# 函数逼近

# §1 引言

## 一、问题的提出

在科学与工程技术的很多领域，人们常碰到大量带有误差的实验数据，这时采用高次插值会出现震荡，采用分段插值则会使函数非常复杂，无法准确反映被测函数的整体性态，因此，不适合用插值法。

如何在给定精度下，求出计算量最小的近似式，这就是函数逼近要解决的问题。

## 二、函数逼近问题的一般提法:

对于函数类 $A$ 中给定的函数 $f(x)$，要求在另一类较简单的且便于计算的函数类 $B(\subset A)$ 中寻找一个函数 $P(x)$，使 $P(x)$ 与 $f(x)$ 之差在某种度量意义下最小。

**注:** 本章中所研究的函数类 $A$ 通常为区间 $[a,b]$ 上的连续函数，记做 $C[a,b]$; 而函数类 $B$ 通常是代数多项式或三角多项式。

## 三、常用的度量标准:

### (一) 最佳一致逼近

若以函数$f(x)$和$P(x)$的最大误差

$$\max_{x\in[a,b]}\left|f(x)-P(x)\right|=\left\|f(x)-P(x)\right\|_{\infty}$$

作为度量误差 $f(x)-P(x)$“大小”的标准，在这种意义下的函数逼近称为**最佳一致逼近**或**均匀逼近**。

## (二) 最佳平方逼近：

采用 $$\sqrt{\int_a^b \left[f(x)-P(x)\right]^2 dx}=\left\|f(x)-P(x)\right\|_2$$

作为度量误差“大小”标准的函数逼近称为最佳平方逼近或均方逼近。

# §2　最佳一致逼近

## 一、最佳一致逼近的概念

定义　设函数 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的连续函数，对于任意给定的 $\varepsilon>0$，如果存在多项式 $P(x)$，使不等式

$$\max_{a\le x\le b}\left|f(x)-P(x)\right|<\varepsilon$$

成立，则称多项式 $P(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上一致逼近(或均匀逼近)于函数 $f(x)$。

# 二、最佳一致逼近多项式的存在性

定理 1（维尔斯特拉斯定理）

若 $f(x)$ 是区间 $[a, b]$ 上的连续函数，则对于任意 $\varepsilon>0$，总存在多项式 $P(x)$，使对一切 $a\le x\le b$ 有

$$\left\| f(x)-P(x) \right\|_{\infty} < \varepsilon$$

## 三、 $C[a,b]$ 上的最佳一致逼近

在 $\|f\|_\infty=\max\limits_{x\in[a,b]}|f(x)|$ 意义下:

能否在所有次数不超过n的代数多项式中找到一个 $p_n^*(x)$，使得

$$\left\|f(x)-p_n^*(x)\right\|_\infty=\min_{p_n(x)\in H_n}\left\|f(x)-p_n(x)\right\|_\infty$$

其中，$H_n$ 表示由所有次数不超过n的代数多项式构成的线性空间。

这就是 $C[a,b]$ 空间中的最佳一致逼近问题。

# 四、$C[a,b]$上最佳一致逼近多项式的存在性

定理2（Borel定理）

对任意的 $f(x)\in C[a,b]$，在 $H_n$ 中都存在对

$f(x)$ 的最佳一致逼近多项式，记为 $p_n^*(x)$，使得

$$\|f(x)-p_n^*(x)\|_\infty = \min_{p_n(x)\in H_n}\|f(x)-p_n(x)\|_\infty$$

成立．称 $p_n^*(x)$ 为 $f(x)$ 的n次最佳一致逼近多项式。

简称最佳逼近多项式。

## 五、相关概念

### 1、偏差

定义 若 $P_n(x)\in H_n$，$f(x)\in C[a,b]$，则称

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

为 $f(x)$ 与 $P_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上的偏差。

注： 显然，$\Delta(f,P_n)\ge 0$，$\{\Delta(f,P_n)\}$ 的全体组成一个集合，记作 $\Delta(f,P_n)$，它有下界0。

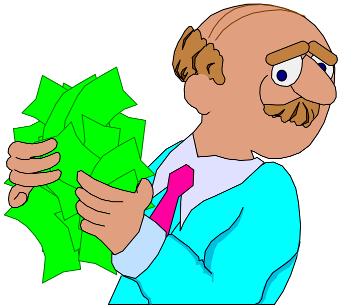
## 2、最小偏差

定义

若记集合的下确界为

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

则称 $E_n$ 为 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的最小偏差。



## 3、偏差点

定义

设 $f(x)\in C[a,b], P(x)\in H_n$，若在 $x=x_0$ 上有

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

则称 $x_0$ 是 $P(x)-f(x)$ 的偏差点。

若 $P(x_0)-f(x_0)=\mu$，则称 $x_0$ 为“正”偏差点。

若 $P(x_0)-f(x_0)=-\mu$，则称 $x_0$ 为“负”偏差点。

## 4、交错点组

定义

若函数 $f(x)$ 在其定义域的某一区间 $[a,b]$ 上存在 $n$ 个点 $\{x_k\}, k=1,2,\dots,n,$ 使得

$$(1)\left|f(x_k)\right|=\max\left|f(x)\right|=\left\|f(x)\right\|_{\infty},\ k=1,2,\dots,n;$$

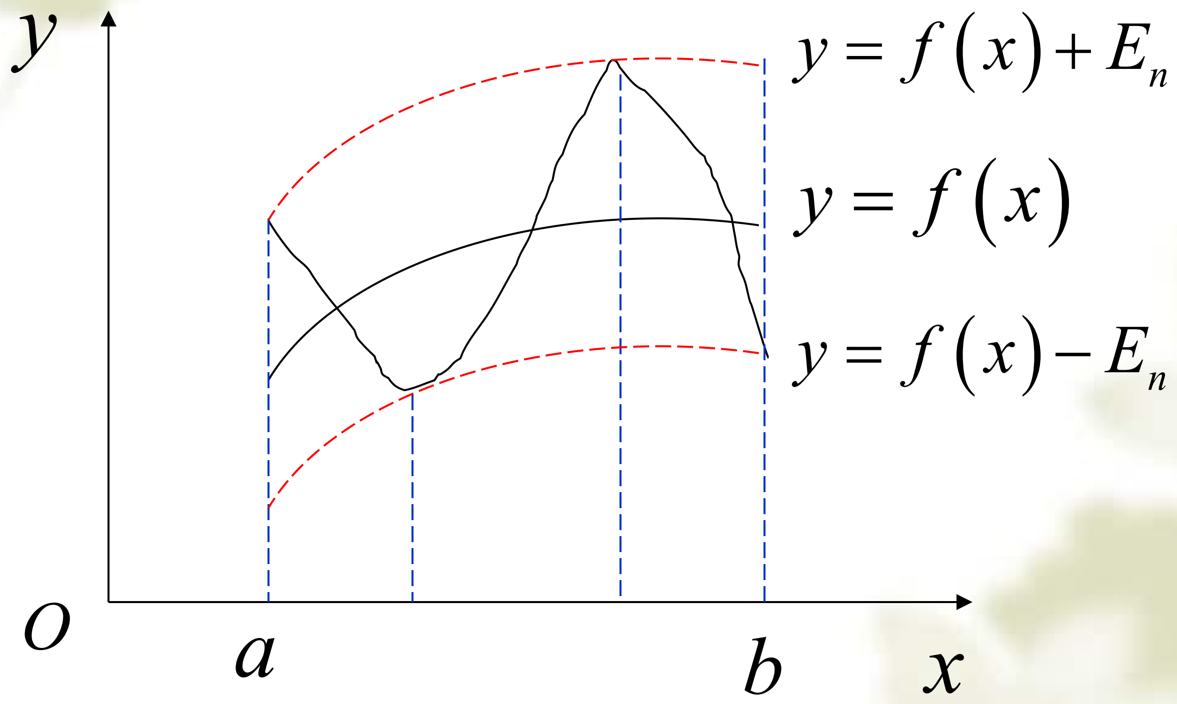
$$(2)-f(x_k)=f(x_{k+1}),k=1,2,\dots,n-1;$$

则称点集 $\{x_k\}, k=1,2,\dots,n,$ 为函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的一个交错点组，点 $x_k$ 称为交错点。

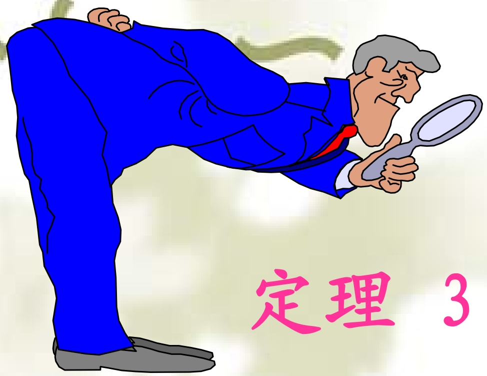
# 六、 $C[a,b]$ 上的最佳一致逼近的特征

**引理3.1**

设 $f(x)$ 是区间$[a,b]$上的连续函数，$P_n^*(x)$ 是 $f(x)$ 的n次最佳一致逼近多项式，则 $f(x)-P_n^*(x)$ 必同时存在正负偏差点。



$y$
$y = f(x) + E_n$
$y = f(x)$
$y = f(x) - E_n$
$O$
$a$
$b$
$x$



## 定理 3 （ Chebyshev定理）

设 $f(x)$是区间$[a,b]$上的连续函数，则$P_n^*(x)$ 是$f(x)$的n次最佳一致逼近多项式的充要条件是：$f(x)-P_n^*(x)$在区间$[a,b]$上存在一个至少由 $n+2$ 个点组成的交错点组。

## 推论1

设 $f(x)$是区间 $[a,b]$ 上的连续函数，$P_n^*(x)$是$f(x)$的n次最佳一致逼近多项式，若 $f^{(n+1)}(x)$在 $(a,b)$ 内存在且保号，则 $f(x)-P_n^*(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上恰好存在一个由 $n+2$ 个点组成的交错点组，且两端点 $a,b$ 都在交错点组中。

**推论2**

在 $P_n[a,b]$ 中,若存在对函数 $f(x) \in C[a,b]$ 的最佳一致逼近元，则惟一.

**推论3**

设 $f(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上的连续函数,则 $f(x)$ 的 $n$ 次最佳一致逼近多项式是 $f(x)$ 的某个 $n$ 次插值多项式。

# 七、一次最佳逼近多项式 $(n=1)$

## 1、推导过程

设 $f(x)\in C^2[a,b]$，且 $f''(x)$ 在 $(a,b)$ 内不变号，要求 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的一次最佳一致逼近多项式 $P_1(x)=a_0+a_1x$

由推论1，$f(x)-P_1(x)$ 在 $[a,b]$ 上恰好有3个点构成的交错组，且区间端点 $a,b$ 属于这个交错点组，设另一个交错点为 $x_2$，

则
$$\begin{cases} f'(x_2)-P_1'(x_2)=0 \\ f(a)-P_1(a)=f(b)-P_1(b) \\ f(a)-P_1(a)=-\left[f(x_2)-P_1(x_2)\right] \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} a_0 + a_1 a - f(a) = a_0 + a_1 b - f(b) \\ a_0 + a_1 a - f(a) = f(x_2) - [a_0 + a_1 x_2] \\ f'(x_2) = a_1 \end{cases}$$

解得

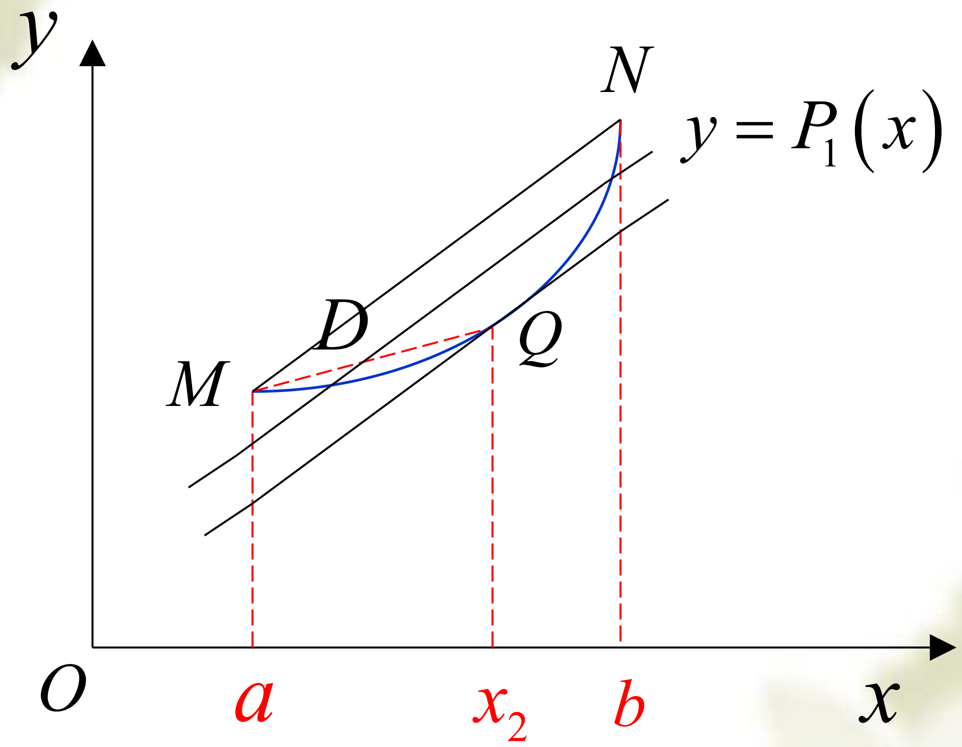
$$a_1 = \frac{f(b)-f(a)}{b-a} = f'(x_2),$$

$$a_0 = \frac{f(a)+f(x_2)}{2} - \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{a+x_2}{2}.$$

即

$$P_1(x) = \frac{f(x_2)+f(a)}{2} + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\left(x - \frac{a+x_2}{2}\right)$$

## 2、几何意义



## 3、举例

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

解：　由 $a_1=\dfrac{f(b)-f(a)}{b-a}=f'(x_2)$，可算出

$$a_1=\sqrt{2}-1\approx 0.414, f'(x)=\frac{x}{\sqrt{1+x^2}},$$

故 $$\frac{x_2}{\sqrt{1+x_2^2}}=\sqrt{2}-1,$$

解得

$$x_2=\sqrt{\frac{\sqrt{2}-1}{2}}\approx 0.4551, f(x_2)=\sqrt{1+x_2}\approx 1.0986.$$

由 $a_0=\frac{f(a)+f(x_2)}{2}-\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{a+x_2}{2}.$ 得

$$a_0=\frac{1+\sqrt{1+x_2^2}}{2}-a_1\frac{x_2}{2}\approx 0.955,$$

于是得 $\sqrt{1+x^2}$ 的最佳一次逼近多项式为

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

故 $$\sqrt{1+x^2}\approx 0.955+0.414x, 0\le x\le 1. \quad (*)$$

误差限为 $$\max_{0\le x\le 1}\left|\sqrt{1+x^2}-P_1(x)\right|\le 0.045.$$

在（*）式中若令 $x=\frac{b}{a}\le 1$ ，则可得一个求根的公式

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

# 八、Chebyshev多项式及其应用

It is very important

(1) 定义

称 $T_n = \cos(n \arccos x), |x| \le 1$ 为n次Chebyshev多项式.

$T_0(x) = 1$
$T_1(x) = x$
$T_2(x) = 2x^2 - 1$
$T_3(x) = 4x^3 - 3x$
$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$
$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$
$\ldots$

[注] 令 $\theta = \arccos x$，则 $\cos\theta = x$

而 $\cos n\theta = \cos^n\theta - C_n^2 \cos^{n-2}\theta \sin^2\theta + C_n^4 \cos^{n-4}\theta \sin^4\theta - \cdots$

故 $T_n$ 为关于 $x$ 的 $n$ 次代数多项式。

## (2) 性质

- 正交性:

由$T_n(x)$所组成的序列$\{T_n(x)\}$是在区间[-1, 1]上带权

$\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式序列。且

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

## 递推关系

相邻的三个切比雪夫多项式具有如下递推关系式:

$$\begin{cases} T_0(x)=1, T_1(x)=x \\ T_{n+1}(x)=2x\cdot T_n(x)-T_{n-1}(x) \end{cases} \quad (n=1,2,\ldots)$$

- 奇偶性:

切比雪夫多项式 $T_n$ ，当 $n$为奇数时为奇函数;

$n$为偶数时为偶函数。

$$T_n(-x)=\cos\left[n\arccos(-x)\right]=\cos(n\pi-n\arccos x)$$

$$=(-1)^n\cos(n\arccos x)=(-1)^n T_n(x)$$

- $T_n$在区间[-1, 1]上有 $n$ 个不同的零点

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

- $T_n(x)$ 在[-1, 1]上有$n+1$个不同的极值点

$$x_k' = \cos k\frac{\pi}{n}, (k = 0,1,2,\ldots,n)$$

使$T_n(x)$轮流取得最大值 1 和最小值 -1。

- 切比雪夫多项式的极值性质

$T_n(x)$ 的最高次项系数为 $2^{n-1}$ $(n = 1, 2, \ldots)$。

➢ 在-1≤$x$≤1上，在首项系数为1的一切$n$次多项式 $P_n(x)$ 中，$\widetilde{T}_n(x)=\dfrac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$与零的偏差最小，且其偏差为$\dfrac{1}{2^{n-1}}$；即，对于任何$P(x)\in P_n(x)$，有

$$\frac{1}{2^{n-1}}=\max_{-1\le x\le 1}\left|\widetilde{T}_n(x)-0\right|\le\max_{-1\le x\le 1}\left|p(x)-0\right|$$

区间$[-1,1]$上的最小零偏差多项式

注： 该性质又被称为Chebyshev多项式的最小模性质.

## (3) 应用

- 多项式的降阶（最小零偏差问题）

在所有次数为 $n$ 的多项式中求多项式 $P_n(x)$，使其在给定的有界闭区间上与零的偏差最小。这一问题被称为最小零偏差多项式问题。

不失一般性，可设 $P_n(x)$ 的首项系数为1，所讨论的有界闭区间为 $[-1,1]$. 对一般区间 $[a,b]$，可先将 $x$ 换为 $t$，考虑 $f(t)$ 在 $[-1,1]$ 上的逼近 $P_n(t)$，再将 $t$ 换回 $x$，最后得到 $P_n(x)$。

寻求最小零偏差多项式$P_n(x)$的问题事实上等价于求$f(x)=x_n$的$n-1$次最佳一致逼近多项式的问题。

即求$\tilde{P}_{n-1}$使其满足：

$$\max_{[-1,1]}\left|f(x)-\tilde{P}_{n-1}(x)\right|=\min_{P_{n-1}(x)\in H_{n-1}}\left\|f(x)-P_{n-1}(x)\right\|_{\infty}$$

注：

在$[-1,1]$上首项系数为1的最小零偏差多项式为$\tilde{T}_n(x)$。

设 $f(x)=b_0+b_1x+\ldots+b_nx^n \ (b_n\neq 0)$为 $[-1,1]$上的 $n$ 次多项式，要求$f(x)$在 $[-1,1]$上的不超过 $n-1$次的最佳一致逼近多项式 $P_{n-1}(x)$。

由于首项系数为1的 $n$ 次Chebyshev多项式 $\widetilde{T}_n(x)$ 无穷范数最小，故有

$$\frac{f(x)-P_{n-1}^*(x)}{b_n}=\widetilde{T}_n(x)$$

于是 $P_{n-1}^*(x)=f(x)-b_n\widetilde{T}_n(x)$

例1 设$f(x)=4x^4+2x^3-5x^2+8x-5/2$， $|x|\leqslant 1$. 求 $f(x)$在$[-1,1]$中的3次最佳一致逼近元$p_3(x)$.

解 由$f(x)$的表达式可知$b_4=4$，首项系数为1的4次Chebyshev多项式为

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

由(1)式得 $p_3^*(x)=f(x)-4T_4(x)=2x^3-x^2+8x-3.$

注：对区间为$[a,b]$的情形，先作变换

$$x=(b-a)t/2+(b+a)/2 \qquad (2)$$

然后对变量为t的多项式用(1)式求得$p_n(t)$，然后再作(2)式的反变换得到$[a,b]$上的最佳一致逼近多项式.

# §3 近似最佳一致逼近多项式

设 $f(x) \in C[-1,1]$, 且存在 $n+1$ 阶连续导数 $f^{(n+1)}(x)$

如何在 $[-1,1]$ 上确定互异的插值节点 $x_0, x_1, \ldots, x_n$,

使得 $f(x)$ 的 $n$ 次插值多项式的余项最小?

由插值余项定理，$n$ 次插值多项式 $L_n(x)$ 的余项为

$$R_n(x)=f(x)-L_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

其中，$\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i),\xi\in(-1,1)$

其估计式为：

$$\left|f(x)-L_n(x)\right|\le\frac{1}{(n+1)!}\max_{-1\le x\le 1}\left|f^{n+1}(x)\right|\max_{-1\le x\le 1}\left|\omega_{n+1}(x)\right|$$

$$=\frac{1}{(n+1)!}\left\|f^{n+1}(x)\right\|_{\infty}\left\|\omega_{n+1}(x)\right\|_{\infty}$$

因此，要使余项达到最小，只需使 $\left\|\omega_{n+1}(x)\right\|_{\infty}$ 尽可能小。注意到 $\omega_{n+1}(x)$ 是一个首项系数为1的 $n+1$ 次多项式，故由Chebyshev多项式的性质，

只要取 $\omega_{n+1}(x)=\tilde{T}_{n+1}(x)$ 即可。

而 $$\omega_{n+1}(x)=\prod_{i=0}^{n+1}(x-x_i),$$

故只需取 $x_i\ (i=0,1,2,\ldots,n)$ 为 $n+1$ 次Chebyshev多项式的零点，

即 $$x_i=\cos\frac{(2i-1)\pi}{2n+1},(i=0,1,2,\ldots,n)$$

**注:**

以 $n+1$ 次Chebyshev多项式的零点作为插值节点的 $n$ 次拉格朗日插值多项式 $L_n(x)$ 虽不能作为 $f(x)$ 的 $n$ 次最佳一致逼近多项式，但由于误差分布比较均匀，因此可以作为 $f(x)$ 的 $n$ 次近似最佳一致逼近多项式。

# §4　最佳平方逼近

## 一、内积空间

**1、定义**　设 $X$ 为(实)线性空间，在 $X$ 上定义了内积是指

对 $X$ 中每一对元素 $x,y$，都有一实数，记为 $(x,y)$ 与之对应，且这个对应满足：

$\vec{a}=(a_1,a_2),\vec{b}=(b_1,b_2)$

$(\vec{a},\vec{b})=a_1b_1+a_2b_2$

$\vec{a}\cdot\vec{b}=a_1b_1+a_2b_2$

（1）　$(x,x)\geq 0, x=0\ (x,x)=0;$

（2）　$(x,y)=(y,x), x,y\in X;$

（3）　$(\lambda x,y)=\lambda(x,y), x,y\in X; \lambda\in R;$

（4）　$(x+y,z)=(x,z)+(y,z), x,y,z\in X;$

则称 $X$ 为内积空间，称二元函数 $(g,g)$ 为内积。

## 2、内积的性质

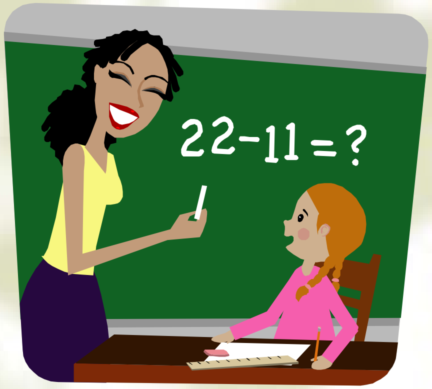
设 $X$ 是一内积空间，则对任意的 $x, y \in X$，有

（1）柯西—许瓦兹不等式：

$$(x,y)^2 \le (x,x)(y,y)$$

（2）三角不等式：

$$\|x+y\|_2 \le \|x\|_2 + \|y\|_2$$



## 3、两种重要的内积空间

- n维欧氏空间$R^n$，内积就是两向量的数量积，即

$$(x,y)=x^T y=\sum x_i y_i .$$

- 连续函数空间 $C[a,b]$，内积可以定义为积分的运算或带权函数的积分运算，即

$$(f(x),g(x))=\int_a^b f(x)g(x)dx, \qquad f(x),g(x)\in C[a,b]$$

或

$$(f(x),g(x))=\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx, \qquad f(x),g(x)\in C[a,b]$$

## 4、权函数的定义

设$\rho(x)$定义在有限或无限区间$[a, b]$上，如果具有下列性质：

**(1)** 对任意$x \in [a, b]$， $\rho(x) \geq 0$；

**(2)** 积分 $\int_a^b |x|^n \rho(x)dx$ 存在，**($n$ = 0, 1, 2, …)**；

**(3)** 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$g(x) \equiv 0$。

称满足上述条件的$\rho(x)$为$[a, b]$上的权函数。

# 5、Euclid范数及其性质

## 定义

设 $f(x)\in C[a,b]$, 则称量

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

称为 $f(x)$ 的Euclid范数。

## 性质

对于任何 $f, g \in C[a,b]$，下列结论成立:

1、 $\left|(f,g)\right| \le \|f\|_2 \|g\|_2$ （Cauchy-Schwarz不等式）

2、 $\|f+g\|_2 \le \|f\|_2 + \|g\|_2$ (三角不等式)

3、 $\|f+g\|_2^2 + \|f-g\|_2^2 = 2\left(\|f\|_2^2 + \|g\|_2^2\right)$

(平行四边形定律)

# 二、相关概念



## 1、距离

线性赋范空间中两元素 $x, y$ 之间的距离为

$$dis(x,y) = \|x-y\|_2 = \sqrt{(x-y,x-y)}$$

因此，$R^n$ 中两点 $x$ 与 $y$ 之间的距离即为

$$dis(x,y) = \|x-y\|_2 = \sqrt{(x-y,x-y)} = \sqrt{\sum (x_i - y_i)^2}$$

连续函数空间 $C[a,b]$ 中，$f(x)$ 与 $g(x)$ 的距离即为

$$dist(f(x),g(x)) = \|f(x)-p(x)\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x)-p(x)]^2 dx}$$

## 2、正交

若 $(x,y)=0$，则称 $x$与 $y$正交。

连续函数空间$C[a,b]$中，设 $f(x),g(x)\in C[a,b]$

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

则称$f(x)$与$g(x)$在$[a,b]$上带权$\rho(x)$正交。

进一步，设在$[a,b]$上给定函数系$\{\varphi_k(x)\}$，若满足条件

$$\left((\varphi_j(x),\varphi_k(x)\right)=\begin{cases}0, & j\neq k\\ A_k>0, & j=k\end{cases}\qquad (j,k=0,1,\cdots)$$

($A_k$是常数)

则称函数系$\{\varphi_k(x)\}$是$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交函数系。

特别地，当$A_k \equiv 1$时，则称该函数系为标准正交函数系。

若上述定义中的函数系为多项式函数系，则称之为$[a, b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式系。

并称 $\varphi_n(x)$ 是 $[a,b]$上 带权$\rho(x)$ 的$n$次正交多项式。

## 3、正交化手续

一般来说，当权函数$\rho(x)$及区间$[a,b]$给定以后，可以由幂函数系$\{1, x, x^2, \ldots, x^n, \ldots\}$利用正交化方法构造出正交多项式系。

$$g_0(x) = 1,$$

$$g_n(x) = x^n - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x^n, g_k)}{(g_k, g_k)} \cdot g_k, k = 1, 2 \ldots$$

## 4、正交多项式的性质

(1)$g_n(x)$是最高次项系数为1的 $n$次多项式.

(2)任一 $n$次多项式$P_n(x)\in H_n$均可表示为$g_0(x),g_1(x),\ldots,g_n(x)$的线性组合.

(3)当 $n\neq m$ 时,$(g_n,g_m)=0$且$g_n(x)$与任一次数小于 $n$ 的多项式正交.

## (4) 递推性

$$g_{n+1}(x)=(x-\alpha_n)g_n(x)-\beta_n g_{n-1}(x), n=0,1,\ldots,$$

其中 $g_0(x)=1, g_{-1}(x)=0,$

$$\alpha_n=\frac{(xg_n,g_n)}{(g_n,g_n)}, n=0,1,\ldots,$$

$$\beta_n=\frac{(g_n,g_n)}{(g_{n-1},g_{n-1})}, n=1,2,\ldots,$$

这里 $(xg_n,g_n)=\int_a^b xg_n^2(x)\rho(x)dx.$

(5) 设$g_0(x),g_1(x),\ldots$ 是在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式序列，则 $g_n(x)(n\geq 1)$ 的 $n$ 个根都是单重实根，且都在区间 $(a,b)$ 内.

# 三、常用的正交多项式

## 1、第一类切比雪夫多项式

(1) 定义

$$T_n = \cos\left(n\arccos x\right), \left|x\right| \le 1$$

## (2) 性质

- 正交性：

切比雪夫多项式序列$\{T_n(x)\}$是在区间[-1, 1]上带权

$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式序列。且

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

## ➢ 递推关系

相邻的三个切比雪夫多项式具有如下递推关系式:

$$\begin{cases} T_0(x)=1, T_1(x)=x \\ T_{n+1}(x)=2x\cdot T_n(x)-T_{n-1}(x) \end{cases} \quad (n=1,2,\ldots)$$

$$\begin{aligned}
T_0(x) &= 1 \\
T_1(x) &= x \\
T_2(x) &= 2x^2-1 \\
T_3(x) &= 4x^3-3x \\
T_4(x) &= 8x^4-8x^2+1 \\
T_5(x) &= 16x^5-20x^3+5x \\
&\cdots
\end{aligned}$$

- $T_n$ 在区间[-1, 1]上有 $n$ 个不同的实零点

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

## 2、Legendre(勒让德)多项式

### (1) 定义

多项式

$(x^2-1)^n$的n阶导数

$$p_n(x)=\frac{1}{2^n\cdot n!}\cdot\boxed{\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]}\qquad (n=0,1,2,\cdots\cdots)$$

称为$n$ 次勒让德多项式。

$$P_0(x)=1 \qquad P_3(x)=\frac{1}{2}(5x^3-3x)$$

$$P_1(x)=x \qquad P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$

$$P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1) \qquad P_5(x)=\frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x)$$

## (2) 性质

### ➢正交性

勒让德多项式序列$\{P_n(x)\}$是[-1, 1]上带权 $\rho(x)=1$

的正交多项式序列。即

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

## 递推关系

相邻的三个勒让德多项式具有如下递推关系式:

$$\begin{cases} P_0(x)=1, P_1(x)=x, \\ P_{n+1}(x)=\dfrac{2n+1}{n+1}xP_n(x)-\dfrac{n}{n+1}P_{n-1}(x) \qquad (n=1,2,\cdots) \end{cases}$$

- 奇偶性:

当$n$为偶数时，$P_n(x)$ 为偶函数；

当$n$为奇数时，$P_n(x)$ 为奇函数。

- $P_n(x)$在区间[-1, 1]内部存在$n$个互异的实零点。

- $P_n(x)$ 的最高次项系数为 $\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$

(5) 在所有首项系数为1的 $n$ 次多项式中，勒让德多项式 $\tilde{P}_{\mathrm{n}}(x)$在 $[-1,1]$ 上与零的平方误差最小。

证明:

设 $Q_{\mathrm{n}}(x)$ 是任意一个最高项系数为1的 $n$ 次多项式，

它可表示为 $Q_{\mathrm{n}}(x)=\tilde{P}_{\mathrm{n}}(x)+\sum_{k=0}^{n-1} a_k \tilde{P}_k(x)$，于是

$$(Q_{\mathrm{n}},Q_{\mathrm{n}})=\int_{-1}^{1} Q_n^2(x)dx=(\tilde{P}_{\mathrm{n}},\tilde{P}_{\mathrm{n}})+\sum_{k=0}^{n-1} a_k^2(\tilde{P}_k,\tilde{P}_k)\geq(\tilde{P}_{\mathrm{n}},\tilde{P}_{\mathrm{n}})$$

当且仅当 $a_0=a_1=\ldots=a_{n-1}=0$ 时等号才成立，

即当 $Q_{\mathrm{n}}(x)\equiv\tilde{P}_{\mathrm{n}}(x)$ 时平方误差最小。

## 3、其他常用的正交多项式

### (1) 第二类Chebyshev(切比雪夫)多项式

定义： 称

$$U_n(x)=\frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}} \qquad (n=0,1,2,\cdots)$$

为第二类切比雪夫多项式。

第二类切比雪夫多项式的性质:

① $\{U_n(x)\}$ 是区间[-1, 1]上带权 $\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式序列。

② 相邻的三项具有递推关系式:

$$\begin{cases} U_0(x)=1,\ U_1(x)=2x, \\ U_{n+1}(x)=2xU_n(x)-U_{n-1}(x) \quad (n=1,2,\cdots) \end{cases}$$

## (2) 拉盖尔(Laguerre)多项式

定义: 称多项式

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}),\quad (0\le x<+\infty)$$

$$(n=0,1,2,\cdots)$$

为拉盖尔多项式。

拉盖尔多项式的性质:

① $\{L_n(x)\}$ 是在区间[0, +∞]上带权 $\rho(x)=e^{-x}$ 的正交多项式序列。

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

② 相邻的三项具有递推关系式:

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

## (3) 埃尔米特(Hermite)多项式

定义: 称多项式

$$H_n(x) = (-1)^n \cdot e^{x^2} \cdot \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2}), \quad x \in (-\infty, +\infty)$$

$$(n = 0, 1, 2, \cdots)$$

为埃尔米特多项式。

埃尔米特多项式的性质:

① $\{H_n(x)\}$是区间(-∞, +∞)上带权 $\rho(x)=e^{-x^2}$

的正交多项式序列。

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

② 相邻的三项具有递推关系式:

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

# 四、内积空间上的最佳平方逼近

## 1. 函数系的线性关系

定义:

若函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$，在区间 $[a,b]$ 上连续，

如果关系式 $a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+a_2\varphi_2(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)=0$

当且仅当 $a_0=a_1=a_2=\cdots=a_n=0$ 时才成立，则称

函数在 $[a,b]$ 上是线性无关的，否则称线性相关。

设$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是 $[a,b]$ 上线性无关的连续函数，$a_0, a_1, \ldots, a_n$ 是任意实数，则

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

的全体是$C[a,b]$ 的一个子集，记为

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

并称$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是生成集合的一个基底。

## 定理

连续函数$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上线性无关的充分必要条件是它们的克莱姆(Gram)行列式 $G_n \neq 0,$

其中

$$G_n = G_n(\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n)$$

$$= \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{vmatrix}$$

## 广义多项式

设函数系 $\{\ \varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x),\ \ldots\}$ 线性无关，

则其有限项的线性组合

$$S(x) = \sum_{j=0}^{u} a_j \varphi_j(x)$$

称为广义多项式。

## 2、最佳平方逼近元的定义

- 设 $X$ 为线性内积空间，$\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_n$ 为 $X$ 上 $n+1$ 个线性无关元，记由 $\left\{\varphi_j\right\}_{j=0\ldots n}$ 张成的 $X$ 的子空间为 $\Phi$ ，

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

- 定义

  对任意的 $g \in X$，在 $X$ 的子空间 $\Phi$ 中，求 $g$ 的在2-范数意义下的最佳逼近元 $S^*$，即求 $S^* \in \Phi$ ，使不等式

$$dis\left(S^*,g\right)=\left\|S^*-g\right\|_2 \leq \left\|S-g\right\|_2$$

  对任意 $S \in \Phi$ 成立. 若满足上式的 $S^* \in \Phi$ 存在，称 $S^*$ 为 $g \in X$ 的最佳平方逼近元。

## 3. 平方最佳逼近元的存在性

定理1　设 $X$ 为线性内积空间，由线性无关组 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 张成的线性空间 $\Phi$ 为 $X$ 的子空间，则对任意的 $g \in X$，存在 $S^* \in \Phi$ 为 $g$ 的最佳平方逼近元.

Remark:　线性内积空间 $X$ 的子空间 $\Phi$ 的线性无关组 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 选取不同，在 $\Phi$ 中求得的对 $g \in X$ 的最佳平方逼近元 $S^*$ 也不同，求解 $S^*$ 的难易程度也不同。

## 4. 最佳平方逼近元的充要条件

**定理2** $S^* \in \Phi = span\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$ 为 $g \in X$ (线性内积空间) 的最佳平方逼近元的充要条件是:

$g - S^*$ 与一切 $\{\varphi_j\}(j = 0, 1, \ldots, n)$ 正交。

其中，$\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 为 $X$ 的 $n+1$ 个线性无关元。

**REMARK:** 定理2中所说的 $g - S^*$ 与一切 $\varphi_j$ 正交，是指

$g - S^*$ 与一切 $\varphi_j$ 的内积等于零，

即

$$\left(g - S^*, \varphi_j\right) = 0, \ j = 0, 1, \ldots, n.$$

证： 必要性.

用反证法. 设$S^* \in \Phi$ 为 $g \in X$ 的最佳平方逼近元，但 $g - S^*$ 不与所有的$\varphi_k\left(k = 0, 1, \ldots, n\right)$正交. 即存在 $\varphi_i\left(0 \le i \le n\right)$ 使得

$$\sigma_i = \left(g - S^*, \varphi_i\right) \ne 0$$

令 $$Q(x) = S^* + \frac{\sigma_i}{(\varphi_i, \varphi_i)}\varphi_i$$

则 $Q\left(x\right) \in \Phi,$

且

$$\left\|g-Q(x)\right\|_2^2=\frac{\left(g-S^*,g-S^*\right)-\sigma_i^2}{\left(\varphi_i,\varphi_i\right)}$$

$$<\left(g-S^*,g-S^*\right)=\left\|g-S^*\right\|_2^2$$

$S^*$

这说明 $S^*$ 不是对 $g$ 的最佳平方逼近元，与假设条件矛盾，

所以 $g-S^*$ 必须与一切 $\varphi_k\left(k=0,1,\ldots,n\right)$ 正交.

充分性.

仍记 $S^* = \sum c_j \varphi_j$. 则对任意的 $S = \sum d_j \varphi_j \in \Phi$，有

$$\|g - S\|_2^2 = (g - S, g - S) = \left(g - S^* + S^* - S, g - S^* + S^* - S\right)$$

$$= \left(g - S^*, g - S^*\right) + 2\left(g - S^*, S^* - S\right) + \left(S^* - S, S^* - S\right)$$

而 $\left(g - S^*, S^* - S\right) = \sum \left(c_j - d_j\right)\left(g - S^*, \varphi_j\right) = 0$

$$\left(S^* - S, S^* - S\right) \geq 0$$

所以 $\left\|g-S\right\|_2^2 \geq \left(g-S^*, g-S^*\right) = \left\|g-S^*\right\|_2^2$

进而有$\left\|g-S^*\right\|_2^2 \leq \left\|g-S\right\|_2^2$ 对任意 $S \in \Phi$成立，

即 $S^*$ 为 $g$ 的最佳平方逼近元。

## 5. 最佳平方逼近元的惟一性

**定理3**

线性内积空间 $X$ 的子空间 $\Phi$ 中若存在对 $g \in X$, 的最佳平方逼近元，则惟一.

## 6. 最佳平方逼近元的求解

现假定线性内积空间 $X$ 上的内积已定义，并且 $X$ 的子空间的一组基底 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ 也确定，对具体的被逼近元 $g \in X$，要求 $S^* \in \Phi$ 为 $g$ 的最佳平方逼近元.

由最佳平方逼近元的充要条件，

若假定 $S^* = \sum c_j^* \varphi_j$

则可以得出 $\left(g - \sum c_j^* \varphi_j, \varphi_i\right) = 0, i = 0,1,\ldots,n$

其中 $c_j^*, i = 0,1,\ldots,n$ 为待定系数

恒等变形为

$$\left(\sum c_j^* \varphi_j, \varphi_i\right) = \left(\varphi_i, g\right),$$

$$i = 0,1,\ldots,n$$

用矩阵式表示这个方程组为

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0^* \\ c_1^* \\ \vdots \\ c_n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varphi_0,g) \\ (\varphi_1,g) \\ \vdots \\ (\varphi_n,g) \end{pmatrix}$$

- 此方程组称为法方程组。

若所选取的一组基底 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ 满足

$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$ 则称其为正交基，此时

$$c_j^* = \frac{(\varphi_j, g)}{(\varphi_j, \varphi_j)}, j = 0,1,\ldots,n$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{if } i \neq j \\ 1 & \text{if } i = j, \end{cases}$$

# 五、函数的最佳平方逼近

1. 对于给定的函数 $f(x)\in C[a,b]$ 要求函数

$$S^*\in\Phi=span\{\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_n\}$$

使 $$\int_a^b \rho(x)\left[f(x)-S^*(x)\right]^2dx=\min_{S(x)\in\Phi}\int_a^b \rho(x)\left[f(x)-S(x)\right]^2dx$$

若这样的 $S^*(x)$ 存在，则称为 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的**最佳平方逼近函数**。

特别地，若 $\Phi=span\{\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_n\}$ 则称 $S^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的 $n$ 次**最佳平方逼近多项式**。

求最佳平方逼近函数 $S^*(x)=\sum_{j=0}^{n} a_j^* \cdot \varphi_j(x)$ 的问题

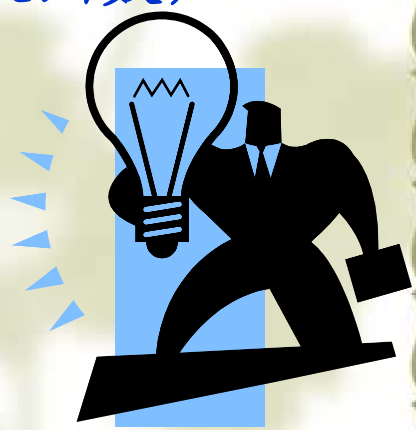
可归结为求它的系数 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$ 使多元函数

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

取得极小值。

由于 $I\left(a_0, a_1, \ldots a_n\right)$ 是关于 $a_0, a_1, \ldots a_n$ 的二次函数，

故利用多元函数取得极值的必要条件，可得



$$\frac{\partial I}{\partial a_k}=0 \qquad (k=0,1,2,\ldots,n)$$

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

最小二乘！

得方程组

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

$$=\int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx, \qquad (k=0,1,2,\cdots,n)$$

如采用函数内积记号

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \int_a^b \rho(x)\varphi_k(x)\varphi_j(x)dx,$$

$$(f, \varphi_k) = \int_a^q \rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx,$$

方程组可以简写为

$$\sum_{j=0}^{n} (\varphi_k, \varphi_j)a_j = (f, \varphi_k) \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots, n)$$

写成矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} (\phi_0,\phi_0) & (\phi_0,\phi_1) & \cdots & (\phi_0,\phi_n) \\ (\phi_1,\phi_0) & (\phi_1,\phi_1) & \cdots & (\phi_1,\phi_n) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots & & & \\ (\phi_n,\phi_0) & (\phi_n,\phi_1) & \cdots & (\phi_n,\phi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\phi_0) \\ (f,\phi_1) \\ \vdots \\ (f,\phi_n) \end{pmatrix}$$

法方程组!

由于$\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$线性无关，故$\boldsymbol{G_n} \neq 0$，于是上述方程组

存在唯一解 $a_k = a_k^* (k = 0, 1, \cdots, n)$

从而肯定了函数$f(x)$在$\Phi$中如果存在最佳平方逼近函数，

则必是

$$S^*(x) = \sum_{j=0}^{u} a_j^* \varphi_j(x)$$

## 3. 举例

求$g(x)=\sqrt{x}$在$H_1[0,1]$中的最佳平方逼近元。

解: 这是$C[0,1]$上的最佳平方逼近问题.

取 $\varphi_0=1, \varphi_1=x, H_1[0,1]=span\{1,x\}$

记 $P_1=a_0+a_1x$

因为$(\varphi_0,\varphi_0)=\int \varphi_0\cdot\varphi_0 dx=1, (\varphi_0,\varphi_1)=\int 1\cdot x dx = 1/2$

$(\varphi_1,\varphi_1)=\int \varphi_1\cdot\varphi_1 dx = 1/3,$

且同样可求得 $(\varphi_0,g)=2/3 (\varphi_1,g)=2/5$

所以，关于$a_0, a_1$的法方程组为

$$\begin{cases} a_0 + \frac{1}{2} a_1 = \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} a_0 + \frac{1}{3} a_1 = \frac{2}{5} \end{cases}$$

解得 $a_0 = 4/15, a_1 = 4/5$

即 $P_1(x) = 4/5\, x + 4/15$ 为$H_1[0,1]$中对$g(x) = \sqrt{x}$

的最佳平方逼近元。

## 4. 函数按正交多项式展开

设 $\Phi = span\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$

其中$\varphi_i\,(i = 0,1,\ldots,n)$为 $[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式系，

给定$f(x) \in C[a,b]$，若$S^*(x) = a_0\varphi_0(x) + \ldots + a_n\varphi_n(x)$为

$f(x)$在 $[a,b]$上的 $n$ 次最佳平方逼近多项式，则由

正交多项式的性质，

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

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

例:

求$f(x)=e^x$在$[-1,1]$上的三次最佳平方逼近多项式。

解: 先计算$(f,P_k)(k=0,1,2,3)$, 即

$$(f,P_0)=\int_{-1}^{1}e^x dx=e-1/e\approx 2.3504,$$

$$(f,P_1)=\int_{-1}^{1}xe^x dx=2e^{-1}\approx 0.7358,$$

$$(f,P_2)=\int_{-1}^{1}\left(3/2\,x^2-1/2\right)e^x dx=e-7/e\approx 0.1431,$$

$$(f,P_3)=\int_{-1}^{1}\left(5/2\,x^3-3/2\,x\right)e^x dx=37/e-5e\approx 0,2013,$$

所以得 $a_0^* = (f, P_0)/2 = 1.1752,$

$$a_1^* = 3(f, P_1)/2 = 1.1036,$$

$$a_2^* = 5(f, P_2)/2 = 0.3578,$$

$$a_3^* = 7(f, P_3)/2 = 0.07046,$$

所以有 $S_3^*(x) = 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3.$

均方误差为

$$\|\delta_n\|_2 = \|e^x - S_3^*(x)\|_2 = \sqrt{\int_{-1}^{1} e^{2x}dx - \sum_{k=0}^{3} \frac{2}{2k+1} a_k^{*2}} \le 0.0084,$$

最大误差为 $\|\delta_n\|_\infty = \|e^x - S_3^*(x)\|_\infty \le 0.0112.$

# 六、曲线拟合的最小二乘法

## 1. 问题提出

已知测量数据:

| $x$ | $x_1$ | $x_2$ | $\cdots\cdots$ | $x_m$ |
|---|---|---|---|---|
| $y$ | $y_1$ | $y_2$ | $\cdots\cdots$ | $y_m$ |

要求简单函数$f(x)$使得$\rho_i = y_i - f(x_i)$总体上尽可能小。

$(y_i \neq f(x_i))$

称为“残差”

这种构造近似函数的方法称为曲线拟合; $f(x)$称为拟合函数。

注: 使$\rho_i = y_i - f(x_i)$尽可能小的度量准则:

常见做法:

较复杂

- 使 $\max\limits_{1\le i\le m} |P(x_i) - y_i|$ 最小

不可导，求解困难

- 使 $\sum\limits_{i=1}^{m} |P(x_i) - y_i|$ 最小

- 使 $\sum\limits_{i=1}^{m} |P(x_i) - y_i|^2$ 最小

# 线性拟合问题

## $||.||_2$ 意义下的线性拟合

确定拟合函数 $f(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + \ldots + c_n\varphi_n(x)$

对于一组数据($xi$, $yi$) ($i$ = 1, 2, …, $m$)，使得

$$\| r \|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} \rho_i^2 = \sum_{i=1}^{m} [y_i - f(x_i)]^2$$

达到极小，这里 $n <= m$。

若记:

$$\Phi_i = \begin{bmatrix} \varphi_i(x_1) \\ \varphi_i(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_i(x_m) \end{bmatrix}, i = 1, 2, n$$

$$A=[\Phi_1,\Phi_2,\cdots,\Phi_n]=\begin{bmatrix}\varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1)\\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \cdots & \varphi_n(x_2)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \varphi_1(x_m) & \varphi_2(x_m) & \cdots & \varphi_n(x_m)\end{bmatrix}$$

$$b=\begin{bmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_m\end{bmatrix},\ r=\begin{bmatrix}\rho_1\\ \rho_2\\ \vdots\\ \rho_m\end{bmatrix},\ x=\begin{bmatrix}c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_n\end{bmatrix}$$

则

$$\|r\|_2^2=\sum_{i=1}^{m}\rho_i^2=\sum_{i=1}^{m}[y_i-f(x_i)]^2=\|b-Ax\|_2^2$$

记 $$F(c_1,c_2,\ldots,c_n)=\sum_{i=1}^{m}\rho_i^2=\sum_{i=1}^{m}[y_i-f(x_i)]^2$$

$$=\sum_{i=1}^{m}[y_i-\sum_{j=1}^{n}c_j\varphi_j(x_i)]^2$$

则$F$ 实际上是 $c_0$，$c_1$，…，$c_n$ 的多元函数，在 $F$ 的极值点处应有

$$\frac{\partial F}{\partial c_j}=0,\quad j=0,\ldots,n$$

记 $b_{jk}=\sum_{i=1}^{m}\varphi_{ji}\varphi_{ki}$，$\quad g_j=\sum_{i=1}^{m}\varphi_{ji}y_i$

于是，得到关于$c_1, c_2, \ldots, c_n$的方程组

$$\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{12} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{n-1,1} & b_{n-1,2} & \cdots & b_{n-1,n} \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_{n-1} \\ g_n \end{bmatrix} \tag{8}$$

法方程组(或正规方程组)

## ➢ 最小二乘二次多项式拟合

问题: 给定$n$个数据点（$x_i$ , $y_i$）（$i$=1, 2, …, $n$)

| $x_i$ | $x_1$ | $x_2$ | $\cdots$ | $x_n$ |
|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | $y_1$ | $y_2$ | $\cdots$ | $y_n$ |

求 $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$, 使得

$$\sum_{i=1}^{n}\left[y_i - (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2)\right]^2$$ 达到最小.

- 令 $F(a_0,a_1,a_2)=\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-(a_0+a_1x_i+a_2x_i^2)\right]^2$

则原问题等价于求$a_0, a_1, a_2$，使$F(a_0, a_1, a_2)$达到最小.

利用多元函数取极值的必要条件得

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a_0}=0=-\sum_{i=1}^{n}2\left(y_i-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2\right) \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_1}=0=-\sum_{i=1}^{n}2\left(y_i-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2\right)x_i \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_2}=0=-\sum_{i=1}^{n}2\left(y_i-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2\right)x_i^2 \end{cases}$$

$$
\begin{bmatrix}
n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \\
\sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \\
\sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^4
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{i=1}^{n} y_i \\
\sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
\sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i
\end{bmatrix}
$$

正则方程组

- 用 Cholesky分解法求此对称正定阵
- 用 MATLAB 函数 $z = A \backslash r$
- 由上式求得$a_0$, $a_1$, $a_2$,得到最小二乘拟合二次多项式

## ➢ 最小二乘三次多项式拟合

$$P_3(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3$$

$$F(a_0,a_1,a_2,a_3)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2-a_3x_i^3)^2$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n}x_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i^3 \\ \sum_{i=1}^{n}x_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^4 \\ \sum_{i=1}^{n}x_i^2 & \sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^4 & \sum_{i=1}^{n}x_i^5 \\ \sum_{i=1}^{n}x_i^3 & \sum_{i=1}^{n}x_i^4 & \sum_{i=1}^{n}x_i^5 & \sum_{i=1}^{n}x_i^6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n}y_i \\ \sum_{i=1}^{n}x_iy_i \\ \sum_{i=1}^{n}x_i^2y_i \\ \sum_{i=1}^{n}x_i^3y_i \end{bmatrix}$$

正则方程组

## ➢ 最小二乘m次多项式拟合（m<n）

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

$$F(a_0, a_1, \cdots, a_m) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i - \cdots - a_m x_i^m)^2$$

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

正则方程组

## 举例

给定 $(t_i, f_i)$ 的一组数据

| $t_i$ | 0 | 20 | 40 | 60 | 80 | 100 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $f_i$ | 81.4 | 77.7 | 74.2 | 72.4 | 70.3 | 68.8 |

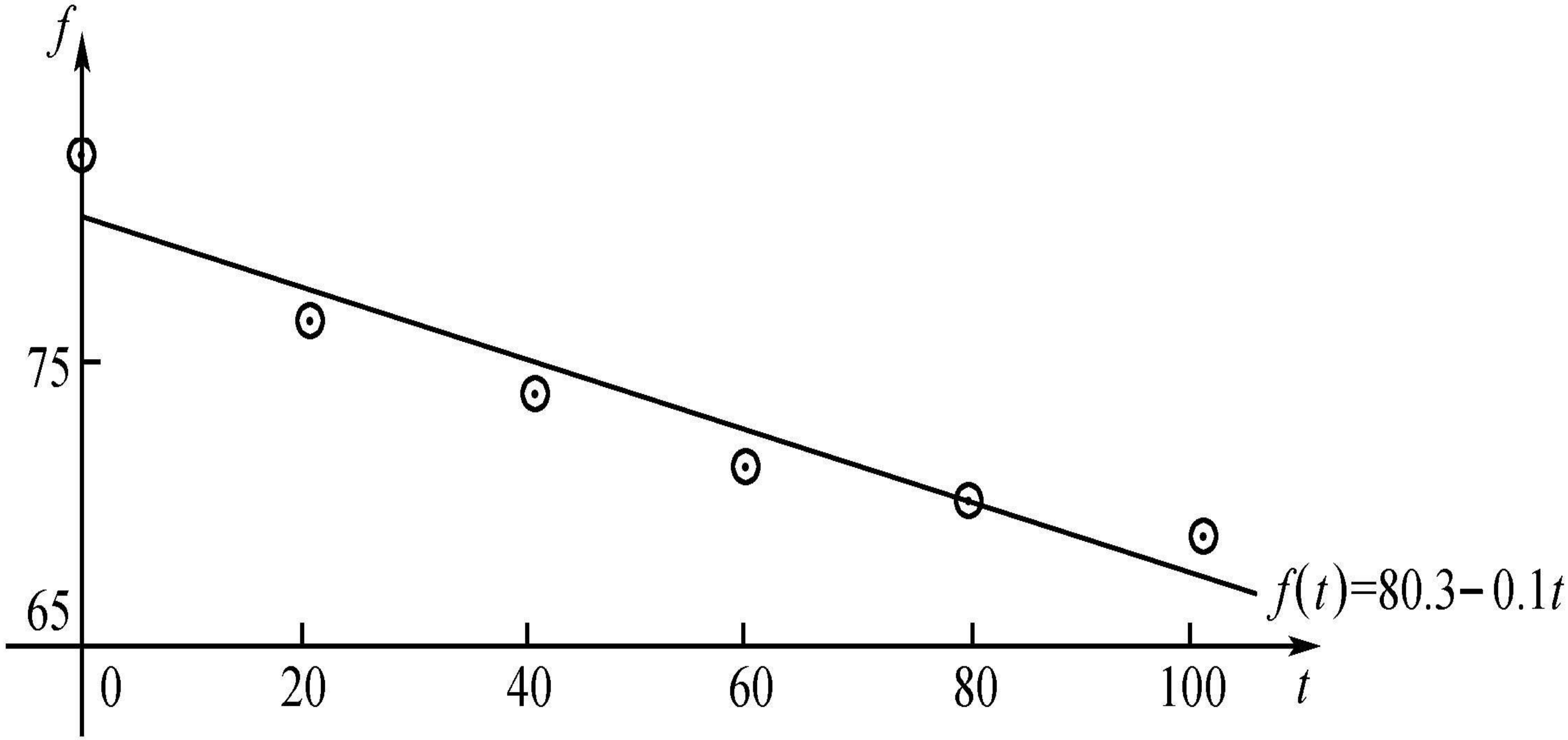
求拟合函数 $f(x)$。

解：作图可知所有点都分布在一条直线的附近，即拟合函数近似为一个线性函数，故可设

$$\varphi_0(t)=1, \varphi_1(t)=t$$

将数据带回，即可得拟合函数

$$f(t)=80.3-0.1t$$



f
75
65
0
20
40
60
80
100
t
f(t)=80.3−0.1t

## 2. 指数拟合

如果数据点 $(x_i, y_i)$ $(i=1, 2, \ldots, n)$ 的分布近似指数曲线，则可考虑用指数函数

$$y = be^{ax}$$

去拟合数据．但是这是一个关于 $a$，$b$ 的非线性模型，故应通过适当变换，将其化为线性模型，然后利用最小二乘法求解．为此，对指数函数两端取对数，得

$$\ln y = \ln b + ax$$

这表明($x_i$， $\ln y_i$）（$i$=1，2， …， $n$)的分布近似于直线， 求出此数据组的最小二乘拟合直线

$$\tilde{y} = a_0 + a_1 x$$

则数据组($x_i$， $y_i$）（$i$=1，2， …， $n$)的最小二乘拟合指数曲线为

$$y = e^{\tilde{y}} = e^{a_0 + a_1 x} = e^{a_0} e^{a_1 x}$$

**例** 设数据$(x_i, y_i)(i=0,1,2,3,4)$由下表给出，表中第4行为$\ln y_i=z_i$，可以看出数学模型为$y=ae^{bx}$，用最小二乘法确定$a$及$b$.

| $i$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| $x_i$ | 1.00 | 1.25 | 1.50 | 1.75 | 2.00 |
| $y_i$ | 5.10 | 5.79 | 6.53 | 7.45 | 8.46 |
| $z_i$ | 1.629 | 1.756 | 1.876 | 2.008 | 2.135 |

**解** 根据给定数据$(x_i, y_i)(i=0,1,2,3,4)$描图可确定拟合曲线方程为$y=ae^{bx}$，它不是线性形式.

对方程$y=ae^{bx}$两边取对数得$\ln y=\ln a+bx$，如果令$z=\ln y, A=\ln a$，则$z=A+bx, \Phi=\{1,x\}$. 为确定$A$和$b$，先将数据$(x_i, y_i)$可转化为$(x_i, z_i)$，见数据表.

根据最小二乘法，取 $\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=x, \omega(x)\equiv 1,$ 得

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{4}1=5, \qquad (\varphi_0,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}x_i=7.5$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}x_i^2=11.875, \qquad (\varphi_0,z)=\sum_{i=0}^{4}z_i=9.404$$

$$(\varphi_1,z)=\sum_{i=0}^{4}x_i z_i=14.422.$$

故有法方程

$$\begin{cases} 5A + 7.50b = 9.404, \\ 7.50A + 11.875b = 14.422. \end{cases}$$

解得$A$=1.122, $b$=0.505, $a$=$e^{A}$=3.071. 于是得最小二乘拟合曲线为

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

现在很多计算机配有自动选择数学模型的程序，其方法与本例相同. 程序中因变量与自变量变换的函数类型较多，通过计算比较误差找到拟合得较好的曲线，最后输出曲线图形及数学表达式.

# 3. 用正交函数作最小二乘拟合

给定 $\begin{cases} x_0 & \cdots\cdots & x_m \\ y_0 & \cdots\cdots & y_m \end{cases}$

可利用正交化手续进行构造

与正交函数系 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots \varphi_n$

则最小二乘拟合函数为：

$$a_k = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} = \frac{\sum_{i=0}^{m} \rho(x_i) f(x_i) \varphi_k(x_i)}{\sum_{i=0}^{m} \rho(x_i) \varphi_k^2(x_i)}$$

$$P_n(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \ldots + a_n\varphi_n(x)$$