

第五章 曲线拟合和函数逼近

最小二乘原理和多项式拟合

- 最小二乘原理
- 多项式拟合

一般的最小二乘拟合

正交多项式曲线拟合

函数逼近

最小二乘原理

例：已知一组实验数据

x_i	-1	0	1	2
y_i	-0.9	1	3	5.1

如何建立 x 与 y 之间的关系？

观察得知两个变量之间大约成线性关系，我们就用直线方程来描述，设 $P_1(x) = ax + b$ ，如何来确定系数 a, b ？

若将系数直接代入方程 $P_1(x) = ax + b$ ，则有

$$\begin{cases} -a + b = -0.9 \\ 0 \times a + b = 1 \\ a + b = 3 \\ 2a + b = 5.1 \end{cases}$$

这是一个矛盾方程组， $P_1(x) = ax + b$ 一般不会通过所有点，那么就会有误差 $r_i = P_1(x_i) - y_i$ ，那么将误差 r_i 的大小作为衡量系数 a, b 好坏的标志。

常用的有最小二乘原理，即使得误差的平方和 $\sum r_i^2$ 最小，也就是使得 $\|r\|_2$ 最小。

在本例中记 $Q(a, b) = \sum_{i=0}^3 r_i^2 = \sum_{i=0}^3 (ax_i + b - y_i)^2$ ，要求 a, b 使 $Q(a, b)$ 最小。根据

求极值的思想，则需满足

$$\begin{cases} \frac{\partial Q(a, b)}{\partial a} = 12a + 4b - 28.2 = 0 \\ \frac{\partial Q(a, b)}{\partial b} = 4a + 8b - 16.4 = 0 \end{cases}$$

求解线性方程组有 $a = 2, b = 1.05$ 。

3

最小二乘原理

曲线拟合问题：对给定的数据 (x_i, y_i) ($i = 0, 1, \dots, m$)，在取定的函数类 Φ 中，求函数 $P(x) \in \Phi$ ，使偏差 $r_i = P(x_i) - y_i$ ，($i = 0, 1, \dots, m$) 的平方和最小，即

$$\sum_{i=0}^m r_i^2 = \sum_{i=0}^m (P(x_i) - y_i)^2 = \min$$

这就是最小二乘曲线拟合问题。这样的 $P(x)$ 称为最小二乘拟合函数或者最小二乘解，求最小二乘拟合函数 $P(x)$ 的方法叫做曲线拟合的最小二乘法。

多项式拟合

给定实验数据

x_i	x_0	x_1	\dots	x_m
y_i	y_0	y_1	\dots	y_m

求 n 次多项式 $P_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ ($n \leq m$)，使得

$$Q = \sum_{i=0}^m (P_n(x_i) - y_i)^2 = \min$$

将拟合函数取为多项式的曲线拟合问题称为**多项式拟合问题**。拟合曲线 $P_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ 也称**最小二乘拟合多项式**。

问题：如何求解系数 a_0, a_1, \dots, a_n ？

$Q(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^m (a_0 + a_1x_i + \dots + a_nx_i^n - y_i)^2$ ，要使 Q 最小，只需 $\frac{\partial Q}{\partial a_j} = 0$ ，

$j = 0, \dots, n$ ，即

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=0}^m (a_0 + a_1x_i + \dots + a_nx_i^n - y_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=0}^m (a_0 + a_1x_i + \dots + a_nx_i^n - y_i)x_i = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial a_n} = 2 \sum_{i=0}^m (a_0 + a_1x_i + \dots + a_nx_i^n - y_i)x_i^n = 0 \end{cases}$$

6

可以化为如下的法方程组或正则方程组：

$$\begin{pmatrix} \sum 1 & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \sum x_i^{n+2} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^n y_i \end{pmatrix}.$$

思考：若记矛盾线性方程组对应的系数矩阵为 A ，
法方程组对应的系数矩阵为 B ，
那么， A, B 有什么关系？

7

例：给定以下的数，用最小二乘法求一次拟合多项式。

x_i	-1	0	1	2
y_i	-0.9	1	3	5.1

解：设一次拟合多项式为 $y = a_0 + a_1 x$ ，

由于 $\sum_{i=0}^3 1 = 4, \sum_{i=0}^3 x_i = 2, \sum_{i=0}^3 x_i^2 = 6, \sum_{i=0}^3 y_i = 8.2, \sum_{i=0}^3 x_i y_i = 14.1$,

$$\text{对应的法方程组为 } \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.2 \\ 14.1 \end{pmatrix}$$

得到 $a_0 = 1.05, a_1 = 2$ ，

则对应的一次拟合多项式为 $y = 1.05 + 2x$ 。

解二：设一次拟合多项式为 $y = a_0 + a_1 x$ ，

$$G = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} -0.9 \\ 1 \\ 3 \\ 5.1 \end{pmatrix}$$

对应的法方程组为 $G^T G a = G^T y$ ，即为：

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.2 \\ 14.1 \end{pmatrix}$$

得到 $a_0 = 1.05, a_1 = 2$ ，

拟合多项式为： $y = 1.05 + 2x$ 。

线性最小二乘拟合的一般形式

把多项式拟合问题做两个方面的推广：

1. 函数系由多项式空间 $\{x^i\} \rightarrow \{\varphi_i(x)\}$ 线性无关
2. 加权系数 $\omega_i (i = 0, 1, \dots, m)$

设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 为 $n+1$ 线性无关的函数，而

$$\Phi = \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\} (n < m).$$

对给定的一组数据 $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^m$ ，在 Φ 中求函数 $P(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x)$ ，使得平方和

$$Q = \sum_{i=0}^m \omega_i (P(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^m \omega_i \left[\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) - y_i \right]^2 = \min.$$

10

问题如何求解系数 a_0, a_1, \dots, a_n ？

要使 Q 最小，只需 $\frac{\partial Q}{\partial a_j} = 0$ ，即 $\frac{\partial Q}{\partial a_j} = 2 \sum_{i=0}^m \omega_i \left\{ \left[\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) - y_i \right] \varphi_j(x_i) \right\} = 0$

$$\text{即 } \sum_{k=0}^n \left[\sum_{i=0}^m \omega_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) \right] a_k = \sum_{i=0}^m \omega_i \varphi_j(x_i) y_i \quad j = 0, 1, \dots, n$$

对应的法方程可以写为

$$\begin{pmatrix} \sum \omega_i \varphi_0^2(x_i) & \sum \omega_i \varphi_0(x_i) \varphi_1(x_i) & \cdots & \sum \omega_i \varphi_0(x_i) \varphi_n(x_i) \\ \sum \omega_i \varphi_0(x_i) \varphi_1(x_i) & \sum \omega_i \varphi_1^2(x_i) & \cdots & \sum \omega_i \varphi_1(x_i) \varphi_n(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum \omega_i \varphi_0(x_i) \varphi_n(x_i) & \sum \omega_i \varphi_1(x_i) \varphi_n(x_i) & \cdots & \sum \omega_i \varphi_n^2(x_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum \omega_i \varphi_0(x_i) y_i \\ \sum \omega_i \varphi_1(x_i) y_i \\ \vdots \\ \sum \omega_i \varphi_n(x_i) y_i \end{pmatrix}$$

注：多项式拟合实际上是选取 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 为 $1, x, \dots, x^n$ 。

11

非线性最小二乘拟合

可化为线性拟合问题的常见函数类型

$y = ae^{b/x} (a > 0)$	设 $\bar{y} = \ln y, \bar{x} = \frac{1}{x}$	$\bar{y} = \bar{a} + b\bar{x} (\bar{a} = \ln a)$
$y = 1/(a + be^{-x}) (a > 0)$	设 $\bar{x} = e^{-x}, \bar{y} = 1/y$	$\bar{y} = a + b\bar{x}$
$y = 1/(ax + b)$	设 $\bar{y} = 1/y$	$\bar{y} = ax + b$
$y = x/(ax + b)$	设 $\bar{y} = 1/y, \bar{x} = 1/x$	$\bar{y} = a + b\bar{x}$
$y^2 = ax^2 + bx + c$	设 $\bar{y} = y^2$	$\bar{y} = ax^2 + bx + c$
$y = x/(ax^2 + bx + c)$	设 $\bar{y} = \frac{x}{y}$	$\bar{y} = ax^2 + bx + c$
$y = a + \frac{b}{x} + \frac{c}{x^2}$	设 $\bar{x} = 1/x$	$y = a + b\bar{x} + c\bar{x}^2$

12

例. 给定数据如下表, 用最小二乘法求形如 $y = ae^{bx}$ 的经验公式。

x	2.2	2.7	3.5	4.1	4.8
y	65	60	53	50	46

解: $y = ae^{bx} \Rightarrow \ln y = \ln a + bx$, 记 $\bar{a} = \ln a$, $\bar{y} = \bar{a} + bx$,

x	2.2	2.7	3.5	4.1	4.8
y	65	60	53	50	46
$\ln y$	4.1744	4.0943	3.9703	3.9120	3.8286

法方程组为 $\begin{pmatrix} 5 & 17.3 \\ 17.3 & 64.223 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 19.9797 \\ 68.5512 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{a} \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4.4538 \\ -0.1323 \end{pmatrix}$

故 $a = e^{\bar{a}} = 85.9527$, $b = -0.1323$.

正交多项式曲线拟合

定义: 设有 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$, 若其在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 上满足

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega_i \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i) = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ \|\varphi_j\|_2^2, & j = k \end{cases}$$

则称 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\}$ 为点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 上带权 ω_i 的**离散正交函数系**。

注: 若 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\} = \{P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)\}$, $P_k(x)$ 为 k 次多项式, 则称 $\{P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)\}$ 为点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 上带权 ω_i 的**离散正交多项式系**。

在离散正交函数系条件下, 法方程组对应的系数矩阵就化为对角阵, 方程组求解非常容易。因此, 问题化为如何构造正交函数系, 而正交多项式系是最简单的正交函数系。

正交多项式的构造

假设已知节点 x_0, x_1, \dots, x_m , 及权重 ω_i , 可用递推公式给出带权 ω_i 的正交多项式序列 $\{P_i(x)\}_{i=0}^n$:

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = (x - \alpha_1)P_0(x) \\ P_{k+1}(x) = (x - \alpha_{k+1})P_k(x) - \beta_k P_{k-1}(x) \quad k=1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

由 $(P_{k+1}, P_k) = 0 \Rightarrow \alpha_{k+1} = \frac{(xP_k, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{\sum_{i=0}^m \omega_i x_i P_k^2(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega_i P_k^2(x_i)}, \quad k=0, 1, 2, \dots, n-1$

由 $(P_{k+1}, P_{k-1}) = 0 \Rightarrow \beta_k = \frac{(xP_k, P_{k-1})}{(P_{k-1}, P_{k-1})} = \frac{\sum_{i=0}^m \omega_i P_k^2(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega_i P_{k-1}^2(x_i)}, \quad k=1, 2, \dots, n-1$

例. 试构造点集 $\{-1, -0.75, -0.5, -0.25, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1\}$ 上的离散正交多项式系 $\{P_0(x), P_1(x), P_2(x)\}$ 。

利用所求的离散正交多项式系, 对下表中的数据求二次拟合多项式。

x	-1	-0.75	-0.5	-0.25	0	0.25	0.5	0.75	1
y	-0.2209	0.3295	0.8826	1.4392	2.0003	2.5645	3.1334	3.7061	4.2836

解: $P_0(x) = 1$

$P_1(x) = x - \alpha_1$, 其中 $\alpha_1 = \frac{\sum x_i P_0^2(x_i)}{\sum P_0^2(x_i)} = \frac{\sum x_i}{\sum 1} = 0$, 故 $P_1(x) = x$

$P_2(x) = (x - \alpha_2)P_1(x) - \beta_1$, 其中 $\alpha_2 = \frac{\sum x_i P_1^2(x_i)}{\sum P_1^2(x_i)} = \frac{\sum x_i^3}{\sum x_i^2} = 0$

$\beta_1 = \frac{\sum P_1^2(x_i)}{\sum P_0^2(x_i)} = \frac{\sum x_i^2}{\sum 1} = \frac{5}{12}$

故 $P_2(x) = x^2 - \frac{5}{12}$

解: (2) 由于

$$a_0 = \frac{(y, P_0)}{(P_0, P_0)} = 2.0131$$

$$a_1 = \frac{(y, P_1)}{(P_1, P_1)} = 2.2516$$

$$a_2 = \frac{(y, P_2)}{(P_2, P_2)} = 0.0313$$

二次拟合多项式为:

$$a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + a_2 P_2(x) = 2.0131 + 2.2516x + 0.0313(x^2 - 5/12)$$

函数逼近

在已知一个函数 $y = f(x)$ 情况下, 寻求一个简单、易于计算的函数来代替 $f(x)$, 以便用此简单函数来代替求 $f(x)$ 的值。如何度量两个函数的近似程度, 我们首先需要给出以下定义:

定义: 设 $f(x) \in C[a, b]$, 其范数为

$$\|f\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|,$$

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

注: 2 范数可以推广到带权 2 范数: $\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx}$, 这里 $\rho(x)$ 称为权函数。

函数逼近目的

函数逼近目的:

对于给定的函数 $y = f(x)$, 希望在 $\text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 中找一个

函数 $P(x) = a_0\varphi_0 + a_1\varphi_1 + \dots + a_n\varphi_n$, 使得

$$1. \|P(x) - f(x)\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |P(x) - f(x)| = \min,$$

$P(x)$ 称为 $f(x)$ 的最佳一致逼近;

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

$P(x)$ 称为 $f(x)$ 的最佳平方逼近。

19

最佳平方逼近

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

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

称为函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上的内积。

最佳平方逼近:

在 $\text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 中找一个函数 $P(x) = a_0\varphi_0 + a_1\varphi_1 + \dots + a_n\varphi_n$,

使得

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

$$\Leftrightarrow Q(a_0, a_1, \dots, a_n) := \int_a^b \rho(x)(P(x) - f(x))^2 dx = \min$$

这是求误差的极小值问题,

$$\Leftrightarrow \frac{\partial Q}{\partial a_j} = 2 \int_a^b \rho(x) \left(\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k - f(x) \right) \varphi_j dx = 0, \quad \forall j = 0, 1, \dots, n.$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=0}^n a_k \int_a^b \rho(x) \varphi_k \varphi_j dx = \int_a^b \rho(x) f(x) \varphi_j dx, \quad \forall j = 0, 1, \dots, n.$$

$$\Leftrightarrow \sum_{k=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_k = (f, \varphi_j), \quad \forall j = 0, 1, \dots, n.$$

对应线性方程组为

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \dots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{pmatrix}$$

21

例: 设 $f(x) = |x| \in C[-1, 1]$, 试求 $f(x)$ 在 $\Phi = \text{span}\{1, x^2, x^4\}$ 上的最佳平方逼近函数。

$$\text{解: 法方程组为 } \begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_0, \varphi_2) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_2) \\ (\varphi_2, \varphi_0) & (\varphi_2, \varphi_1) & (\varphi_2, \varphi_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ (f, \varphi_2) \end{pmatrix}$$

$$\text{即 } \begin{pmatrix} \int_{-1}^1 1 dx & \int_{-1}^1 x^2 dx & \int_{-1}^1 x^4 dx \\ \int_{-1}^1 x^2 dx & \int_{-1}^1 x^4 dx & \int_{-1}^1 x^6 dx \\ \int_{-1}^1 x^4 dx & \int_{-1}^1 x^6 dx & \int_{-1}^1 x^8 dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_{-1}^1 |x| dx \\ \int_{-1}^1 |x| x^2 dx \\ \int_{-1}^1 |x| x^4 dx \end{pmatrix}$$

$$\text{计算得到 } \begin{pmatrix} 2 & \frac{2}{3} & \frac{2}{5} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{5} & \frac{2}{7} \\ \frac{2}{5} & \frac{2}{7} & \frac{2}{9} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a_0 = 0.1171875 \\ a_1 = 1.640625 \\ a_2 = -0.8203125 \end{cases}$$

最佳平方逼近函数为

$$P(x) = 0.1171875 + 1.640625x^2 - 0.8203125x^4$$

例: 设 $f(x) \in C[0, 1]$, $\rho(x) = 1$, 如果在 $\text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$ 上作逼近, 则

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

对应的法方程系数矩阵为

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots & \frac{1}{n+1} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \dots & \frac{1}{n+2} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \dots & \frac{1}{n+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n+1} & \frac{1}{n+2} & \frac{1}{n+3} & \dots & \frac{1}{2n+1} \end{pmatrix},$$

其为 Hilbert 矩阵, 为高度病态的矩阵。因此, 若采用正交多项式作基, 可克服病态问题求解。

24

定义: 若函数族 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 满足

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \int_a^b \rho(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) dx = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ \|\varphi_j\|_2^2, & j = k \end{cases}$$

则称 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的**正交函数族**。

若 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交函数族, 法方程化为

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \dots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{pmatrix}$$

此时, $a_j = \frac{(f, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)}$, 代入 $P(x)$ 即可得到 $f(x)$ 最佳平方逼近。

25

正交多项式的构造

定义: 若 $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\} = \{P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)\}$, $P_k(x)$ 为 k 次多项式, 则称 $\{P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)\}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的**正交多项式系**。

正交多项式构造:

$$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = (x - \alpha_1)P_0(x) \\ P_{k+1}(x) = (x - \alpha_{k+1})P_k(x) - \beta_k P_{k-1}(x) \quad k = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

$$\text{由 } (P_{k+1}, P_k) = 0 \Rightarrow \alpha_{k+1} = \frac{(xP_k, P_k)}{(P_k, P_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$\text{由 } (P_{k+1}, P_{k-1}) = 0 \Rightarrow \beta_k = \frac{(xP_k, P_{k-1})}{(P_{k-1}, P_{k-1})} = \frac{(P_k, P_k)}{(P_{k-1}, P_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \dots, n-1。$$

26

几类常见的正交多项式系

一、Legendre 勒让德多项式 (区间 $[-1, 1]$, 权重 $\rho(x) = 1$)

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$P_0(x) = 1$$

$$\text{递推式: } P_1(x) = x$$

$$P_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} [(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)]$$

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

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

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

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

...

注: 所有首项系数为 1 的 n 次多项式中, Legendre 多项式 $\frac{2^n (n!)^2}{(2n)!} P_n(x)$ 对 0 的平方偏差最小。

27

几类常见的正交多项式系

二、Chebyshev 切比雪夫多项式 (区间 $[-1, 1]$, 权重 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$)

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$T_0(x) = 1$$

$$\text{递推式: } T_1(x) = x$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

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

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

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

...

注: 所有首项系数为 1 的 n 次多项式中, Chebyshev 多项式 $\frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$ 对 0 的一致偏差最小。

28

特殊的最佳平方逼近问题

例. 求多项式 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[-1, 1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式。

解. 由题意, 假设所求的最佳平方逼近多项式为 $p_2^*(x)$, 则 $f(x) - p_2^*(x) = 2 \times \frac{2}{5} P_3(x)$

$$\text{故 } p_2^*(x) = f(x) - 2 \times \frac{2}{5} P_3(x) = x^2 + \frac{16}{5}x - 1$$

例. 求多项式 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[0, 1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式。

解. 令 $x = \frac{t+1}{2}$, $t = 2x - 1$, 则 $f(x) = \frac{1}{4}t^3 + t^2 + \frac{9}{4}t + \frac{1}{2} = g(t)$

问题等价于求 $g(t)$ 在 $[-1, 1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式,

$$g(t) - p_2^*(t) = \frac{1}{4} \times \frac{2}{5} P_3(t)$$

$$p_2^*(t) = g(t) - \frac{1}{10} P_3(t) = t^2 + \frac{12}{5}t + \frac{1}{2}$$

$$\text{则 } p_2^*(x) = (2x-1)^2 + \frac{12}{5}(2x-1) + \frac{1}{2} = 4x^2 + \frac{4}{5}x - \frac{9}{10}$$

29

特殊的最佳一致逼近问题

对于给定的函数 $y = f(x)$, 希望在 $\text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 中找一个函数

$$P(x) = a_0\varphi_0 + a_1\varphi_1 + \dots + a_n\varphi_n, \text{ 使得 } \|f(x) - P(x)\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P(x)| = \min。$$

一般情况下一致逼近函数不好找到, 这里我们将利用 Chebyshev 多项式性质求一些特殊的最佳一致逼近多项式问题。

30

应用1：插值余项极小化

若插值区间为 $[-1,1]$ ，可利用切比雪夫多项式 $T_n(x)$ ，使 $n-1$ 次插值多项式的余项极小化：

$$w_n^*(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x),$$

取 $T_n(x)$ 的零点 $x_i = \cos \frac{2k-1}{2n} \pi$ ， $i=1,2,\cdots,n$ ，($x_i \in [-1,1]$)作为插值节点，所构造的 $n-1$ 次插值多项式可以作为近似的最佳一致逼近多项式。

若插值区间不为 $[-1,1]$ ，插值区间为 $[a,b]$ ，可以先把 $[a,b]$ 做变换到 $[-1,1]$ ，令 $x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t$ ，对 t 来说，变化区间是 $[-1,1]$ 。

$$w_n^*(x) = w_n^*\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) = w_n^*(t).$$

31

应用2：多项式降次

对于高次多项式，可以用低一次的最佳一致逼近多项式来代替它。

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： $p_2^*(x)$ 应该满足 $f(x) - p_2^*(x) = 2\left(\frac{1}{2^{3-1}} T_3(x)\right) = \frac{1}{2}(4x^3 - 3x)$ ，

$$\text{故 } p_2^*(x) = f(x) - \frac{1}{2}(4x^3 - 3x) = x^2 + \frac{7}{2}x - 1.$$

32

应用2：多项式降次

例：求 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[0,1]$ 上的二次最佳一致逼近多项式。

解： $x = \frac{t+1}{2}$ ， $t = 2x - 1$ ，

$$\text{则 } f(x) = \frac{1}{4}t^3 + t^2 + \frac{9}{4}t + \frac{1}{2} = g(t)$$

$$g(t) - p_2^*(t) = \frac{1}{4} \frac{1}{2^{3-1}} T_3(t) = \frac{1}{16}(4t^3 - 3t),$$

$$\text{故 } p_2^*(t) = g(t) - \frac{1}{16}(4t^3 - 3t) = t^2 + \frac{39}{16}t + \frac{1}{2},$$

$$\text{对应有 } p_2^*(x) = (2x-1)^2 + \frac{39}{16}(2x-1) + \frac{1}{2} = 4x^2 + \frac{7}{8}x - \frac{15}{16}.$$

33