第三章函数逼近与快速傅里叶变换

- 基本概念与预备知识
- 正交多项式
- 最佳平方逼近
- 曲线拟合与最小二乘
- 有理逼近与 Pade 逼近
- 三角多项式逼近与快速 Fourier 变换

什么是函数逼近？

x_0	x_1	…	x_m
y_0	y_1	…	y_m

已知数据表，能否找到一个简单易算的 $p(x)$，使得 $p(x_i) = y_i$

→ 插值

给定复杂函数 $f(x)$，能否在某个简单易算的函数类中找到一个 $p(x)$，使得 $p(x)$ 在某种度量下距离 $f(x)$ 最近，即最佳逼近？

→ 函数逼近

给定带误差的数据表，能否能否在某个简单易算的函数类中找到一个 $p(x)$，使得 $p(x)$ 在某种度量下是这些数据的最佳逼近？

→ 曲线拟合

3.1基本概念与预备知识

- 线性空间、线性相关、线性无关
- 基、维数、有限维空间与无限维空间
- 常见线性空间：R^n、C^n、H_n、$C[a,b]$、$C^n[a,b]$

定理：（Weierstrass 定理）

设 $f(x)\in C[a,b]$，则对 $\forall\ \varepsilon>0$，总存在一个多项式 $p(x)$，使得 $\max\limits_{a\le x\le b}\left|f(x)-p(x)\right|<\varepsilon$

在 $[a,b]$ 上一致成立。

范数与赋范线性空间

定义： 设 S 为线性空间，$x\in S$，若存在唯一实数 $\|\cdot\|$，满足

(1) $\|x\|\geq 0$，等号当且仅当 $x=0$ 时成立 （正定性）

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

(3) $\|x+y\|\leq\|x\|+\|y\|$ （三角不等式）

则称 $\|\cdot\|$ 为 S 上的范数，$(S, \|\cdot\|)$ 称为 赋范线性空间

赋范线性空间 $\mathbf{R}^n$

线性空间 R^n 上常见的范数有

- **1-范数：** $$\|x\|_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|=|x_1|+|x_2|+\cdots+|x_n|$$
- **2-范数：** $$\|x\|_2=\left(\sum_{i=1}^{n}x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$$
- **p-范数：** $$\|x\|_p=\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$
- **∞-范数（有时也称最大范数）：** $$\|x\|_\infty=\max_{1\le i\le n}|x_i|$$

赋范线性空间 C[a,b]

线性空间 $C[a, b]$ 上的常见范数有

- ∞-范数： $\|f\|_\infty = \max\limits_{a\le x\le b} |f(x)|$
- 1-范数： $\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| \,\mathrm{d}x$
- 2-范数： $\|f\|_2 = \left(\int_a^b |f(x)|^2 \,\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}}$
- p-范数： $\|f\|_p = \left(\int_a^b |f(x)|^p \,\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{p}}$

内积与内积空间

定义： 设 X 是数域 K (K 可以是 R 或 C) 上的线性空间，对 $\forall\ u, v \in$ X，有 K 中的一个数 (u, v) 与之对应，且满足

(1) $(u,v)=\overline{(v,u)}$

(2) $(\alpha u,v)=\alpha(u,v),\quad \alpha\in K$

(3) $(u+v,w)=(u,w)+(v,w),\quad \forall w\in X$

(4) $(u,u)\geq 0$，等号当且仅当 $u = 0$ 时成立

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

- 实数域上的内积空间称为欧氏空间
- 复数域上的内积空间称为酉空间

常见内积空间

- 内积空间 $\mathbf{R}^n$

$$(x, y) = y^{\mathrm{T}} x = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

- 内积空间 $\mathbf{C}^n$

$$(x, y) = y^{*} x = x_1 \overline{y}_1 + x_2 \overline{y}_2 + \cdots + x_n \overline{y}_n$$

- 内积空间 $\mathrm{C}[a, b]$

$$\left(f, g \right) = \int_a^b f(x) g(x) \, \mathrm{d}x$$

正交与Cauchy-Schwarz不等式

定义： 设 X 是内积空间, $u, v \in X$，若 $(u, v) = 0$，则称 u, v 正交。

注：正交是向量相互垂直概念的推广。

定理（Cauchy-Schwarz 不等式）

设 X 是数域 K 上的内积空间，则对任意 $u, v \in X$，有

$$|(u,v)|^2 \le (u,u)(v,v).$$

思考： 等号成立的充要条件是什么?

Gram 矩阵

设 X 是内积空间，$u_1, u_2, \ldots, u_n \in \mathrm{X}$，定义 Gram 矩阵

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

定理：G 非奇异当且仅当 $u_1, u_2, \ldots, u_n$ 线性无关。

内积与导出范数

设 X 是内积空间，对任意 $u \in X$，定义

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

可以验证它是一个范数，称为**内积导出范数**。

例：R^n 上的内积：$(x,y) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$

导出的范数为 $\|x\| = \left(x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2\right)^{\frac{1}{2}}$，即 2-范数。

带权内积

设 $x, y \in \mathbf{R}^n$，给定正实数 $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n$，称

$$(x, y)_\omega = \sum_{i=1}^{n} \omega_i x_i y_i = \omega_1 x_1 y_1 + \omega_2 x_2 y_2 + \cdots + \omega_n x_n y_n$$

为带权内积， $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n$ 称为权系数

$\mathbf{C}^n$ 上的带权内积

$$(x, y)_\omega = \sum_{i=1}^{n} \omega_i x_i \bar{y}_i = \omega_1 x_1 \bar{y}_1 + \omega_2 x_2 \bar{y}_2 + \cdots + \omega_n x_n \bar{y}_n$$

注：权系数必须全部是正数！（思考：为什么）

权函数

定义： 设 $\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的非负函数，满足

① $\int_a^b x^k \rho(x)\,\mathrm{d}x$ 存在且为有限值 $(k = 0, 1, 2, \dots)$

② 对 $[a, b]$ 上的任意非负连续函数 $g(x)$，满足

若 $\int_a^b g(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = 0$，则 $g(x) \equiv 0$

则称 $\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上一个权函数

- $[a, b]$ 可以是无限区间，即 a 可以是负无穷, b 可以是正无穷
- 权函数非负
- 权函数与定义区间有关

常见的权函数

$$\boxed{\rho(x) = 1 \quad (-1 \le x \le 1)}$$

$$\boxed{\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} \quad (-1 \le x \le 1)}$$

$$\boxed{\rho(x) = e^{-x} \quad (0 < x < +\infty)}$$

$$\boxed{\rho(x) = e^{-x^2} \quad (-\infty < x < +\infty)}$$

$C[a,b]$ 带权内积

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

带权内积 $$(f,g)_\rho = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x)\,\mathrm{d}x$$

导出范数 $$\|f\|_\rho = (f,f)_\rho^{\frac{1}{2}} = \left(\int_a^b \rho(x) f^2(x)\,\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}}$$

性质： 设 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n \in C[a,b]$，则 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 线性无关当且仅当 $\det(G) \neq 0$，其中 G 为 Gram 矩阵，即

$$G = G(\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_n) = \begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}$$

函数逼近

什么是最佳逼近

定义： 记 Φ 为某个函数空间，给定函数 $f(x) \in C[a,b]$，若 $g^*(x) \in \Phi$ 使得

$$\|f(x) - g^*(x)\| = \min_{g(x)\in\Phi} \|f(x) - g(x)\|$$

则称 $g^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中的 $[a,b]$ 上的 **最佳逼近函数。**

函数逼近中的关键两点：

(1) 确定函数空间，即用什么样的函数来逼近 $f(x)$

(2) 确定度量标准，即采用什么样的评判标准

最佳逼近多项式

定义： 记 H_n 为所有次数不超过 n 的多项式组成的集合，给定函数 $f(x)\in C[a, b]$，若 $p^*(x)\in H_n$ 使得

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

则称 $p^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的 n 次**最佳逼近多项式**。

注：取不同的范数，可以定义不同的最佳逼近方式

最佳一致逼近多项式

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

最佳平方逼近多项式

$$\left\| f(x) - p^*(x) \right\|_2 = \min_{p(x)\in H_n} \left\| f(x) - p(x) \right\|_2$$

曲线拟合

最小二乘拟合

给定 $f(x) \in C[a, b]$ 的数据表

x_0	x_1	$\cdots$	x_m
y_0	y_1	$\cdots$	y_m

寻找 $g^*(x) \in \Phi$，使得

$$\sum_{i=1}^{m} \left| y_i - g^*(x_i) \right|^2 = \min_{g \in \Phi} \sum_{i=1}^{m} \left| y_i - g(x_i) \right|^2$$

称 $g^*(x)$ 为 $f(x)$ 的最小二乘拟合。

若 $\Phi = H_n$，则称 $g^*(x)$ 为 n 次最小二乘拟合多项式

3.2正交多项式

- 正交函数族与正交多项式
- Legendre 正交多项式
- Chebyshev 正交多项式
- Chebyshev 插值
- 第二类 Chebyshev 正交多项式
- Laguerre 正交多项式
- Hermite 正交多项式

函数的正交

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

正交函数族

定义：设函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_k(x), \ldots \in C[a, b]$，

$\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，若

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

则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 是 $[a, b]$ 上 **带权 $\rho(x)$ 的正交函数族**

若所有 $A_i = 1$，则称为 **标准正交函数族**

正交函数举例

例： 三角函数系

$$1,\quad \cos x,\quad \sin x,\quad \cos 2x,\quad \sin 2x,\quad \ldots$$

在 $[-\pi, \pi]$ 上是带权 $\rho(x)=1$ 的正交函数族

证：

$$(1,\ 1) = \pi\int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}x = 2$$

$$(\sin nx, \sin mx) = \pi\int_{-\pi}^{\pi} \sin nx \sin mx \ \mathrm{d}x = \quad \cdot \delta_{nm}$$

$$(\cos nx, \cos mx) = \pi\int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \cos mx \ \mathrm{d}x = \quad \cdot \delta_{nm}$$

$$(m, n = 1, 2, 3, \ldots)$$

$$(\cos nx, \sin mx) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \sin mx \ \mathrm{d}x = 0$$

$$(m, n = 0, 1, 2, \ldots)$$

正交多项式

定义： 设 $\varphi_n(x)$ 是首项系数不为 0 的 n 次多项式，$\rho(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，若

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

则称 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上 **带权 $\rho(x)$ 正交**，称 $\varphi_n(x)$ 为 **n 次正交多项式。**

性质 1： 设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，H_n 为所有次数不超过 n 的多项式组成的线性空间，则

$$\{\ \varphi_0(x),\ \varphi_1(x),\ \varphi_2(x)\ ,\ \cdots,\ \varphi_n(x)\ \}$$

构成 H_n 的一组基

性质 2： 设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，则对 $\forall\ p(x) \in H_{n-1}$，有

$$\left(p(x), \varphi_n(x)\right) = \int_a^b \rho(x) p(x) \varphi_n(x)\ \mathrm{d}x = 0$$

性质 3： 设 $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，且**首项系数均为 1**，则

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

其中

$n = 0, 1, 2, \ldots$

$$\varphi_{-1} = 0, \quad \varphi_0 = 1, \quad \alpha_n = \frac{(x\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_n, \varphi_n)}, \quad \beta_n = \frac{(\varphi_n, \varphi_n)}{(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}$$

这就是正交多项式的**三项递推公式**！即所有首项系数为 1 的正交多项式族都满足这个公式，该公式也给出了正交多项式的一个计算方法。

性质 4： 设 $\left\{\varphi_n\right\}_{n=0}^{\infty}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交多项式，则 $\varphi_n(x)$ 在 (a, b) 内有 n 个不同的零点

几类重要的正交多项式

- Legendre 多项式
- Chebyshev 多项式
- 第二类 Chebyshev 多项式
- Laguerre 多项式
- Hermite 多项式

勒让德（Legendre）多项式

在 $[-1, 1]$ 上带权 $\rho(x)=1$ 的正交多项式称为 **勒让德多项式**

记为：$P_0, P_1, P_2, \ldots$

$$P_0(x)=1,\ \ P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n$$

$x\in[-1, 1],\ \ n = 1, 2, \ldots$

- $P_n(x)$ 的首项 x^n 的系数为：$\dfrac{2n(2n-1)\cdots(n+1)}{2^n n!}=\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$
- 令 $\tilde{P}_n(x)=\dfrac{n!}{(2n)!}\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n$

则 $\tilde{P}_n(x)$ 是**首项系数为 1** 的勒让德多项式

Legendre 多项式

- 勒让德多项式的性质

(1) 正交性：
$$\boxed{(\mathrm{P}_n,\mathrm{P}_m)=\int_{-1}^{1}\mathrm{P}_n(x)\mathrm{P}_m(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n\\ \dfrac{2}{2n+1}, & m=n\end{cases}}$$

(2) 奇偶性：$\mathrm{P}_{2n}(x)$ 只含偶次幂，$\mathrm{P}_{2n+1}(x)$ 只含奇次幂，故
$$\boxed{\mathrm{P}_n(-x)=(-1)^n\mathrm{P}_n(x)}$$

(3) 递推公式：
$$\boxed{(n+1)\mathrm{P}_{n+1}(x)=(2n+1)x\,\mathrm{P}_n(x)-n\mathrm{P}_{n-1}(x)}$$

其中 $\mathrm{P}_0(x)=1,\ \mathrm{P}_1(x)=x$， $n=1, 2, \ldots$

(4) $\mathrm{P}_n(x)$ 在 (-1,1) 内有 n 个不同的零点

Legendre 多项式表达式

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

$$P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$$

$$P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + 3)/8$$

$$P_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$$

$$\vdots$$

切比雪夫（Chebyshev）多项式

在 [-1, 1] 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式称为**切比雪夫多项式**，

其中

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

Chebyshev 多项式的表达式

$$\boxed{T_n(x) = \cos(n \arccos x)}$$

$x \in [-1, 1]$，$n = 0, 1, 2, \ldots$

Chebyshev多项式的性质

$$x = \cos\theta$$

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

(2) 奇偶性：$T_{2n}(x)$ 只含偶次幂，$T_{2n+1}(x)$ 只含奇次幂，故

$$\boxed{T_n(-x) = (-1)^n T_n(x)}$$

(3) 递推公式：$$\boxed{T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)}$$

其中 $T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x$， $n = 1, 2, \ldots$

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

(4) $T_n(x)$ 在 (-1,1) 内有 n 个不同的零点:

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

(5) $T_n(x)$ 在 [-1, 1] 上有 n+1 个极值点:

$$\tilde{x}_k = \cos\frac{k\pi}{n} \qquad (k = 0, 1, \ldots, n)$$

(6) $T_n(x)$ 的首项系数为 2^{n-1}，且 $|T_n(x)| \le 1$

首项系数为 1 的 Chebyshev 多项式

(7) 令 $\tilde{T}_n(x)=\dfrac{T_n(x)}{2^{n-1}}$

则 $\left\{\tilde{T}_n(x)\right\}$ 为首项系数为 1 的 Chebyshev 多项式。

定理： 记 $\tilde{H}_n$ 为所有首项系数为 1 的 n 次多项式组成的集合，则对 $\forall\ p(x)\in\tilde{H}_n$ 有

$$\max_{-1\le x\le 1}\left|\tilde{T}_n(x)\right|\le\max_{-1\le x\le 1}\left|p(x)\right|$$

且 $\max\limits_{-1\le x\le 1}\left|\tilde{T}_n(x)\right|=\dfrac{1}{2^{n-1}}$

等价描述： $\left\|\tilde{T}_n(x)\right\|_\infty\le\left\|p(x)\right\|_\infty\qquad\forall\ p(x)\in\tilde{H}_n$

即 $\tilde{T}_n(x)$ 在集合 $\tilde{H}_n$ 中无穷范数最小。

注记：

① 这里的无穷范数是指 C[-1, 1] 上的无穷范数。

② 定理中的结论可推广为“在所有次数不超过 n 的首项系数为 1 的多项式中，$\tilde{T}_n(x)$ 的无穷范数最小”

③ 该结论可用于计算 n 次多项式在 [-1,1] 上的 n-1 次最佳一致逼近多项式。

性质： 设 $f(x) \in H_n$，且首项系数为 $a_n \neq 0$，则 $f(x)$ 在 [-1,1] 上的 n-1 次最佳一致逼近多项式为

$$f(x) - a_n \tilde{T}_n(x)$$

例： 求 $f(x)=2x^3+x^2+2x-1$ 在 $[-1,1]$上的二次最佳一致逼近多项式。

解： 设 $p(x)$ 是 $f(x)$在 $[-1,1]$上的二次最佳一致逼近多项式，则由前面的性质可知

$$
\begin{aligned}
p(x) = f(x) - a_3\tilde{T}_3(x) \\
&= 2x^3 + x^2 + 2x - 1 - 2\left(x^3 - \frac{3}{4}x\right) \\
&= x^2 + \frac{7}{2}x - 1
\end{aligned}
$$

思考：

如何计算 n 次多项式在 $[a, b]$ 上的 n-1 次最佳一致逼近多项式？

Chebyshev多项式的表达式

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

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

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

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

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

$$\vdots$$

用 Chebyshev 多项式的零点插值

$$x_k = \cos\left(\pi\frac{2k+1}{2(n+1)}\right)$$

以 Chebyshev 多项式的**零点**作为**插值节点**进行插值

好处：**所有插值多项式中, 总体插值误差最小**

定理： 设 $f(x) \in C^{n+1}[-1, 1]$，插值节点 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ 为 $T_{n+1}(x)$ 的 $n+1$ 个零点，则

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

Chebyshev零点插值

若 $f(x)\in C^{n+1}[a, b]$，怎么办？

作变量替换 $$x=\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}$$

插值节点

$$x_k=\frac{b-a}{2}\cos\pi\frac{2k+1}{2(n+1)}+\frac{b+a}{2}$$ $(k=0, 1, \ldots, n)$

插值误差

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

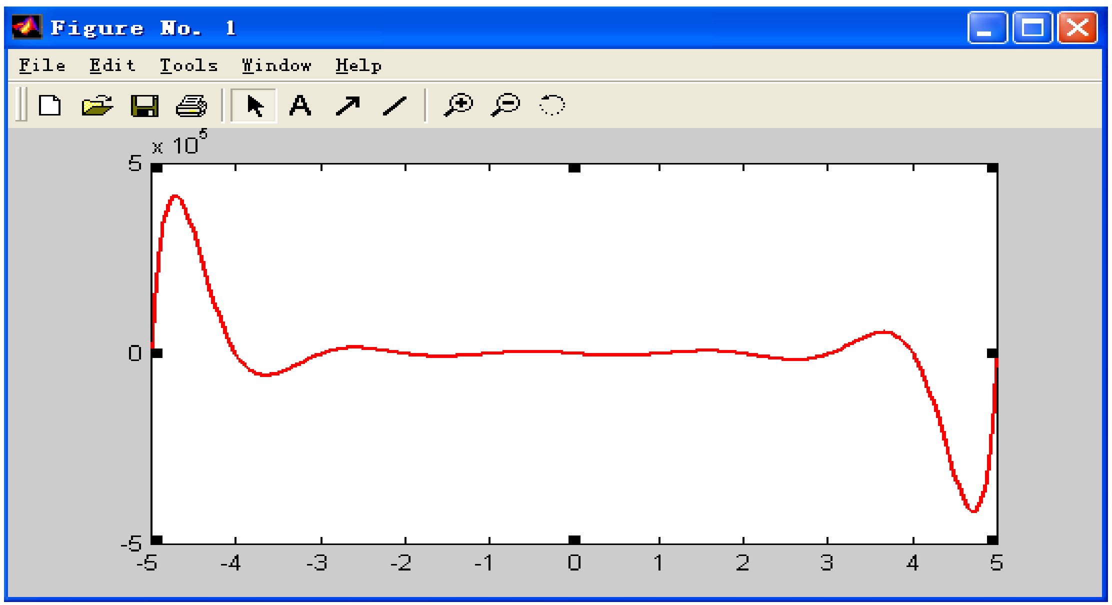
例 函数 $f(x)=\dfrac{1}{1+x^2}\quad x\in[-5,5]$

取等距插值结点: -5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, 5

$$\boxed{f(x)=L_{10}(x)+\frac{f^{(11)}(\xi_n)}{11!}\omega_{11}(x)}$$

$$\omega_{11}(x)=(x+5)(x+4)(x+3)(x+2)(x+1)x(x-1)(x-2)(x-3)(x-4)(x-5)$$

$\omega_{11}(x)\ \rightarrow$



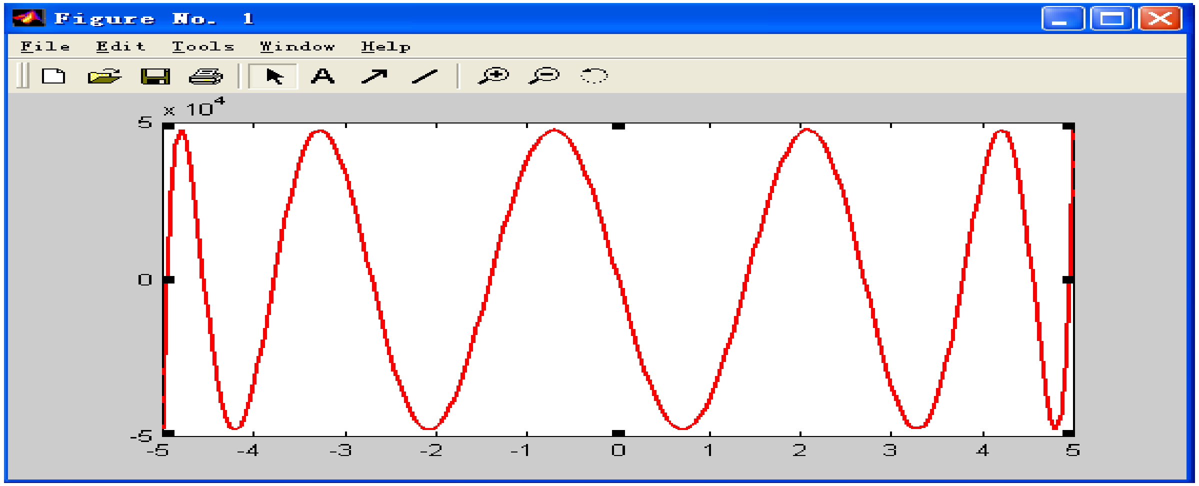
在[-5, 5]区间上,取11个切比雪夫结点

$$x_k = 5\cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{22}\right) \qquad (\ k=10, 9, 8, \cdots, 1, 0\ )$$

-4.9491	-4.5482	-3.7787	-2.7032	-1.4087
0.0000	1.4087	2.7032	3.7787	4.5482
4.9491				

$$\omega_{11}(x)=(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\cdots\cdots(x-x_{10})$$

$\omega_{11}(x)$ →



插值函数$L_{10}(x)$取

切比雪夫结点插值

插值函数$L_{10}(x)$取

等距结点插值

其他正交多项式（了解）

- **第二类 Chebyshev 多项式**
- **Laguerre 多项式**
- **Hermite 多项式**

第二类 Chebyshev 多项式

$$U_n(x)=\frac{\sin\big((n+1)\arccos x\big)}{\sqrt{1-x^2}}$$

$x\in$ [-1, 1]，n = 0, 1, 2, …

- 在 [-1, 1] 上带权 $\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$ 正交，即

$$(U_n,U_m)=\int_{-1}^{1}\rho(x)T_n(x)T_m(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n\\ \pi/2, & m=n\end{cases}$$

- 递推公式：$U_{n+1}(x)=2xU_n(x)-U_{n-1}(x)$

其中 $U_0(x)=1$, $U_1(x)=2x$，n = 1, 2, …

拉盖尔（Laguerre） 多项式

$$\boxed{L_n(x) = e^x \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n e^{-x})}$$

$x \in [0, \infty]$，$n = 0, 1, 2, \ldots$

- 在 [0, ∞] 上带权 $\rho(x) = e^{-x}$ 正交，即

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

- 递推公式：$L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x)$

其中 $L_0(x) = 1$, $L_1(x) = 1 - x$，$n = 1, 2, \ldots$

埃尔米特（Hermite）多项式

$$\boxed{H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}}$$ $x\in(-\infty,+\infty)$，$n = 0, 1, 2, \ldots$

- 在 $(-\infty,+\infty)$ 上带权 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 正交，即

$$(H_n,H_m)=\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)H_n(x)H_m(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n\\ 2^n n!\sqrt{n}, & m=n\end{cases}$$

- 递推公式：$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)$

其中 $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$，$n = 1, 2, \ldots$

3.3最佳平方逼近

设 $f(x)\in C[a,b]$，$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\in C[a,b]$ 线性无关，令 $\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_n\}$

求 $S^*(x)\in\Phi$，使得

$$\|f(x)-S^*(x)\|_2^2=\min_{S\in\Phi}\|f(x)-S(x)\|_2^2$$

- 我们称 $S^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中的 最佳平方逼近。
- 这里的范数是带权内积导出范数，即

$$\|f(x)-S(x)\|_2^2=\int_a^b\rho(x)\big(f(x)-S(x)\big)^2\mathrm{d}x$$

如何求 $S^*(x)$

对任意 $S(x) \in \Phi$,
可设 $$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$$

则"求 $S^*(x)$"等价于"求下面的多元函数的最小值点"

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

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

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

$$\Longleftrightarrow \boxed{\sum_{j=0}^{n} a_j\left(\varphi_k, \varphi_j\right) = \left(\varphi_k, f\right)} \quad k = 0, 1, \ldots, n$$

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

法方程

性质：$\left(f - S^*, \varphi_k\right) = 0$, $k = 0, 1, \ldots, n$

解的存在唯一性

法方程存在唯一解 $\Longleftrightarrow$ $\det(G) \neq 0$ $\Longleftrightarrow$ $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 线性无关

设法方程的解为： $a_0^*, a_1^*, \ldots, a_n^*$，令

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

定理：$S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 Φ 中的唯一最佳平方逼近函数，且逼近误差为

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

最佳平方逼近多项式

即 $f(x)\in C[a, b]$ 在 H_n 中的最佳平方逼近，记为 S_n^*

计算方法

若 $[a, b]=[0, 1]$，取 H_n 的一组基：$1, x, x^2, \dots, x^n$，得法方程

Hilbert 矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

H

H 严重病态
只适合求低
次最佳逼近

举例

例：(P68，例 6)

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

解：

$$d_0=(\varphi_0, f)=(1, f)=\int_0^1\sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x\approx 1.147$$

$$d_1=(\varphi_1, f)=(x, f)=\int_0^1 x\sqrt{1+x^2}\,\mathrm{d}x\approx 0.609$$

$$\Rightarrow\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ 1/2 & 1/3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}d_0\\ d_1\end{bmatrix}\Rightarrow a_0\approx 0.934,\quad a_1\approx 0.426$$

$$\Rightarrow \boxed{S^*(x)\approx 0.934+0.426\,x}$$

$$\|\delta(x)\|_2^2=\|f(x)\|_2^2-\sum_{j=0}^{n}a_j^*(\varphi_j, f)\approx 0.0026$$

$$\|\delta(x)\|_\infty\approx 0.066$$

使用正交基求最佳平方逼近

若 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 正交，则法方程的解为 $a_k^* = \dfrac{(\varphi_k, f)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$

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

$$\boxed{S^*(x) = \frac{(\varphi_0, f)}{(\varphi_0, \varphi_0)}\varphi_0(x) + \frac{(\varphi_1, f)}{(\varphi_1, \varphi_1)}\varphi_1(x) + \cdots + \frac{(\varphi_n, f)}{(\varphi_n, \varphi_n)}\varphi_n(x)}$$

误差 $$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} \frac{(\varphi_k, f)^2}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{k=0}^{n} \frac{(\varphi_k, f)^2}{(\varphi_k, \varphi_k)} \le \|f(x)\|_2^2}$$

Bessel 不等式

广义 Fourier 级数

设 $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \ldots$ 是正交函数族，则称

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k^* \varphi_k(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + a_2^* \varphi_2(x) + \cdots$$

为 $f(x)$ 的 **广义 Fourier 级数**

其中 $a_k^* = \dfrac{(\varphi_k, f)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$ 为**广义Fourier系数**

用正交多项式作最佳逼近

定理： 若 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 是正交多项式族，$S_n^*(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式，则

$$\lim_{n\to\infty}\left\| f(x) - S_n^*(x) \right\|_2 = 0$$

$$\boxed{S_n^*(x) = \frac{(\varphi_0, f)}{(\varphi_0, \varphi_0)}\varphi_0(x) + \frac{(\varphi_1, f)}{(\varphi_1, \varphi_1)}\varphi_1(x) + \cdots + \frac{(\varphi_n, f)}{(\varphi_n, \varphi_n)}\varphi_n(x)}$$

Legendre 多项式求最佳逼近

设 $f(x) \in C[-1, 1]$，$\rho(x) = 1$，则 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式为

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

其中 $a_k^* = \dfrac{(P_k, f)}{(P_k, P_k)} = \dfrac{2k+1}{2}\displaystyle\int_{-1}^{1} P_k(x) f(x)\,\mathrm{d}x$

误差

$$\|\delta_n(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} \frac{(P_k, f)^2}{(P_k, P_k)} = \int_{-1}^{1} f^2(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n} \frac{2}{2k+1}\left(a_k^*\right)^2$$

定理： 若 $f(x)\in C^2[-1, 1]$, 则对任意 $x\in[-1, 1]$ 和 $\forall\ \varepsilon > 0$，当 n 充分大时，有

$$\left|f(x)-S_n^*(x)\right|\le\frac{\varepsilon}{\sqrt{n}}$$

定理： 在所有首项系数为 1 的 n 次多项式中，$\tilde{\mathrm{P}}_n(x)$ 在 $[-1, 1]$ 上与零的平方逼近误差最小，即

$$\left\|\tilde{\mathrm{P}}_n(x)\right\|_2=\min_{p\in\tilde{H}_n,\ \deg(p)=n}\left\|p(x)\right\|_2$$

其中 $\tilde{\mathrm{P}}_n(x)$ 是首项系数为 1 的 n 次 Legendre 多项式

举例

例：(P71例 7)

求 $f(x)=e^x$ 在 [-1, 1] 上的三次最佳平方逼近多项式

解： 直接计算可得

$$\left(P_0, f\right)=\int_{-1}^{1} e^x \ \mathrm{d}x \approx 2.3504$$

$$\left(P_1, f\right)=\int_{-1}^{1} xe^x \ \mathrm{d}x \approx 0.7358$$

$$\left(P_2, f\right)=\int_{-1}^{1} (1.5x^2-0.5)e^x \ \mathrm{d}x \approx 0.1431$$

$$\left(P_3, f\right)=\int_{-1}^{1} (2.5x^3-1.5x)e^x \ \mathrm{d}x \approx 0.02013$$

$$S_3^*(x) \approx 0.1761x^3 + 0.5367x^2 + 0.9979x + 0.9963$$

误差

$$\left\|\delta_3(x)\right\|_2^2 = \int_{-1}^{1} f^2(x)\ \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{3} \frac{2}{2k+1}\left(a_k^*\right)^2 \approx 0.0084$$

$$\left\|\delta_3(x)\right\|_\infty \approx 0.0112$$

一般区间上的最佳平方逼近多项式

设 $f(x) \in C[a, b]$，$\rho(x) = 1$，计算 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最佳平方逼近多项式

变量代换 $$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$$

$[a, b] \longrightarrow [-1, 1]$

$$f(x) \longrightarrow f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$$

$$\downarrow$$

$$S^*\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right) \longleftarrow S^*(t)$$

Chebyshev 级数

在广义 Fourier 级数中取 $\varphi_k = T_k$， $k = 0, 1, 2, \ldots$

$$\boxed{C^*(x) = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k^* T_k(x)}$$

其中 $a_k^* = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{T_k(x)\, f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} \cos k\theta\, f(\cos\theta)\, d\theta$

一致收敛性：若 $f''(x)$ 在 [-1, 1] 上分段连续，则

$$\boxed{f(x) = C^*(x)}$$

Chebyshev 级数

部分和 $$C_n^*(x) = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{n} a_k^* T_k(x)$$

误差 $$f(x) - C_n^*(x) \approx a_{n+1}^* T_{n+1}(x)$$

结论：$C_n^*(x)$ **可看作是** $f(x)$ **在 [-1, 1] 上的** n **次近似最佳一致逼近多项式。**

举例

例：(P72例 8)

求 $f(x)=e^x$ 在[-1, 1]上的 Chebyshev 级数部分和$C_3^*(x)$

解：

$$a_k^* = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{T_k(x)f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} e^{\cos(\theta)}\cos(k\theta)\,\mathrm{d}\theta$$

直接计算可得 $a_0^* = 2.5321,\ a_1^* = 1.1303,$

$$a_2^* = 0.27150,\ a_3^* = 0.044337$$

$$\boxed{C_3^*(x) = 0.17735x^3 + 0.5430x^2 + 0.9973x + 0.9945}$$

误差 $\left\| f(x) - C_3^*(x) \right\|_\infty \approx 0.00607$

3.4曲线拟合

给定数据：

x_0	x_1	x_2	…	x_m
y_0	y_1	y_2	…	y_m

在函数族 Φ 中寻找函数 $S^*(x)$，使得

$$\sum_{i=0}^{m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|^2=\min_{S(x)\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\left|S(x_i)-y_i\right|^2$$

$\Rightarrow$ 曲线拟合的最小二乘法

$$\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$$

$$m \gg n$$

其他方法

- 使得 $\max\limits_{0\le i\le m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|$ 最小

→ 求解复杂 ☹

- 使得 $\sum\limits_{k=0}^{m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|$ 最小

→ 不可导，求解困难 ☹

带权最小二乘

已知函数值表 (x_i , y_i)，在函数空间 Φ 中求 $S^*(x)$ ，使得

$$\sum_{i=0}^{m}\omega_i[S^*(x_i)-y_i]^2=\min_{s(x)\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\omega_i\left[S(x_i)-y_i\right]^2$$

其中 ω_i 是点 x_i 处的权

这个问题实质上是最佳平方逼近问题的离散形式。可以将求连续函数的最佳平方逼近函数的方法直接用于求解该问题。

最小二乘求解

对任意 $S(x) \in \Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$，可设

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

则求 $S^*(x)$ 等价于求下面的多元函数的最小值点

$$I(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[S(x_i) - y_i\right]^2$$

$$= \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i\right]^2$$

最小值点 $\Longleftrightarrow$ $\boxed{\dfrac{\partial I}{\partial a_k} = 0}$ $k = 0, 1, \ldots, n$

最小二乘求解

注：此处 f 是为了描述方便而引入的一个记号

定义离散带权内积：

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\,,\qquad (f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i f(x_i)\varphi_k(x_i)$$

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

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

法方程

$$d_k=(\varphi_k,f)$$

法方程存在唯一解 $\Longleftrightarrow$ $\det(G) \neq 0$

$\overset{?}{\Longleftrightarrow}$ $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 线性无关

定理： 如果 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n \in C[a, b]$ 的任意（非零）线性组合在点集 $x_0, x_1, \ldots, x_m$ 上至多只有 n 个不同的零点，则 G 非奇异，此时法方程存在唯一解。

- 上述定理中的条件称为 Haar 条件
- 若取 $\varphi_k = x^k$，则 $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ 满足 Haar 条件

设法方程的解为： $a_0^*, a_1^*, \ldots, a_n^*$, 则最小二乘解为： $S^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + \cdots + a_n^* \varphi_n(x)$

举例

例： 给定函数值表，求 $f(x)$ 的最小二乘拟合函数 $S^*(x)$

x_i	0.24	0.65	0.95	1.24	1.73	2.01	2.23	2.52	2.77	2.99
y_i	0.23	-0.26	-1.10	-0.45	0.27	0.10	-0.29	0.24	0.56	1.00

解： 在坐标平面上描出上表中的数据点，根据点的分布情况，选取基函数

$$\varphi_0(x)=\ln x,\quad \varphi_1(x)=\cos x,\quad \varphi_2(x)=e^x$$

得法方程

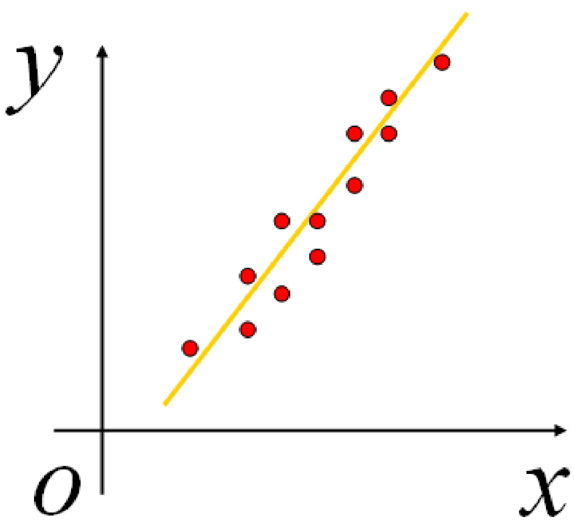
$$\begin{bmatrix} 6.7941 & -5.3475 & 63.259 \\ -5.3475 & 5.1084 & -49.009 \\ 63.259 & -49.009 & 1002.5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1.6131 \\ -2.3827 \\ 26.773 \end{bmatrix}$$

解得 $a=-1.0410,\quad b=-1.2613,\quad c=0.03073$

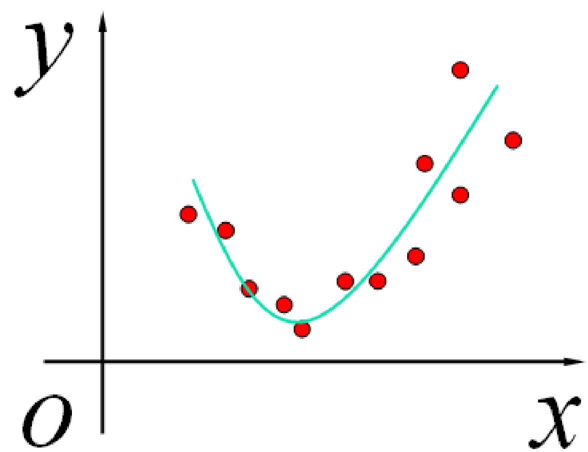
所以 $S^*(x)=-1.0410\ln x-1.2613\cos x+0.03073e^x$

举例

最小二乘问题中，如何选择数学模型很重要，即如何选取函数空间 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$，通常需要根据物理意义，或所给数据的分布情况来选取合适的数学模型。



$y = ax + b$



$y = ax^2 + bx + c$

多项式最小二乘曲线拟合

$\Phi = H_n = \mathrm{span}\{1, x, ..., x^n\}$, 即 $\varphi_i = x^i$, 则相应的法方程为

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i f_i \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i f_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n f_i \end{bmatrix}$$

此时 $S^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* x^k$ 为 $f(x)$ 的 n 次最小二乘拟合多项式

举例

例： 求下面数据表的二次最小二乘拟合多项式

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

解： 设二次拟合多项式为 $p_2(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$

得法方程

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix}$$

解得 $a_0=1.0052, a_1=0.8641, a_2=0.8437$

所以此组数据的二次最小二乘拟合多项式为

$$p_2(x)=1.0052+0.8641x+0.8437x^2$$

(1) 若题目中没有给出各点的权值 ω_i，默认为 $\omega_i=1$

(2) 该方法不适合 n 较大时的情形 （病态问题）

带权正交（离散情形）

给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 以及各点的权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$，如果函数族 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 满足

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

则称 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 正交

若 φ_k 是首项系数非零 k 次多项式，则为正交多项式族

用正交多项式做最小二乘

设多项式 $p_0, p_1, \ldots, p_n$ 关于点集 $x_0, x_1, \ldots, x_m$ 带权 $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_m$ 正交，则 $f(x)$ 在 H_n 中的最小二乘拟合多项式为

$$S^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + a_2^* p_2(x) + \cdots + a_n^* p_n(x)$$

其中 $a_k^* = \dfrac{(p_k, f)}{(p_k, p_k)}$ $\quad k = 0, 1, \ldots, n$

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

由离散带权内积导出的范数，不是 $C[a,b]$ 中的 2-范数

正交多项式的构造

给定 $\left(x_i, f(x_i)\right)$和权系数 ω_i，如何构造正交多项式族 $\left\{p_k(x)\right\}_{k=0}^{n}$

三项递推公式：

$$\begin{cases} p_0(x) = 1, \ \ p_1(x) = x - \alpha_0 \\ p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k) p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x) \end{cases}$$

$k = 1, \dots , n$-1

其中 $\begin{cases} \alpha_k = (x \ {}_k pp_k)/(p_k, p_k) \\ \beta_k = (p_k, p_k)/(p_{k-1}, p_{k-1}) \end{cases}$ $(\ k = 0, 1, \dots , n\text{-}1\ )$ $(\ k = 1, 2, \dots , n\text{-}1\ )$

可以证明：$\left\{p_k(x)\right\}_{k=0}^{n}$ 关于点集 $\left\{x_i\right\}_{i=0}^{m}$带权 $\left\{\omega_i\right\}_{i=0}^{m}$ 正交

注记

$$\begin{cases} p_0(x)=1, \quad p_1(x)=x-\alpha_0 \\ p_{k+1}(x)=(x-\alpha_k)p_k(x)-\beta_k p_{k-1}(x) \end{cases}$$

$$S^*(x)=a_0^* p_0(x)+a_1^* p_1(x)+a_2^* p_2(x)+\cdots+a_n^* p_n(x)$$

$$\boxed{a_k^*=\frac{(p_k,f)}{(p_k,p_k)}}$$

(1) 可以将构造正交多项式族、解法方程、形成拟合多项式穿插进行；

(2) n 可以事先给定，或在计算过程中根据误差来决定；

(3) 该方法非常适合编程实现，只用递推公式，并且当逼近次数增加时，只要将相应地增加程序中的循环次数即可。

(4) 该方法是目前多项式拟合最好的计算方法，有通用程序。

举例

例： 给定数据点及权系数，求二次最小二乘拟合多项式

x_i	0	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
y_i	1.00	1.75	1.96	2.19	2.44	2.71	3.00
ω_i	1	1	1	1	1	1	1

解： 通过直接计算，可得

$(p_0, p_0) = 7$，$(f, p_0) = 15.05$ ⇒ $a_0 = 2.15$，$\alpha_0 = 0.64$

⇒ $p_1(x) = x - 0.64$ ⇒ $a_1 = 1.98$，$\alpha_1 = 0.36$，$\beta_0 = 0.094$

⇒ $p_2(x) = x^2 - 0.98x + 0.12$ ⇒ $a_2 = 1.00$

⇒ $S_2^*(x) = a_0 p_0(x) + a_1 p_1(x) + a_2 p_2(x) = x^2 + x + 1$

Matlab 正交多项式最小二乘拟合函数：`polyfit(x,y,n)`

Matlab 曲线拟合工具箱：`cftool`

非线性最小二乘

有时需要非线性函数，如 $S(x)=ae^{bx}$，拟合给定的数据，这时建立的法方程是一个非线性方程组，这类拟合问题称为**非线性最小二乘拟合**。

例： 用指数函数 $y(x)=ae^{bx}$ 拟合下面的数据

x_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46

例： 用函数 $y(x)=a\sin bx$ 拟合表中的数据

x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
y_i	0.6	1.1	1.6	1.8	2.0	1.9	1.7	1.3

其他非线性拟合方法

- 对数拟合： $S(x)=a+b\ln x$

- 幂函数拟合： $S(x)=ax^{b}$

- 双曲拟合： $\dfrac{1}{S(x)}=a+\dfrac{b}{x}$

3.6 FFT快速傅里叶变换

$$F_n = (f_{jk}), \quad f_{jk} = \omega_n^{(j-1)(k-1)}$$

$$\omega_n^n = 1$$

$$\omega_n = \exp(-2\pi i/n) = \cos(2\pi/n) - i \cdot \sin(2\pi/n).$$

x的离散DFT为: $y = F_n x$

当 $n=4$ 时, $\omega_4=-\mathrm{i}$,

$$\boldsymbol{F}_4=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 1 & \omega_4 & \omega_4^2 & \omega_4^3\\ 1 & \omega_4^2 & \omega_4^4 & \omega_4^6\\ 1 & \omega_4^3 & \omega_4^6 & \omega_4^9\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 1 & -\mathrm{i} & -1 & \mathrm{i}\\ 1 & -1 & 1 & -1\\ 1 & \mathrm{i} & -1 & -\mathrm{i}\end{bmatrix}$$

- 当 n=8时

$$\boldsymbol{\omega = \omega_8}$$

$$\boldsymbol{F}_8 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \omega^3 & \omega^4 & \omega^5 & \omega^6 & \omega^7 \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & 1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 \\ 1 & \omega^3 & \omega^6 & \omega & \omega^4 & \omega^7 & \omega^2 & \omega^5 \\ 1 & \omega^4 & 1 & \omega^4 & 1 & \omega^4 & 1 & \omega^4 \\ 1 & \omega^5 & \omega^2 & \omega^7 & \omega^4 & \omega & \omega^6 & \omega^3 \\ 1 & \omega^6 & \omega^4 & \omega^2 & 1 & \omega^6 & \omega^4 & \omega^2 \\ 1 & \omega^7 & \omega^6 & \omega^5 & \omega^4 & \omega^3 & \omega^2 & \omega \end{bmatrix}$$

做个排列 $\mathbf{c} = [0 \quad 2 \quad 4 \quad 6 \quad 1 \quad 3 \quad 5 \quad 7]$

$$F_8(:,c) = \left[\begin{array}{cccc|cccc}
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & \omega & \omega^3 & \omega^5 & \omega^7 \\
1 & \omega^4 & 1 & \omega^4 & \omega^2 & \omega^6 & \omega^2 & \omega^6 \\
1 & \omega^6 & \omega^4 & \omega^2 & \omega^3 & \omega & \omega^7 & \omega^5 \\
\hline
1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\
1 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 & -\omega & -\omega^3 & -\omega^5 & -\omega^7 \\
1 & \omega^4 & 1 & \omega^4 & -\omega^2 & -\omega^6 & -\omega^2 & -\omega^6 \\
1 & \omega^6 & \omega^4 & \omega^2 & -\omega^3 & -\omega & -\omega^7 & -\omega^5
\end{array}\right]$$

$$\omega^2 = \omega_8^2 = \omega_8$$

$$F_8(:, c) = \left[\begin{array}{c|c} \boldsymbol{F}_4 & \boldsymbol{\Omega}_4 \boldsymbol{F}_4 \\ \hline \boldsymbol{F}_4 & -\boldsymbol{\Omega}_4 \boldsymbol{F}_4 \end{array}\right],$$

$$\boldsymbol{\Omega}_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_8^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_8^3 \end{bmatrix}.$$

$$
\boldsymbol{F}_8\boldsymbol{x} = F(:,c)x(c) = \left[\begin{array}{c|c} F_4 & \Omega_4 F_4 \\ \hline F_4 & -\Omega_4 F_4 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x(0:2:7) \\ \hline x(1:2:7) \end{array}\right]
$$

$$
= \left[\begin{array}{c|c} I & \Omega_4 \\ \hline I & -\Omega_4 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} F_4 x(0:2:7) \\ \hline F_4 x(1:2:7) \end{array}\right].
$$

计算 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{F}_8 \boldsymbol{x}$

$$\boldsymbol{y}_T = \boldsymbol{F}_4 \boldsymbol{x}(0:2:7)$$

$$\boldsymbol{y}_B = \boldsymbol{F}_4 \boldsymbol{x}(1:2:7)$$

$$y(0:3) = \boldsymbol{y}_T + \boldsymbol{d}.*\boldsymbol{y}_B$$

$$y(4:7) = \boldsymbol{y}_T - \boldsymbol{d}.*\boldsymbol{y}_B$$

$$d = \begin{bmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \\ \omega^3 \end{bmatrix}$$

对于 $n=2^t$, 可以循环执行上述步骤直到 $n=1$, 此时 $\boldsymbol{F}_1\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$:

function $y=\mathrm{FFT}(x,n)$

if $n=1$

$y=x$

else

$m=n/2; \omega=\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}/n}$

$y_T=\mathrm{FFT}(x(0:2:n),m); y_B=\mathrm{FFT}(x(1:2:n),m)$

$d=[1,\omega,\cdots,\omega^{m-1}]^{\mathrm{T}}; z=d.*y_B$

$$y=\begin{bmatrix} y_{\mathrm{T}}+z \\ y_{\mathrm{T}}-z \end{bmatrix}$$

end

计算量是O(n log n)

$$F_n^{-1} = \frac{1}{n} F_n^{\mathrm{H}} = \frac{1}{n} \bar{F}_n$$

MATLA B命令 fft, ifft