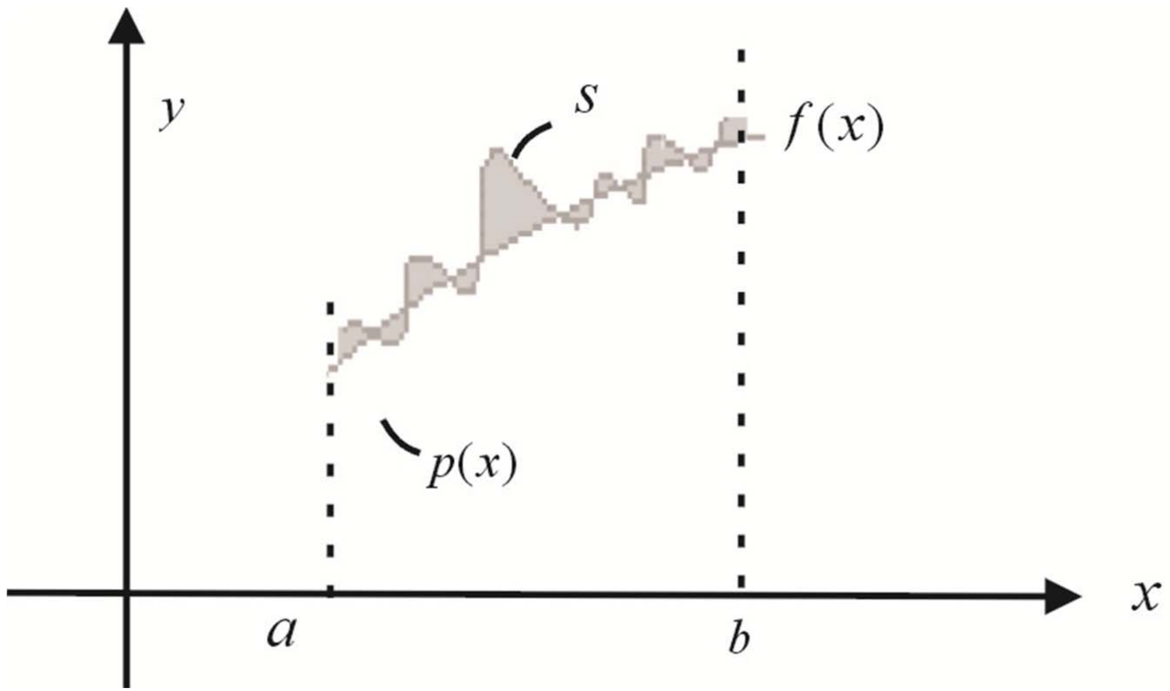
（2） $\| f(x)-p(x)\|_2=\left(\int_a^b (f(x)-p(x))^2\right)^{\frac{1}{2}}$

$p(x)$对$f(x)$在平方范数意义下的逼近，称“平方逼近”或“均方逼近”。平方范数不像∞-范数那样具有直观含义，但它与1-范数具有某种直观相似性，如果近似地认为：

$$\| f(x)-p(x)\|_2 \approx \| f(x)-p(x)\|_1=\int_a^b | f(x)-p(x)|\, dx = S \quad \text{即，} \quad S \le \varepsilon$$

从图上可以看出：

平方范数意义下的平方逼近，一般不再具有“均匀”、“一致”性质，而带有某种“平均”含义，某些区段误差可以很大。



小结：用不同的范数，即不同的度量标准讨论函数最佳逼近问题，则逼近函数对被逼近函数的近似会有不同的表现，与∞-范数对应的一致逼近效果最好。

在本章，我们仅仅讨论最佳平方逼近，即以平方范数作为度量标准的函数逼近问题。它常常涉及函数空间或线性空间内引进的另一种运算性质：**内积**。可以对元素之间的夹角做分析讨论（与向量空间类比）下面简单介绍。

第3章课后练习（6）

作业：三、2、4（1）（2）、5、6、12

预习：3.5

3.1.3 内积与内积空间

定义3　X：数域K（R或C）上线性空间，$\forall u,v\in X$　$(u,v)\in K$ 并满足：

1、$(u,v)=\overline{(v,u)}$　共轭可交换性

2、$(\alpha u,v)=\alpha(u,v)$

3、$(u+v,w)=(u,w)+(v,w)$

（2、3）线性性

4、$(u,u)\geq 0$，当且仅当$u=0$时，$(u,u)=0$　非负性

称（u, v）为X上的**内积**，定义了内积的线性空间称为**内积空间**。

称 $\overline{(u,v)}$ 为（u, v）的共轭，当K为实数域R时：

（u, v）=（v, u）。

强调：对函数空间$C[a, b]$，u_1，u_2，$v\in[a,b]$ 内积线性性质的表示方式：$$(c_1u_1+c_2u_2,v)=c_1(u_1,v)+c_2(u_2,v)$$

进一步推广为：$$(\sum_{j=0}^{n}a_ju_j,v)=\sum_{j=0}^{n}a_j(u_j,v)$$

即“线性组合的函数内积=内积的线性组合”。

定理2，柯西—施瓦茨（Cauchy-Schwarz）不等式

X—实内积空间，$\forall u,v\in X$ 有：$|(u,v)|^2\le(u,u)(v,v)$

定理证明书上有，请自己看。**注意：**书上证明仅适用于“实”内积空间，对“复”内积空间应做相应的变动，但结论是成立的。

定理3 设X为实内积空间， $u_1,u_2,\cdots,u_n \in X$ ，Gram（格拉姆）矩阵：

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

非奇异的充要条件是：u_1，…，u_n线性无关。

下面的证明与书上有些不同，但大体上是一致的。

证明：下面的证明用到线性代数的一个非常基本的事实。

G非奇异 $\Leftrightarrow$ $\det(G)\neq 0$ $\Leftrightarrow$ 齐次方程组

$\sum_{j=0}^{n}\alpha_j(u_j,u_k)=0 \quad (k=1,\cdots n)$ 有恒零解

$u_1,\cdots,u_n$ 元素是否线性相关，根据定义应有：

$\alpha_1 u_1+\alpha_2 u_2+\cdots\alpha_n u_n=0$ 若$\alpha_1=\cdots\alpha_n=0$，则线性无关

分别用各元素u_1，…，u_n对上式两端作内积：

$$\begin{cases}\alpha_1(u_1,u_1)+\alpha_2(u_2,u_1)\cdots+\alpha_n(u_n,u_1)=0\\ \alpha_1(u_1,u_2)+\alpha_2(u_2,u_2)\cdots+\alpha_n(u_n,u_2)=0\\ \cdots\\ \alpha_1(u_1,u_n)+\alpha_2(u_2,u_n)\cdots+\alpha_n(u_n,u_n)=0\end{cases}$$

由此得到以 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ 为未知数的齐次线性方程组它的系数矩阵正是相应的Gram矩阵，此时 $\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots \alpha_n = 0 \Leftrightarrow G$ 非奇异。

证毕

在内积空间*X*，总可以规定一种依赖于内积运算的范数：

$$\| u \| = \sqrt{(u,u)} = (u,u)^{1/2}$$

根据内积的性质，包括定理2给出的Cauchy-Schwarz不等式，可以证明，上述用内积定义的范数表达式满足范数定义的三条性质。书上有证明，自己看一下。

书上的证明还是只适用于“实”内积空间，若要对一般复内积空间，p54倒数第2行的 $2(u,v)$ 应改为 $2|(u,v)|$，之后再做推导。

例1：给出了n维实、复向量空间内积，作为内积空间内积计算的例子，大家看一下。

这里引入了n维向量空间中“加权”的概念。如实向量空间 $x, y \in R^n$ ，给定$w_i>0$，$[i=1,\ldots,n]$，称 $\{w_i\}$ 为权系数，并相应定义加权内积：

$$(x, y) = \sum_{i=0}^{n} w_i x_i y_i$$

权系数如何确定，需要根据实际问题而定，若取$w_i=1$，就是普通不加权的情形。类似地，可以在函数空间定义权函数概念。

定义4 $\rho(x)\geq 0,\quad \forall x\in[a,b]$ 满足

（1） $\int_a^b x^k\rho(x)dx$ 存在（k=0,1……）

（2）对非负连续函数g(x)，若 $\int_a^b g(x)\rho(x)dx=0 \Rightarrow g(x)\equiv 0$

称 $\rho(x)$ 为[a,b]上的**权函数**。

定义4中的第2条性质可以表述为另一种等价形式：

$\rho(x)\neq 0 \quad \forall x\in(c,d)\subset[a,b]$。这里区间（$c$,$d$）是[$a$,$b$]中任一子区间。用语言可表述为："权函数在[$a$,$b$]中任一子区间不恒为零"。

例2：给出了函数空间$C[a,b]$上加权内积的定义。

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：

$$(f(x),g(x))=\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx \qquad (1.15)$$

容易验证它满足内积定义的4条性质，由此**内积导出**的范数为：

$$\|f(x)\|_2=(f(x),f(x))^{\frac{1}{2}}=[\int_a^b \rho(x)f(x)f(x)dx]^{\frac{1}{2}} \qquad (1.16)$$

称（1.15）和（1.16）为带权$\rho(x)$的内积和范数，常用的是$\rho(x)\equiv 1$的情形。

小结：本节介绍了关于线性空间、范数、赋范线性空间、内积以及内积空间一些最基本的知识，它们在“泛函分析”中有系统、全面、深入的理论和研究。下面将以这些基本知识作为基础，对函数逼近的数学方法加以讨论。

§ 3.2　正交多项式

3.2.1　正交函数族与正交多项式

定义5　$f(x), g(x) \in C[a,b]$，　$\rho(x)$ 为权函数，若：

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

则 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在$[a,b]$上带权正交。

若函数族 $\varphi_0(x), \cdots, \varphi_n(x)$，满足：

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \int_a^b \rho(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) dx = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ A_k & j = k \end{cases} \quad (2.2)$$

则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 是在$[a,b]$带权 $\rho(x)$ 的正交函数族。若$A_k \equiv 1$，称标准正交函数族。

例如：三角函数族：1, cos$x$, sin$x$, cos2x, sin2x,…..
是[-π, π]上的正交函数族。

定义6，设 $\varphi_n(x)$ 是[a,b]上首项系数 $a_n \neq 0$ 的n次多项式， $\rho(x)$ 是[a,b]上的权函数，如果多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 满足关系式（2.2），则称多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 为[a,b]上带权 $\rho(x)$ 正交，称 $\varphi_n(x)$ 为[a,b]上带权$\rho(x)$的n次多项式。

定义6给出的正交多项式序列的定义与定义5很相似。

P57倒数第9～P58第11行，正交多项式的性质，不要求。

3.2.2 Legendre多项式

了解一下即可，但性质4应知道，后面要用到。

3.2.3 切比雪夫多项式

只需要了解一下。

3.2.4 切比雪夫多项式零点插值

不要求。

3.2.5 其它常用正交多项式

只了解，这里很多公式，都不必死记，用时查查即可。

§ 3.3　最佳平方逼近

3.3.1　最佳平方逼近及计算

一、问题提法

在讨论函数的最佳平方逼近时，需要涉及三个基本的相关问题：

（1）**被逼近函数类**：A：$C[a,b]$

即 $f(x)\in C[a,b]$ ：被逼近函数

（2）**逼近函数类**：函数类B应比较简单，这表现在

（a）有限维线性子空间 $\varphi = span\{\varphi_0(x)\ldots\varphi_n(x)\}$ ，由于是有限维线性子空间，函数类B中任一元素可以表达为：

$$S(x)=\sum_{j=0}^{n}\alpha_j\varphi_j(x)\in\varphi$$ 其中 $a_o,\cdots,a_n\in R$（实数空间）

函数类B中任一元素均有由基函数作线性组合的表达式。

（b）基函数简单

如： $\{1, x, \ldots\ldots, x^n\}$

$\{1, \cos x, \sin x, \ldots\ldots \cos nx, \sin nx\}$

$\{1, e^x, e^{-x}, \ldots\ldots\}$

{正交多项式族}

{有理函数族}

……

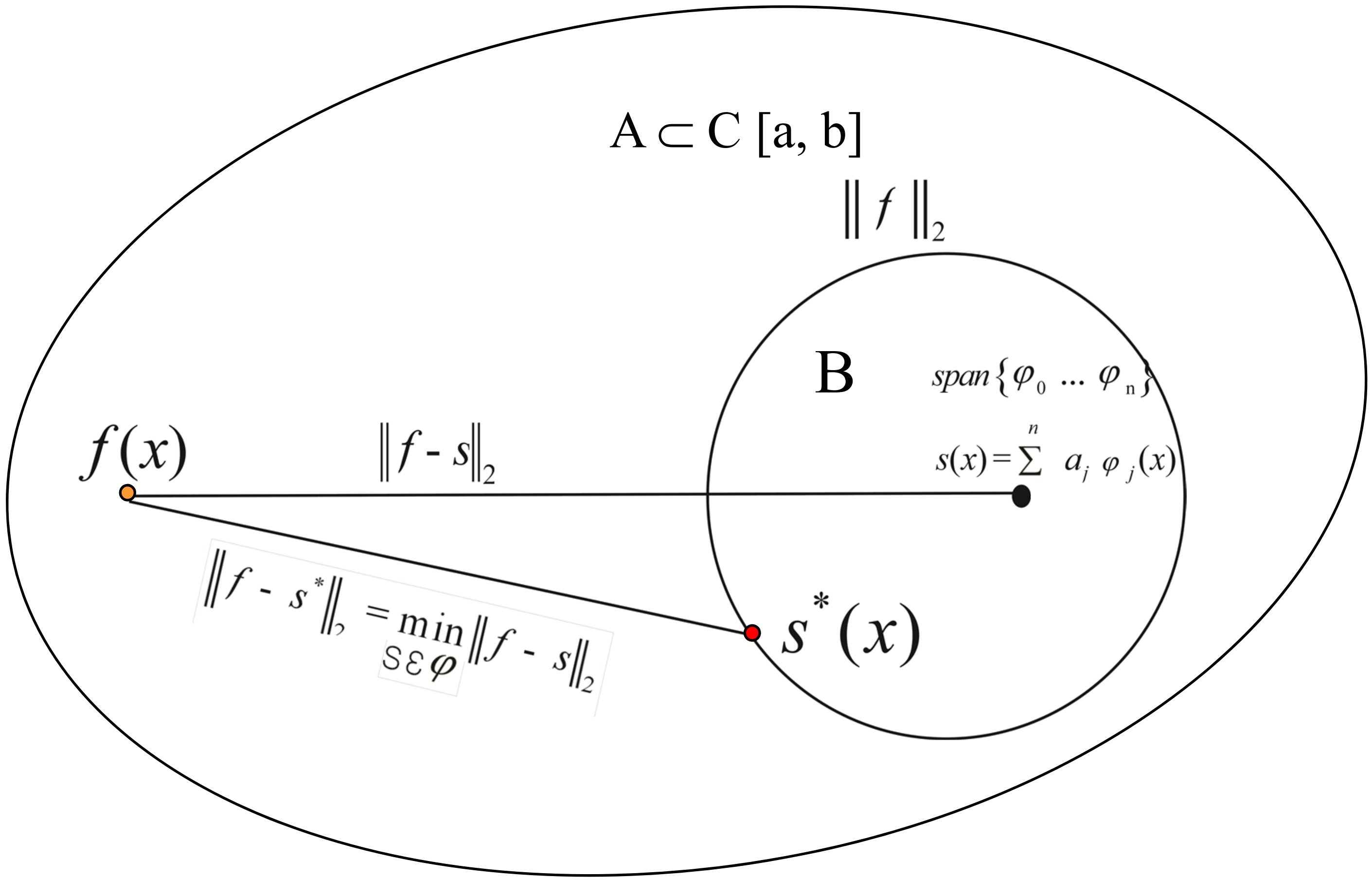
（3）**误差度量：2- 范数**

函数的最佳平方逼近可以用下式简单表示：

$$\| f(x)-S^*(x)\|_2^2=\min_{s(x)\in\varphi}\| f-S\|_2^2=\min_{s(x)\in\varphi}\int_a^b \rho(x)[f(x)-\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x)]^2\,dx$$

$S^*(x)$ ：在平方范数度量下，线性空间 $\varphi=Span\{\varphi_0,\cdots,\varphi_n\}$ 中与被逼近函数 $f(x)$ 的误差最小。

用图可以形象表示函数最佳平方逼近问题：



- ✓ $S^*(x)$ 的构造
- ✓ 存在唯一性
- ✓ 平方误差的计算
- ✓ 基函数的选取

二、 $S^*(x)$ 的构造：

把线性空间φ中元素$s(x)$与$f(x)$的距离平方记作：

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

是 $a_0,\ldots\ldots,a_n$ 的多元函数。因此，求 $S^*(x)$ 就是求多元函数 $I(a_0,\ldots\ldots,a_n)$ 关于变量 $a_0,\ldots\ldots,a_n$ 取极小值的那组变量，由多元函数取极值的**必要条件**知，此时的变量应满足：

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

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

改写为：$$\int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_x(x)dx-\int_a^b \rho(x)(\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x))\varphi_k(x)dx=0$$

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\varphi_x(x)dx - \int_a^b \rho(x)(\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x))\varphi_k(x)dx = 0$$

利用内积记号，上式可以表示为：

$$(f,\varphi_k) - (\varphi_k, \sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_k) = 0 \qquad (k = 0,\cdots,n)$$

应用内积的线性性质：“线性组合的内积=内积的线性组合”

有：

$$\sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_k,\varphi_j) = (f,\varphi_k) \qquad (k = 0,\cdots,n)$$

矩阵形式更好与定理3对照，这是关于$a_0,\ldots\ldots,a_n$的线性方程组，称为“法方程”，其矩阵形式：

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

由于 $\varphi_0,\cdots,\varphi_n$ 是线性空间φ的基函数，线性无关，所构成的Gram行列式不为0，即法方程的系数行列式不为0，系数矩阵非奇异，方程有唯一解：$a_0^*,\ldots,a_n^*$

$$S^*(x)=a_0^*\varphi_0(x)+\cdots+a_n^*\varphi_0(x)\in\varphi$$

特别注意：这里把满足极值必要条件，而非充分要件的$S^*(x)$取作最佳平方逼近函数，未免有些武断。原因是满足极值必要条件的元素不一定能使多元函取到极值，这种例子在高等数学中已指出过。因此，下面将要证明，满足极值必要条件的 $S^*(x)$ ，确实与 $f(x)$ 具有最小平方距离。

三、证明 $\| f - s^* \|_2 = \min\limits_{S\in\varphi} \| f - s \|_2$

给出详细证明这前，先分析误差函数 $(f - s^*)$ 的一个重要性质，这个性质在证明当中起着关键作用。

1、误差函数 $(f - s^*)$ 的基本性质：

先明确两个符号：$s(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) \in \varphi$　任一元素

$$s^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_j(x) \in \varphi \qquad a_0^*, \cdots a_n^* \text{ 满足 } \frac{\partial I}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 0, \cdots, n)$$

即，$S^*(x)$ 是φ中一个特殊的元素，它的特殊性表现在它的线性组合系数 $a_0^*, \cdots, a_n^*$ 满足法方程。

即，$\sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_k,\varphi_j)=(f,\varphi_k) \qquad (k=0,\cdots,n)$

$$(\varphi_k,\sum_{j=0}^{n} a_j^*\varphi_j)=(f,\varphi_k) \;\; (k=0,\cdots,n) \Rightarrow (\varphi_k,s^*)=(f,\varphi_k) \quad (k=0,\cdots,n)$$

合并：$\quad (f-s^*,\varphi_k)=0 \qquad (k=0,\cdots,n)$

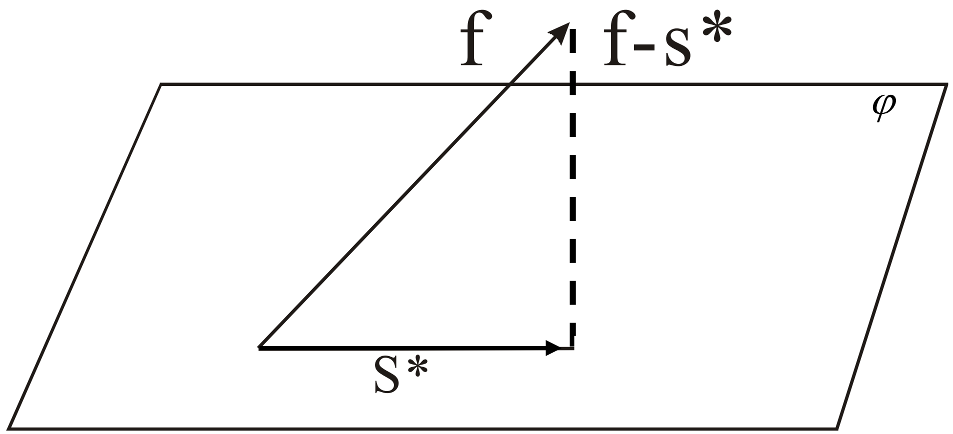
上式表明，满足极值必要条件而构造的逼近函数与$f(x)$的误差，对φ空间任一基函数φ_k正交，那么误差函数 $f(x)-s^*(x)$ 也与φ中任一元素正交：

$$\Rightarrow (f-s^*,a_k\varphi_k)=0 \qquad a_k\in R,\; k=0,\cdots,n$$

$$\Rightarrow (f-s^*,\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k)=0$$

$$\Rightarrow (f-s^*,s)=0 \qquad s(x)\in\varphi$$

用图示如下：



强调： 满足极值必要条件而构造的逼近函数最重要、最基本的性质是它与被逼近函数的误差函数垂直于φ空间中任一基函数，也就是垂直于φ中任一元素，可以表示为：

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

$$(f - s^*) \perp S(x) \qquad \mathrm{S(x)} \in \varphi$$

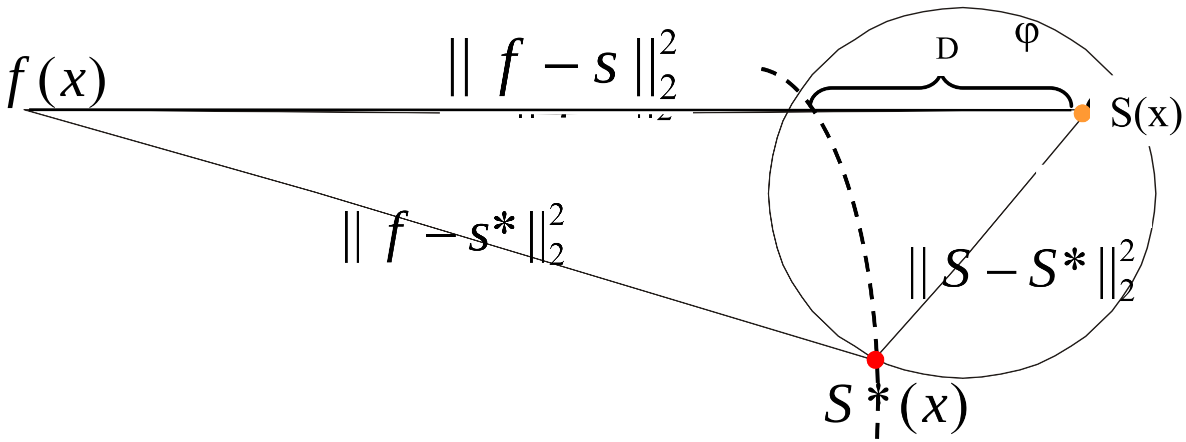
2、证明：

思路：　证 $\| f-s\|_2^2 \geq \| f-s^*\|_2^2$ 　或 $\| f-s\|_2^2 - \| f-s^*\|_2^2 \geq 0$

即证S^*与 f 的平方距离的平方不超过φ中其它元素对f的平方距离平方，即证：

$$D=\int_a^b \rho(x)(f(x)-s(x))^2 dx-\int_a^b \rho(x)(f(x)-s^*(x))^2 dx \geq 0$$

用图可直观理解为：



$$D=\int_a^b \rho(x)(f(x)-s(x))^2dx-\int_a^b \rho(x)(f(x)-s^*(x))^2dx$$

$$D=\int_a^b \rho[\cancel{f}^2-2fs+s^2-\cancel{f}^2+2fs^*-s^{*2}]dx$$

在余下的项里，希望能配出这样一项：

$$\int_a^b \rho(x)(s(x)-s^*(x))^2dx=\int_a^b \rho(x)(s^2-2ss^*+s^{*2})dx$$

s^2已有，还缺$2ss^*$及s^{*2}，两项，可以加上再减去。

$$D=\int_a^b \rho[-2fs+\underbrace{s^2+s^{*2}-2ss^*}-s^{*2}+2ss^*+2fs^*-s^{*2}]dx$$

$$=\int_a^b \rho(s-s^*)^2dx+2\int_a^b \rho(s^*-s)(f-s^*)dx$$

注意D中的第二项： $\int_a^b \rho(s^*-s)(f-s^*)dx=(s^*-s,f-s^*)=0$

有： $D=\int_a^b \rho(s-s^*)^2dx\ge 0$

而且，仅当$s(x)=s^*(x)$时，D=0，这说明$s^*(x)$是函数空间φ中，与$f(x)$有最小平方误差的唯一一个函数。这样，存在唯一性得到证明。

四、$\| f-s^* \|_2^2$ —最佳平方逼近的误差

令： $\delta(x)=f(x)-s^*(x)$

则： $\|\delta(x)\|_2^2=(f-s^*, f-s^*)=(f-s^*, f)-(f-s^*, s^*)$

其中，第二项可利用前面导出的最佳平方逼近函数对$f(x)$的误差函数与φ空间中任一元素正交，也和自身正交，即为0，因此有：

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

这样，只须计算$\| f \|_2^2$ ，即可得到误差，比直接计算$\| f - s^* \|_2^2$方便。

五、基函数选择

多项式比较简单，常被取作基函数，比如取 $\varphi = span\ \{1, x, \cdots, x^n\}$

但下面的例子说明。若直接选用$\{1,x,\ldots,x^{n}\}$作基函数，计

算将出现严重不稳定。

例6，设 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$ 求[0，1]上的n次最佳平方逼近多项式。

$\rho(x)\equiv 1 \qquad f(x)=\sqrt{1+x^2}$ 被逼近函数

若取：$\varphi=span\{1,x\cdots,x^n\}$ 求：$s^*(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j^*x^j$

其中：$a_0^*,\cdots,a_n^*$ 满足如下法方程：

$$\sum_{j=0}^{n}a_j^*(\varphi_k,\varphi_j)=(\varphi_k,f) \qquad k=0,\cdots,n$$

而：

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

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

记：

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

法方程： $G_n a^* = d$

其中： a^*是 a_j^* 的列向量，d是右端向量。

G_n称为Hilbert希尔伯特矩阵，是一个高度病态的矩阵，第五章将详细讨论。这里列出其行列式的大小，加以说明：

$$|G_0| = 1$$
$$|G_3| = 1.7\times 10^{-7}$$
$$|G_6| = 4.8\times 10^{-25}$$
$$|G_8| = 9.7\times 10^{-43}$$

当n较大时，$|G_n| \approx 0$， 就是说法方程接近于奇异。因此，求解 a_j^* 时，舍入误差将严重影响解的精度。解决办法是：

① n较小时使用

② 用双精度数

③ 用正交多项式作基

3.3.2 用正交函数族作最佳平方逼近

设：$\{\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$ 为正交函数族，即：$(\varphi_k,\varphi_j)=\begin{cases}0 & j\neq k\\ A_k>0 & j=k\end{cases}$

则法方程：$$\sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_k,\varphi_j)=(f,\varphi_k) \quad (k=0,\cdots,n)$$

由于基函数的正交性，系数矩阵退化为对角阵：

$$\boxed{a_k^*=(f,\varphi_k)(\varphi_k,\varphi_k)=(f,\varphi_k)/A_k, \qquad (k=0,\cdots,n)}$$

因此，最佳平方逼近多项式可立即给出为：$\boxed{S^*(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\varphi_k(x)}$

避免求解一个变量间相互耦合的法方程，用正交函数族作最佳平方逼近有以下优点：

（1）计算稳定，方便：$a_k^*=\dfrac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)} \qquad (k=0,\cdots,n)$

（2）便于基函数增删，第k个正交基函数的线性组合系数仅仅依赖于第k个基函数 $\varphi_k(x)$本身。

小结：掌握用正交多项式族做最佳平方逼近的特殊情况和它的优点。了解一下定理8与9即可，定理10可不看。

定理8：是正交式项式族做最佳平方逼近的**收敛性定理**

定理9：给出平方逼近可在一定条件下达到**一致逼近的效果，**是非常有意义的结论。希望能了解。

3.3.3 切比雪夫级数

不要求。

第3章课后练习（7）

作业：三、14（2）（3）、15、17、18

预习：4.1、4.2

§3.4 曲线拟合的最小二乘法

3.4.1 最小二乘法及其计算

曲线拟合是讨论连续函数对表格函数的最佳平方逼近。它与用连续函数逼近连续函数的最佳平方逼近，在问题的提法、解决问题的思路、最小二乘逼近函数的构造等方面都十分相似。因此，在下面的介绍中，将突出二者不同的地方，相同的将仅作简要介绍。先介绍几个预备知识。

一、预备知识

1、函数对离散点的加权内积：

定义： $x:\quad x_o,\quad x_1,\quad \cdots\cdots,\quad x_m$

$$\varphi(x):\quad \varphi(x_0),\ \varphi(x_1),\ \cdots\cdots,\ \varphi(x_m)$$

$$\psi(x):\quad \psi(x_0),\ \psi(x_1),\ \cdots\cdots,\ \psi(x_m)$$

$$w(x):\quad w(x_0),\ w(x_1),\ \cdots\cdots,\ w(x_m)$$

$$\text{称}:(\varphi,\psi)=\sum_{i=0}^{m} w(x_i)\varphi(x_i)\psi(x_i)$$

为函数 $\varphi(x)$ 与 $\psi(x)$ 对离散点$x_0,\ldots\ldots,x_m$及权函数$w(x)$的内积，$w(x)>0$。

该内积定义同样满足P53定义3关于线性空间内积给出的四条性质，自己证明一下。

类似地，利用函数自身内积的非负性可定义平方范数。

2、函数对离散点的平方范数：

$$\|\varphi(x)\|_2 = (\varphi,\varphi)^{1/2} = \left(\sum_{i=0}^{n} w(x_i)(\varphi^2(x_i))\right)^{1/2}$$

3、函数族关于离散点的正交：

$$\varphi = \{\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)\} \qquad x_i(i=0,\cdots,m)$$

有： $$(\varphi_j,\varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} w(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ A_k > 0 & j = k \end{cases}$$

4、设 $\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 及点集 $x_0,\cdots,x_m (m>n)$

若 $$a_0\varphi_0(x_i)+\cdots+a_n\varphi_n(x_i)=0 \qquad (i=0,\cdots,m)$$

当且仅当$a_0=\cdots=a_n=0$ 时成立， 称 $\varphi_0,\cdots,\varphi_n(x)$ 关于点集 $x_0,\cdots,x_m$ 线性无关。

定理3’： $\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 对点集 $x_0,\cdots,x_m$（$m>n$）线性无关的充要条件是相应的Gram行列式det(G)≠0。

定理的证明可仿照定理3，这里不做了。

思考：对区间来说线性无关的一族函数，对点集来说是否也线性无关？

答案是否定的，书P74有个例子说明了这点，大家思考一下。

书上对线性组合函数在点集的零点性质提出一种称为Haar哈尔条件的定义，大家看一下，了解即可。另一方面，《数值分析基础》（关治，陆金甫）的书中有一定理（P128，引理3.1）。

引理3.1： $\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 如果在 $X=\{x_o,\cdots x_m\}(m\geq n)$上满足Haar条件，则 $\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 在X上线性无关。

定理指出：满足Haar条件 $\longrightarrow$ 线性无关。但如何定量判定Haar条件，仍不清楚。所以还是用定理3判断，较为方便与直接。

二、问题提法

首先，明确与最小二乘拟合相关的三个基本问题：

1、被逼近函数类A：表格函数

$$y = f(x) \quad (x_i, y_i) \quad (i = 0, \cdots, m)$$

注意：最小二乘逼近的函数不是连续函数，而是表格函数。

2、逼近函数类 B

这与最佳平方逼近采用的简单连续函数大体相同，表现在：

（a）有限维线性空间：$\varphi = span\{\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$

其中，$\varphi_0(x),\cdots,\varphi_n(x) \in C[a,b]$

B中函数有十分简单的结构：$s(x)=\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x) \in \varphi \quad a_0,\cdots,a_n \in R$

（b）基函数简单

类似地，这里也选择“多项式”，“三角函数”、“指数函数”、“有理函数”等集合。

3、误差度量：关于离散点的平方范数

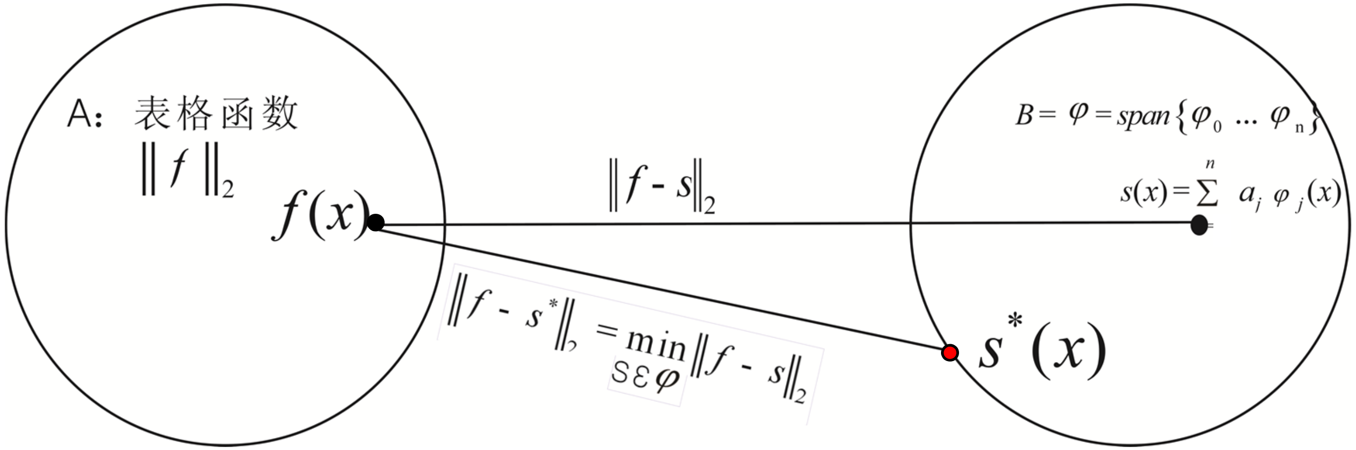
最小二乘逼近可以简单地表达为：

$$\|f(x)-s^*(x)\|_2=\min_{s\in\varphi}\|f-s\|_2=\min_{s\in\varphi}\left(\sum_{i=0}^{m}\left[y_i-\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)\right]^2\right)^{1/2}$$

对照最佳平方逼近，从形式上看完全一致，区别仅在范数计算。

找$S^*(x)$：在关于**离散点平方范数**的度量下，线性空间 $\varphi=\{\varphi_0,\cdots,\varphi_n\}$ 中与被逼近函数$f(x)$的误差最小。

可用下图形表示：



再强调：最佳平方逼近与最小二乘逼近的区别仅在于被逼近函数类型：

连续函数——最佳平方逼近

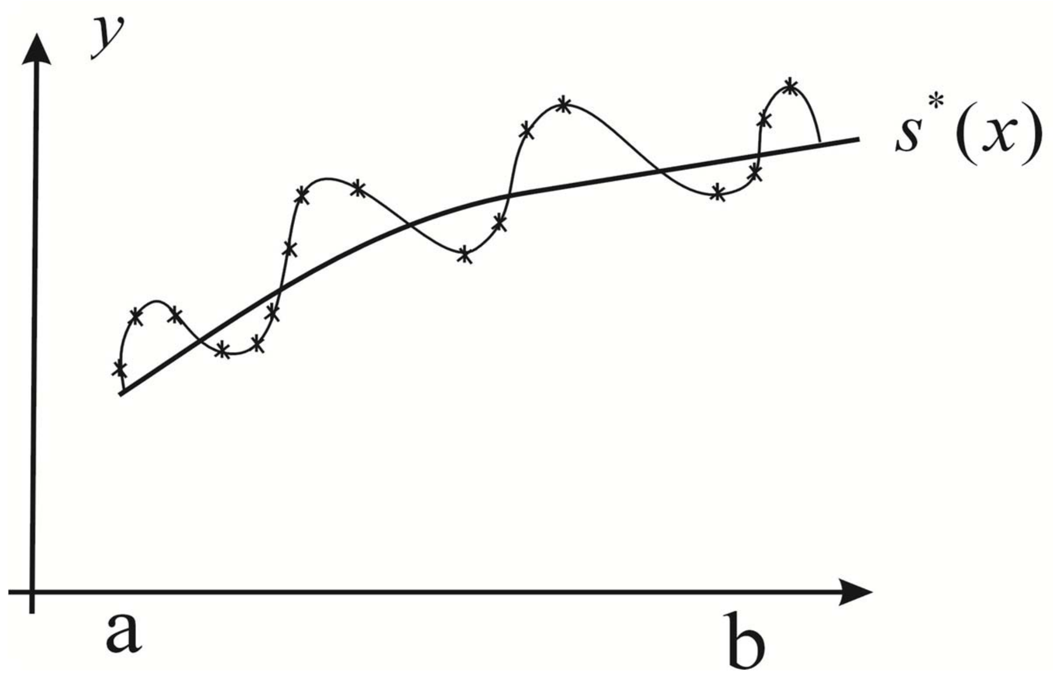
表格函数——最小二乘拟合

思考：大家注意到第二章的插值方法，也是讨论为表格函数配曲线的问题，这与最小二乘拟合有什么区别和联系呢?

什么时候应使用最小二乘拟合?

一般来说，适合使用最小二乘拟合方法配连续曲线的离散点，大体有以下特点：

（a）不很准确　（b）数量大　（c）有某种分布规律



当数据具有前述几个特点时，若要求像插值那样配一条严格通过每个离散点的曲线，可能会掩盖了这批数据所反映的x, y间的依赖关系，这时采用最小二乘拟合会更有意义。

在明确了最小二乘拟合的提法后，具体讨论如何构造最小二乘拟合函数等问题。它与最佳平方逼近函数的构造几乎是平行（一样）的，书上也有简略推导，这里列出标题，大家可依照上节课对最佳平方逼近函数的构造与分析加以充实。

三、*S**（*x*）的构造

把问题转化为求多元函数：$I(a_0,\cdots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}w(x_i)[f(x_i)-\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)]^2$

的极值问题，所有讨论与前面相同。

四、证明 $\|f-s^*\|_2=\min_{s\in\varphi}\|f-s\|_2$

证明的方法、思路与最佳平方逼近完全相同，关键在于导出最小二乘拟合函数与被逼近函数的误差具有的性质：

误差函数 $f(x)-s^*(x)$ 的重要性质：

$$\left.\begin{array}{r}(f-s^*,\varphi_k)=0\\ \text{或}\quad (f-s^*)\perp\varphi_k\end{array}\right\}k=0,\cdots,n \qquad \text{或}\ (f-s^*,s)=0 \quad \forall S\in\varphi$$

推导与证明请自己完成。

五、最小二乘拟合的误差 $\|f-s^*\|_2^2$

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

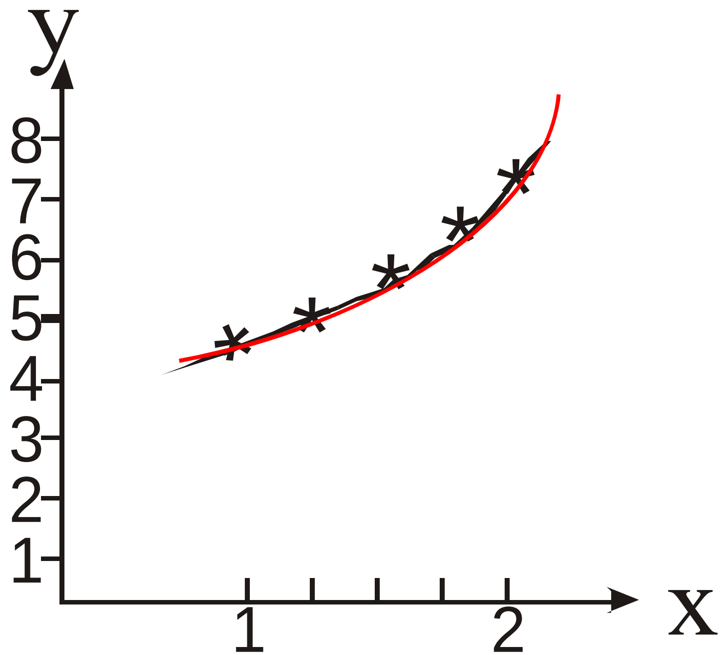
六、基函数选择

这里介绍两种常用方法：

1、分析数据规律选基函数

例9： 比较简单，自己看。

例10： $(x_j,y_j),\ (j=0,1,2,3,4,)$ 在表3-1给出，由给定数据在方格纸上绘图：



根据离散点的分布，确定采用指数形式：$y = \gamma e^{bx}$ 描述点的分布比较合适。但应注意，**上述函数形式应当转换为可由基函数的线性组合表达的形式**：

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

因此，应对函数形式加以处理，两边取对数：$\ln y = \ln \gamma + bx$

作变量代换，令 $\bar{y} = \ln y$， $a = \ln \gamma$ ，则： $\bar{y} = a + bx$ $\varphi = span\{1, x\}$

确定a与b即可 。

这个例子强调说明以下两点：

（a）为什么改写拟合函数表达式 $y=\gamma e^{bx}$?

原因是将非线性的函数表达式改写为在适当引入变量代换后，可给出通过基函数线性组合的函数表达式。

（b）作变量代换后，问题转化为新变量 $\bar{y}$与x之间的最小二乘拟合问题，必须对原始数据加以改造，就是表3-2第4行给出的数据。

2、正交多项式组作基函数（3.3.2）

3.4.2 用正交多项式作最小二乘拟合

思考：本章第2节已经介绍5种常用正交多项式族，他们对任意点集是否也正交？举个例子：

P61式（2-9）给出了定义在[-1.1]，权函数 $\rho(x)=1$ 的Legendre多项式族的递推公式，并列出0~6次的多项式。

其中：$p_0(x)=1$，$p_1(x)=x$，……

[-1.1]对权函数 $\rho(x)=1$ 正交： $(p_0,p_1)=\int_{-1}^{1}1\cdot xdx=\frac{1}{2}x^2\mid_{-1}^{1}=0$

而它们对某一点集 $x_i=-0.5$， 0.1， 0.7， 1 的内积：

$$(p_0,p_1)=1\times(-0.5)+1\times0.1+1\times0.7+1\times1=1.3\neq0$$

结论： $p_0(x)$ 与 $p_1(x)$ 虽然在区间[-1.1]正交，但对位于其中的点集 $\{-0.5, 0.1, 0.7, 1\}$ 却不正交。因此，关于区间正交的多项式，对点集不一定正交。

下面给出构造关于点集正交多项式族的公式与证明。
P77的式（4.10）与P77的（4.11）给出了两组公式，可以递推构造关于任意函数及任意点集正交的多项式族，下面证明这样构造的多项式族是两两正交的。

证明：设点集： $x_i \quad (i = 0, \cdots, m)$，权函数：$w(x) \geq 0$，则有递推式：

$$
\begin{cases}
p_0(x)=1 \\
p_1(x)=(x-\alpha_1)p_o(x) \\
p_{k+1}(x)=(x-\alpha_{k+1})p_k-\beta_k p_{k-1}(x) \qquad (k=0,1,\cdots,n-1) \\
\alpha_{k+1}=(xp_k,p_k)/(p_k,p_k) \\
\beta_{k+1}=(p_k,p_k)/(p_{k-1},p_{k-1})
\end{cases}
$$

从这组合式看出，当点集及权函数给出，$p_1(x)$ 中的 α_1 即可求出：$\alpha_1=(xp_0,p_0)/(p_0,p_0)=(x,1)$。求出 $p_1(x)$ 后，利用递推关系式，计算包含在递推关系中的系数 α_{k+1}，β_k，从 $p_k(x)$ 及 $p_{k-1}(x)$ 即可推出 $p_{k+1}(x)$，而 α_{k+1} 仅依赖于p_k；β_k依赖于p_k与p_{k-1}，都是已知的，递推过程可以进行下去：

P0，P1，P2，P3，P4……

证明：上述多项式族关于点集 x_i 带权正交

思路：归纳法

设：$\{p_0(x), p_1(x), \cdots, p_k(x)\}$ 是按照上面公式构造出来的，要证明它们两两正交，可对L作归纳。

（1）L =1　$\{P_0，P_1\}$

做内积： $(p_1, p_0) \xrightarrow{\text{代入}P_1} = ((x-\alpha_1)p_0, p_0)$

打开： $(xp_0, p_0) - \alpha_1(p_0, p_0)$

代入α_1： $(xp_0, p_0) - \dfrac{(xp_0, p_o)}{(p_o, p_o)}(p_0, p_0) = 0$

（2）设： $L=k$ 时，$\{p_0,\cdots,p_k\}$ 正交

即对k，$(p_k,p_s)=0$ $(s=0,\ldots,k-1)$

（3）证：$\{p_0,\cdots,p_k,p_{k+1}\}$ 正交，即证：$(p_{k+1},p_s)=0$

两个简单事实：

（a） $(xp_t,p_q)=\sum_{i=0}^{m}w(x_i)x_i p_t(x_i)p_q(x_i)=(p_t,xp_q)$

（b） $\{p_0,\cdots,p_k\}$ 正交

$\Rightarrow\{p_0,\cdots,p_k\}$ 可作基函数

$\Rightarrow$ 任一次数$\le k$的多项式$Q_k(x)$可由这组基函数表示出来：

$$Q_k(x)=\sum_{j=0}^{k}a_j p_j(x)$$

详细证明如下： $(p_{k+1},p_s)=((x-\alpha_{k+1})p_k,p_s)-\beta_k(p_{k-1},p_s)$

$$=(xp_k,p_s)-\alpha_{k+1}(p_k,p_s)-\beta_k(p_{k-1},p_s)$$

将s分作三段证明：

$$s=\underbrace{0,\cdots,k-2}_{a},\underset{b}{k-1},\underset{c}{k}$$

（a） $s\le k-2$

根据归纳法假设（2）， $s\le k-2$ 时，上式后两项为0。

即：$(p_k,p_s)=(p_{k-1},p_s)=0,\qquad s\le k-2$

而第一项：$s+1$次 $\because s\le k-2,\quad s+1\le k-1$

$$(xp_k,p_s)=(p_k,xp_s)=(p_k,\sum_{i=0}^{s+1}a_i p_i(x))$$

$$=\sum_{i=0}^{s+1}a_i(p_k,p_i)=0\qquad(\because i\le k-1)$$

$\left.\begin{array}{l}(b)s=k-1\\(c)s=k\end{array}\right\}P78,$ 有详细证明。

§3.5 不要求

§3.6 不要求

小结：线性空间、范数、赋范线性空间、内积以及内积空间、线性相关与线性无关、正交函数及正交函数族。

连续函数的最佳平方逼近。

离散函数的最小二乘拟合。