简单回顾多项式插值：M_n-- n次多项式集合，$f(x)$（$x\in[a,b]$）--实值函数，$\{x_j\}_0^n\in[a,b]$--- $n+1$ 个互异点.

1. Lagrange插值、Newton插值

已知：

x	x_0	x_1	……	x_n
$f(x)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	……	$f(x_n)$

问题：估算 $\boldsymbol{f(x)\approx ?}\quad \boldsymbol{x\in[a,b]}$

目标：寻找 $y(x)\in M_n$，满足

$$\boldsymbol{y(x_j)=f(x_j)}\quad (j=0,1,2,\cdots,n)$$ ---插值条件

并以 $y(x)$ 作为 $f(x)$ 的估值.

$\{x_j\}_0^n$--插值节点，x--被插点，$y(x)$--插值多项式，$f(x)$--被插函数

2. Hermite(埃尔米特)插值

目标：寻求 $y(x)\in M_{n+r+1}$ 满足

$$\begin{cases} y(x_j)=f(x_j), & j=0,1,\cdots,n, \\ y'(x_j)=f'(x_j), & j=0,1,\cdots,r.\ \ r\le n \end{cases}$$
---插值条件

以 $y(x)$ 作为 $f(x)$ 的估值，称之为 $f(x)$ 的Hermite插值多项式.

3. 分段插值、样条插值

注意共同要求：

（1）误差函数

$$\boldsymbol{E(x)=f(x)-y(x)}$$ ---插值余项

满足对给定的精度 $\varepsilon>0$，有

$$|\boldsymbol{E(x)}|<\varepsilon,\quad \boldsymbol{x}\in[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}]$$

（2）满足插值条件 $\boldsymbol{y(x_j)=f(x_j)}$（$j=0,1,2,\cdots,n$）

几何特点：$y(x)$ 与 $f(x)$ 在插值节点处相交.

注意：在实际应用中，$\boldsymbol{f(x_j)}$是$f(x)$在插值节点处通过某种方式得到的值，是带有误差的值，可以记作$\boldsymbol{\tilde{f}(x_j)}$.

问题：如果$\boldsymbol{\tilde{f}(x_j)}$与$\boldsymbol{f(x_j)}$之间有比较大的误差，按照插值逼近的思想构造$f(x)$的逼近函数$y(x)$，逼近效果如何？

3.4　最佳平方逼近

1. 正交多项式及其性质

【定义】若 $\rho(x)$ 为有限或无限区间 $[a,b]$ 上的函数，且满足

（1） $\rho(x)\ge 0,\ \ a\le x\le b;$

（2） 对 $k=0,1,2,\cdots,\ \int_a^b \rho(x)x^k dx$ 都存在；

（3） 对非负的 $f(x)\in C[a,b]$，若 $\int_a^b f(x)\rho(x)dx=0$，则 $f(x)\equiv 0.$

则称 $\rho(x)$ 为 $[a,b]$ 上的权函数.

【定义】设 $f(x)$, $g(x)\in C[a,b]$，$\rho(x)$ 为 $[a,b]$ 上的权函数，若内积

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

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

【定义】若函数序列 $\{\varphi_j\}_0^\infty$ 在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 两两正交，即

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

则称 $\{\varphi_j\}_0^\infty$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交函数族；若 $\varphi_n(x)$ 是首项系数非零的 n 次多项式，称 $\varphi_n(x)$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 n 次正交多项式，则称 $\{\varphi_j\}_0^\infty$ 为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式族.

【例 3.11】 证明：三角函数族 $1,\ \sin x,\ \cos x,\ \sin 2x,\ \cos 2x,\cdots$ 在 $[-\pi,\pi]$ 上是正交函数族（权 $\rho(x)\equiv 1$）.

【证明】 因为 $(1,1)=\int_{-\pi}^{\pi}dx=2\pi$,

$$(\sin nx,\sin mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\sin nx\sin mx dx=\begin{cases}\pi, & m=n,\\ 0, & m\neq n,\end{cases}\qquad n,m=1,2,\cdots,$$

$$(\cos nx,\cos mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\cos mx dx=\begin{cases}\pi, & m=n,\\ 0, & m\neq n,\end{cases}\qquad n,m=1,2,\cdots,$$

$$(\cos nx,\sin mx)=\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\sin mx dx=0,\qquad n,m=0,1,\cdots.$$

由定义证明，三角函数族 $1,\ \sin x,\ \cos x,\ \sin 2x,\ \cos 2x,\cdots$ 在 $[-\pi,\pi]$ 上是正交函数族（权 $\rho(x)\equiv 1$）.

由于多项式序列 $\left\{x^n\right\}_0^{\infty}$ 是线性无关的，利用正交化方法（正交定义）可以构造出在 $[a,b]$ 上带权正交的多项式序列 $\left\{\varphi_j\right\}_0^{\infty}$：

$$\varphi_0(x)=1,\ \varphi_n(x)=x^n-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(x^n,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}\varphi_k(x),\qquad n=1,2,\cdots.$$

这样构造的正交多项式序列 $\left\{\varphi_j\right\}_0^{\infty}$ 有以下性质：

(1) $\varphi_n(x)$ 是最高项系数为 1 的 n 次多项式；

(2) 任何 n 次多项式均可表示为 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 的线性组合；

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

对于一般的正交多项式还有以下重要性质：

【定理 3.5】在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列 $\{\varphi_j\}_0^\infty$，若最高项系数为 1，它便是唯一的，且由以下的递推公式确定：

$$\varphi_{n+1}(x)=(x-\alpha_n)\varphi_n(x)-\beta_n\varphi_{n-1}(x), \qquad n=0,1,\cdots,$$

其中

$$\varphi_0(x)=1,\ \varphi_{-1}(x)=0;$$

$$\alpha_n=\frac{(x\varphi_n,\varphi_n)}{(\varphi_n,\varphi_n)},n=0,1,\cdots; \qquad \beta_n=\frac{(\varphi_n,\varphi_n)}{(\varphi_{n-1},\varphi_{n-1})},n=1,2,\cdots.$$

【证明】 用归纳法证.

当 $n=0$，因为

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\int_a^b \rho(x)dx>0, \qquad \alpha_0=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)},$$

由递推公式知 $\varphi_1(x)=x-\alpha_0$，故有

$$(\varphi_0,\varphi_1)=(x\varphi_0,\varphi_0)-\alpha_0(\varphi_0,\varphi_0)=0,$$

即 $\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$ 正交.

现假设按递推公式构造了 $\varphi_j(x)(j=1,2,\cdots,n)$，且 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 正交，

往证由递推公式得到的 $\varphi_{n+1}(x)$ 与 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 正交.

考察

$$(\varphi_j,\varphi_{n+1})=(x\varphi_j,\varphi_n)-\alpha_n(\varphi_j,\varphi_n)-\beta_n(\varphi_j,\varphi_{n-1}),$$

当 $j<n-1$ 时：

上式中的后两项显然等于0.

因 $x\varphi_j(x)$ 是 $j+1$ 次多项式， $j+1<n$，故它与 $\varphi_n(x)$ 正交，所以 $(x\varphi_j,\varphi_n)=0,$ 又因 $(\varphi_j,\varphi_n)=0,$ $(\varphi_j,\varphi_{n-1})=0$，于是 $(\varphi_j,\varphi_{n+1})=0.$

当 $j=n-1$ 及 $j=n$ 时：

由递推公式及归纳假设，有

$$(\varphi_{n-1},\varphi_{n+1})=(x\varphi_{n-1},\varphi_n)-\alpha_n(\varphi_{n-1},\varphi_n)-\beta_n(\varphi_{n-1},\varphi_{n-1})$$

$$=(x\varphi_{n-1},\varphi_n)-\frac{(\varphi_n,\varphi_n)}{(\varphi_{n-1},\varphi_{n-1})}(\varphi_{n-1},\varphi_{n-1})$$

$$=(x\varphi_{n-1},\varphi_n)-(\varphi_n,\varphi_n)$$
$$=(\varphi_n+\alpha_{n-1}\varphi_{n-1}+\beta_{n-1}\varphi_{n-2},\varphi_n)-(\varphi_n,\varphi_n)=0,$$

$$(\varphi_n,\varphi_{n+1})=(x\varphi_n,\varphi_n)-\alpha_n(\varphi_n,\varphi_n)-\beta_n(\varphi_n,\varphi_{n-1})=0.$$

这表明 $(\varphi_j,\varphi_{n+1})=0$ 对 $j=0,1,\cdots,n$ 成立.

因此，由递推公式生成的序列 $\left\{\varphi_j\right\}_0^\infty$ 是 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式.

【定理 3.6】 设 $\left\{\varphi_j\right\}_0^\infty$ 是在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列，则 $\varphi_n(x)(n\geq 1)$ 的 n 个根都是单重实根，且都在区间 (a,b) 内.

【证明】 设 $\varphi_n(x)$ 在 (a,b) 内有 m 个单重实根:

$$a < x_1 < x_2 < \cdots < x_m = b$$

显然 $\varphi_n(x)$ 在 $x_j(j=1,2,\cdots,m)$ 两边函数值变号，令

$$q(x)=(x-x_1)\cdots(x-x_m)=\sum_{j=0}^{m}a_j\varphi_j(x)$$

则 $\varphi_n(x)q(x)$ 在 (a,b) 上不变号，因此

$$(\varphi_n,q)=\int_a^b\rho(x)\varphi_n(x)q(x)dx\neq 0.$$

如果 $m<n$，则由正交性可得

$$(\varphi_n,q)=\sum_{j=0}^{m}a_j(\varphi_n,\varphi_j)=0$$

这与 $(\varphi_n,q)\neq 0$ 矛盾，说明 $m=n$. 故 $\varphi_n(x)$ 在 (a,b) 内 n 个根均为单实根.

下面介绍几个常见的正交多项式.

Legendre(勒让德)多项式：$[-1, 1]$ 上带权函数 $\rho(x)=1$ 的正交多项

表达式：

$$P_0(x)=1, P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\{(x^2-1)^n\}, \quad n=1,2\cdots. \quad (3.4.5)$$

重要性质：

(1) 正交性

$$(P_n, P_m)=\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx=\begin{cases} 0, & m \neq n \\ \dfrac{2}{2n+1}, & m=n. \end{cases} \quad (3.4.6)$$

令 $\varphi(x)=(x^2-1)^n$， 则 $\mathrm{P}_n(x)=\dfrac{1}{2^n n!}\varphi^{(n)}(x)$， $\varphi^{(k)}(\pm 1)=0, k=0,1,\cdots,n-1$.

设 $Q(x)\in M_n$，用分部积分得

$$\int_{-1}^{1} Q(x)\mathrm{P}_n(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{2^n n!}\int_{-1}^{1} Q(x)\varphi^{(n)}(x)\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{1}{2^n n!}\int_{-1}^{1} Q^{(1)}(x)\varphi^{(n-1)}(x)\mathrm{d}x=\cdots=\frac{(-1)^n}{2^n n!}\int_{-1}^{1} Q^{(n)}(x)\varphi(x)\mathrm{d}x.$$

当 $Q(x)$ 为次数 $\leq n-1$ 的多项式时， $Q^{(n)}(x)=0$. 于是有

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{P}_n(x)\mathrm{P}_m(x)\mathrm{d}x=0, \qquad m\neq n$$

当 $Q(x)=\mathrm{P}_n(x)$ 时， $Q^{(n)}(x)=\mathrm{P}_n^{(n)}(x)=\dfrac{(2n)!}{2^n n!}$. 于是

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{P}_n^2(x)\mathrm{d}x=\frac{(-1)^n(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}\int_{-1}^{-1}(x^2-1)^n\mathrm{d}x=\frac{2}{2n+1}.$$

(2) 递推公式

$$(n+1)\mathrm{P}_{n+1}(x)=(2n+1)\,x\mathrm{P}_n(x)-n\mathrm{P}_{n-1}(x),\qquad n=1,2,\cdots \tag{3.4.7}$$

其中 $\mathrm{P}_0(x)=1,\ \mathrm{P}_1(x)=x.$

由递推公式可求出 $\mathrm{P}_2(x),\mathrm{P}_3(x)$ $\cdots$. 图 3.9 给出了它们的图形.

(3) 奇偶性： $\mathrm{P}_n(-x)=(-1)^n\mathrm{P}_n(x).$

(4) $\mathrm{P}_n(x)$ 首项 x^n 的系数

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

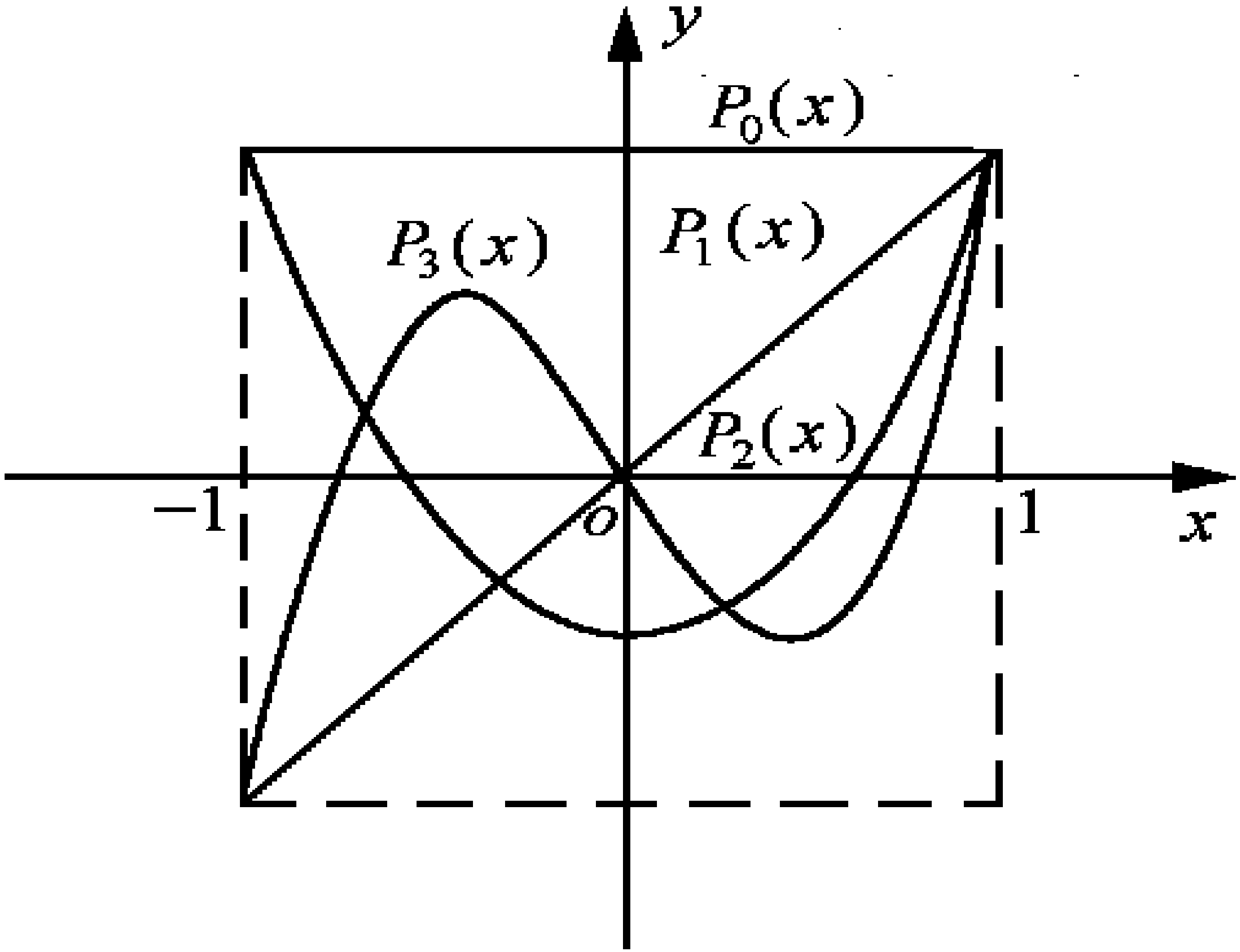

图 3.9 几个低次 Legendre 多项式

Chebyshev(切比雪夫)多项式： $[-1,\ 1]$ 上带权函数 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交多项式

表达式：

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\qquad n=0,1,\cdots. \tag{3.4.9}$$

注：令 $x=\cos\theta$，则 $T_n(\theta)=\cos n\theta, 0\le\theta\le\pi$，这是 $T_n(x)$ 参数形式表达式.

由三角公式可将 $\cos n\theta$ 展成 $\cos\theta$ 的一个 n 次多项式，故 $T_n(x)$ 是 x 的 n 次多项式.

(1) 正交性：

$$(T_n,T_m)=\int_{-1}^{1}\frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\ne n,\\ \dfrac{\pi}{2}, & m=n\ne 0,\\ \pi, & m=n=0.\end{cases} \tag{3.4.10}$$

（2） 递推公式：

$$T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x), \qquad n=1,2,\cdots, \tag{3.4.11}$$

其中 $T_0(x)=1,\ \ T_1(x)=x.$

由 $x=\cos\theta,\ T_{n+1}(x)=\cos(n+1)\theta,$ 用三角公式

$$\cos(n+1)\theta=2\cos\theta\cos n\theta-\cos(n-1)\theta$$

则得递推公式. 进一步可推出：

$$T_2(x)=2x^2-1,\ \ T_3(x)=4x^3-3x,\cdots.$$

图形见图 3.10.

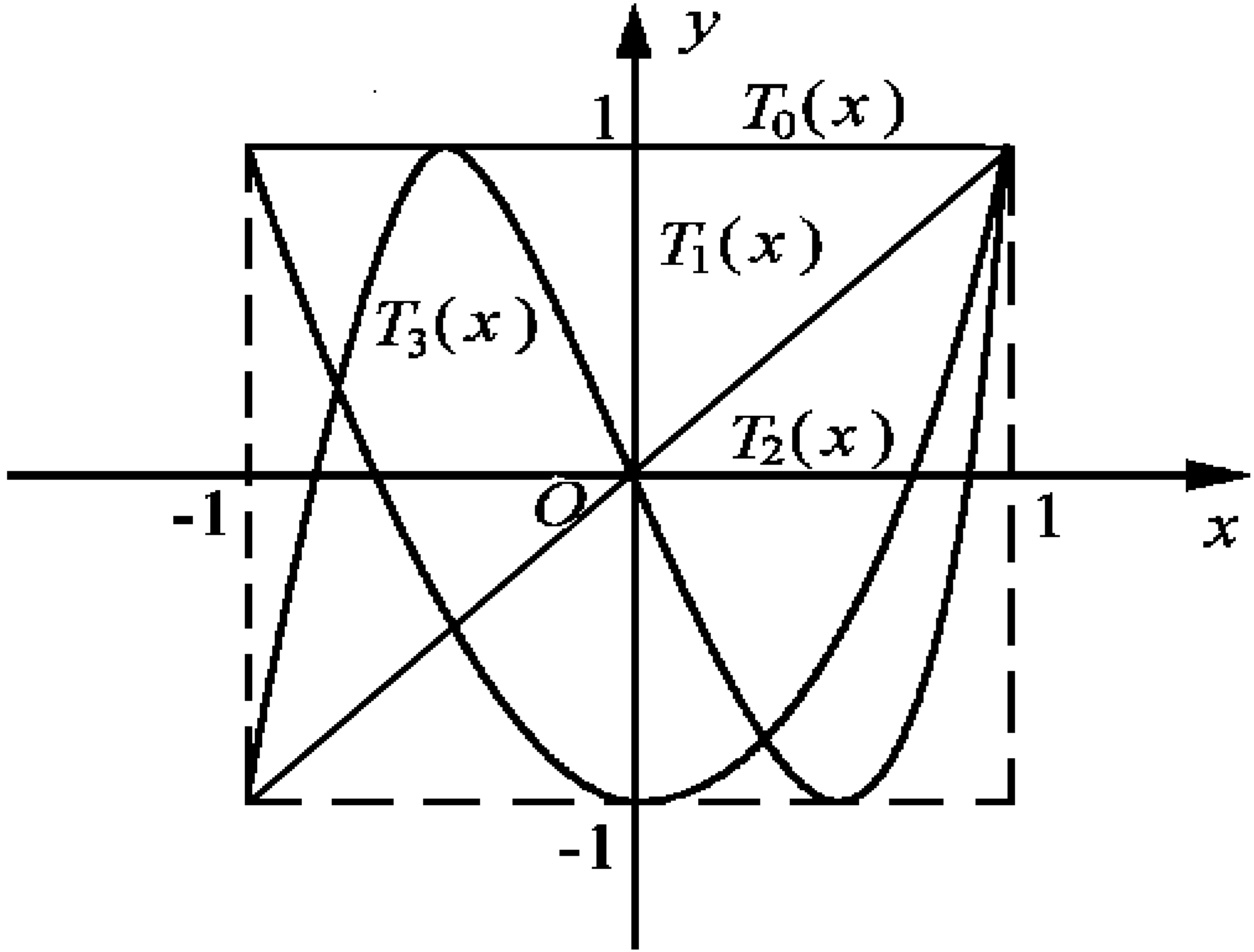

图 3.10　几个低次的 Chebyshev 多项式

（3） 奇偶性：

$$T_n(-x)=(-1)^n T_n(x).$$

（4） $T_n(x)$ 在 $(-1,1)$ 内的 n 个零点为

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

在 $[-1, 1]$ 上有 $n+1$ 个极值点

$$y_k=\cos\frac{k}{n}, k=0,1,\cdots,n$$

在这些点上， $T_n(x)$ 交替取最大值 1，最小值 $-1.$

（5） $T_n(x)$ 首项 x^n 的系数 $A_n=2^{n-1}(n\geq 1)$, $A_0=1.$

第二类 Chebyshev(切比雪夫)多项式:

$[-1,\ 1]$ 上带权函数 $\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式

表达式:

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

令 $x=\cos\theta$,可得参数形式表达式:

$$s_n(x)=\frac{\sin(n+1)\theta}{\sin\theta}$$

同理可知 $s_n(x)$ 是 x 的 n 次多项式.

主要性质：

(1) 正交性

$$(s_n, s_m) = \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\, s_n(x) s_m(x) \mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \dfrac{\pi}{2}, & m = n. \end{cases}$$

(2) 递推公式

$$s_{n+1}(x) = 2x s_n(x) - s_{n-1}(x), \qquad n = 1, 2, \cdots,$$

其中 $s_0(x) = 1,\ s_1(x) = 2x.$

(3) 奇偶性

$$s_n(-x) = (-1)^n s_n(x).$$

Laguerre(拉盖尔)多项式：

$[0,+\infty)$ 上带权函数 $\rho(x)=e^{-x}$ 的正交多项式

表达式：

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

(1) 正交性

$$(\mathrm{L}_n,\mathrm{L}_m)=\int_0^{+\infty}e^{-x}\mathrm{L}_n(x)\mathrm{L}_m(x)\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ (n!)^2 & m=n.\end{cases}$$

(2) 递推公式

$$\mathrm{L}_{n+1}(x)=(2n+1-x)\mathrm{L}_n(x)-n^2\mathrm{L}_{n-1}(x),\qquad n=1,2,\cdots,$$

其中 $\mathrm{L}_0(x)=1,\ \mathrm{L}_1(x)=1-x.$

Hermite(埃尔米特)多项式：

$(-\infty,+\infty)$ 上带权 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 的正交多项式

表达式及主要性质：

$$\mathrm{H}_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}.$$

(1) 正交性

$$(\mathrm{H}_n,\mathrm{H}_m)=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}\mathrm{H}_n(x)\mathrm{H}_m(x)\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n,\\ 2^n n!\sqrt{\pi}, & m=n.\end{cases}$$

(2) 递推公式

$$\mathrm{H}_{n+1}(x)=2x\mathrm{H}_n(x)-2n\mathrm{H}_{n-1}(x),\qquad n=1,2,\cdots,$$

其中 $\mathrm{H}_0(x)=1,\ \mathrm{H}_1(x)=2x.$

【定理 3.7】 $\{\varphi_j\}_0^n\subset C[a,b]$ 线性无关的充分必要条件是其 Gram 矩阵

$$G_n=\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_0)\\ (\varphi_0,\varphi_1) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_1)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ (\varphi_0,\varphi_n) & (\varphi_1,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}$$ 非奇异.

【证明】只需证明 $\det G_n \neq 0$ 的充分必要条件是齐次线性方程组

$$\sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_j,\varphi_k)=0,\qquad k=0,1,\cdots,n, \tag{3.4.18}$$

仅有零解 $a_0=a_1=\cdots a_n=0.$

必要性：$\det G_n \neq 0$ 并令 $\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j=0$，则

$$\left(\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j,\varphi_k\right)=\sum_{j=0}^{n} a_j(\varphi_j,\varphi_k)=0,\qquad k=0,1,\cdots,n \tag{3.4.19}$$

这表明 $\{a_j\}_0^n$ 满足齐次线性方程组（3.4.18）．因其系数矩阵行列式 $\det G_n \neq 0$，故

$$a_0 = a_1 = \cdots a_n = 0$$

即 $\{\varphi_j(x)\}_0^n$ 线性无关.

充分性：$\{\varphi_j(x)\}_0^n$ 线性无关，且 $\{a_j\}_0^n$ 满足式(3.4.18)．从而有

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

故有 $\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j = 0$ 由于 $\{\varphi_j(x)\}_0^n$ 线性无关，从而有 $a_0 = a_1 = \cdots a_n = 0$.

即齐次线性方程组(3.4.18)仅有零解，故 $\det G_n \neq 0$.

2. 函数的最佳平方逼近

（1）最佳平方逼近问题及其解法

设 $f(x)\in C[a,b],\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 为 $C[a,b]$ 上 $n+1$ 个线性无关函数，用 $\Phi=\mathrm{Span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$ 表示由 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 张成的线性子空间. 则对任意的 $\varphi(x)\in\Phi$，有

$$\varphi(x)=\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x). \tag{3.4.20}$$

连续函数最佳平方逼近问题：寻求一个 $\varphi(x)\in\Phi$ 逼近 $f(x)\in C[a,b]$，使其满足

$$\|f-\varphi\|_2^2\triangleq(f-\varphi,f-\varphi)=\int_a^b\rho(x)\left[f(x)-\varphi(x)\right]^2\mathrm{d}x=\min \tag{3.4.21}$$

其中 $\rho(x)$ 是 $[a,b]$ 上权函数，称 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 为最佳平方逼近基函数.

若 $f(x)$ 是由离散函数表 $(x_i f_i), i=0,1,\cdots,m(m>n)$ 给出的，则上述问题就成为离散函数最佳平方逼近问题：求 $\varphi(x)\in\Phi$ 使

$$\|f-\varphi\|_2^2 \triangleq (f-\varphi, f-\varphi)=\sum_{i=0}^{m}\rho_i\left[f_i-\varphi(x_i)\right]^2=\min \qquad (3.4.22)$$

这里 ρ_i 是点 x_i 处的权系数. 综合以上情形可以给出如下定义.

【定义 3.10】 设 $f(x)\in C[a,b]$，若存在 $\varphi^*(x)\in\Phi=\mathrm{Span}\{\varphi_0(x),\ \varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$， 使

$$\left\|f-\varphi^*\right\|_2^2=\min_{\varphi\in\Phi}\|f-\varphi\|_2^2 \qquad (3.4.23)$$

则称 $\varphi^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近函数.

注：定义中 $\|\bullet\|_2$ 在连续的情形就是(3.4.21)式，离散的情形就是(3.4.22)式.

下面针对连续情形讨论求 $\varphi^*(x)\in\Phi$ 存在唯一性及解法.

由定义可知，求解 $\varphi^*(x)\in\Phi$ 等价于求多元函数

$$F(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\int_a^b\rho(x)\left[\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)-f(x)\right]^2\mathrm{d}x \qquad (3.4.24)$$

的极小值. 由于 F 是关于参数 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的二次函数，用多元函数极值必要条件得

$$\frac{\partial F}{\partial a_k}=2\int_a^b\rho(x)\left[\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x)-f(x)\right]\varphi_k(x)\mathrm{d}x=0,\qquad k=0,1,\cdots,n.$$

于是有

$$\sum_{j=0}^n(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k),\qquad k=0,1,\cdots,n. \qquad (3.4.25)$$

这是关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的线性方程组，称为法方程，法方程的系数矩阵是G_n.

由于 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 线性无关，法方程系数矩阵行列式 $\det G_n\neq 0$，故法方程有唯一解 $a_k=a_k^*,k=0,1,\cdots,n$. 于是求得

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x). \qquad (3.4.26)$$

不难证明由此得到的 $\varphi^*(x)$ 确为所求. 即对任意的 $\varphi(x) \in \Phi$， 成立

$$\|f - \varphi^*\|_2^2 \le \|f - \varphi\|_2^2 .$$

以上结论对离散情形也同样成立.

记 $\delta(x) = f(x) - \varphi^*(x)$

$\|\delta\|_2^2$ ----- 最佳平方逼近误差，简称平方误差.

$\|\delta\|_2$ ----- 均方误差

由法方程知 $(f - \varphi^*, \varphi^*) = 0$，故

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

讨论：

作为特例，若取

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

区间取 $[0,1],\rho(x)=1$， 此时 $f(x)\in C[0,1]$ 在 $\Phi=M_n=\mathrm{Span}\{1,x,\cdots,x^n\}$ 上的最佳平方逼近多项式为

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

由于

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\int_0^1 x^{j+k}\mathrm{d}x=\frac{1}{j+k+1}, \qquad j,k=0,1,\cdots,n$$

于是得相应法方程的系数矩阵

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{n}}=\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{bmatrix}=(h_{ij})_{(n+1)\times(n+1)},$$

其中 $h_{ij}=\dfrac{1}{i+j-1}$. 称 $\boldsymbol{H}_n$ 为 Hilbert（希尔伯特）矩阵.

若记 $\boldsymbol{a}=(a_0,a_1,\cdots,a_n)^T,\boldsymbol{d}=(d_0,d_1,\cdots,d_n)^T$，其中

$$(f,\varphi_k)=\int_0^1 f(x)x^k\mathrm{d}x=d_k,\qquad k=0,1,\cdots,n.$$

此时法方程为

$$\boldsymbol{H}_n\boldsymbol{a}=\boldsymbol{d}.$$

它的解为 $a_k=a_k^*,k=0,1,\cdots,n.$ 由此可得最佳平方逼近多项式 $p_n^*(x)$.

注： 由于 $\boldsymbol{H}_n$ 是病态矩阵，在 $n\geq 3$ 时直接解法方程 $\boldsymbol{H}_n\boldsymbol{a}=\boldsymbol{d}$ 误差很大，因此当取 $\varphi_n(x)=x^n$ 时，解法方程方法只适合 $n\leq 2$ 的情形. 对 $n\geq 3$ 可用正交多项式作 Φ 的基函数，来求解最佳平方逼近多项式.

【例 3.12】 设 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$， 求 [0, 1] 上的一次最佳平方逼近多项式

$$p_1^*(x)=a_0^*+a_1^*x.$$

【解】 令 $\varphi_j(x)=x^j$, $j=0,1.$ 由于

$$d_0=\int_0^1\sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2})+\frac{\sqrt{2}}{2}\approx 1.147,\quad d_1=\int_0^1(\sqrt{1+x^2})\,x\mathrm{d}x=\frac{2\sqrt{2}-1}{3}\approx 0.609.$$

于是得法方程为

$$\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ 1/2 & 1/3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.147\\ 0.609\end{bmatrix}$$

其解为 $a_0^*=0.934$, $a_1^*=0.426$，因此求得一次最佳平方逼近式为

$$p_1^*(x)=0.934+0.426x.$$

平方误差 $\|\delta\|_2^2=(f,f)-(p_1^*,f)=(f,f)-(a_0^*\varphi_0+a_1^*\varphi_1,f)$

$$=(f,f)-a_0^*(\varphi_0,f)-a_1^*(\varphi_1,f)=\int_0^1(\sqrt{1+x^2})^2\mathrm{d}x-a_0^*d_0-a_1^*d_1=0.0026$$

（2）用正交函数族为基函数做平方逼近

设 $f(x)\in C[a,b]$，$\Phi=\mathrm{Span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$，若 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是正交函数族，即 $(\varphi_i,\varphi_j)=0(i\neq j),(\varphi_i,\varphi_i)>0$，此时法方程

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

系数矩阵为非奇异对角阵，法方程的解为

$$a_k^*=\frac{(f,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)}=\frac{(f,\varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2^2},\qquad k=0,1,\cdots,n.$$

于是得 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近函数为

$$\varphi^*(x)=\sum_{k=0}^{n}a_k^*\varphi_k(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,\varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2^2}\varphi_k(x).$$

平方误差

$$\|\delta\|_2^2=\|f-\varphi^*\|_2^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}a_k^*(f,\varphi_k)=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}\left[\frac{(f,\varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2^2}\right]^2\|\varphi_k\|_2^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}(a_k^*\|\varphi_k\|_2)^2\geq 0.$$

3．曲线拟合的最小二乘逼近

当 $f(x)$ 是由实验或观测得到的，其函数通常给出的是表格

$$(x_i,f_i)\quad(i=0,1,\cdots,m).$$

若要求一条曲线 $y=\varphi(x)$ 逼近函数 $f(x)$，通常由于观测有误差，因此 $\varphi(x_i)-f_i=0$ 不一定成立.

曲线拟合最小二乘问题： 要寻求 $\varphi^*(x)\in\Phi=\mathrm{Span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\},n<m$， 使

$$\|\delta\|_2^2=\|f-\varphi^*\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\rho_i[f_i-\varphi^*(x_i)]^2=\min_{\varphi\in\Phi}\|f-\varphi\|_2^2$$

$\rho_i(i=0,1,\cdots,n)$ 是权值. 这就是当 $f(x)$ 为离散情形的最佳平方逼近问题.

求 $\varphi^*(x)$ 的问题等价于求多元函数

$$F(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\sum_{i=0}^{n}\rho_i\left[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-f_i\right]^2 \qquad (3.4.37)$$

的极小值，它与连续情形的最佳平方逼近问题讨论一样可得到法方程

$$\sum_{j=0}^{n}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k),\qquad k=0,1,\cdots,n. \qquad (3.4.38)$$

法方程的解是存在唯一的. 只是此处的内积 $(\bullet,\bullet)$ 由连续的积分形式换成离散的求和

形式，即

$$\begin{cases} (\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\rho_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i), \\ (f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\rho_i f_i\varphi_k(x_i). \end{cases} \tag{3.4.39}$$

求解法方程得 $a_k=a_k^*,k=0,1,\cdots,n$，于是得

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

称 $\varphi^*(x)$ 为最小二乘逼近函数， $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 为最小二乘逼近基函数.

平方误差

$$\|\delta\|_2^2=\|f-\varphi^*\|_2^2=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}a_k^*(\varphi_k,f)$$

此处的内积是离散形式.

如何选择数学模型？即如何根据给定的 $\{f_i\}$ 来选择函数类 Φ？

（1）若取 $\Phi=\mathrm{Span}\{1,x,\cdots,x^n\}$，当 n 较大时法方程病态，需另作处理．而当 n 较小时，往往不能表征 $f(x)$ 的性态，或误差较大或模型不符．

（2）通常可以根据物理意义或 $(x_i,f_i)(i=0,1,\cdots,m)$ 数据分布的大致图形选择相应的数学模型．

实际上，经常采用线性最小二乘逼近，即 Φ 是线性函数空间．

有的数学模型表面上不是线性模型，但通过变换可化为线性模型．

例如 $y=ae^{bx}$，其中 a,b 为待定参数，取对数得

$$\ln y=\ln a+bx.$$

令 $Y=\ln y$，记 $A=\ln a$，于是有

$$Y=A+bx$$

取

$$\varphi_0(x)=1,\quad \varphi_1(x)=x$$

将曲线拟合原始数据 (x_i, y_i) 变换为 $(x_i, Y_i), i=0,1,\cdots,m$，就变成求线性模型

$$\varphi(x) = A + bx$$

【例 3.14】 给定数据 $(x_i, f_i), i=0,1,2,3,4$, 见表 3.3. 试选择适当模型，求最小二乘拟合函数$\varphi^*(x)$.

表 3.3

i	x_i	f_i	$Y_i = \ln f_i$	x_i^2	x_iY_i	$\varphi^*(x_i)$
0	1.00	5.10	1.629	1.000	1.629	5.09
1	1.25	5.79	1.756	1.5625	2.195	5.78
2	1.50	6.53	1.876	2.2500	2.814	6.56
3	1.75	7.45	2.008	3.0625	3.514	7.44
4	2.00	8.46	2.135	4.000	4.270	8.44

【解】 根据给定数据选择

数学模型(1)： $y = ae^{bx} (a > 0)$

取对数

$$\ln y = \ln a + bx,\quad Y = \ln y, A = \ln a,$$

取 $\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_1(x) = x$，要求

$$Y = A + bx$$

与 $(x_i, Y_i), i = 0,1,\cdots,4,$ 做最小二乘拟合，$Y_i = \ln f_i.$ 由于

$$(\varphi_0, \varphi_0) = 5,\ (\varphi_0, \varphi_1) = (\varphi_1, \varphi_0) = 7.5,\ (\varphi_1, \varphi_1) = 11.875,$$

$$(\boldsymbol{Y}, \varphi_0) = \sum_{i=0}^{4} Y_i = 9.404，\ (\boldsymbol{Y}, \varphi_1) = \sum_{i=0}^{4} Y_i x_i = 14.422,$$

得法方程

$$\begin{cases} 5A + 7.5b = 9.404, \\ 7.5A + 11.875b = 14.422. \end{cases}$$

求解此方程得

$$A = 1.122,\ b = 0.5056,\ a = e^{A} = 3.071.$$

于是得最小二乘拟合曲线

$$y = 3.071e^{0.5056x} = \varphi^{*}(x).$$

算出 $\varphi^{*}(x_i)$ 的值列于表 3.3 最后一列，从结果看到这一模型拟合效果较好.

若选择数学模型(2)： $y = \dfrac{1}{a_0 + a_1 x}$

则令 $Y = \dfrac{1}{y} = a_0 + a_1 x$，此时

$$\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_1(x) = x,\ (\boldsymbol{Y}, \varphi_0) = 0.77436,\ (\boldsymbol{Y}, \varphi_1) = 1.11299.$$

法方程为

$$\begin{cases} 5a_0 + 7.5a_1 = 0.77436, \\ 7.5a_0 + 11.875a_1 = 1.11299. \end{cases}$$

求解得

$$a_0 = 0.27139, \qquad a_1 = -0.07768.$$

于是得最小二乘拟合曲线

$$y = \frac{1}{0.27139 - 0.07768x} = \tilde{\varphi}^*(x).$$

计算出 $\tilde{\varphi}^*(x_i)$ 的值分别为 5.16, 5.74,6.46, 7.38, 8.62. 结果比指数模型 $y = ae^{bx}$ 差.

若直接选择多项式模型(3)： $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$，结果将更差.

注：选择数学模型是非常重要的.

目前已有自动选择数学模型的软件.

当数学模型选为多项式时，可根据正交性条件，用点集 $\{x_i\}_0^m$ 由递推公式构造正交多项式 $\{\varphi_k(x)\}_0^n$：

$$\begin{cases} \varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=(x-\alpha_0)\varphi_0(x), \\ \varphi_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)\varphi_k(x)-\beta_k\varphi_{k-1}(x), \qquad k=1,2,\cdots,n-1, \end{cases}$$

满足条件

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

其中

$$
\begin{cases}
\alpha_k = \dfrac{(x\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} = \dfrac{\sum\limits_{i=0}^{m} \rho_i x_i \varphi_k^2(x_i)}{\sum\limits_{i=0}^{m} \rho_i \varphi_k^2(x_i)}, \qquad k = 0, 1, \cdots, n-1, \\
\beta_k = \dfrac{(\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})} = \dfrac{\sum\limits_{i=0}^{m} \rho_i \varphi_k^2(x_i)}{\sum\limits_{i=0}^{m} \rho_i \varphi_{k-1}^2(x_i)}, \qquad k = 1, 2, \cdots, n-1.
\end{cases}
$$

与连续情形讨论相似，此时可得最小二乘逼近多项式

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

其中

$$
a_k^* = \frac{(\boldsymbol{f}, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} = \frac{1}{A_k} \sum_{i=0}^{m} \rho_i f_i \varphi_k(x_i), \qquad k = 0, 1, \cdots, n.
$$

算法的终止可根据平方误差

$$\delta_n^2 = \left\| f - \varphi_n^*(x) \right\|_2^2 = \| f \|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} (a_k^*)^2 \| \varphi_k \|_2^2 \le \varepsilon$$

或 $n = N$ （事先给定）控制.

【例 3.15】用正交化方法求离散数据表 3.4 中的最小二乘二次多项式拟合函数.

表 3.4

i	0	1	2	3	4
x_i	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	0.10	0.35	0.81	1.09	1.96

【解】在离散点列 $\{x_i\}_{i=0}^m = \{0,\ 0.25,\ 0.5,\ 0.75,\ 1\}$ 上，按三项递推公式构造正交多项式. 权因子 $\{\rho_i\}_0^m = \{1,\ 1,\ 1,\ 1,\ 1\}$.

这里 $n=2$． 取 $\varphi_0(x)=1$，由此得

$$\varphi_0=\{\varphi_0(x_i)\}_0^m=(1,1,1,1,1)^T,\ (\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^m\rho_i[\varphi_0(x_i)]^2=5$$

$$(x\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^m\rho_i x_i[\varphi_0(x_i)]^2=2.5,\ \alpha_0=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=0.5$$

于是递推出 $\varphi_1(x)=x-\alpha_0=x-0.5$. 进一步计算

$$\varphi_1=\{\varphi_1(x_i)\}_0^m=(-0.5,\ -0.25,\ 0,\ 0.25,\ 0.5)^T,$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^m\rho_i[\varphi_1(x_i)]^2=0.625,$$

$$(x\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^m\rho_i x_i[\varphi_1(x_i)]^2=0.3125,$$

$$\alpha_1=\frac{(x\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=0.5,\ \beta_1=\frac{(\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=0.125.$$

于是递推得 $\varphi_2(x)=(x-\alpha_1)\varphi_1(x)-\beta_1\varphi_0(x)=(x-0.5)^2-0.125.$ 继续计算

$$\varphi_2=(0.125,\ -0.0625,\ -0.125,\ -0.0625,\ 0.125)^T,$$

$$(\varphi_2,\varphi_2)=0.0546875,$$

$$(y,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{m}\rho_i y_i\varphi_0(x_i)=4.31,\ \ a_0^*=\frac{(y,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=0.862,$$

$$(y,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{m}\rho_i y_i\varphi_1(x_i)=1.115,\ \ a_1^*=\frac{(y,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=1.784,$$

$$(y,\varphi_2)=\sum_{i=0}^{m}\rho_i y_i\varphi_2(x_i)=0.6625,\ \ a_2^*=\frac{(y,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)}=1.211428571.$$

最后得到拟合多项式

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + a_2^*\varphi_2(x)$$

$$= 0.862 + 1.784(x-0.5) + 1.2114[(x-0.5)^2 - 0.125]$$

$$= 0.1214 + 0.5726x + 1.2114x^2.$$

平方误差$\|\delta\|_2^2 = 0.0337.$