§3.1 函数逼近的基本概念

3.1.1 函数逼近与函数空间

3.1.2 范数与赋范线性空间

3.1.3 内积与内积空间

内容： 函数逼近的基本思想；函数空间，赋范线性空间，内积空间的基本概念。

重点： 函数空间与函数逼近的基本概念与思想。

难点： 函数逼近与各类空间概念的理解及它们之间的关系。

3.1.1 函数逼近与函数空间

问题 1. 数值计算中经常要计算函数值，如计算机中计算基本初等函数及其他特殊函数;

2. 当函数只在有限点集上给定函数值，要在包含该点集的区间上给出函数的简单表达式。

这些都涉及到在区间 $[a,b]$ 上用简单函数逼近已知复杂函数的问题，这就是函数逼近问题。

实质上，插值法就是函数逼近问题的一种。

本章讨论的函数逼近，是指“对函数类A 中给定的函数 $f(x)$，记作$f(x)\in A$，要在另一类简单的便于计算的函数类 B中求函数 $p(x)\in B$，使$p(x)$与 $f(x)$的误差在某种度量意义下最小”。

函数类 A通常是区间 $[a,b]$上的连续函数，记作 $C[a,b]$，称为连续函数空间。

函数类 B通常为 n次多项式，有理函数或分段低次多项式等。

对次数不超过 n（n为正整数）的实系数多项式全体，按通常多项式与多项式加法及数与多项式乘法也构成数域 R上一个线性空间，用 H_n表示，称为多项多项式空间。

所有定义在 $[a,b]$上的连续函数集合，按函数加法和数与函数乘法构成数域 R上的线性空间，记作$C[a,b]$。

类似地，记 $C^p[a,b]$为具有 p 阶连续导数的函数空间。

定义1 设集合 S 是数域 P 上的线性空间，元素 $x_1,\cdots,x_n\in S$, 如果存在不全为零的数 $\alpha_1,\cdots,\alpha_n\in P$ 使得

$$\alpha_1 x_1+\cdots+\alpha_n x_n=0 \qquad (1.1)$$

则称 $x_1,\cdots,x_n$ **线性相关**。

否则，若等式(1.1)只对 $\alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_n=0$ 成立，则称 $x_1,\cdots,x_n$ **线性无关**。

若线性空间 S 是由 n 个线性无关元素 $x_1,\cdots,x_n$ 生成的，即对 $\forall x \in S$ 都有

$$x = \alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n$$

则 $x_1,\cdots,x_n$ 称为空间 S 的一组基，记为

$$S = span\{x_1,\cdots,x_n\}$$

并称空间 S 为 n 维空间，系数 $\alpha_1,\cdots,\alpha_n$ 称为 x 在基 $x_1,\cdots,x_n$ 下的坐标，记作 $(\alpha_1,\cdots,\alpha_n)$.

如果 S 中有无限个线性无关元素 $x_1,\cdots,x_n,\cdots$, 则称 S 为无限维线性空间。

考察次数不超过 n 次的多项式集合 H_n，其元素 $p(x) \in H_n$ 表示为

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n \qquad (1.2)$$

它由 $n+1$ 个系数 $(a_0, a_1, \cdots, a_n)$ 惟一确定。

$1, x, \cdots, x^n$ 是线性无关的，它是 H_n 的一组基，故

$$H_n = span\{1, x, \cdots, x^n\}$$

且 $(a_0, a_1, \cdots, a_n)$ 是 $p(x)$ 的坐标向量，H_n 是 $n+1$ 维的。

由于$C[a,b]$是无限维的，因此它的任一元素，即连续函数$f(x)\in C[a,b]$，都不能用有限个线性无关的函数表示。但是魏尔斯特拉斯定理告诉我们，可以用有限维的 $p(x)\in H_n$ 进行任意逼近。

定理1（魏尔斯特拉斯定理） 设$f(x)\in C[a,b]$，则对任何$\varepsilon>0$，总存在一个代数多项式 $p(x)$，使

$$\|f(x)-p(x)\|_\infty<\varepsilon$$

在 $[a,b]$ 上一致成立。

伯恩斯坦于1912年给出了一种构造性证明，同时还由函数整体逼近的特性构造出伯恩斯坦多项式:

$$B_n(f,x)=\sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right)P_k(x) \qquad (1.3)$$

其中

$$P_k(x)=\binom{n}{k}x^k(1-x)^{n-k}$$

它具有性质:

（1）$\lim\limits_{n\to\infty} B_n(f,x)=f(x)$ 在 $[0,1]$ 上一致成立;

（2）若 $f(x)$ 在 $[0,1]$ 上 m 阶导数连续，则

$$\lim_{n\to\infty} B_n^{(m)}(f,x) = f^{(m)}(x)$$

（3）若 $|f(x)| \le \delta$ 对任意 $x \in [0,1]$ 成立，则

$B_n(f,x)$ 有界，即多项式是稳定的。

伯恩斯坦多项式与拉格朗日多项式形式类似，但逼近性质要好得多。不过它的收敛速度比三次样条逼近差太多，所以实际中很少被使用。

前面是用 H_n中的函数来进行逼近。事实上，可用任一组在$C[a,b]$上线性无关的函数集合 $\{\phi_i(x)\}_{i=0}^{n}$ 来逼近 $f(x)\in C[a,b]$。此时元素

$$\phi(x)\in\Phi=span\{\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)\}\subset C[a,b]$$

可表示为

$$\phi(x)=a_0\phi_0(x)+a_1\phi_1(x)+\cdots+a_n\phi_n(x) \qquad (1.5)$$

函数逼近问题就是对任意 $f(x)\in C[a,b]$，在子空间 Φ中找一个元素$\phi^*(x)\in\Phi$， 使 $f(x)-\phi^*(x)$ 在某种意义下最小。

3.1.2 范数与赋范线性空间

定义2 设 S 为线性空间, $x \in S$, 若存在惟一实数 $\|\cdot\|$ 满足条件:

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

（2）$\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \quad \alpha \in \mathbf{R}$; (齐次性)

（3）$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \quad x, y \in S$. (三角不等式)

则称 $\|\cdot\|$ 为线性空间 S 上的范数, S 与 $\|\cdot\|$ 一起称为赋范线性空间，记为 X.

例如，在 $\mathbf{R}^n$上的向量 $x \in (x_1, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^n$,三种常用范数为

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} |x_i|,$$ 称为∞范数或最大范数

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|,$$ 称为1-范数

$$\|x\|_2 = (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)^{\frac{1}{2}},$$ 称为2-范数

类似地，对连续函数空间 $C[a,b]$ 中的元素 $f(x)$

三种常用范数如下:

$$\|f\|_\infty = \max_{a\le x\le b}|f(x)|,$$ 称为 ∞ 范数

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)|dx,$$ 称为1-范数

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

3.1.3 内积与内积空间

定义3 X 是数域K(R或C) 上的线性空间，对 $\forall u,v\in X$,
有K中一个数与之对应，记为 (u,v)，满足以下条件:

(1) $(u,v)=\overline{(v,u)},\quad \forall u,v\in X;$

(2) $(\alpha u,v)=\alpha(u,v),\quad \alpha\in \mathrm{K},\ u,v\in X;$

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

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

则称 (u,v)为X上 u与 v的内积。

定义了内积的线性空间称为**内积空间**。

例如，线性代数中，$\mathbf{R}^n$中两个向量$x \in (x_1, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$，

$y \in (y_1, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$的内积定义为:

$$(x, y) = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

这样 R^n就成为一个内积空间。

定义中（1）的右端 $\overline{(u,v)}$称为 (u,v)的共轭。

当K为实数域R时，$(u,v) = (v,u)$ 。

如果$(u,v) = 0$，则称 u与 v正交（垂直）。

定理2 设X为一个内积空间，$u_1, u_2, \cdots, u_n \in X$，

矩阵

$$G = \begin{bmatrix} (u_1,u_1) & (u_2,u_1) & \cdots & (u_n,u_1) \\ (u_1,u_2) & (u_2,u_2) & \cdots & (u_n,u_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (u_1,u_n) & (u_2,u_n) & \cdots & (u_n,u_n) \end{bmatrix} \qquad (1.7)$$

称为**格拉姆(Gram)矩阵**。

该矩阵非奇异的充分必要条件是$u_1, u_2, \cdots, u_n$线性无关。

定义4 设$[a,b]$是有限或无限区间，在其上的非负函数$\rho(x)$满足条件:

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

（2） 对$[a,b]$上的非负连续函数$g(x)$，如果

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

则$g(x)\equiv 0$, 并称$\rho(x)$为$[a,b]$上的一个**权函数**。

2. 内积

定义 6.9 设 $f(x),g(x)\in c[a,b]$，$\rho(x)$是$[a,b]$上的权函数，则称

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

为函数 $f(x)$与 $g(x)$在$[a,b]$上以 $\rho(x)$为权函数的内积.

内积有如下性质：

(1) $(f,f)\geqslant 0$，当且仅当 $f\equiv 0$ 时，$(f,f)=0$；

(2) $(f,g)=(g,f)$；

(3) $(c_1f_1+c_2f_2,g)=c_1(f_1,g)+c_2(f_2,g)$，$(c_1,c_2\in R)$

§3.2 连续函数的最佳逼近

3.2.1 正交多项式

3.2.2 最佳一致逼近

3.2.3 最佳平方逼近

内容：正交多项式的概念及性质；正交多项式的构造；常用正交多项式；最佳一致逼近的基本概念；最佳平方逼近的基本概念及算法

重点：正交多项式与最佳逼近的相关概念及算法。

难点：正交多项式的构造；最佳平方逼近多项式的求得。

3.2.1 正交多项式

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

且满足

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0 \qquad (2.1)$$

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

若函数族 $\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x),\cdots$满足关系：

$$(\phi_j,\phi_k)=\int_a^b \rho(x)\phi_j(x)\phi_k(x)\mathrm{d}x=\begin{cases} 0, & j\neq k \\ A_k>0, & j=k \end{cases} \qquad (2.2)$$

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

若 $A_k\equiv 1$，则称之为标准正交函数族。

例如，三角函数族

$$1,\cos x,\sin x,\cos 2x,\sin 2x,\cdots$$

就是在区间$[-\pi,\pi]$上的正交函数族。

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

只要给定区间 $[a,b]$ 及权函数 $\rho(x)$，就可由一族线性无关的幂函数 $\{1, x, \cdots, x^n, \cdots\}$, 构造一个出正交多项式序列 $\{\phi_n(x)\}_0^\infty$：

$$\phi_0(x) = 1,$$

$$\phi_n(x) = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x^n, \phi_j(x))}{(\phi_j(x), \phi_j(x))} \phi_j(x)$$

$$(n = 1, 2, \cdots) \qquad (2.3)$$

得到的正交多项式序列有以下性质:

（1） $\phi_n(x)$是具有最高次项系数为1的 n次多项式;

（2）任何 n次多项式$P_n(x)\in H_n$均可表示为 $\phi_0(x)$, $\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$的线性组合;

（3） 当 $k\neq j$时，$(\phi_j(x),\phi_k(x))=0$, 且 $\phi_k(x)$与任一次数小于 k的多项式正交。

（4） 成立递推关系

$$\phi_{n+1}(x)=(x-\alpha_n)\phi_n(x)-\beta_n\phi_{n-1}(x),\quad (n=0,1,\cdots) \qquad (2.4)$$

其中

$$\phi_0(x)=1,\ \phi_{-1}(x)=0,\quad \alpha_n=(x\phi_n(x),\phi_n(x))/(\phi_n(x),\phi_n(x)),$$

$$\beta_n=(\phi_n(x),\phi_n(x))/(\phi_{n-1}(x),\phi_{n-1}(x)),\quad (x\phi_n(x),\phi_n(x))=\int_a^b x\phi_n^2(x)\rho(x)\mathrm{d}x.$$

（5） 设$\{\phi_n(x)\}_0^\infty$是在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交多项式序列，则$\phi_n(x)(n\geq 1)$的n个根都是在区间(a,b)内的单重实根。

常用正交多项式:

当区间为$[-1,1]$，权函数 $\rho(x)\equiv 1$时，由$\{1,x,\cdots,x^n,\cdots\}$正交化得到的多项式就称为勒让德(Legendre)多项式，一般用$\mathrm{P}_0(x),\mathrm{P}_1(x),\cdots,\mathrm{P}_n(x),\cdots$表示。

罗德利克(Rodrigul）给出了简单的表达式:

$$\mathrm{P}_0(x)=1,\ \mathrm{P}_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n],\ (n=1,2,\cdots) \quad (2.5)$$

当区间为 $[-1,1]$，权函数为 $\rho(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 时，由序列 $\{1,x,\cdots,x^n,\cdots\}$ 正交化得到的正交多项式就是**切比雪夫 (Chebyshev) 多项式**。

它可表示为:

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\ |x|\le 1 \qquad （2.6）$$

若令 $x=\cos\theta$，则 $T_n(x)=\cos n\theta,\ 0\le\theta\le\pi.$

事实上，区间 $[a,b]$ 及权函数 $\rho(x)$ 不同，则得到的正交多项式也不同。除上述两种最重要的正交多项式外，还有三种较常用的正交多项式。

在区间 $[-1,1]$ 上带权 $\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式称为**第二类切比雪夫多项式**。

表达式为：$$U_n(x)=\frac{\sin[(n+1)arccox]}{\sqrt{1-x^2}} \qquad (2.7)$$

递推关系：$U_0(x)=1,\quad U_1(x)=2x,$

$$U_{n+1}(x)=2xU_n(x)-U_{n-1}(x) \quad (n=1,2,\cdots)$$

在区间$[0,+\infty)$上带权 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x}$的正交多项式称为**拉盖尔 (Laguerre) 多项式**。

其表达式为:

$$\mathrm{L}_n(x)=\mathrm{e}^{x}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n\mathrm{e}^{-x}) \qquad (2.8)$$

递推关系:

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

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

在区间 $(-\infty,+\infty)$ 上带权 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x^2}$ 的正交多项式称为埃尔米特多项式。

表达式为:

$$\mathrm{H}_n(x)=(-1)^n \mathrm{e}^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(\mathrm{e}^{-x^2}) \qquad (2.9)$$

递推关系:

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

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

3.2.2 最佳一致逼近

设 $f \in C[a,b]$, 在 $H_n = span\{1, x, \cdots, x^n\}$ 中求多项式 $P_n^*(x)$, 使其误差

$$\| f - P_n^* \|_\infty = \max_{a \le x \le b} | f(x) - P_n^*(x) | = \min_{P_n \in H_n} \| f - P_n \|$$

这就是最佳一致逼近或切比雪夫逼近问题。

称 $P_n^*(x) \in H_n$ 是 $f(x)$ 在 $[a,b]$ 上的最佳一致逼近多项式或最小偏差逼近多项式，简称最佳逼近多项式。

定理4 若 $f \in C[a,b]$, 则总存在 $P_n^*(x) \in H_n$ ，使

$$\left\| f(x) - P_n^*(x) \right\|_\infty = E_n$$

这个定理说明了最佳逼近多项式的存在性。

定义9 设 $f \in C[a,b]$, $P(x) \in H_n$, 若在 $x = x_0$ 上有

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

就称 x_0是 $P(x)$ 的**偏差点**。

由函数 $P(x) - f(x)$在 $[a,b]$ 上的连续性不难看出，偏差点至少存在一个。

定理5 $P(x)\in H_n$是$f\in C[a,b]$的最佳逼近多项式的充分必要条件是$P(x)$在$[a,b]$上至少有$n+2$个轮流为“正”、“负”的偏差点即有$n+2$个点

$$a\le x_1<x_2<\cdots<x_{n+2}\le b$$

使

$$P(x_k)-f(x_k)=(-1)^k\sigma\|P(x)-f(x)\|_\infty,\quad \sigma=\pm1 \qquad (2.10)$$

这样的点组称为**切比雪夫交错点组**。

推论1 若$f\in C[a,b]$，则在H_n中存在惟一的最佳逼近多项式。

3.2.3 最佳平方逼近

对 $f(x)\in C[a,b]$ 及 $C[a,b]$ 中的一个子集

$$\phi = span\{\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)\}$$

若存在 $S^*(x)\in\phi$, 使

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

$$=\min_{S(x)\in\phi}\int_a^b\rho(x)[f(x)-S(x)]^2\mathrm{d}x \qquad (2.11)$$

则称 $S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在子集 $\phi\subset C[a,b]$ 中的最佳平方逼近函数。

由（2.11）可知该问题等价于求多元函数

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\int_a^b \rho(x)[\sum_{j=0}^{n} a_j\phi_j(x)-f(x)]^2\mathrm{d}x \qquad (2.12)$$

的最小值。

$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$是关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$的二次函数，利用多元函数求极值的必要条件:

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

即 $$\frac{\partial I}{\partial a_k}=2\int_a^b \rho(x)[\sum_{j=0}^{n} a_j\phi_j(x)-f(x)]\phi_k(x)\mathrm{d}x$$

于是有

$$\sum_{j=0}^{n}(\phi_k(x),\phi_j(x))a_j=(f(x),\phi_k(x)),\ (k=0,1,\cdots,n) \qquad (2.13)$$

这个关于 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的线性方程组，称为法方程。

由于 $\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$ 线性无关，故

$$\det G(\phi_0,\phi_1,\cdots,\phi_n)\neq 0$$

于是方程组（2.13）有惟一解 $a_k=a_k^*\ (k=0,1,\cdots,n)$,

从而得到

$$S^*(x)=a_0^*\phi_0(x)+\cdots+a_n^*\phi_n(x).$$

若令 $\delta(x)=f(x)-S^*(x)$, 则平方误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2=(f(x)-S^*(x),f(x)-S^*(x))$$

$$=(f(x),f(x))-(S^*(x),f(x))$$

$$=\|f(x)\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}a_k^*(\phi_k(x),f(x)) \qquad (2.14)$$

若取 $\phi_k(x)=x^k,\rho(x)\equiv 1,f(x)\in C[0,1]$, 则要在 H_n 中求 n 次最佳平方逼近多项式

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

此时

$$(\phi_j(x),\phi_k(x)) = \int_0^1 x^{k+j}\mathrm{d}x = \frac{1}{k+j+1},$$

$$(f(x),\phi_k(x)) = \int_0^1 f(x)x^k\mathrm{d}x \equiv d_k$$

若用 H 表示 $G_n = G(1, x, \cdots, x^n)$ 对应的矩阵，则

$$\mathrm{H} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{bmatrix} \qquad (2.15)$$

称为希尔伯特(Hilbert)矩阵。

在作最佳平方逼近时，若基 $\phi_i(x), (i=1,2,\cdots,n)$ 选择不当，会导致法方程组的系数矩阵病态，使得求解非常困难，因此常选用正交多项式作基。

设 $f(x)\in C[a,b]$, $\phi = span\{\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)\}$, 若 $\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$ 是满足条件(2.2)的正交函数族，

则

$$(\phi_i(x),\phi_j(x)) = 0, \quad i \neq j$$

而

$$(\phi_j(x),\phi_j(x)) > 0$$

故法方程组的系数矩阵 $\mathrm{G}_n = \mathrm{G}(\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x))$

为非奇异对角矩阵，且方程（2.13）的解为

$$a_k^* = (f(x),\phi_k(x))/(\phi_k(k),\phi_k(x)),\ (k=0,1,\cdots,n) \qquad (2.16)$$

于是 $f(x)\in C[a,b]$ 在 ϕ 中的最佳平方逼近函数为

$$S^*(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(f(x),\phi_k(x))}{\|\phi_k(x)\|_2^2}\phi_k(x) \qquad (2.17)$$

由（2.14）可得均方误差为

$$\|\delta_n(x)\|_2 = \|f(x)-S_n^*(x)\|_2 = \left(\|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n}\left[\frac{(f(x),\phi_k(x))}{\|\phi_k(x)\|_2}\right]^2\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (2.18)$$

讨论特殊情况。设 $\{\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)\}$是正交多项式，由 $1,x,\cdots,x^n$正交化得到，则有下面的收敛定理

定理7 设 $f(x)\in C[a,b]$， $S^*(x)$是由（2.17）给出的 $f(x)$的最佳平方逼近多项式，其中$\{\phi_k(x),k=0,1,\cdots,n\}$是正交多项式族，则有

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

由于勒让德多项式$\{P_k(x)\}$是在区间$[-1, 1]$上由$\{1, x, \cdots, x^k, \cdots\}$正交化得到的，因此利用函数的勒让德多项式得到的最佳平方逼近多项式与由$\{1, x, \cdots, x^n\}$得到中的最佳平方逼近多项式是一致的。

而且用勒让德展开不用解线性方程组，不存在病态问题，因此通常都用这种方法求最佳平方逼近多项式。

§3.3 离散数据的曲线拟合

3.3.1 最小二乘法及其计算

3.3.2 多项式拟合

内容: 曲线拟合的最小二乘法的基本原理及公式；多项式拟合的计算公式；处理实际问题的一些技巧。

重点: 最小二乘法的基本原理；多项式拟合的计算公式。

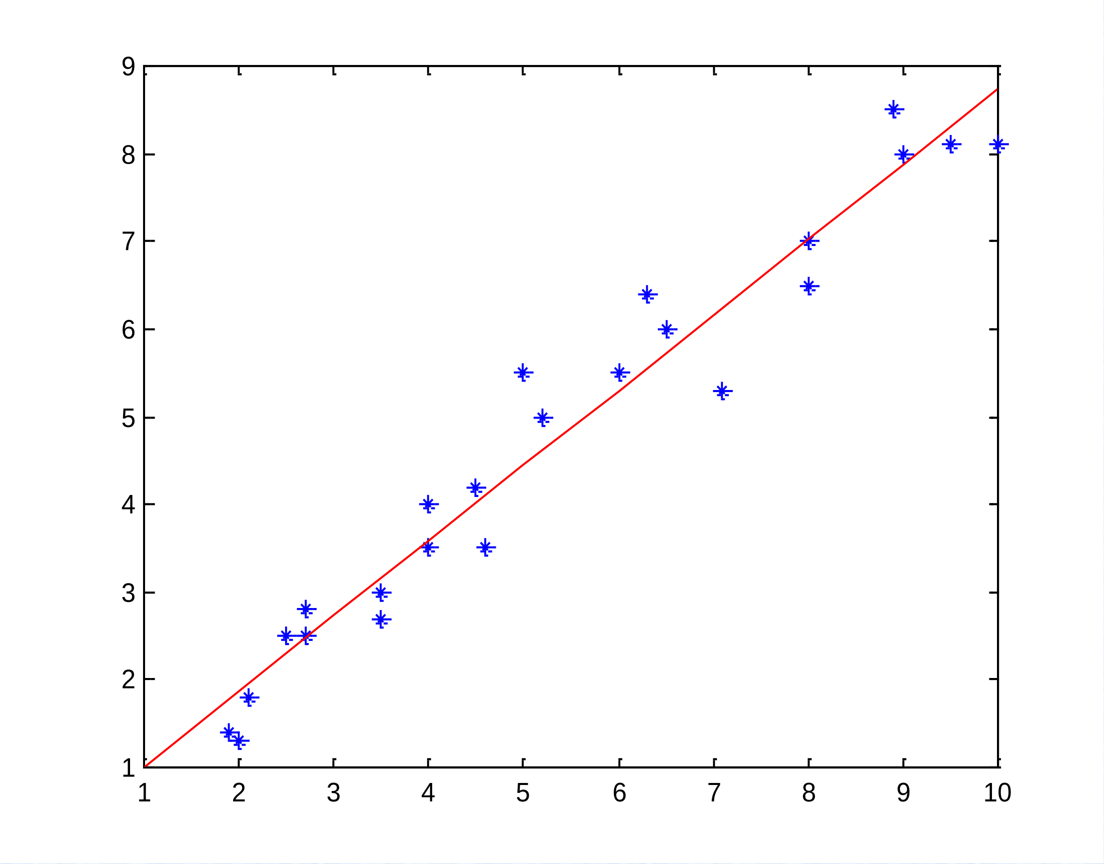
难点: 用最小二乘法公式进行实际计算 。

3.3.1 最小二乘法及其计算

在函数的最佳平方逼近中 $f(x) \in C[a,b]$, 如果 $f(x)$ 只在一组离散点集 $\{x_i, i = 0,1,\cdots,m\}$ 上给定，这就是科学实验中经常见到的实验数据 $\{(x_i, y_i), i = 0,1,\cdots,m\}$ 的曲线拟合。

问题：利用 $y_i = f(x_i), i = 0,1,\cdots,m$, 求出一个函数 $y = S^*(x)$ 与所给数据 $\{(x_i, y_i), i = 0,1,\cdots,m\}$ 拟合（某种度量意义下的误差最小）。

所谓某种度量意义下的误差最小，即指拟合曲线与离散点得距离最小。如下图所示。



记误差 $\delta_i = S^*(x_i) - y_i$，$i = 0,1,\cdots,m$，则 $\boldsymbol{\delta} = (\delta_0, \delta_1, \cdots, \delta_m)^{\mathrm{T}}$ 的分量即为各数据点上的误差。

设 $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ 是 $C[a,b]$ 上线性无关函数族，在 $\phi = span\{\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)\}$ 中找一函数 $S^*(x)$，使误差平方和

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} [S^*(x_i) - y_i]^2 = \min_{S(x)\in\phi} \sum_{i=0}^{m} [S(x_i) - y_i]^2 \qquad (3.1)$$

这里

$$S(x) = a_0\phi_0(x) + a_1\phi_1(x) + \cdots + a_n\phi_n(x), \ (n < m) \qquad (3.2)$$

这个问题称为最小二乘逼近，几何上称为曲线拟合的最小二乘法。

用最小二乘法求拟合曲线时，首先要确定 $S(x)$ 的形式。而确定 $S(x)$ 的形式问题不仅是数学问题，还与问题的实际背景有关。

通常要用问题的运动规律及给定的数据进行数据描图，确定 $S(x)$ 的形式，然后通过实际计算选出较好的结果。

$S(x)$的一般表达式为（3.2）表示的线性形式。

若$\phi_k(x)$是 k次多项式, $S(x)$就是n次多项式。

为了使问题的提法更有一般性，通常在最小二乘法中考虑加权平方和

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)[S(x_i) - y_i]^2 \qquad (3.3)$$

这里 $\omega(x) \geq 0$ 是 $[a,b]$上的权函数，它表示不同点处的数据比重不同。

用最小二乘法求拟合曲线，就是在形如（3.2）的$S(x)$中求一函数 $y=S^*(x)$，使（3.3）取得最小。

这样，最小二乘问题就转化为求多元函数

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[\sum_{j=0}^{n}a_j\phi_j(x_i)-f(x_i)]^2 \qquad (3.4)$$

的极小点 $(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)$ 的问题。

由求多元函数极值的必要条件，有

$$\frac{\partial I}{\partial a_k}=2\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[\sum_{j=0}^{n}a_j\phi_j(x_i)-f(x_i)]\phi_k(x_i)=0,\ (k=0,1,\cdots,n)$$

若记

$$(\phi_j,\phi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)\phi_j(x_i)\phi_k(x_i),$$

$$(f,\phi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)f(x_i)\phi_k(x_i)\equiv d_k,\ (k=0,1,\cdots,n) \qquad (3.5)$$

上式可改写为

$$\sum_{j=0}^{n}(\phi_k,\phi_j)a_j=d_k,\ (k=0,1,\cdots,n) \qquad (3.6)$$

这个方程称为**法方程**。

法方程（3.6）可写成如下矩阵形式

$$\mathbf{Ga} = \boldsymbol{d}$$

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

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} (\phi_0, \phi_0) & (\phi_0, \phi_1) & \cdots & (\phi_0, \phi_n) \\ (\phi_1, \phi_0) & (\phi_1, \phi_1) & \cdots & (\phi_1, \phi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\phi_n, \phi_0) & (\phi_n, \phi_1) & \cdots & (\phi_n, \phi_n) \end{bmatrix} \qquad (3.7)$$

要使法方程（3.6）有惟一解，就要求矩阵 G 非奇异，而 $\phi_0(x), \phi_1(x), \cdots, \phi_n(x)$ 在 $[a,b]$ 上线性无关不能推出矩阵 G 非奇异，必须加上另外的条件。

定义10 设$\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)\in[a,b]$的任意线性组合在点集$\{x_i,i=0,1,\cdots,m\}(m\ge n)$上至多只有 n 个不同的零点，则称$\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)$在点集$\{x_i,i=0,\cdots,m\}$上满足哈尔 (Haar) 条件。

如果$\phi_0(x),\phi_1(x),\cdots,\phi_n(x)\in[a,b]$在$\{x_i\}_0^m$上满足哈尔条件，则法方程（3.6）的系数矩阵（3.7）非奇异，方程（3.6）存在惟一的解$a_k=a_k^*,k=0,1,\cdots,n.$

由上述得到函数 $f(x)$ 的最小二乘解为

$$S^*(x)=a_0^*\phi_0(x)+a_1^*\phi_1(x)+\cdots+a_n^*\phi_n(x)$$

这样得到的 $S^*(x)$，对任何形如（3.2）的 $S(x)$，都有

$$\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[S^*(x_i)-f(x_i)]^2\le\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[S(x_i)-f(x_i)]^2$$

故 $S^*(x)$ 确是所求最小二乘解。

3.3.2 多项式拟合

离散数据 $\{(x_i, y_i), i=0,1,\cdots,m\}$ 最小二乘拟合中，最简单、最常用的拟合函数是多项式

$$S(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n,\ (n<m) \tag{3.8}$$

即在多项式空间 $\phi=span\{1, x,\cdots, x^n\}$ 中作曲线拟合，称为多项式拟合。

显然 $1, x,\cdots, x^n$ 在任意 $m(m\geq n)$ 个点上满足哈尔条件。

进行多项式拟合时，由（3.5）可得

$$(\phi_j, \phi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) x_i^j x_i^k = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) x_i^{j+k},$$

$$(f, \phi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) f(x_i) x_i^k \equiv d_k, \ (k = 0, 1, \cdots, n) \qquad (3.9)$$

这时法方程的系数矩阵为

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) & \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i & \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i^n & \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i) x_i^{2n} \end{bmatrix} \qquad (3.10)$$

需要注意的是，一般当$n \geq 3$时，多项式拟合的法方程将是病态的。

有时根据给定数据图形，其拟合函数 $y = f(x)$ 表面上不是（5.2）的形式，但通过变换仍可化为线性模型。

例如 $S(x) = a\mathrm{e}^{bx}$，两边取对数，并令 $\bar{S}(x) = \ln S(x)$，$A = \ln a$， $B = b$，这样就将其变成了多项式函数

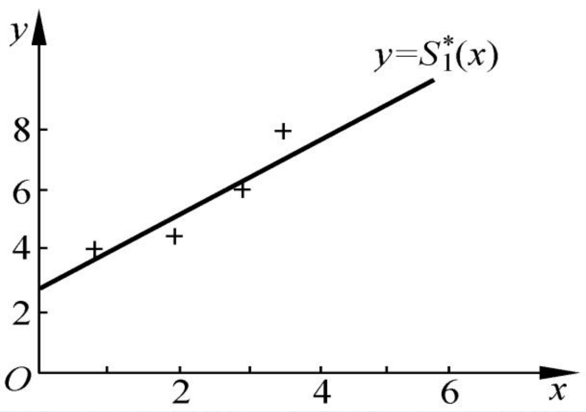
$$\bar{S}(x) = A + Bx$$

例7 已知一组实验数据如下，求它的拟合曲线。

x_i	1	2	3	4	5
f_i	4	4.5	6	8	8.5
ω_i	2	1	3	1	1

解　将所给数据在坐标纸上标出，见下图

从图中看到各点在一条直线附近，故可选择线性函数作拟合曲线。



令 $S_1(x)=a_0+a_1x$, 这里 $m=4,\quad n=1,\quad \phi_0(x)=1,$

$\phi_1(x)=x$, 故

$$(\phi_0,\phi_0)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i=8,$$

$$(\phi_0,\phi_1)=(\phi_1,\phi_0)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i=22,$$

$$(\phi_1,\phi_1)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i^2=74,$$

$$(\phi_0,f)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i f_i=47,$$

$$(\phi_1,f)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i f_i=145.5$$

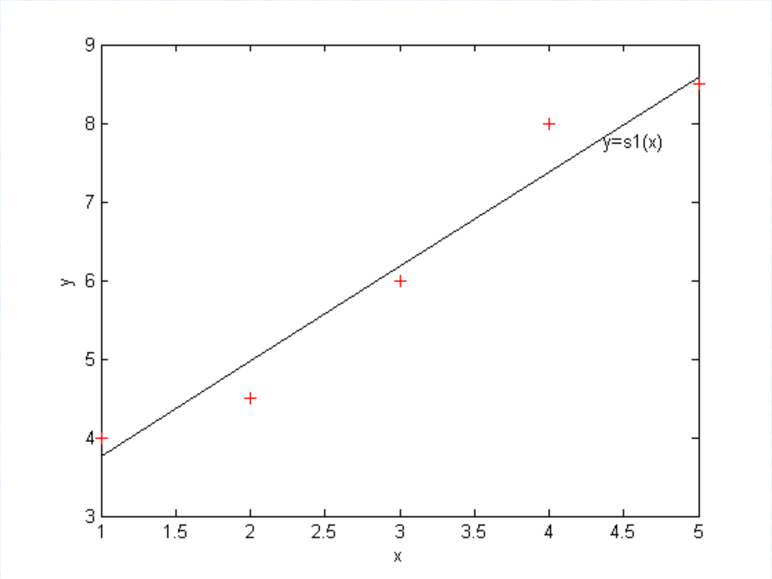
由此得方程组

$$\begin{cases} 8a_0 + 22a_1 = 47 \\ 22a_0 + 74a_1 = 145.5 \end{cases}$$

解得 $a_0 = 2.77, a_1 = 1.13.$ 于是所求拟合曲线为

$$S_1^*(x) = 2.77 + 1.13x$$

如图:



关于多项式拟合，Matlab中有现成的程序

$$a = \mathrm{polyfit}(x, y, m)$$

其中输入参数 x, y 为要拟合的数据，m 为拟合多项式的次数，输出参数 a 为拟合多项式的系数。

利用下面的程序，可在Matlab中完成上例的多项式拟合。

```
x=[1 1 2 3 3 3 4 5];
f=[4 4 4.5 6 6 6 8 8.5];
aa=poly(x,f,1);
y=polyval(aa,x);
plot(x,f,'r+',x,y,'k')
xlabel('x');
ylabel('y');
gtext('y=s1(x)')
```

例8 设数据由表3-1给出，表中第4行为 $\ln y_i = \overline{y}_i$，通过描点可以看出数学模型为 $y = ae^{bx}$，用最小二乘法用最小二乘法确定 a 及 b。

表3－1

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
$\overline{y}_i$	1.629	1.756	1.876	2.008	2.135

解 用给定数据描图可确定拟合曲线方程为 $y = ae^{bx}$，它不是线性形式，于是两边取对数得

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

若令 $\bar{y} = \ln y, A = \ln a$, 则得 $\bar{y} = A + bx, \phi = \{1, x\}$.

为确定 A, b, 先将 (x_i, y_i) 转化为 $(x_i, \bar{y}_i)$, 数据表见表 3-1。

根据最小二乘法，取 $\phi_0(x) = 1, \phi_1(x) = x, \omega(x) \equiv 1$,

得

$$(\phi_0, \phi_0) = 5,\ (\phi_0, \phi_1) = \sum_{i=0}^{4} x_i = 7.5,\ (\phi_1, \phi_1) = \sum_{i=0}^{4} x_i^2 = 11.875,$$

$$(\phi_0, \bar{y}) = \sum_{i=0}^{4} \bar{y}_i = 9.404, \quad (\phi_1, \bar{y}) = \sum_{i=0}^{4} x_i \bar{y}_i = 14.422$$

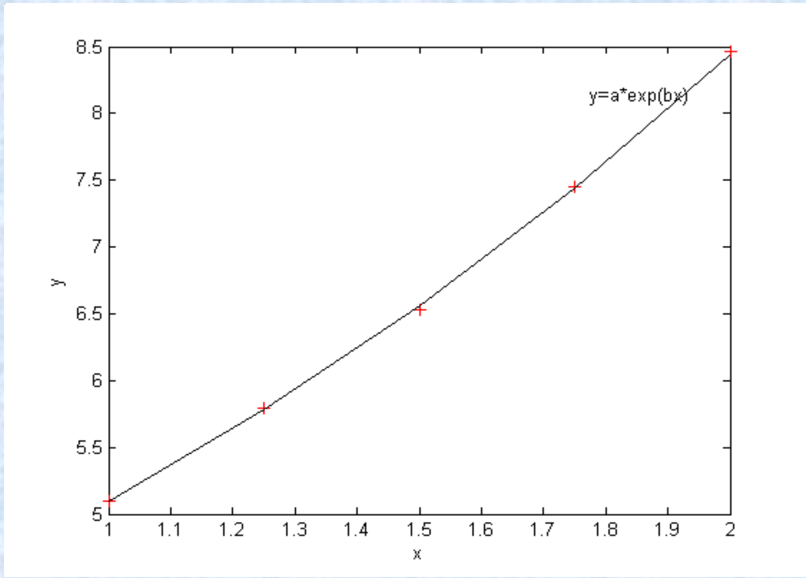
故有法方程

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

解得 $A=1.122,\quad b=0.505,\quad a=e^{A}=3.071.$

于是得拟合曲线为

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



利用下面的程序，可在Matlab中完成曲线拟合。

```
x=[1.00 1.25 1.50 1.75 2.00];
y=[5.10 5.79 6.53 7.45 8.46];
y1=log(y);
aa=poly(x,y1,1);
a=aa(1);    b=exp(aa(2));
y2=b*exp(a*x);
plot(x,y,’r+’,x,y2,’k’)
xlabel(‘x’);
ylabel(‘y’);
gtext(‘y=a*exp(bx))’;
```