数值分析

— 科学与工程计算基础

任课教师：黄忠亿

清华大学数学科学系

目录 I

目录 II

函数逼近的基本概念

前一章引入的“插值”概念是函数逼近的一种，但是我们遇到了等距节点高次插值的**Runge**现象. 为了避免此缺点, 我们这一章寻求另一种广义的“函数逼近”, 即求一个函数 $\varphi(x) \in \Phi$, 使得在某种范数意义下“误差最小”:

$$\|f - \varphi^*\| = \min_{\varphi \in \Phi} \|f - \varphi\| .$$

自然, 选取不同的函数空间 Φ, 以及选取不同的范数, 都可能得到不同的 “逼近函数”!

函数逼近的基本概念

我们首先看最简单的函数空间: $\Phi = P_n$ (多项式空间).

此逼近问题有解, 基本源于我们已知的 Weistrass 引理:

$$\forall f \in C[a,b],\ \forall \varepsilon > 0,\ \exists N = N(\varepsilon) \in \mathbb{N},\ \text{及多项式}\ p_N \in P_N, \text{s.t.}$$

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p_N(x)| = \|f - p_N\|_\infty \leq \varepsilon.$$

事实上我们确实可以用 Bernstein 多项式来实现以上逼近:

对 $f \in C[0,1]$, 令

$$B_n(f;x) = \sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right)\begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix} \cdot x^k(1-x)^{n-k} \equiv \sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right) B_n^k(x).$$

函数空间中的范数

效率太低，工作量较大

可以证明$n \to \infty$时，$B_n \rightrightarrows f$，且 $f \in C^m[a,b] \Longrightarrow B_n^{(m)} \rightrightarrows f^{(m)}$.
但是 **Bernstein** 多项式收敛太慢，因此实际很少使用.

我们常用的函数类为多项式、有理函数、三角函数等. 常用的范数有二范数、无穷范数等.

我们先回顾一下函数空间中的范数与内积定义及其性质.

函数空间中的范数

线性空间的范数定义之前已经介绍过. 对线性空间 X, 引入实值函数 $\|\cdot\| : X \to \mathbb{R}$, 如果满足

1. 正性: $\forall x \in X$, $\|x\| \geq 0$, 且 $\|x\| = 0 \iff x = \mathbf{0}$.
2. 齐次性: $\forall x \in X, \forall \alpha \in \mathbb{R}$, $\|\alpha \cdot x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$.
3. 三角不等式: $\forall x, y \in X$, $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

则称 $\|\cdot\|$ 为 X 上的一种范数。$(X, \|\cdot\|)$ 称为赋范空间.

函数空间中的范数

对于 $X = \mathbb{R}^n$ 时，我们之前已经定义过 $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_\infty$ 等.

对于函数空间，如 $X = C[a,b]$，我们也可类似定义：

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

更一般的，对 $p \in [1, +\infty)$ 可以定义

$$\|f\|_p = \left(\int_a^b |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}.$$

常用的是 $p = 2, 1$ 等.

函数空间中的内积

$\mathbb{R}^n$ ($\mathbb{C}^n$) 上的内积定义已是熟知: $(x, y) = y^* \cdot x$.

对于一般线性空间 X, 也可定义内积 $(\cdot, \cdot) : X \times X \to \mathbb{C}$ (或者 $\mathbb{R}$), 如果它满足以下三条:

1. 对称性: $\forall u, v \in X$, 有 $(u, v) = \overline{(v, u)}$.
2. 线性性: $\forall u, v, w \in X, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ 有 $(\alpha u + \beta v, w) = \alpha(u, w) + \beta(v, w)$.
3. 正性: $\forall u \in X$, $(u, u) \geq 0$, 且 $(u, u) = 0 \Longleftrightarrow u = \mathbf{0}$.

$(X, (\cdot, \cdot))$ 称为内积空间. 若 $(u, v) = 0$ 则称 u, v 正交.

关于内积的基本性质

我们这里给出两个后面常用的定理.

定理 7.1

设 $(X, (\cdot,\cdot))$ 为内积空间. 那么 $\forall u, v \in X$, $|(u,v)|^2 \leq (u,u)\cdot(v,v)$.

$\triangleleft$ **若 $v = \mathbf{0}$ 则显然两边都是零, 所以不等式成立.**

若 $v \neq \mathbf{0}$, 那么 $\forall \lambda \in \mathbb{C}$, 有

$$0 \leq (u+\lambda v, u+\lambda v) = (u,u) + \lambda(v,u) + \overline{\lambda(v,u)} + |\lambda|^2(v,v)$$

取 $\lambda = -\dfrac{\overline{(v,u)}}{(v,v)}$**, 那么**

$$0 \leq (u,u) - 2\frac{|(u,v)|^2}{(v,v)} + \frac{|(u,v)|^2}{(v,v)} = (u,u) - \frac{|(u,v)|^2}{(v,v)}. \quad \triangleright$$

关于内积的基本性质

定理 7.2

设 $(X,(\cdot,\cdot))$ 为内积空间, $u_i \in X$, $i = 1,\cdots,n$. 令

$$G = \begin{pmatrix} (u_1,u_1) & \cdots & (u_n,u_1) \\ \vdots & & \vdots \\ (u_1,u_n) & \cdots & (u_n,u_n) \end{pmatrix}$$ 为 Gram 矩阵.

则 G 可逆 $\Longleftrightarrow \{u_i\}_{i=1}^n$ 线性无关.

$\triangleleft$ G **可逆** $\Longleftrightarrow G\mathbf{x} = \mathbf{0}$ **只有零解** $\mathbf{x} = \mathbf{0}$

$\Longleftrightarrow 0 = \sum_{j=1}^n x_j(u_j,u_k) = \left(\sum_{j=1}^n x_j u_j, u_k\right)$, $k = 1,\cdots,n$ **只有零解.**

$\Longleftrightarrow \sum_{j=1}^n x_j u_j = 0$ **只有零解** $\Longleftrightarrow \{u_j\}_{j=1}^n$ **线性无关.** $\triangleright$

目录 I

目录 II

最佳一致逼近多项式

对 $f \in C[a,b]$, 由 **Weistrass** 引理可知, 存在 p_n, s.t. $p_n \rightrightarrows f$.

但实际问题中 n 总是有限的, 因此 **Tchebychev** 提出, 固定 n, 求 $p_n^* \in P_n$, s.t. $\|p_n^* - f\|_\infty = \min\limits_{p_n \in P_n} \|p_n - f\|_\infty$.

定义 7.1

设 $f \in C[a,b]$, 对 $p_n \in P_n$, 我们称

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

为 f 与 p_n 在 $[a,b]$ 上的偏差. 称

$$E_n = \inf_{p_n \in P_n} \{\Delta(f, p_n)\}$$

为 f 在 $[a,b]$ 上关于 P_n 的最小偏差.

最佳一致逼近多项式的存在性

定义 7.2

设 $f \in C[a,b]$, 若 $\exists p_n^* \in P_n$, s.t. $\Delta(f, p_n^*) = E_n$, 则称 p_n^* 为 f 在 $[a,b]$ 上的最佳一致逼近多项式.

定理 7.3 (最佳一致逼近多项式的存在性)

设 $f \in C[a,b]$, 则存在 $p_n^* \in P_n$, s.t. 也说明下确界可以取到

$$\Delta(f, p_n^*) = \|f - p_n^*\|_\infty = E_n = \inf_{p_n \in P_n} \{\Delta(f, p_n)\}$$

◁ 令 $\varphi(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \max_{a \le x \le b} \left| f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j x^j \right|$. 欲证明 φ 在多项式空间 P_n 中可以达到最小值！我们分四步来证明.

最佳一致逼近多项式的存在性

1) 记 $\vec{a} = (a_0, \cdots, a_n) \in \mathbb{R}^{n+1}$, 易见 $\varphi(\vec{a}) \geq 0$, 即有下界为 **0.** 因此 $\varphi(\vec{a})$ 在 $\mathbb{R}^{n+1}$ 中存在下确界, 记为 $\rho \geq 0$:

$$\rho = \inf_{\vec{a} \in \mathbb{R}^{n+1}} \varphi(\vec{a}) \geq 0.$$

2) 再证 $\varphi(\vec{a})$ 是连续函数 (连续函数在紧集上达到最大、最小值)

$$\forall \vec{\varepsilon} = (\varepsilon_0, \cdots, \varepsilon_n) \in \mathbb{R}^{n+1}, \qquad \varphi(a_0 + \varepsilon_0, \cdots, a_n + \varepsilon_n)$$

$$= \max_{a \leq x \leq b} \left| f(x) - p_n(x) - \sum_{j=0}^{n} \varepsilon_j x^j \right| \leq \max_{a \leq x \leq b} \left\{ |f(x) - p_n(x)| + \left| \sum_{j=0}^{n} \varepsilon_j x^j \right| \right\}$$

$$\leq \varphi(a_0, \cdots, a_n) + \max_{a \leq x \leq b} \sum_{j=0}^{n} |\varepsilon_j| \cdot |x|^j \leq \varphi(a_0, \cdots, a_n) + M_n \sum_{j=0}^{n} |\varepsilon_j|$$

最佳一致逼近多项式的存在性

上面$M_n = \max\limits_{x,j} |x|^j$. 因此$|\varphi(\vec{a}+\vec{\varepsilon}) - \varphi(\vec{a})| \le M_n \left\|\vec{\varepsilon}\right\|_1$, 即$\varphi$连续.

3) 再证: 存在 $R > 0$, 当 $\left\|\vec{a}\right\|_2 > R$ 时, $\varphi(\vec{a}) > \rho$ (即 $\varphi(\vec{a})$ 的最小值应该在 $\left\|\vec{a}\right\| \le R$ 时达到).

定义 $\psi(\vec{a}) = \max\limits_{a \le x \le b} \left| \sum\limits_{j=0}^{n} a_j x^j \right| \equiv \|p_n\|_\infty$.

令 $\mu = \min\limits_{\left\|\vec{a}\right\|_2 = 1} \psi(\vec{a}) > 0$, $R = \frac{1}{\mu}(\|f\|_\infty + \rho + 1)$,

$$\varphi(\vec{a}) = \max_{a \le x \le b} |f(x) - p_n(x)| \ge \max_{a \le x \le b} \left| \sum_{j=0}^{n} a_j x^j \right| - \|f\|_\infty = \psi(\vec{a}) - \|f\|_\infty$$

最佳一致逼近多项式的存在性

显然 $\forall \lambda > 0$,

$$\lambda\psi(\frac{\vec{a}}{\lambda}) = \lambda \max_{a\le x\le b}\left|\sum_{j=0}^{n}\frac{a_j}{\lambda}x^j\right| = \psi(\vec{a}).$$

当 $A = \left\|\vec{a}\right\|_2 = \sqrt{\sum_{j=0}^{n} a_j^2} > R$ **时,**

有 $\varphi(\vec{a}) \ge \psi(\vec{a}) - \|f\|_\infty = A\psi(\frac{\vec{a}}{A}) - \|f\|_\infty \ge A\mu - \|f\|_\infty$

$> R\cdot\mu - \|f\|_\infty = \rho + 1 > \rho$

做单方向的估计

最佳一致逼近多项式的存在性

4) 由 **1)-3)**, 当 $\left\|\vec{a}\right\|_2 \le R$ 时, $\varphi(\vec{a})$ 有下确界 ρ.

又因为 φ 连续, 因此 φ 在 $\left\{\left\|\vec{a}\right\|_2 \le R\right\}$ 这个闭球上达到其下确界 ρ, 即

$$\exists\ \vec{a}^* = (a_0^*, \cdots, a_n^*) \in \mathbb{R}^{n+1},\ \textit{s.t.}\ \varphi(a_0^*, \cdots, a_n^*) = \rho.$$

也就是说, 存在 $p_n^* = \sum_{j=0}^{n} a_j^* x^j$, *s.t.* $\Delta(f, p_n^*) = E_n$. $\triangleright$

最佳一致逼近多项式的判别

有了存在性定理之后，我们接下来主要就是来看如何判别一个多项式是最佳一致逼近, 并且如何构造出来.

定义 7.3 (偏差点)

设 $f \in C[a,b]$, $p \in P_n$, 若在 $x = x_0$ 处, 有

$$|f(x_0) - p(x_0)| = \|f - p\|_\infty = \Delta(f,p) \equiv M,$$

则称 x_0 是 $p(x)$ 关于 f 的偏差点.

特别, 若 $p(x_0) - f(x_0) = \ \ M$, 则称 x_0 为 $p(x)$ 的正偏差点;

若 $p(x_0) - f(x_0) = -M$, 则称 x_0 为 $p(x)$ 的负偏差点.

最佳一致逼近多项式的判别—必要条件

定理 7.4 (必要条件)

设 $p^* \in P_n$ 是 f 的最佳一致逼近多项式, 则 p 同时有正负偏差点.

$\triangleleft$ 已知有 $\Delta(f, p^*) = \max\limits_{x\in[a,b]} |f(x) - p(x)| = \inf\limits_{p\in P_n} \|f - p\|_\infty = M$.

反证法, 假设 p^* 只有 "正"偏差点 (另一半类似可证), 即 $\exists x_0$ s.t.

$p^*(x_0) - f(x_0) = M$, 且 $\forall x \in [a, b]$, $p^*(x) - f(x) > -M$.

因 $p^* - f \in C[a, b]$, 故在 $[a, b]$ 上有最小值, 记之为 $2\delta - M$ $(\delta > 0)$.

即 $-M + 2\delta \leq p^*(x) - f(x) \leq M$, $\forall x \in [a, b]$.

令 $q_n(x) = p^*(x) - \delta$, 有 $|q(x) - f(x)| \leq M - \delta, \quad \forall x \in [a, b]$.

即 $\Delta(f, q) = M - \delta < M = E_n$, 与 p^* 为最佳一致逼近矛盾! $\triangleright$

最佳一致逼近多项式的判别—充要条件

定理 7.5 (充要条件—Tchebychev 定理)

设 $p^* \in P_n$, p^* 是 f 的最佳一致逼近多项式 $\Longleftrightarrow$ $p(x)$ 在 $[a,b]$ 上"至少"有 $n+2$ 个轮流为正负的偏差点$\{x_j\}_{j=1}^{n+2}$:

$$a \le x_1 < \cdots < x_{n+2} \le b, \quad p^*(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \Delta(f, p^*), \text{ 其中 } \sigma = \pm 1. \tag{7.1}$$

◁ 注意, 这里并没有排斥 x_k 与 x_{k+1} 之间还有别的偏差点.

充分性"$\Longleftarrow$": 假设 $p(x)$ 至少有 $n+2$ 个轮流为正负的偏差点 $\{x_j\}_{j=1}^{n+2}$ 满足 (7.1). 反证法, 假设 p 不是最佳一致逼近, 即

$$\exists q \in P_n, \quad \text{s.t. } \Delta(f,q) < \Delta(f,p).$$

最佳一致逼近多项式的判别—充要条件

令 $\varepsilon(x) = p(x) - q(x) \equiv \big(p(x) - f(x)\big) - \big(q(x) - f(x)\big) \in P_n$.

对于这些 $p(x)$ 的偏差点 $\{x_j\}_{j=1}^{n+2}$:

$$|\varepsilon(x_j)| \geq |p(x_j) - f(x_j)| - |q(x_j) - f(x_j)| \geq \Delta(f,p) - \Delta(f,q) > 0,$$

这说明 $\varepsilon(x_j)$ 符号与 $p(x_j) - f(x_j)$ 一样, 也是轮流取正负号. 因而 n 次多项式 $\varepsilon(x)$ 至少有 $n+1$ 个零点, 这样只能 $\varepsilon(x) \equiv 0$, 矛盾. 即满足 (7.1) 的 p 必然为最佳一致逼近.

必要性"$\Longrightarrow$": 设 $p \in P_n$ 为 f 的最佳一致逼近, $\Delta(f,p) = E_n$. 欲证明它至少有 $n+2$ 个轮流为正负的偏差点满足 (7.1).

显然如果 $E_n = 0$ (即 f 本身为 n 次多项式), 显然成立.

最佳一致逼近多项式的判别—充要条件

下面设 $E_n > 0$. 由前面必要性定理 **7.4** 知至少有一正一负两个偏差点: x_1, x_2.

现假设 $p(x)$ 至多有 m 个轮流为正负的偏差点: $a \le x_1 < \cdots < x_m \le b$, $p(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma E_n$.

欲用反证法证明 $m \ge n+2$. 假设 $m < n+2$.

由偏差点性质我们知道 $p(x) - f(x)$ 有 $m-1$ 个零点 $\{y_i\}_{i=1}^{m-1}$:

$$a \le x_1 < y_1 < x_2 < y_2 \cdots < x_{m-1} < y_{m-1} < x_m \le b.$$

无妨设 x_1 为正偏差点, 即 $\sigma = -1$. 可以调整 y_i 使得:

$[a, y_1]$ 中只有正偏差点, $[y_1, y_2]$ 中只有负偏差点, $\cdots\cdots$

(否则 p 的轮流为正负的偏差点数目可以多于 m)

最佳一致逼近多项式的判别—充要条件

这样, 在 $[a, y_1], [y_1, y_2], \cdots, [y_{m-1}, b]$ 上存在 $\delta_1, \cdots, \delta_m > 0$,s.t.

$$\text{(负偏差点)}: -E_n \leq p(x) - f(x) \leq E_n - \delta_j,$$

$$\text{或者 (正偏差点)}: \delta_j - E_n \leq p(x) - f(x) \leq E_n.$$

取 $\delta = \min_{1 \leq j \leq m} \delta_j > 0$. 定义多项式 $q_{m-1}(x) = \varepsilon \prod_{i=1}^{m-1} (x - y_i) \in P_n$

(因为假设 $m \leq n+1$). 可以取 $|\varepsilon|$ 充分小使得 $\|q_{m-1}\|_\infty < \frac{\delta}{2}$,

且取 ε 的符号使得 $\operatorname{sgn}\left(q_{m-1}(x_1)\right) = \operatorname{sgn}\left(p(x_1) - f(x_1)\right) > 0$.

最佳一致逼近多项式的判别—充要条件

再令 $q(x) = p(x) - q_{m-1}(x) \in P_n$, 注意 q_{m-1} 只在 y_i 上为零.

由 $q(x) - f(x) = p(x) - f(x) - q_{m-1}(x)$, 再利用一下正负性:

在 $[\,a, y_1]$ 上, $0 \le q_{m-1}(x) \le \frac{\delta}{2} \Longrightarrow \frac{\delta}{2} - E_n \le q(x) - f(x) < E_n$

在 $[y_1, y_2]$ 上, $-\frac{\delta}{2} \le q_{m-1}(x) \le 0 \Longrightarrow -E_n < q(x) - f(x) \le E_n - \frac{\delta}{2}$

$\cdots\cdots$

总之有 $\forall x \in [a, b]$, $|q(x) - f(x)| < E_n \Longrightarrow \Delta(f, q) < E_n$,

与 p 为最佳一致逼近矛盾！故必有 $m \ge n + 2$. $\triangleright$

由上述定理可以马上得到最佳一致逼近多项式的唯一性.

最佳一致逼近多项式—唯一性

推论 7.1

$\forall f \in C[a,b]$, 在 P_n 中存在唯一 p s.t. $\Delta(f,p) = E_n$.

$\triangleleft$ 设存在两个最佳一致逼近多项式 p, q s.t.

$$-E_n \le p - f \le E_n,\ -E_n \le q - f \le E_n \implies -E_n \le \frac{p+q}{2} - f \le E_n$$

即 $r(x) = \frac{p+q}{2}$ 也是最佳一致逼近. 设 $\{x_k\}_{k=1}^{n+2}$ 为 $r(x)$ 的轮流为正负的偏差点. 这样 $E_n = |r(x_k) - f(x_k)| = |\frac{p(x_k)+q(x_k)}{2} - f(x_k)|$

$\le \frac{1}{2}(|p(x_k) - f(x_k)| + |q(x_k) - f(x_k)|) \le E_n$

$\implies |p(x_k) - f(x_k)| = E_n, |q(x_k) - f(x_k)| = E_n$,

且 $(p-f)(x_k)$ 与 $(q-f)(x_k)$ 符号还相同.

$\implies p(x_k) = q(x_k)$, 即 $p - q$ 至少有 $n+2$ 个不同零点 $\implies p \equiv q$. $\triangleright$

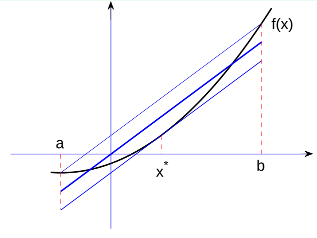
最佳一致逼近多项式—构造方法

最佳一致逼近不容易找到

没有系统的方法构造

从上面定理也可以看出，一般欲求 $p_n^* \in P_n$ s.t. $\Delta(f, p_n^*) = E_n$，是非常困难的，没有一种系统化的方法。

我们这里仅给出 $n = 1$ 时特殊情形的构造方法：



设 $f \in C^2[a, b]$，且 f'' 在 $[a, b]$ 上不变号（比如 $f'' \geq 0$ 即 f 为凸函数，如右图所示）。欲求 $p_1^* = a_0 + a_1 x \in P_1$ s.t. $\Delta(f, p_1^*) = E_1$。由前面判别定理，应该至少存在三个偏差点 $a \leq x_1 < x_2 < x_3 \leq b$, s.t.

$$p_1^*(x_k) - f(x_k) = (-1)^k \sigma \left\| f - p_1^* \right\|_\infty , \quad k = 1, 2, 3, \ \sigma = \pm 1.$$

这说明$p_1^* - f$在$[a, b]$上至少有两个零点，$(p_1^* - f)'$ 至少有一个零点。

最佳一致逼近多项式—构造方法

因为 f'' 不变号, 即 f' 在 $[a,b]$ 上单调, 自然 $(p_1^* - f)' = a_1 - f'$ 也单调, 因而它恰好有一个零点！ 设之为 x^*, 即有 $a_1 = f'(x^*)$.

又因为 $(p_1^* - f)'(x^*) = 0$, 即 x^* 为 $(p_1^* - f)$ 的一个极值点, 即 $x^* = x_2$. 再由于 $(p_1^* - f)'$ 单调升(或降), 因此 $x_1 = a,\ x_3 = b$.

这样有 $p_1^*(a) - f(a) = -[p_1^*(x^*) - f(x^*)] = p_1^*(b) - f(b)$

$\Longrightarrow a_0 + aa_1 - f(a) = f(x^*) - (a_0 + a_1x^*) = a_0 + a_1b - f(b)$

$\Longrightarrow a_1 = \frac{f(b)-f(a)}{b-a} = f[a,b] = f'(x^*) \Longrightarrow x^* = (f')^{-1}(a_1)$.

最后定出 $a_0 = \frac{1}{2}[f(a) + f(x^*) - a_1(a + x^*)]$.

即 $p_1^*(x) = \frac{1}{2}[f(a) + f(x^*) - f[a,b](a + x^*)] + f[a,b]x$.

最佳一致逼近多项式—构造方法

例 7.1 (我们看一个例子:)

求 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$ 在 $[0,1]$ 上的最佳一致逼近一次多项式.

解: 按照前面计算办法, $a_1=f[a,b]=\frac{f(1)-f(0)}{1-0}=\sqrt{2}-1$.

利用 $a_1=f'(x^*)=\frac{x^*}{\sqrt{1+(x^*)^2}} \Longrightarrow x^*=\sqrt{\frac{\sqrt{2}-1}{2}}$.

即 $f(x^*)=\sqrt{1+(x^*)^2}=\sqrt{\frac{\sqrt{2}+1}{2}}$.

$\Longrightarrow a_0=\frac{1}{2}\{f(a)+f(x^*)-f[a,b](a+x^*)\}=\frac{1}{2}[1+\sqrt{\frac{\sqrt{2}+1}{2}}-\sqrt{\frac{(\sqrt{2}-1)^3}{2}}]$

得到 $p_1^*(x)=a_0+a_1x$. $\square$

可以看到计算最佳一致逼近过程过于复杂, 且对于高次最佳一致逼近多项式没有一般算法. 因此我们会考虑其他范数下的最佳逼近, 或者近似最佳一致逼近.

目录 I

目录 II

最佳平方逼近的基本概念

我们根据前面内积的定义推广一下常见的内积定义, 引入如下带权内积

$$(f,g)_\rho \coloneqq \int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx.$$

这里的 $\rho(x)$ 为所谓权函数, 满足以下条件

1. $\rho(x) \geq 0, \forall x \in [a,b]$;
2. $\int_a^b \rho(x)|x|^m dx < +\infty, \forall m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$;
3. 任给非负连续函数 g, 若 $\int_a^b \rho(x)g(x)dx = 0 \Longrightarrow g \equiv 0$.

最佳平方逼近的基本概念

由上面带权内积可以诱导出一种 2-范数:

$$\|f\|_2 \coloneqq \sqrt{(f,f)} = \left(\int_a^b \rho(x)|f(x)|^2\right)^{1/2}.$$

令 $L_\rho^2[a,b] = \{f : [a,b] \to \mathbb{R} \mid \|f\|_2 < +\infty\}$ **为一线性赋范空间.**

设 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n \subset L_\rho^2[a,b]$ **为线性无关函数, 记** $\mathfrak{S} = \mathrm{span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\}$.

定义 7.4

设 $f \in L_\rho^2[a,b]$, 若 $\exists S_n^* \in \mathfrak{S}$ **s.t.** $\|f - S_n^*\|_2 = \inf_{S\in\mathfrak{S}} \|f - S\|_2$, 则称 S_n^* 为 f 在 $\mathfrak{S}$ 中的最佳平方逼近函数.

最佳平方逼近的基本概念

既然 $S_n^* \in \mathfrak{S}$, 那么有 $\{a_j^*\}_{j=0}^n \subset \mathbb{R}$ s.t. $S_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_j(x)$. 因此找 S_n^*, 也就是找系数 $\{a_j^*\}_{j=0}^n$, s.t. 以下多元函数

$$I(a_0, \cdots, a_n) = \left\| f - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j \right\|_2^2 = \int \left[f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x) \right]^2 \rho(x) dx$$

在 $\vec{a}^* = \{a_j^*\}_{j=0}^n$ 达到最小值.

由多元函数求极值的**必要条件:**

$$\left. \frac{\partial I}{\partial a_k} \right|_{\vec{a}^*} = 0, \quad k = 0, \cdots, n, \quad \vec{a}^* = (a_0^*, \cdots, a_n^*)$$

最佳平方逼近函数的计算

$$\Longrightarrow 0 = 2\left(\int_a^b \sum_{j=0}^{n} a_j \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)dx - \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx\right)$$

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

上述方程组也称为关于 $(a_0, \cdots, a_n)$ 的**法方程**. 由定理 **7.2** 知, 上述**法方程存在唯一解(即Gram矩阵可逆)** $\Longleftrightarrow \{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$ 线性无关.

因此, 由 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$ 为线性无关基函数知, 上述法方程必存在唯一解 $\vec{a}^* = (a_0^*, \cdots, a_n^*) \in \mathbb{R}^{n+1}$. 记 $S_n^* = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_j$.

最佳平方逼近函数的计算

由于前面法方程的成立仅是极值的必要条件，下面我们还需要验证 $\forall S \in \mathfrak{S}$, $\|f-S_n^*\|_2^2 \le \|f-S\|_2^2$:

$$\|f-S\|_2^2=(f-S,f-S)=(f-S_n^*+S_n^*-S,f-S_n^*+S_n^*-S)$$

$$=(f-S_n^*,f-S_n^*)+2Re(f-S^*,S_n^*-S)+(S_n^*-S,S_n^*-S)$$

由法方程 $\sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_j,\varphi_k)=(f,\varphi_k) \Longrightarrow (f-S_n^*,\varphi_k)=0,\ k=0,\cdots,n$.

即，$\forall S=\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j$，有 $(f-S_n^*,S)=0 \Longrightarrow (f-S_n^*,S_n^*-S)=0$.

这样 $\|f-S\|_2^2=\|f-S_n^*\|_2^2+\|S_n^*-S\|_2^2 \ge \|f-S_n^*\|_2^2$.

这说明 S_n^* 确实是 f 在 $\mathfrak{S}$ 中的最佳平方逼近函数，且为唯一解.

最佳平方逼近函数的计算

但如果我们取 $\mathfrak{S} = P_n$ 的基函数为 $\{1, x, \cdots, x^n\}$ 来求最佳平方逼近, 那么我们会发现其 **Gram** 矩阵为 **Hilbert** 矩阵, $n \to +\infty$ 时其条件数急剧增大. 此时解法方程, 舍入误差会带来很大影响.

为了减少舍入误差影响, 我们一般采用所谓的正交多项式 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$, 即

$$(\varphi_j, \varphi_k) = A_{jk} = \begin{cases} A_j > 0, & j = k; \\ 0, & j \neq k. \end{cases}$$

这时 **Gram** 矩阵成为对角矩阵了, 自然法方程也就极易求解了.

因此, 如何得到在带权内积 $(f, g)_\rho = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$ 下的正交多项式成为关键!

目录 I

目录 I

目录 II

正交多项式的存在性

定义 7.5

设 $\varphi_n(x)$ 为 n 次多项式, 如果 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{+\infty}$ 满足

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

则称多项式序列 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{+\infty}$ 在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交. $\varphi_n(x)$ 称为 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交的 n 次多项式.

下面看如何构造出正交多项式?

Gram-Schmit正交化

定理 7.6 (Gram-Schmit正交化)

$\forall n \geq 0$, $\exists$多项式序列 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ s.t. φ_j 为 j 次多项式, 且

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j = k; \\ 0, & j \neq k. \end{cases}$$

$\triangleleft$ 设 $\varphi_0(x) \equiv C$, 欲使 $(\varphi_0, \varphi_0) = 1$, 即

$$1 = \int_a^b \rho(x) C^2 dx \Longrightarrow C = \left(\int_a^b \rho(x) dx \right)^{-1/2}.$$

(由权函数定义知 $\int_a^b \rho(x) \cdot 1 dx > 0$)

Gram-Schmit正交化

下面看如何得到 φ_1? 用待定系数法, 令 $\psi_1(x) = x + a_{10}\varphi_0(x)$, s.t. $(\psi_1, \varphi_0) = 0$

$$\Longrightarrow a_{10} = -(x, \varphi_0) = -C\int_a^b \rho(x)x\,dx.$$

再令 $\varphi_1 = \dfrac{\psi_1}{\|\psi_1\|_2}$, 便有 $(\varphi_1, \varphi_1) = 1$, $(\varphi_1, \varphi_0) = 0$.

一般地, 如果已经求出了 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_{n-1}$, s.t.

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \delta_{jk}, \quad 0 \le j, k \le n-1.$$

可以令 $\psi_n(x) = x^n + a_{n,n-1}\varphi_{n-1}(x) + \cdots + a_{n0}\varphi_0(x)$.

Gram-Schmit正交化

欲使 $(\psi_n, \varphi_j) = 0$, $j = 0, \cdots, n-1$,

即有 $a_{nj} = -(x^n, \varphi_j)$, $j = 0, \cdots, n-1$.

再令 $\varphi_n = \dfrac{\psi_n}{\|\psi_n\|_2}$, 即有 $(\varphi_n, \varphi_n) = 1$, $(\varphi_n, \varphi_j) = 0$, $0 \le j \le n-1$.

这样我们便得到了正交多项式序列 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$. $\triangleright$

下面我们来看正交多项式的一些基本性质.

正交多项式的基本性质

1. $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 构成多项式空间 P_n 的一组基.

◁ 由上面定理 7.6 的证明过程可以看到, 每个 φ_n 的首项 x^n 的系数都不为零. 假设有系数 $\{c_j\}_{j=0}^n$ 使得 $p_n(x) = \sum_{j=0}^n c_j\varphi_j(x) = 0$, 那么依次由高到低看 x^j 的系数 ($j = n, n-1, \cdots, 0$) 可以依次推出 $c_n = 0, \cdots, c_0 = 0$. 即 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 是线性无关的.

自然 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 构成 P_n 的一组基: 对 $p_n(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$ 有 $p_n(x) - a_n\psi_n(x)$ 就成为一个 $n-1$ 次多项式. 归纳法即得 $p_n(x)$ 可写成 $\{\psi_j\}$ (自然也是 $\{\varphi_j\}$) 的线性组合. ▷

正交多项式的基本性质

2. φ_n **与任意次数低于** n **次的多项式正交.**

$\lhd\ \forall q_k \in P_k\ (k<n)$, 有 $q_k(x) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \varphi_j(x)$

$$\Longrightarrow (\varphi_n, q_k) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j (\varphi_n, \varphi_j) = 0. \quad \rhd$$

正交多项式的基本性质

3. 令 $\varphi_{-1}(x) \equiv 0$, 我们有以下递推关系式:

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

其中 $\alpha_n, \beta_n, \gamma_{n-1}$ 是一些常数.

计算的时候只需利用前两个进行待定系数就好了

$\triangleleft$ 设 a_k 为 $\varphi_k(x)$ 中首项系数 (x^k 的系数), 并令 $\alpha_n = \frac{a_{n+1}}{a_n}$.

则 $q(x) = \varphi_{n+1}(x) - \alpha_n x\varphi_n(x) \in P_n$. 由性质 1 有

$$q(x) = \beta_n\varphi_n(x) + \sum_{j=0}^{n-1}\gamma_j\varphi_j(x).$$

事实上由上一个正交的性质，这个性质也是有道理的

将 $q(x)$ 与 $\varphi_n(x)$ 做内积得 $(q, \varphi_n) = \beta_n(\varphi_n, \varphi_n) = \beta_n$, 即

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

正交多项式的基本性质

再将 $q(x)$ 与 $\varphi_j(x)$ $(j<n)$ 做内积, 得到

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

当 $j\le n-2$ 时, $x\varphi_j\in P_{n-1}$, 此时有 $(\varphi_n,x\varphi_j)=0$.

即只有 $\gamma_{n-1}\neq 0$, $\gamma_j=0$ $(0\le j\le n-2)$.

$$\Longrightarrow q(x)=\beta_n\varphi_n(x)+\gamma_{n-1}\varphi_{n-1}(x)$$

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

其中 $\alpha_n=\dfrac{a_{n+1}}{a_n}$, $\beta_n=-\alpha_n(x\varphi_n,\varphi_n)$, $\gamma_{n-1}=-\alpha_n(\varphi_n,x\varphi_{n-1})$. $\triangleright$

可以用于计算φn

正交多项式的基本性质

4. 设 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 为 $[a,b]$ 上的正交多项式, **则 $\varphi_j(x)$ 在 (a,b) 上恰好有 j 个单根.**

$\triangleleft$ **i)** 首先证明 φ_j $(j \geq 1)$ 在 (a,b) 上有实根.

用反证法, 设 $\varphi_j(x)$ 在 (a,b) 上无实根, 因其为连续函数, 故它不变号, 无妨设 $\varphi_j(x) \geq 0$, $\forall x \in [a,b]$. 这样

和常数做内积

$$0 < \int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)dx = \frac{1}{\varphi_0}\int_a^b \rho(x)\varphi_j(x)\varphi_0(x)dx = \frac{1}{\varphi_0}(\varphi_j, \varphi_0) = 0$$

矛盾！ 这说明 $j \geq 1$ 时, $\varphi_j(x)$ 在 (a,b) 上必有零点.

正交多项式的基本性质

ii) 再证 $\varphi_n(x)$ 的实根都是单根.

也用反证法. 设 x_1 为 φ_n 的重根, 即有 $(x-x_1)^2|\varphi_n(x)$.

令 $q(x)=\varphi_n(x)/(x-x_1)^2 \in P_{n-2}$, 由性质**2**,

$$0=(\varphi_n,q)=\int_a^b \rho(x)\varphi_n(x)\frac{\varphi_n(x)}{(x-x_1)^2}=\int_a^b \rho(x)\left[\frac{\varphi_n(x)}{x-x_1}\right]^2 dx>0$$

矛盾! **(**因为 $\varphi_n(x)/(x-x_1)\not\equiv 0$**).** 这说明 φ_n 只能有单根.

iii) 最后证明 φ_n 有 n 个实根.

设 $\varphi_n(x)$ 在 (a,b) 上共有 k 个实根 $x_1,\cdots,x_k\in(a,b)$.

正交多项式的基本性质

这样 $q_{n-k}(x) = \dfrac{\varphi_n(x)}{\prod_{j=1}^{k}(x-x_j)}$ 在 (a,b) 上无实根, 即不变号.

无妨设 $q_{n-k}(x) > 0, \forall x \in (a,b)$.

若 $k < n$, 即 φ_n 与 k 次多项式 $\prod_{j=1}^{k}(x-x_j)$ 正交, 即

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\varphi_n, \prod_{j=1}^{k}(x-x_j)\right) = \int_a^b \rho(x)\varphi_n(x)\prod_{j=1}^{k}(x-x_j)dx \\ &= \int_a^b \rho(x)q_{n-k}(x)\left[\prod_{j=1}^{k}(x-x_j)\right]^2 dx > 0. \end{aligned}$$

矛盾！ 故必有 $k = n$, 即 $\varphi_n(x)$ 在 (a,b) 上有 n 个实单根. $\triangleright$

Christoffel-Darboux 恒等式

5. 设 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{+\infty}$ 为正交多项式, a_n 为 φ_n 的首项系数, $(\varphi_j, \varphi_k) = \delta_{jk}$, 令 $\alpha_n = a_{n+1}/a_n$, 有 $\forall x, y \in [a, b]$,

(7.4) $$(x-y)\sum_{k=0}^{n}\varphi_k(x)\varphi_k(y) = \frac{1}{\alpha_n}[\varphi_{n+1}(x)\varphi_n(y) - \varphi_{n+1}(y)\varphi_n(x)]$$

$\lhd$由性质 **3:** $\varphi_{n+1}(x)\varphi_n(y) = (\alpha_n x+\beta_n)\varphi_n(x)\varphi_n(y)+\gamma_{n-1}\varphi_{n-1}(x)\varphi_n(y)$

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

$\Longrightarrow$ 右端$= (x-y)\varphi_n(x)\varphi_n(y) + \frac{\gamma_{n-1}}{\alpha_n}[\varphi_{n-1}(x)\varphi_n(y) - \varphi_{n-1}(y)\varphi_n(x)]$

又$\gamma_{n-1} = -\alpha(\varphi_n, x\varphi_{n-1}) = -\alpha(\varphi_n, a_{n-1}x^n) = -\alpha_n(\varphi_n, \frac{a_{n-1}}{a_n}\varphi_n) = -\frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}}$

$\Longrightarrow$右端$= (x-y)\varphi_n(x)\varphi_n(y) + \frac{1}{\alpha_{n-1}}[\varphi_n(x)\varphi_{n-1}(y) - \varphi_n(y)\varphi_{n-1}(x)]$

(递推即得)$= (x-y)\sum_{k=0}^{n}\varphi_k(x)\varphi_k(y)$ $\rhd$

正交多项式例举—Legendre 多项式

1. Legendre 多项式

Legendre 多项式是以下 Legendre 方程的解

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

我们也可以定义: 在区间 $[-1, 1]$ 上用权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 定义出的内积下正交多项式 $P_n(x)$ $(n = 0, 1, \cdots)$ 称为 **Legendre 多项式.**

1814年 Rodrigure 给出了更容易计算的表达式

$$P_0(x) = 1, \quad P_n(x) = \frac{1}{n!2^n}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n], \quad n \geq 1$$

正交多项式例举—Legendre 多项式

易见上式定义的 $P_n(x)$ 确实是 n 次多项式, 首项系数为

$$\frac{1}{n!2^n}2n\cdot(2n-1)\cdots\cdots(n+1)=\frac{(2n)!}{(n!)^2 2^n}$$

如果令

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

那么 $\{\widetilde{P}_n(x)\}$ 为首项系数为 **1** 的 **Legendre** 多项式.

正交多项式例举—Legendre 多项式

Legendre 多项式具有以下性质:

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

$\triangleleft$ **无妨设** $n \geq m$**. 利用分部积分公式有**

$$m!n!2^{m+n}\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = \int_{-1}^{1} \frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]\frac{d^m}{dx^m}[(x^2-1)^m]dx$$

$$= \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}[(x^2-1)^n]\frac{d^m}{dx^m}[(x^2-1)^m]\Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}[(x^2-1)^n]\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}[(x^2-1)^m]dx$$

$$= (\text{重复分部积分}) \cdots = (-1)^n \int_{-1}^{1} (x^2-1)^n \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}}[(x^2-1)^m]dx.$$

因而, 若 $n > m$**, 则上面积分**$= 0$**.**

正交多项式例举—Legendre 多项式

如果 $n=m$, 则积分$=(-1)^n\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n(2n)!dx=(2n)!\int_{-1}^{1}(1-x^2)^n dx$

令 $x=\sin\theta$, 上面积分$=\displaystyle\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos^{2n+1}\theta d\theta\equiv I_{2n+1}$, 然后利用递推

公式: $I_{2n+1}=\frac{2n}{2n+1}I_{2n-1}$ 及 $I_1=\displaystyle\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos\theta d\theta=2$ 得

$$I_{2n+1}=\frac{2n\cdot(2n-2)\cdots 2}{(2n+1)\cdot(2n-1)\cdots 3}\cdot 2=\frac{(2^n n!)^2}{(2n+1)!}2$$

$\Longrightarrow (P_n,P_n)=\frac{2}{2n+1}$. $\triangleright$

2) 递推关系: (默认 $P_{-1}\equiv 0$)

$(n+1)P_{n+1}(x)=(2n+1)xP_n(x)-nP_{n-1}(x)$, $n=0,1,\cdots$

正交多项式例举—Legendre 多项式

◁ 已证 $\{P_n\}$ 为正交多项式序列, 由前面已证的递推关系, 有

$$P_{n+1} = (\alpha_n x + \beta_n) P_n + \gamma_{n-1} P_{n-1},$$

其中 $\alpha_n = \frac{a_{n+1}}{a_n}$, $\beta_n = -\alpha_n (xP_n, P_n)/(P_n, P_n)$,

$\gamma_{n-1} = -\alpha_n (P_n, xP_{n-1})/(P_{n-1}, P_{n-1})$.

因 $a_n = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$, $(P_n, P_n) = \frac{2}{2n+1} \Longrightarrow \alpha_n = \frac{2n+1}{n+1}$.

利用正交性

$$\gamma_{n-1} = -\alpha_n \frac{a_{n-1}}{a_n} \frac{(P_n, P_n)}{(P_{n-1}, P_{n-1})} = -\frac{2n+1}{n+1} \frac{n}{2n-1} \frac{2}{2n+1} \Big/ \frac{2}{2n-1} = -\frac{n}{n+1}.$$

而利用分部积分

$$(xP_n, P_n) = -(P_{n-1}, P_n) - (xP_{n-1}, P_{n+1}) = 0 \Longrightarrow \beta_n = 0. \quad \triangleright$$

利用上述递推关系: $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$, $P_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2}$, $\cdots$

正交多项式例举—Legendre 多项式

3) 奇偶性: $P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$　　下标是偶数就是偶函数

$\triangleleft$ 由性质 **2)**, $P_0 = 1$, $P_1(x) = x$, 满足上面奇偶性要求. 下面对 n 进行归纳证明. 由上面递推关系

$$
\begin{aligned}
(n+1)P_{n+1}(-x) &= (2n+1)(-x)P_n(-x) - nP_{n-1}(-x) \\
\overset{\text{由归纳假设}}{=} & \quad (2n+1)(-x)(-1)^n P_n(x) - n(-1)^{n-1}P_{n-1}(x) \\
= & \quad (-1)^{n+1}[(2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)] \\
\equiv & \quad (-1)^{n+1}(n+1)P_{n+1}(x). \quad \triangleright
\end{aligned}
$$

4) $P_n(x)$ 在 $(-1,1)$ 上有 n 个不同零点.

$\triangleleft$ 为前面一般正交多项式性质**4)**的直接推论. $\triangleright$

正交多项式例举—Tchebychev 多项式

在 $[-1,1]$ 上用权函数 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 得到的正交多项式记为 $\{T_n\}_{n\geq 0}$，其表达式也可写成 $T_n(x)=\cos(n\arccos x)$，$n\geq 0$。

由此可以看出T(x)的最大值是1

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

$\lhd$ 令 $x=\cos\theta$，$(T_n,T_m)=\displaystyle\int_{\pi}^{0}\frac{\cos n\theta\cos m\theta}{\sin\theta}(-\sin\theta)d\theta=\int_0^{\pi}\frac{\cos(n-m)\theta+\cos(n+m)\theta}{2}d\theta$. 由此可得，$n=m=0$ 时，显然 $(T_0,T_0)=\displaystyle\int_0^{\pi}1d\theta=\pi$. 当 $n=m\neq 0$ 时，$(T_n,T_n)=\displaystyle\int_0^{\pi}\frac{1}{2}d\theta=\frac{\pi}{2}$. 而 $n\neq m$ 时，$(T_n,T_m)=0$. $\rhd$

正交多项式例举—Tchebychev 多项式

2) 递推关系: $T_{n+1} = 2xT_n - T_{n-1}$. $T_0 = 1$, $T_1 = x$, $T_2 = 2x^2 - 1$, $\cdots$

$\lhd$ $T_{n+1}(x) = \cos(n+1)\arccos x \overset{x=\cos\theta}{=} \cos(n+1)\theta$, 类似的,

$T_{n-1}(x) = \cos(n-1)\theta \Longrightarrow T_{n+1} + T_{n-1} = 2\cos\theta \cdot \cos n\theta = 2xT_n$. $\rhd$

3) 奇偶性: $T_n(-x) = (-1)^n T_n(x)$

$\lhd$ 由2), $T_0 = 1$, $T_1 = x$, 且 $T_{n+1}(-x) = -2xT_n(-x) - T_{n-1}(-x) = (-1)^{n+1}[2xT_n(x) - T_{n-1}(x)] = (-1)^{n+1}T_{n+1}(x)$. $\rhd$

4) $T_n(x)$ 在 $(-1,1)$ 上有 n 个不同零点 $x_k = \cos\frac{2k-1}{2n}\pi$, $1 \le k \le n$

$\lhd$ 令 $x = \cos\theta$, 即有 $\cos n\theta$ 在 $n\theta = \frac{2k-1}{2}\pi$ 上为零. $\rhd$

正交多项式例举—Tchebychev 多项式

5) $T_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 上有 $n+1$ 个极点 $x_k^* = \cos\frac{k}{n}\pi$, $k=0,\cdots,n$

$\triangleleft$ $\cos n\theta$ 在 $n\theta = k\pi$ 上为± 1, 当 k 为偶/奇数时. $\triangleright$ 因此为偏差点

6) $T_n(x)$ 的首项系数为 2^{n-1}, $n \geq 1$. $\triangleleft$ 由递推关系 **2)** 即得. $\triangleright$

7) 在首项系数为 1 的n次多项式中, $2^{1-n}T_n$ 与0的偏差最小, 为2^{1-n}. 换句话说 $\forall$ 首项系数为 1 的$q_n(x)$, $\|q_n\|_\infty \geq 2^{1-n}$.

$\triangleleft$ 记 $2^{1-n}T_n(x) = x^n - p_{n-1}^*(x)$.首1n次多项式里这个无穷范数最小

因为 $T_n(x)$ 有 $n+1$ 个轮流为正负的~~极点~~x_k^* 偏差点

$\Longrightarrow$ $p_{n-1}^*(x)$ 为 x^n 在 $[-1,1]$ 上的最佳一致逼近 $n-1$ 次多项式

$\Longrightarrow$ $\forall q_n(x) = x^n - p_{n-1}(x)$.

自然有 $\|q_n\|_\infty = \|x^n - p_{n-1}\|_\infty \geq \left\|x^n - p_{n-1}^*\right\|_\infty = 2^{1-n}$. $\triangleright$

正交多项式例举—Laguerre 多项式

在 $[0,+\infty)$ 上以权函数 $\rho=e^{-x}$ 构成的正交多项式称为 **Laguerre** 多项式, 表达式可写成

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n}{dx^n}(x^ne^{-x}),\quad n\geq 0.$$

正交性: $(L_n,L_m)=\int_0^{+\infty}e^{-x}L_n(x)L_m(x)=\begin{cases}0, & n\neq m\\ (n!)^2, & n=m\end{cases}$

递推关系: $L_{n+1}(x)=(2n+1-x)L_n(x)-n^2L_{n-1}(x)$, $n=1,2,\cdots$

$L_0(x)=1$, $L_1(x)=1-x$, $L_2(x)=2-4x+x^2$, $\cdots$

正交多项式例举—Hermite 多项式

在 $(-\infty, +\infty)$ 上以权函数 $\rho = e^{-x^2}$ 构成的正交多项式称为 Hermite 多项式, 表达式可写成

可以理解为某种正态**分布的核密度**

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2}), \quad n \geq 0.$$

正交性: $(H_n, H_m) = \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \begin{cases} 0, & n \neq m \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & n = m \end{cases}$

递推关系: $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$, $n = 1, 2, \cdots$

$$H_0(x) = 1,\ H_1(x) = 2x,\ H_2(x) = 4x^2 - 2,\ \cdots$$

奇偶性: $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$.

目录 I

目录 II

用正交函数做最佳平方逼近

设 $f \in L^2_\rho[a,b] = \left\{ f : [a,b] \to \mathbb{R} \,\middle|\, \|f\|_2^2 = \int_a^b \rho(x)|f(x)|^2 dx < +\infty \right\}$

$\mathfrak{S} = \mathrm{span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\}$, 且设 $(\varphi_i, \varphi_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ A_i > 0, & i = j \end{cases}$

为求 f 在 $\mathfrak{S}$ 上的最佳平方逼近 S_n^* s.t. $\|f - S_n^*\|_2^2 = \inf_{S \in \mathfrak{S}} \|f - S\|_2^2$

设 $S_n^* = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^* \varphi_j(x)$, 由前面最佳平方逼近理论, 及基函数 $\{\varphi_j\}$ 的正交性, 我们有

$$\alpha_k^*(\varphi_k, \varphi_k) = (f, \varphi_k) \Longrightarrow \alpha_k^* = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}. \tag{7.5}$$

前面已经证明过 S_n^* 确实为 f 在 $\mathfrak{S}$ 上的最佳平方逼近.

用正交函数做最佳平方逼近

令误差 $\delta_n = f - S_n^*$**，由** $(f, \varphi_k) = \alpha_k^*(\varphi_k, \varphi_k) \Longrightarrow (f, S_n^*) = (S_n^*, S_n^*)$

$\Longrightarrow \|\delta_n\|_2^2 = (f, f) + (S_n^*, S_n^*) - 2(f, S_n^*) = (f, f) - (S_n^*, S_n^*)$

定义 7.6

$\forall f \in L_\rho[a, b]$, $\{\varphi_j\}_{j\geq 0}$ 为正交函数组(不一定是多项式), 称

(7.6) $$\alpha_j = \frac{(f, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)} = \frac{1}{(\varphi_j, \varphi_j)} \int_a^b \rho(x) f(x) \varphi_j(x) dx, \ j = 0, 1, \cdots$$

为 f 在正交函数组 $\{\varphi_j\}_{j\geq 0}$ 下的广义Fourier系数, 相应地称级数 $\sum_{j=0}^{+\infty} \alpha_j \varphi_j(x)$ 为 f 的 广义 Fourier 级数.

用正交函数做最佳平方逼近

从上面最佳平方逼近的定义可以看出, f 的最佳平方逼近就是它的广义**Fourier**级数前 $n+1$ 项的部分和. 且由

$$0 \le \|\delta_n\|_2^2 = (f,f) - (S_n^*, S_n^*) \Longrightarrow (S_n^*, S_n^*) = \sum_{j=0}^{n} (\alpha_j^* \|\varphi_j\|_2)^2 \le \|f\|_2^2$$

此不等式也称为 **Bessel 不等式**.

定理 7.7 (L^2 范数下的收敛性)

设 $f \in C[a,b]$, S_n^* 为 f 在 $\mathfrak{S} = \mathrm{span}\{\varphi_0, \cdots, \varphi_n\}$ 上的最佳平方逼近多项式, 则有 $\lim\limits_{n\to+\infty} \|f - S_n^*\|_2 = 0$.

$\triangleleft$ 令 $J_n = \|f - S_n^*\|_2^2 = (\delta_n, \delta_n) = \|f\|_2^2 - \|S_n^*\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \sum\limits_{j=0}^{n} \dfrac{(f,\varphi_j)^2}{(\varphi_j,\varphi_j)}$

用正交函数做最佳平方逼近

显然有 $J_n \geq J_{n+1} \geq \cdots \geq 0$, 即 $\{J_n\} \downarrow 0$.

由 **Weistrass** 引理, $\forall \varepsilon > 0$, $\exists p_m^\varepsilon(x)$, *s.t.*

$$\|f - p_m^\varepsilon\|_\infty \leq \frac{\varepsilon}{C}, \quad \text{其中 } C = \sqrt{\int_a^b \rho(x)dx}.$$

这样 $J_m = \|f\|_2^2 - \|S_m^*\|_2^2 \leq \|f - p_m^\varepsilon\|_2^2$

$$= \int_a^b \rho(x)|f(x) - p_m^\varepsilon(x)|^2 dx \leq \frac{\varepsilon^2}{C^2} \cdot \int_a^b \rho(x)dx = \varepsilon^2.$$

这样由 $\{J_n\} \downarrow 0$, 知 $\forall n \geq m$, $J_n \leq J_m \leq \varepsilon^2$. 即证明了 $J_n \to 0$ $\triangleright$

即可写成 $\|f\|_2^2 = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{(f, \varphi_j)^2}{(\varphi_j, \varphi_j)}$. 这也称为 **Parseval 等式**.

用Legendre多项式做最佳平方逼近

可以将 Legendre 多项式归一化, 令

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{n!2^n}\sqrt{\frac{2n+1}{2}}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n, \quad n = 0, 1, \cdots$$

则有 $(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{nm}$. 这样对 $f \in C[-1,1]$, f 在 $\mathfrak{S} = \mathrm{span}\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 上的最佳平方逼近为

$$S_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j^* \varphi_j(x), \quad \alpha_j^* = \int_{-1}^{1} f(x)\varphi_j(x)dx$$

对一般区间上 $f \in C[a,b]$, 令 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$, 即 $t = \frac{2}{b-a}(x - \frac{a+b}{2})$, 有 $t \in [-1,1] \Longleftrightarrow x \in [a,b]$.

用Legendre多项式做最佳平方逼近

对首项系数为1的Legendre多项式 $\tilde{P}_n = \frac{n!}{(2n)!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$，有以下定理

$(t) = f(x(t))$ 的 $S_n^*(t(x))$ 即为 f 之最佳平方逼近

定理 7.8

在$[-1,1]$上所有首项系数为1的n次多项式中，$\tilde{P}_n(x)$ 的二范数最小.

$\triangleleft$ 令 $q_n(x) = x^n + q_{n-1}(x) = \tilde{P}_n(x) + \sum_{k=0}^{n-1} c_k \tilde{P}_k(x)$. 有

$$\|q_n\|_2^2 = (\tilde{P}_n, \tilde{P}_n) + \sum_{k=0}^{n-1} c_k^2 (\tilde{P}_k, \tilde{P}_k) \geq (\tilde{P}_n, \tilde{P}_n) = \left\|\tilde{P}_n\right\|_2^2. \quad \triangleright$$

用 Tchebychev 多项式做最佳平方逼近

在 $[-1,1]$ 上, 取 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, 则 f 在 $\mathfrak{S}=\text{span}\{T_j\}_{j=0}^n$ 上的最佳平方逼近为

$$S_n^*(x)=\sum_{j=0}^n \alpha_j T_j(x), \quad \alpha_j=\frac{(f,T_j)}{(T_j,T_j)}, \quad (T_j,T_j)=\begin{cases}\pi, & j=0\\ \frac{\pi}{2}, & j\neq 0\end{cases}$$

对一般区域可做上述坐标变换得到.

例 7.2

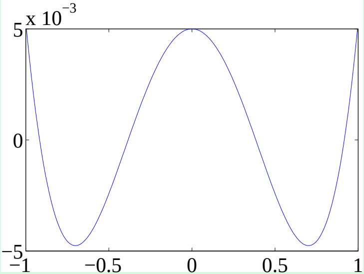
取 $\rho=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, 求 $f(x)=\cos x$ 在 $[-1,1]$ 上的最佳三次平方逼近.

解: $(f,T_0)=\displaystyle\int_{-1}^1 \frac{\cos x}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx 2.404$, $\qquad (f,T_1)=0$,

用 Tchebychev 多项式做最佳平方逼近

$$(f, T_2) = \int_{-1}^{1} \frac{(2x^2-1)\cos x}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx -0.3610, \quad (f, T_3) = 0.$$

因此 $S_3^*(x) = \dfrac{2.404}{\pi} - 0.3610\dfrac{2}{\pi}(2x^2-1) \approx -0.460x^2 + 0.995$



从左图所示的误差 $f - S_3^*$ 可以看出，S_3^* 几乎满足了最佳一致逼近三次多项式的性质. 因为

$\|f - S_3^*\| \approx 5.00 \times 10^{-3}$，且 S_3^* 几乎具有 5 个轮流为正负的偏差点. $\square$

近似最佳一致逼近—截断级数近似

从上例可以看出, 使用截断 **Tchebychev** 级数的办法可以得到近似最佳一致逼近多项式: 设 $f \in C[-1,1]$ (一般区间可以通过坐标变换实现), 其广义 **Fourier** 级数 (**Tchebychev** 级数) 为

$$f \sim \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty} c_k T_k(x), \quad c_k = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx, \; k = 0, 1, \cdots .$$

若取前 $n+1$ 项的部分和记成

$$S_n^*(x) = \frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^{n} c_k T_k(x),$$

那么 S_n^* 为权 $\rho = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 下 f 的最佳平方逼近 n 次多项式.

截断 Tchebychev 级数近似最佳一致逼近

我们有 (在带权二范数意义下)

$$f(x) - S_n^*(x) = c_{n+1}T_{n+1}(x) + \sum_{k=n+2}^{+\infty} c_k T_k(x).$$

设 $f \in C^{(r)}[-1,1]$ **(**$r \geq 2$**), 有**

$$\begin{aligned}
\frac{\pi}{2}c_k &= \int_{-1}^{1} \frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \overset{x=\cos\theta}{=} \int_0^{\pi} f(\cos\theta)\cos k\theta d\theta \\
(\text{分部积分}) &= \int_0^{\pi} f(\cos\theta)\frac{1}{k}d\sin k\theta \\
&= f(\cos\theta)\frac{\sin k\theta}{k}\Big|_0^{\pi} - \frac{1}{k}\int_0^{\pi} \sin k\theta f'(\cos\theta)(-\sin\theta)d\theta \\
&= \frac{1}{2k}\int_0^{\pi} f'(\cos\theta)[\cos(k-1)\theta - \cos(k+1)\theta]d\theta = \cdots
\end{aligned}$$

截断 Tchebychev 级数近似最佳一致逼近

重复分部积分过程直到 $f^{(r)}$, 可以得到 $|c_k| \sim \dfrac{C}{k^r}$.

这样由 $|T_k(x)| \le 1$ 得

$$\left|\sum_{k=n+2}^{+\infty} c_k T_k(x)\right| \le C \sum_{k=n+2}^{+\infty} \frac{1}{k^r} \le C \int_{n+1}^{+\infty} \frac{1}{x^r} dx = \frac{C}{(r-1)(n+1)^{r-1}}$$

这样有 $f(x) - S_n^*(x) = c_{n+1}T_{n+1}(x) + \mathcal{O}\left(\dfrac{1}{(n+1)^{r-1}}\right)$.

而 $T_{n+1}(x)$ 有 $n+2$ 个轮流为正负 1 的极值点, 因此 S_n^* 可以看成 $f(x)$ 的近似最佳一致逼近多项式！ (如上例所示.)

光滑性越好，相差越小

Lagrange 插值余项极小化

我们也可以通过调整插值节点来构造好的插值多项式来得到近似最佳一致逼近. 假设我们在节点 $x_1, \cdots, x_n$ 上做插值, 由前面 **Lagrange** 插值余项公式

$$R_{n-1}(x) = f(x) - L_{n-1}(x) = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi)\omega_n(x),$$

其中 $\omega_n(x) = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$. 记 $M_n = \left\| f^{(n)} \right\|_\infty$, 有

$$\|R_{n-1}\|_\infty \le \frac{M_n}{n!} \|\omega_n\|_\infty .$$

如果能让 $\|\omega_n\|_\infty$ 尽可能小, 那么插值误差也就尽可能小了.

那么如何极小化 $\|\omega_n\|_\infty$ 呢?

Lagrange 插值余项极小化

我们知道 $\omega_n(x)$ 为首项系数为 1 的多项式. 而首项系数为 1 的多项式中, 模最小的多项式应该是 $2^{1-n}T_n(x)$. 即我们应该让 $\omega_n(x) = 2^{1-n}T_n(x)$, 即取插值节点 $x_1, \cdots, x_n$ 为 $T_n(x)$ 的零点:

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

这样有 $\|R_{n-1}\|_\infty \leq \frac{M_n}{n!2^{n-1}}$. 此时的 $L_{n-1}(x)$ 可以看成 f 的一个近似最佳一致逼近!

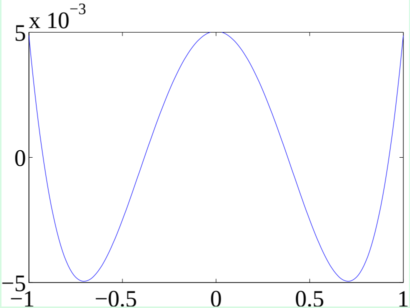
例 7.3

仍以上例为例说明, $f = \cos x$, 用 *Lagrange* 插值极小化方法求近似最佳一致逼近3次多项式.

Lagrange 插值余项极小化

解: 取 $T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$ 的零点 $x_j = \pm\sqrt{\frac{2\pm\sqrt{2}}{4}}$ 做插值. 得到 $L_3(x) = 0x^3 - 0.45953x^2 - 0x + 0.99496$. 与前面得到的 $S_3^*(x)$ 很接近.

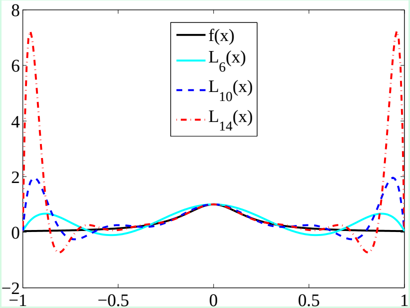
$$\|f - L_3\|_\infty = 5.0374 \times 10^{-3}.$$



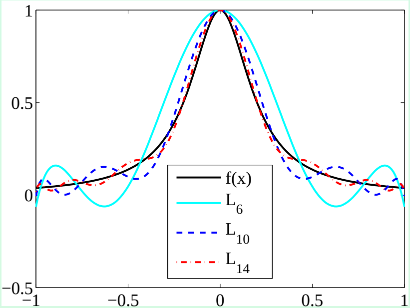
看左图的误差 $f(x) - L_3(x)$ 图像, 与 $f(x) - S_3^*(x)$ 类似. 也是几乎有 **5** 个轮流为正负的偏差点.

用 Tchebychev 多项式零点做插值

如果对函数 $\frac{1}{1+25x^2}$ 在 $[-1,1]$ 上用 **Tchebychev** 多项式的零点做插值, 就没有 **Runge** 现象.



用等距节点做多项式插值



用Tchebychev多项式零点插值

目录 I

目录 II

有理逼近

前面考虑的都是用光滑函数(多项式)来逼近连续函数, 显然用多项式来逼近函数有不少优点, 如:

1. 闭区间上可以用多项式来任意逼近连续函数;
2. 多项式易于计算（求值、求导以及积分等）.

但是我们也看到多项式逼近有时会产生伪振荡, 且若 f 本身有奇点时用多项式来逼近可能不是很好选择. 而用有理函数逼近有时效果更好, 可以克服这些缺点. 或者不是太光滑的时候

有理逼近

有理函数是多项式的推广:

$$R_{nm}(x)=\frac{P_n(x)}{Q_m(x)}=\frac{\sum_{k=0}^{n}a_kx^k}{\sum_{k=0}^{m}b_kx^k}. \tag{7.7}$$

通常取定 $b_0=1$, 且设 P_n 与 Q_m 无公因子.

我们采用有理逼近的目的在于, 在给定计算量下, 希望给出的有理逼近的误差比多项式小.

我们这里主要考虑基于 **Taylor** 展开来构造好的有理逼近.

Padé逼近

设 $f(x)$ **在** $x=0$ **处的Taylor展开式为**

$$f(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{x^k}{k!}f^{(k)}(0)=\sum_{k=0}^{N}\frac{x^k}{k!}f^{(k)}(0)+\frac{x^{N+1}}{(N+1)!}f^{(N+1)}(\xi_x)$$

取其部分和为 $P_N(x)=\sum_{k=0}^{N}\frac{x^k}{k!}f^{(k)}(0)=\sum_{k=0}^{N}c_kx^k$**, 即** $c_k=\frac{f^{(k)}(0)}{k!}$**.**

Padé逼近

定义 7.7 (Padé逼近)

若对 $f \in C^{(N+1)}[-a,a]$, $N = n+m$, 有理函数

$$R_{nm}(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k \Big/ \sum_{k=0}^{m} b_k x^k \quad \text{满足}$$

$$R_{nm}^{(k)}(0) = f^{(k)}(0) \equiv P_N^{(k)}(0), \quad k = 0, 1, \cdots, N \tag{7.8}$$

则称 $R_{nm}(x)$ 为 $f(x)$ 在 $x=0$ 处的 (n,m) 阶 *Padé* 逼近, 记为 $R(n,m)$.

由上述定义可知 $\left(P_N(x) - R_{nm}(x)\right)^{(k)}\Big|_{x=0} = 0$, $k = 0, 1, \cdots, N$. **这样设** $g(x)$ **为任一光滑函数, 那么按二项式展开即得,**

$$\left[g(x) \cdot \left(P_N(x) - R_{nm}(x)\right)\right]^{(k)}\Big|_{x=0} = 0.$$

Padé逼近

因此我们取 $g(x) = Q_m(x)$**, 令**

$h(x) = Q_m(x) \cdot (P_N - R_{nm})(x) = Q_m P_N - P_n$ **为一多项式, 有**

$$h^{(k)}(0) = 0, \quad k = 0, 1, \cdots, N$$

即 $0 = \left(Q_m P_N - P_n\right)^{(k)}(0) = \sum_{j=0}^{k} \begin{pmatrix} k \\ j \end{pmatrix} P_N^{(j)}(0) Q_m^{(k-j)}(0) - k! a_k$

$$= k! \left[\sum_{j=0}^{k} c_j b_{k-j} - a_k \right], \quad k = 0, 1, \cdots, N$$

当 $k - j > m$ **时,** $b_{k-j} \equiv 0$**;** $k > n$ **时,** $a_k \equiv 0$**. 因此有 (注意** $b_0 = 1$**)**

Padé逼近

(7.9) $$0 = c_k + \sum_{j=(k-m,0)_+}^{k-1} c_j b_{k-j}, \quad k = n+1, \cdots, n+m$$

(7.10) $$a_k = c_k + \sum_{j=(k-m,0)_+}^{k-1} c_j b_{k-j}, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

令 $H = \begin{pmatrix} c_n & c_{n-1} & \cdots & c_{n-m+1} \\ c_{n+1} & c_n & \cdots & c_{n-m+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{n+m-1} & c_{n+m-2} & \cdots & c_n \end{pmatrix}$, $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$, $\mathbf{c} = -\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ \vdots \\ c_{n+m} \end{pmatrix}$

先解方程组 $H\mathbf{b} = \mathbf{c}$ 得 $\mathbf{b}$, 然后再由 (7.10) 式计算得 $\{a_k\}_{k=0}^n$.

Padé逼近

这样我们有以下定理

定理 7.9

设 $f \in C^{(N+1)}(-a,a)$, $N = n+m$, 则

$$R_{nm} = \frac{P_n}{Q_m} \text{ 是 } f \text{ 的 } (n,m)\text{阶 } \textit{Padé} \text{ 逼近}$$

$$\Longleftrightarrow \quad P_n, Q_m \text{ 的系数 } a_k, b_k \text{ 满足关系式 (7.3)–(7.4).}$$

Padé逼近

例 7.4

求 $f(x)=\ln(1+x)$ 的 *Padé* 逼近 $R(2,1)$.

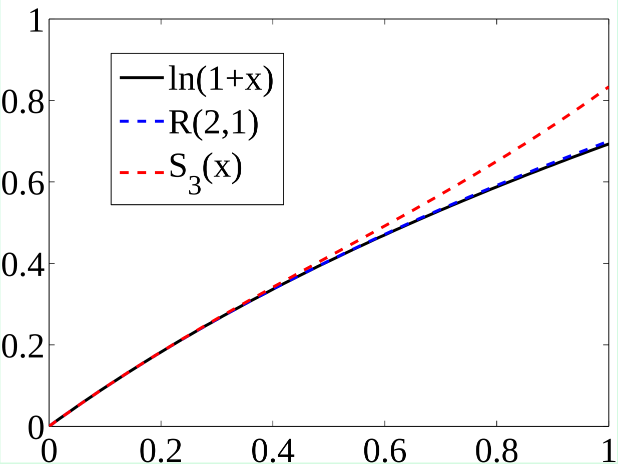
解: 由 $f(x)=\ln(1+x)$ **在零点的 Taylor 展开**

$\ln(1+x)=-\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-x)^k}{k}$ 有 $c_0=0$, $c_1=1$, $c_2=-\frac{1}{2}$, $c_3=\frac{1}{3}$.

对 $n=2, m=1$, $H=[c_2]=\frac{1}{2}\Longrightarrow b_0=1,\ b_1=-c_3/c_2=2/3$

$\Longrightarrow a_0=0,\ a_1=1,\ a_2=1/6$. 即 $R(2,1)=\dfrac{x+\frac{1}{6}x^2}{1+\frac{2}{3}x}=\dfrac{x^2+6x}{4x+6}$.

Padé逼近



从计算量看, 计算 $R(2,1)$ 的计算量与 $S_3 = -\sum_{k=1}^{3} \frac{(-x)^k}{k}$ 的计算量是相当的. 然而从左图的对比来看, 用**Padé**逼近得到的有理函数显然比截断**Taylor**级数得到的多项式好多了.

连分式

利用连分式可以减少计算有理函数的计算量.

我们先来看连分式的定义. 还是用 $\ln(1+x)$ 来作为例子:

$$\ln(1+x) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \cdots$$

如果取其部分和 $S_n(x) = -\sum_{k=1}^{n} \frac{(-x)^k}{k}$. 前面我们已经知道 $S_n(x)$ 的逼近效果不好. 但如果我们对上式做辗转相除, 即:

设 $\ln(1+x) = x \cdot \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{(-x)^{k-1}}{k} \equiv \frac{x}{Q_1(x)}$, 那么有

$$Q_1(x) = \left[\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{(-x)^{k-1}}{k}\right]^{-1} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{12} + \frac{x^3}{24} - \frac{19x^4}{720} + \cdots$$

连分式

进一步的令 $\ln(1+x) = x \cdot \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{(-x)^{k-1}}{k} \equiv \frac{x}{Q_1(x)} = \frac{x}{1 + \frac{x}{2}\frac{1}{Q_2(x)}}$,

即 $Q_2(x) = \frac{1}{1 - \frac{x}{6} + \frac{x^2}{12} - \frac{19x^3}{360} + \cdots} = 1 + \frac{x}{6} - \frac{x^2}{18} + \frac{4x^3}{135} + \cdots$

重复下去, 就可以得到

$$\ln(1+x) = \cfrac{x}{1 + \cfrac{x}{2 + \cfrac{x}{3 + \cfrac{x}{1 + \cfrac{x}{5} + \cdots}}}}$$

这就是连分式的形式. 也可以取前几项来作为 $\ln(1+x)$ 的近似.

连分式

例如分别取前面三项、五项截断:

$$R_{21}(x)=\cfrac{x}{1+\cfrac{x}{2+\cfrac{x}{3+x}}}=\frac{6x+x^2}{6+4x}$$

$$R_{32}(x)=\cfrac{x}{1+\cfrac{x}{2+\cfrac{x}{3+\cfrac{x}{1+\cfrac{x}{5}}}}}=\frac{x^3+21x^2+30x}{9x^2+36x+30}$$

可以发现它就是前面计算得到的 Padé 逼近 $R(2,1)$ 和 $R(3,2)$!

目录 I

目录 II

最小二乘拟合

我们下面看对离散数据如何得到拟合曲线?

实际观察数据 $\{(x_i, y_i), i = 0, 1, \cdots, m\}$ 一般都会有误差, 且 m 一般很大, 但我们一般希望用一个简单函数来拟合,

$$y = s_n^*(x), \qquad \textsf{s.t.} \qquad y_i \approx s_n^*(x_i),\ 0 \le i \le m.$$

s_n^* 中一般包含很少的参数 (比如 $n+1$ 个, $n \ll m$)

这样我们一般也不要求用插值的办法, 而是希望在某种范数意义下"整体误差"很小即可. 令

$$\delta_i = s_n^*(x_i) - y_i, \quad i = 0, 1, \cdots, m$$

最小二乘拟合

一般希望 $\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)\delta_i^2$ 尽可能小, 其中 $\omega(x)$ 为权函数.

定义 7.8 (用数学语言来描述即为:)

取 $\mathfrak{S}=\mathrm{span}\{\varphi_0,\cdots,\varphi_n\}$, 其中 $\varphi_i\in C[a,b]$. 假设点 $\{x_i\}_{i=0}^n\subset[a,b]$. 如果存在 $s_n^*\in\mathfrak{S}$, s.t.

$$\left\|\vec{\delta}\right\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)\delta_i^2\equiv\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)|y_i-s_n^*(x_i)|^2=\min_{s\in\mathfrak{S}}\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)|y_i-s(x_i)|^2$$

那么称 s_n^* 为 f 在 $\mathfrak{S}$ 上关于数据 $\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^m$ 的最小二乘拟合, 这里 $\omega(x)$ 为一个权函数.

最小二乘拟合

也可写成 $s_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^* \varphi_j(x)$, 上面求最小二乘拟合也就是求多元函数$I(a_0, \cdots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) \left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i \right]^2$ 的最小值点.

这样, 如果我们定义离散型内积如下

$$(f, g) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) f(x_i) g(x_i), \tag{7.11}$$

上面多元函数 $I(a_0, \cdots, a_n)$ 在点 $\vec{a}^* = (a_0^*, \cdots, a_n^*) \in \mathbb{R}^{n+1}$ 取极值的必要条件为

$$\left.\frac{\partial I}{\partial a_k}\right|_{\vec{a}^*} = 0 \Longleftrightarrow \sum_{j=0}^{n} a_j^* (\varphi_j, \varphi_k) = (f, \varphi_k), \quad k = 0, \cdots, n$$

最小二乘拟合

类似地定义

$$G=\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_0)\\ \vdots & & \vdots\\ (\varphi_0,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}$$ 为离散内积形式 **Gram** 矩阵.

仍然要 G 可逆才能保证法方程 $G\ \vec{a}=F$ 有唯一解.

但是这时如果仅仅要求 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 是线性无关函数, 可能无法保证 G 可逆!

最小二乘拟合

例 7.5

例如取 $\varphi_0 = \sin x$, $\varphi_1 = \sin 2x$, $x_j = j\pi$, $j = 0, 1, 2$. 显然 φ_0, φ_1 在 $[0, 2\pi]$ 上线性无关, 但 $\varphi_0(x_i) = \varphi_1(x_i) = 0$, 即 $G = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 为零矩阵, 当然不可逆.

为此，我们需要额外增加条件才能保证离散形式的法方程仍然有唯一解！

最小二乘拟合

定义 7.9 (Haar 条件)

若 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n \subset C[a,b]$ 的任意线性组合在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m (m \geq n)$ 上至多有 n 个不同的零点, 则称 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 上满足 *Haar* 条件.

定义 7.10 (离散点上线性无关)

称 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n \subset C[a,b]$ 在点集 $X = \{x_i\}_{i=0}^m (m \geq n)$ 上线性无关, 是指若存在 $\{a_j\}_{j=0}^n$ 使得

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) = 0, \quad i = 0, \cdots, m$$

则一定有 $a_0 = a_1 = \cdots = a_n = 0$.

最小二乘拟合

这样我们就有以下定理

定理 7.10

如果 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m(m \geq n)$ 上满足 *Haar* 条件, 则 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 线性无关, 且G可逆.　　Haar条件可以推出线性无关

$\lhd$ 用反证法. 假设 $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ 线性相关, 即存在一组系数 $\{a_j\} \neq 0$ *s.t.*

$$\sum_{j=0}^n a_j\varphi_j(x_i) = 0, \quad i = 0, 1, \cdots, m.$$

即组合 $\sum\limits_{j=0}^n a_j\varphi_j$ 在X 上有 $m+1$ 个零点, 与 **Haar** 条件矛盾.

最小二乘拟合

离散的线性无关可以推出Gram矩阵可逆

事实上任取 $\{x_{i_j}\}_{j=0}^{n} \subset X$, 都有 $\begin{vmatrix} \varphi_0(x_{i_0}) & \cdots & \varphi_0(x_{i_n}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_n(x_{i_0}) & \cdots & \varphi_n(x_{i_n}) \end{vmatrix} \neq 0$.

另外若 $|G| = 0 \Longrightarrow G \cdot \vec{a} = 0$ 有非零解 $\vec{a}$

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

$$\Longrightarrow \left(\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j, \sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k\right) = 0 \Longrightarrow \sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x_i) = 0, \ i = 0, \cdots, m$$

矛盾. $\triangleright$

最小二乘拟合

这样只要基函数 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}(m \geq n)$ 上满足 **Haar** 条件, 那么法方程 $G\vec{a} = F$ 存在唯一解 $\vec{a}^*$. 且完全类似之前的过程可以证明此必要条件也是充分条件, 即计算出来的点就是最小二乘拟合点: 指的是线性无关性

事实上有

$$
\begin{aligned}
(f-s, f-s) &= (f - s_n^* + s_n^* - s, f - s_n^* + s_n^* - s) \\
&= (f - s_n^*, f - s_n^*) + (s_n^* - s, s_n^* - s) + 2(f - s_n^*, s_n^* - s)
\end{aligned}
$$

最小二乘拟合

而 $(f - s_n^*, s_n^* - s) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\big(y_i - s_n^*(x_i)\big) \sum_{j=0}^{n} (a_j^* - a_j)\varphi_j(x_i)$

$$= \sum_{j=0}^{n} (a_j^* - a_j) \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\varphi_j(x_i) \left(y_i - \sum_{k=0}^{n} a_k^* \varphi_k(x_i) \right) = 0$$

即有 $\|f - s\|_2^2 \geq \|f - s_n^*\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \|s_n^*\|_2^2$.

一般如果取 $\varphi_j(x) = x^j$, 当 n 较大时, G 的条件数也会很坏! 也可以类似之前做法, 将多项式在离散形式内积下正交化, 得到对角形式法方程, 从而可以避免带来大的舍入误差.

用正交多项式做最小二乘拟合

同前面一样, 我们也可以用 **Gram-Schmit** 正交化的思想来得到在权 $\omega(x)$ 下的正交多项式:

设 $p_0(x) \equiv 1$, 取 $\varphi_0 = p_0/\|p_0\|_2$, 有 $\|\varphi_0\|_2 = 1$.

令 $p_k(x) = x^k - \sum_{j=0}^{k-1}(x^k, \varphi_j)\varphi_j(x)$, 再令 $\varphi_k = p_k/\|p_k\|_2$, 即有 $\|\varphi_k\|_2 = 1$, 可归纳证明 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{k}$ 是正交的. 且有以下递推公式

$$p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x), \quad \alpha_k = (xp_k, p_k)/(p_k, p_k), \quad \beta_k = (p_k, p_k)/(p_{k-1}, p_{k-1}), \quad k = 1, 2, \cdots;$$

这样用正交多项式 $\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$ 为基函数, 可以得到

$$s_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^*\varphi_j(x), \quad a_j^* = (y, \varphi_j).$$

用正交多项式做最小二乘拟合

我们来看一个例子.

例 7.6 (假设给了数据)

i	0	1	2	3	4
x_i	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	1.000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

假设用二次多项式来做拟合. 即令 $y = a + bx + cx^2$, 取 $\omega \equiv 1$.

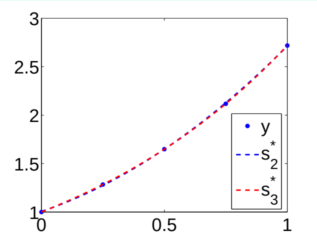
解: 直接计算可以得到 $s_2^*(x) = 0.84366x^2 + 0.86418x + 1.00514$.

也可再计算三次多项式拟合, 得

$$s_3^*(x) = 0.27893x^3 + 0.42526x^2 + 1.0141x + 0.99991$$

最小二乘拟合

做图对比如左下图所示. 计算一下误差:



$$\delta_2^* = \sqrt{\sum_{j=0}^{4}[f(x_i) - s_2^*(x_i)]^2} = 1.66 \times 10^{-2}$$

$$\delta_3^* = \sqrt{\sum_{j=0}^{4}[f(x_i) - s_3^*(x_i)]^2} = 7.77 \times 10^{-3}$$

即三次多项式逼近得更好一些。若用线性函数逼近会更差.

从上例可以看出, 对于给定的数据 $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{m}$, 采用什么样的函数类 $\mathfrak{S} = \text{span}\{\varphi_j\}_{j=0}^{n}$ 来做逼近也是差别很大的.

线性化方法做最小二乘拟合

如果有时知道大致模型，不知道参数，那么一般会得到一个非线性最小二乘问题，即最终需要求解非线性方程组，这个计算量太大。因此这时一般想办法将之线性化。

例 7.7 (假设给了数据)

x_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46
$\bar{y}_i = \ln y_i$	1.629	1.756	1.876	2.008	2.135

根据经验，假设用 $y = ae^{bx}$ 来做拟合。

线性化方法做最小二乘拟合

即可令 $\bar{y} = \ln y = \ln a + bx$, 这样 $\bar{y}(x)$ 为线性函数. 取 $\omega \equiv 1$:
可以用正交多项式: $p_0 \equiv 1$, $(p_0, p_0) = 5$.

$$p_1(x) = x - \frac{(x, p_0)}{(p_0, p_0)} p_0 = x - \sum_{i=0}^{4} \frac{x_i p_0}{5} p_0 = x - 1.50$$

计算一下有 $(p_1, p_1) = 0.625$, $(p_0, \bar{y}) = 9.405$, $(p_1, \bar{y}) = 0.3161$.

$$\Longrightarrow \quad a_0 = \frac{9.405}{5} = 1.881, \quad a_1 = \frac{0.3161}{0.625} = 0.5057$$

$$\Longrightarrow \quad \bar{y}(x) = \ln a + bx = a_0 p_0 + a_1 p_1 = 1.881 + 0.5057(x - 1.50)$$

$$\Longrightarrow \quad b = a_1 = 0.5057, \quad a = e^{1.1225} = 3.0725$$

即 $\quad y(x) \sim 3.0725 e^{0.5057x}$

目录 I

目录 II

周期函数的最佳平方逼近

减少计算量

当 $f(x)$ 为周期函数时，采用三角函数来逼近更为合适.

记 $X_{2\pi} = \{g \in C(\mathbb{R}) \,|\, g(x+2\pi) = g(x),\ \forall x \in \mathbb{R}\}$，可以在空间 $X_{2\pi}$ 上定义内积

(7.12) $$(f,g)_{2\pi} = \int_0^{2\pi} f(x)g(x)dx,$$

由此可以诱导出范数 $\|f\|_2 = \sqrt{(f,f)_{2\pi}}$.

如果取 $\mathfrak{S} = \mathrm{span}\{1, \cos x, \sin x, \cdots, \cos nx, \sin nx\}$，显然有 $\mathfrak{S} \subset X_{2\pi}$ 为 $2n+1$ 维子空间.

周期函数的最佳平方逼近

这样 $\forall f \in X_{2\pi}$, 在 $\mathfrak{S}$ 中寻找 f 的最佳平方逼近函数 s_n^* s.t.

$$\|f - s_n^*\|_2 = \inf_{s\in\mathfrak{S}} \|f - s\|_2.$$

容易验证函数组 $\{1, \cos x, \sin x, \cdots, \cos nx, \sin nx\}$ 满足以下正交条件:

也被称作三角多项式

(7.13)

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \sin mx dx = 0,$$

$$\int_0^{2\pi} \cos kx \cos mx dx = \begin{cases} 2\pi, & k = m = 0, \\ \pi, & k = m \neq 0, \\ 0, & k \neq m. \end{cases}$$

$$\int_0^{2\pi} \sin kx \sin mx dx = \begin{cases} \pi, & k = m \neq 0, \\ 0, & k \neq m. \end{cases}$$

周期函数的最佳平方逼近

关于最佳平方逼近 $s_n^*(x) = \dfrac{a_0}{2} + \sum\limits_{k=0}^{n}(a_k \cos kx + b_k \sin kx)$ 我们有以下定理

定理 7.11

三角多项式

$$s_n^*(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=0}^{n}(a_k \cos kx + b_k \sin kx) \tag{7.14}$$

是 f 的最佳平方逼近的充要条件是

$$\begin{cases} a_k = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\cos kx dx, & k = 0, 1, \cdots, n, \\ b_k = \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\sin kx dx, & k = 1, 2, \cdots, n. \end{cases} \tag{7.15}$$

周期函数的最佳平方逼近

◁ 由前面的一般形式下的系数计算公式 (7.5)

$$s_n^*(x) = \sum_{k=0}^{N} c_k \varphi_k(x), \quad c_k = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

和三角多项式的性质 (7.13) 即得 (7.15). ▷

对于上面的最佳平方逼近多项式(7.14), 类似前面证明过程可得

$$\|f - s_n^*\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \|s_n^*\|_2^2 \geq 0,$$

有一定的稳定性!

由此可以得到三角多项式情形的 **Bessel** 不等式

(7.16)
$$\frac{1}{2}a_0^2 + \sum_{k=1}^{n}(a_k^2 + b_k^2) \leq \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}[f(x)]^2 dx.$$

周期函数的最佳平方逼近

类似于定理7.7的证明, 易得以下定理结论

定理 7.12 (Parseval 等式)

设 f 为 2π 周期连续函数, 那么系数由(7.15)定义的 Fourier 级数部分和 s_n^* 平方收敛到 f, 并有以下 Parseval 等式, 即

$$\lim_{n\to+\infty}\int_0^{2\pi}[f(x)-s_n^*(x)]^2dx=0, \tag{7.17}$$

$$\frac{1}{2}a_0^2+\sum_{k=1}^{\infty}(a_k^2+b_k^2)=\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi}[f(x)]^2dx. \tag{7.18}$$

周期函数的最佳平方逼近—离散情形

实际问题中，我们常常仅有离散点集上的函数值，因此研究离散情形的周期数据的拟合问题也是具有实用价值的.

假设我们有周期为 2π 的函数 f 的 N 个等距节点 $\{\frac{2\pi k}{N}\}_{k=0}^{N-1}$ 上的值

$$f\left(\frac{2\pi k}{N}\right), \quad k = 0, 1, \cdots, N-1 \tag{7.19}$$

利用 f 的周期性，实际上对任何整数 $m \in \mathbb{Z}$, $f(\frac{2\pi m}{N})$ 都可以得到.

我们依然取函数组 $\{1, \cos x, \sin x, \cdots, \cos nx, \sin nx\}$, 易见它们关于离散点 $\{x_j = \frac{2\pi j}{N}\}_{j=0}^{N-1}$ 在离散内积意义下是正交的.

即对于 $k, m = 0, 1, \cdots, n$ $(n < \frac{N}{2})$, 有

周期函数的最佳平方逼近—离散情形

$$(7.20)\quad \begin{aligned} &\sum_{j=0}^{N-1} \sin k\frac{2\pi j}{N} \sin m\frac{2\pi j}{N} = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ \frac{N}{2}, & k = m \neq 0; \end{cases} \\ &\sum_{j=0}^{N-1} \cos k\frac{2\pi j}{N} \sin m\frac{2\pi j}{N} = 0; \\ &\sum_{j=0}^{N-1} \cos k\frac{2\pi j}{N} \cos m\frac{2\pi j}{N} = \begin{cases} 0, & k \neq m, \\ \frac{N}{2}, & k = m \neq 0, \\ N, & k = m = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

这样给了 f 在点 $\{x_j = \frac{2\pi j}{N}\}_{j=0}^{N-1}$ 上的值之后, 在空间 $\mathfrak{S} = \mathrm{span}\{1, \cos x, \sin x, \cdots, \cos nx, \sin nx\}$ 上做最小二乘拟合得

周期函数的最佳平方逼近—离散情形

(7.21) $$s_n^*(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{n}(a_k \cos kx + b_k \sin kx), \quad n < \frac{N}{2}.$$

其中

(7.22)
$$a_k = \frac{2}{N}\sum_{j=0}^{N-1} f\left(\frac{2\pi j}{N}\right)\cos\left(\frac{2\pi jk}{N}\right), \quad k = 0, 1, \cdots, n.$$
$$b_k = \frac{2}{N}\sum_{j=0}^{N-1} f\left(\frac{2\pi j}{N}\right)\sin\left(\frac{2\pi jk}{N}\right), \quad k = 1, 2, \cdots, n.$$

而 $N = 2n+1$ 情形即为三角函数插值!

设 f 是以 2π 为周期的复值函数, 假设给了 f 在 N 个节点 $\{x_j = \frac{2\pi j}{N}\}_{j=0}^{N-1}$ 上的值. 取基函数 $\psi_m(x) = e^{imx}$.

复值周期函数的最佳平方逼近

易见 $\{\psi_m\}_{m=0}^{n}$ 在节点 $\{x_j=\frac{2\pi j}{N}\}_{j=0}^{N-1}$ 上为正交函数组:

(7.23)

$$(\psi_m,\psi_k)=\sum_{j=0}^{N-1}\psi_m(x_j)\bar{\psi}_k(x_j)=\sum_{j=0}^{N-1}e^{\mathrm{i}(m-k)\frac{2\pi j}{N}}=\begin{cases}0, & m\neq k,\\ N, & m=k.\end{cases}$$

这样 f 在节点 $\{x_j=\frac{2\pi j}{N}\}_{j=0}^{N-1}$ 上的最小二乘拟合为

(7.24)
$$s_n^*(x)=\sum_{k=0}^{n}c_k e^{\mathrm{i}kx},\quad n<N;$$

(7.25)
$$c_k=\frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1}f(x_j)e^{-\mathrm{i}kx_j},\quad k=0,1,\cdots,n.$$

复值周期函数的最佳平方逼近

如果 $n = N - 1$, 即 s_n^* 为复值周期函数 f 在节点 $\{x_j = \frac{2\pi j}{N}\}_{j=0}^{N-1}$ 上的三角插值, 这样即有

$$s_n^*(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, \cdots, N-1$$

由 (7.24) 式有

$$f(x_j) = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{\mathrm{i}kx_j}, \quad j = 0, 1, \cdots, N-1 \tag{7.26}$$

即，利用(7.25)由 $\{f(x_j)\}_{j=0}^{N-1}$ 求 $\{c_k\}_{k=0}^{N-1}$ 的过程称为 f 的离散 Fourier 变换; 利用(7.26)由 $\{c_k\}_{k=0}^{N-1}$ 求 $\{f(x_j)\}_{j=0}^{N-1}$ 的过程称为 f 的离散 Fourier 逆变换.

快速 Fourier 变换

显然，如果按照 (7.25)–(7.26) 来计算离散**Fourier**（逆）变换, 需要 $\mathcal{O}(N^2)$ 次乘除法和加减法. 为了减少计算量, **1965** 年 **Cooley** 和 **Tukey** 提出了关于复**Fourier**级数的快速“**Fourier** 变换”, 引起了特别重视. 基本思想就是尽可能利用周期性来减少乘除法次数.

令 $\omega = e^{-\frac{i2\pi}{N}}$, $g_m = \frac{1}{N} f_m$, **DFT** (7.25) 式可写成:

$$c_k = \sum_{m=0}^{N-1} g_m \omega^{mk}, \quad k = 0, 1, \cdots, N-1 \tag{7.27}$$

此式也称为长度为 N 的 **DFT.** 当 N 很大时, 我们尽可能希望利用其因子分解来降低计算量.

快速 Fourier 变换

设 $N = N_1N_2$, (其中 $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$), 并记 (注意 $m, k \le N-1$)

$$m = N_1m_2 + m_1, \quad k = N_2k_1 + k_2,$$

这里 $m_1, k_1 = 0, \cdots, N_1-1$; $m_2, k_2 = 0, \cdots, N_2-1$. 利用 $\omega^N = 1$, 及上面 m, k 的表达式代入 (7.27), 并记 $\omega_1 = \omega^{N_2} = \omega^{-\frac{i2\pi}{N_1}}$, $\omega_2 = \omega^{N_1} = \omega^{-\frac{i2\pi}{N_2}}$, 有

$$c_k = c_{N_2k_1+k_2} = \sum_{m_1=0}^{N_1-1} \omega_1^{m_1k_1} \omega^{m_1k_2} \left(\sum_{m_2=0}^{N_2-1} g_{N_1m_2+m_1} \omega_2^{m_2k_2} \right). \tag{7.28}$$

这样, 计算一个 $N_1 \times N_2$ 长度的 **DFT** 转化为计算 N_1 个长度为 N_2 的 **DFT** 及计算 N_2 个长度为 N_1 的 **DFT**.

快速 Fourier 变换

具体来说可以分成以下三步来完成:

1. 对应于 N_1 个不同的 m_1, 计算长度为 N_2 的 **DFT**

$$\bar{g}_{m_1,k_2} = \sum_{m_2=0}^{N_2-1} g_{N_1 m_2+m_1} \omega_2^{m_2 k_2}. \tag{7.29}$$

2. 用因子 $\omega^{m_1 k_2}$ 乘以 $\bar{g}_{m_1,k_2}$, 记为 $\tilde{g}_{m_1,k_2}$.
3. 对每个 k_2 计算长度为 N_1 的 **DFT** (共 N_2 个)

$$c_{N_2 k_1+k_2} = \sum_{m_1=0}^{N_1-1} \omega_1^{m_1 k_1} \tilde{g}_{m_1,k_2}. \tag{7.30}$$

计算量从 $N^2=(N_1N_2)^2$ 变成 $N_1(N_2)^2+N_2(N_1)^2=N(N_1+N_2)$.

快速 Fourier 变换

重复以上过程便可以得到 $N\log N$ 计算量的算法.

无妨设 $N=2^n$ (一般情形会增加一些计算量, 但量级一样).

先把 m,k 用二进制表示

$$\begin{aligned} k &= 2^{n-1}k_{n-1}+2^{n-2}k_{n-2}+\cdots+2^1k_1+k_0, \\ m &= 2^{n-1}m_{n-1}+2^{n-2}m_{n-2}+\cdots+2^1m_1+m_0. \end{aligned}$$

其中 $k_j,m_j=0,1$ ($0\le j\le n-1$). 记 $k=(k_{n-1},\cdots,k_1,k_0)$, $m=(m_{n-1},\cdots,m_1,m_0)$. 把 (7.27) 可以写成

$$c(k_{n-1},\cdots,k_1,k_0)=\sum_{m_0=0}^{1}\cdots\sum_{m_{n-1}=0}^{1}\omega^{km}g(m_{n-1},\cdots,m_1,m_0). \tag{7.31}$$

快速 Fourier 变换

再注意到 km 可以写成

$$
\begin{aligned}
km = \ & (2^{n-1}k_{n-1} + \cdots + 2^1 k_1 + k_0)2^{n-1}m_{n-1} \\
+ \ & (2^{n-1}k_{n-1} + \cdots + k_0)2^{n-2}m_{n-2} + \cdots \\
+ \ & (2^{n-1}k_{n-1} + \cdots + k_0)m_0
\end{aligned}
$$

然后利用 $\omega^{2^n} = \omega^N = 1$ 可以做进一步简化:

$$
\begin{aligned}
\omega^{(2^{n-1}k_{n-1}+\cdots+2^1k_1+k_0)2^{n-1}m_{n-1}} &= \omega^{k_0 2^{n-1}m_{n-1}}, \\
\omega^{(2^{n-1}k_{n-1}+\cdots+2^1k_1+k_0)2^{n-2}m_{n-2}} &= \omega^{(2k_1+k_0)2^{n-2}m_{n-2}}, \\
&\cdots\cdots \\
\omega^{(2^{n-1}k_{n-1}+\cdots+2^1k_1+k_0)2^1m_1} &= \omega^{(2^{n-2}k_{n-2}+\cdots+k_0)2^1m_1}
\end{aligned}
$$

快速 Fourier 变换

这样可以把 (7.31) 化成

(7.32)
$$
\begin{aligned}
&c(k_{n-1},\cdots,k_1,k_0) \\
&=\sum_{m_0=0}^{1}\cdots\sum_{m_{n-1}=0}^{1} g(m_{n-1},\cdots,m_1,m_0)\cdot \\
&\quad \omega^{k_0 2^{n-1} m_{n-1}}\omega^{(2k_1+k_0)2^{n-2}m_{n-2}}\cdots\omega^{(2^{n-1}k_{n-1}+\cdots+2^1k_1+k_0)m_0}
\end{aligned}
$$

快速 Fourier 变换

最终可以得到以下算法(依次计算向外的求和)

$$
\begin{aligned}
g_1(k_0, m_{n-2}, \cdots, m_0) &= \sum_{m_{n-1}=0}^{1} g(m_{n-1}, \cdots, m_1, m_0)\omega^{k_0 2^{n-1} m_{n-1}} \\
g_2(k_0, k_1, m_{n-3}, \cdots, m_0) &= \sum_{m_{n-2}=0}^{1} g_1(k_0, m_{n-2}, \cdots, m_0)\omega^{(2k_1+k_0)2^{n-1} m_{n-1}} \\
&\cdots\cdots \\
g_n(k_0, k_1, \cdots, k_{n-1}) &= \sum_{m_0=0}^{1} g_{n-1}(k_0, \cdots, k_{n-2}, m_0)\omega^{(2^{n-1}k_{n-1}+\cdots+k_0)m_0} \\
c(k_0, k_1, \cdots, k_{n-1}) &= g_n(k_0, k_1, \cdots, k_{n-1})
\end{aligned}
$$

这样计算量从 N^2 减少为 $N \log_2 N$.