# 第3章

# 曲线拟合与函数逼近

在第 2 章中介绍了函数逼近的一种方法——函数的插值或多项式插值，其显著的特点就是要求近似函数(插值函数)在节点处与函数同值，即满足插值条件. 在实际工程计算中，由于误差的存在，要求近似函数严格满足插值条件(几何上即相应的曲线通过点$(x_i,y_i)$)是不现实的.

在科学实验和统计分析中，往往需要从一组实验数据或观测数据$(x_i,y_i)$出发，找出变化规律，求出函数 $y=f(x)$的近似表达式. 如果利用插值方法，由于数据很多，得到的插值函数很复杂，缺少实用价值；且实验数据往往有误差，没有必要要求它们相等. 曲线拟合是从给出的一大堆数据中找出规律，即设法构造一条曲线，不要求该曲线严格地通过每个数据点，只要求它能更加合理地反映数据点总的趋势，在某种意义下与这些数据点的总体偏差最小. 这类方法称为曲线(数据)拟合法.

对连续点也有类似问题. 设 $f(x)$是定义在区间$[a,b]$上的连续函数，但太复杂，应用不便，希望用简单函数 $p(x)$去近似 $f(x)$. 通常取 $p(x)$为多项式、有理分式等，要求在某种意义下 $p(x)$与 $f(x)$在整个区间$[a,b]$上的总体偏差最小. 这类方法称为函数逼近法.

## 3.1 曲线拟合的最小二乘法

对于一组给定的数据

| $x$ | $x_1$ | $x_2$ | … | $x_m$ |
|---|---|---|---|---|
| $y$ | $y_1$ | $y_2$ | … | $y_m$ |

记通过点$(x_i,y_i)$的规律为 $y=f(x)$，即 $y_i=f(x_i)(i=1,2,\cdots,m)$. 假设“逼近”规律的近似函数为 $y=\varphi(x)$，即 $y_i^*=\varphi(x_i)(i=1,2,\cdots,m)$. 它与观测值 $y_i$ 之差

$$\delta_i = y_i^* - y_i = \varphi(x_i) - y_i, \quad i = 1,2,\cdots,m$$

称为残差. 残差的大小可作为衡量近似函数好坏的标准.

由于观测数据总有误差，所以不要求 $y=\varphi(x)$通过已知点$(x_i,y_i)(i=1,2,\cdots,m)$. 在给定点 $x_i(i=1,2,\cdots,m)$上，按照使残差的平方和 $\sum\limits_{i=1}^{m}\delta_i^2$ 最小的规则求得近似函数 $y=\varphi(x)$的方法称为最佳平方逼近，也称为曲线拟合的最小二乘法.

曲线拟合的最小二乘问题一般提法：根据给定的数据组$(x_i,y_i)(i=1,2,\cdots,m)$，选取近

似函数形式,即给定函数类 $\Phi=\mathrm{Span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$,求函数 $\varphi(x)\in\Phi$,即

$$\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x) \tag{3.1}$$

使得

$$\begin{aligned} I(a_0,a_1,\cdots,a_n) &= \sum_{i=1}^{m}\rho_i[\varphi(x_i)-y_i]^2 \\ &= \sum_{i=1}^{m}\rho_i\left[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i\right]^2 \end{aligned} \tag{3.2}$$

达到最小.这里 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\in C[a,b]$是线性无关的函数族,$\rho_i>0$ $(i=1,2,\cdots,m)$为权系数,$m$ 一般比 $n$ 大得多.

求式(3.2)的最小值就是求多元函数 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$的极值. 记 $I=I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$,由极值的必要条件可得

$$\frac{\partial I}{\partial a_j}=2\sum_{i=1}^{m}\rho_i\left[\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i\right]\varphi_j(x_i)=0,\quad j=0,1,\cdots,n$$

即

$$\sum_{k=0}^{n}a_k\left[\sum_{i=1}^{m}\rho_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)\right]=\sum_{i=1}^{m}\rho_i y_i\varphi_j(x_i),\quad j=0,1,\cdots,n \tag{3.3}$$

引入内积定义(带权内积)

$$\begin{cases}(\varphi_j,\varphi_k)=\displaystyle\sum_{i=1}^{m}\rho_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\\[2ex] (y,\varphi_j)=\displaystyle\sum_{i=1}^{m}\rho_i y_i\varphi_j(x_i)\end{cases} \tag{3.4}$$

则式(3.3)可改写为

$$(\varphi_0,\varphi_j)a_0+(\varphi_1,\varphi_j)a_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_j)a_n=(y,\varphi_j),\quad j=0,1,\cdots,n$$

这是关于参数 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的线性方程组,用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(y,\varphi_0)\\ (y,\varphi_1)\\ \vdots\\ (y,\varphi_n)\end{pmatrix} \tag{3.5}$$

线性方程组(3.5)称为法方程.

函数族$\{\varphi_j(x)\}(j=0,1,\cdots,n)$线性无关不能保证式(3.5)的系数矩阵非奇异. 因此,要使法方程(3.5)有唯一解 $a_0,a_1,\cdots,a_n$,必须加上另外的条件(本书略去,读者可参见文献[1]).

## 3.2 最小二乘法的求法

### 3.2.1 多项式拟合

在最小二乘拟合中,若取 $\varphi_j(x)=x^j(j=0,1,\cdots,n)$,则 $\varphi(x)\in\mathrm{Span}\{1,x,\cdots,x^n\}$,即

$$\varphi(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n \tag{3.6}$$

此时关于系数 $a_0, a_1, \cdots, a_n$ 的法方程(3.5)是病态方程，通常当 $n \geqslant 3$ 时都不直接取 $\varphi_k(x) = x^k$ 作为基. 这里只给出 $n=2, \rho_i \equiv 1$ 时的情形. 由法方程(3.5)可得

$$\begin{cases} ma_0 + a_1 \sum_{i=1}^{m} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = \sum_{i=1}^{m} y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{m} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^3 = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{m} x_i^4 = \sum_{i=1}^{m} y_i x_i^2 \end{cases} \tag{3.7}$$

解出 $a_0, a_1, a_2$，就得到拟合公式 $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$.

**例 3.1**　已知某单位 2001—2007 年的利润为

| 时间/年 | 2001 | 2002 | 2003 | 2004 | 2005 | 2006 | 2007 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 利润/万元 | 72 | 108 | 140 | 150 | 174 | 196 | 208 |

试预测 2008 年的利润.

**解**　由已知数据作出散点图(如图 3.1 所示)，可见该单位的年利润几乎直线上升. 我们选择一次多项式作为拟合函数来预测 2008 年的利润. 为简化计算，将年份记为 $x_i = 2000 + t_i$，相应年份的利润记作 $y_i (i = 1, 2, \cdots, 7)$，则所求的拟合函数为 $y = a + bt$. 计算得

$$\sum_{i=1}^{7} t_i = 28, \quad \sum_{i=1}^{7} t_i^2 = 140, \quad \sum_{i=1}^{7} y_i = 1048, \quad \sum_{i=1}^{7} t_i y_i = 4810$$

从而得方程组

$$\begin{cases} 7a + 28b = 1048 \\ 28a + 140b = 4810 \end{cases}$$

解得 $a = \dfrac{430}{7}, b = \dfrac{309}{14}$. 于是所求拟合函数为

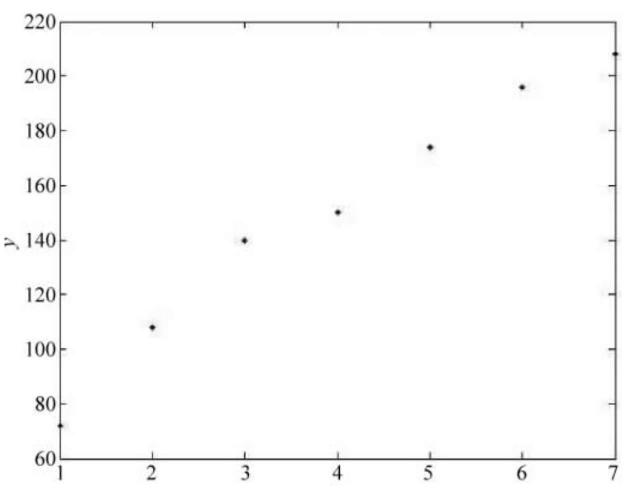


图 3.1　散点图

$$y = \frac{430}{7} + \frac{309}{14}t$$

将 $t=8$ 代入，得 2008 年的利润为

$$y = \frac{430}{7} + \frac{309}{14} \times 8 = \frac{1666}{7} = 238(\text{万元})$$

**例 3.2** 求下列数据的最小二乘二次拟合多项式.

| $x_i$ | $-1$ | $-0.75$ | $-0.5$ | $-0.25$ | $0$ | $1$ | $0.75$ | $0.5$ | $0.25$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $y_i$ | $-0.2209$ | $0.3295$ | $0.8826$ | $1.4392$ | $2.0003$ | $2.5645$ | $3.1334$ | $3.7601$ | $4.2836$ |

**解** 依题意，设二次拟合多项式为 $p_2(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$，将数据代入式(3.7)得线性方程组

$$\begin{cases} 9a_0 + 0 + 3.75a_2 = 18.1723 \\ 0 + 3.75a_1 + 0 = 8.4842 \\ 3.75a_0 + 0 + 2.7656a_2 = 7.6173 \end{cases}$$

解得 $a_0=2.0034$，$a_1=2.2625$，$a_2=0.0378$. 所以此数据组的最小二乘二次拟合多项式为

$$p_2(x) = 2.0034 + 2.2625x + 0.0378x^2$$

## 3.2.2 可化为线性拟合的非线性拟合

使用最小二乘逼近时，模型的选择是很重要的，通常模型 $y=\varphi(x)$是由物理规律或数据分布情况确定的，不一定都是线性模型. 但有的非线性拟合曲线可以经过适当的变换转化为线性曲线，从而用线性拟合进行处理. 对于一个实际的曲线拟合问题，一般先按观测值在直角坐标平面上描出散点图，然后根据散点图选用相接近的模型(曲线拟合方程)，再通过适当的变量替换化为线性拟合问题. 按线性拟合解出后要再还原为原变量所表示的曲线拟合方程.

例如，指数函数 $y=ae^{bx}$ 关于系数 $a$，$b$ 并非线性，但对它两端取对数得到

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

若令$\bar{y}=\ln y$，$A=\ln a$，则上式转化为$\bar{y}=A+bx$，它是线性模型，仍可按上面介绍的方法求 $y=\varphi(x)$.

表 3.1 列举了可线性化的几类曲线方程.

**表 3.1 曲线拟合方程及变换关系**

| 拟合曲线 | 变换关系 | 变换后方程 |
|---|---|---|
| $y=ax^b$ | $\bar{y}=\ln y, \bar{x}=\ln x, \bar{a}=\ln a$ | $\bar{y}=\bar{a}+b\bar{x}$ |
| $y=a+\frac{b}{x}$ | $\bar{x}=\frac{1}{x}$ | $y=a+b\bar{x}$ |
| $y=\frac{x}{ax+b}$ | $\bar{y}=\frac{1}{y}, \bar{x}=\frac{1}{x}$ | $\bar{y}=a+b\bar{x}$ |

续表

| 拟合曲线 | 变换关系 | 变换后方程 |
|---|---|---|
| $y=a+b\ln x$ | $\bar{x}=\ln x$ | $y=a+b\bar{x}$ |
| $y=\dfrac{1}{a+be^{-x}}$ | $\bar{y}=\dfrac{1}{y},\bar{x}=e^{-x}$ | $\bar{y}=a+b\bar{x}$ |

**例 3.3** 给定数据如下，用最小二乘法求形如 $y=ax^b$ 的拟合曲线.

| $x_i$ | 1.2 | 2.8 | 4.3 | 5.4 | 6.8 | 7.9 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\bar{y}_i$ | 2.1 | 11.5 | 28.1 | 41.9 | 72.3 | 91.4 |

**解** 对 $y=ax^b$ 两端取对数得 $\ln y=\ln a+b\ln x$. 令 $\bar{y}=\ln y,\bar{x}=\ln x,A=\ln a$，则有 $\bar{y}=A+b\bar{x}$，它是线性最小二乘拟合问题. 为求得 $A,b$，先将 $(x_i,y_i)$ 化为 $(x_i,\bar{y}_i)$. 转化后的数据列入表 3.2.

**表 3.2 转化后的数据表**

| $x_i$ | 1.2 | 2.8 | 4.3 | 5.4 | 6.8 | 7.9 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\bar{x}_i=\ln x_i$ | 0.1823 | 1.0296 | 1.4586 | 1.6864 | 1.9169 | 2.0669 |
| $y_i$ | 2.1 | 11.5 | 28.1 | 41.9 | 72.3 | 91.4 |
| $\bar{y}_i=\ln y_i$ | 0.7419 | 2.4423 | 3.3358 | 3.7353 | 4.2808 | 4.5152 |

根据表 3.2 计算得到对应的法方程为

$$\begin{cases}6.0000A+8.3407b=19.0514\\8.3407A+14.0114b=31.3532\end{cases}$$

解得 $A=0.3743,b=2.0149$，即 $a=e^A=1.4540$. 于是得最小二乘拟合曲线

$$y=1.4540x^{2.0149}$$

## 3.2.3 正交多项式拟合的最小二乘法

在最小二乘曲线拟合中，若 $\Phi=\mathrm{Span}\{1,x,\cdots,x^n\}$，模型取为式(3.6)时，法方程是病态方程. 怎样避免求解病态方程呢？我们先给出关于给定点的正交多项式的定义.

**定义 3.1** 设给定拟合数据 $(x_i,y_i)$ 及权 $\rho_i(i=1,2,\cdots,m)$，若函数族 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\in C[a,b]$ 满足

(1) $\sum\limits_{i=1}^{m}\rho_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)=0(k\neq j)$；

(2) $(\varphi_k,\varphi_k)=\sum\limits_{i=1}^{m}\rho_i\varphi_k^2(x_i)>0$；

则称 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是 $[a,b]$ 上关于点集 $\{x_i\}$、带权 $\rho_i(i=1,2,\cdots,m)$ 的正交函数族. 若 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是多项式，则称其为正交多项式函数族.

在最小二乘法中取正交多项式族 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 为基函数，则线性方程组(3.5)的系数矩阵为对角矩阵，方程组的解为

$$a_j=\frac{(y,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)}=\frac{\sum_{i=1}^{m}\rho_i y_i\varphi_j(x_i)}{\sum_{i=1}^{m}\rho_i\varphi_j^2(x_i)},\quad j=0,1,\cdots,n \tag{3.8}$$

最小二乘拟合函数为

$$\varphi(x)=\sum_{j=0}^{n}\frac{(y,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)}\varphi_j(x) \tag{3.9}$$

可以证明，若令

$$\varphi_0(x)=1,\quad \varphi_1(x)=x-\alpha_1$$

$$\varphi_k(x)=(x-\alpha_k)\varphi_{k-1}(x)-\beta_k\varphi_{k-2}(x)\quad (k=2,3,\cdots,n) \tag{3.10}$$

其中

$$\begin{cases}\alpha_k=\dfrac{(x\varphi_{k-1},\varphi_{k-1})}{(\varphi_{k-1},\varphi_{k-1})}, & k=1,2,\cdots,n\\[2ex] \beta_k=\dfrac{(\varphi_{k-1},\varphi_{k-1})}{(\varphi_{k-2},\varphi_{k-2})}, & k=2,3,\cdots,n\end{cases} \tag{3.11}$$

则 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$是正交多项式函数族.

**例 3.4** 利用正交函数族求例 3.2 所给数据的最小二乘二次拟合多项式.

**解** 取 $\varphi_0(x)=1$，由式(3.11)计算得

$$\alpha_1=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}x_i}{\sum_{i=1}^{9}1}=\frac{0}{9}=0$$

故 $\varphi_1(x)=x-\alpha_1=x$. 又由式(3.11)计算得

$$\alpha_2=\frac{(x\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}x_i^3}{\sum_{i=1}^{9}x_i^2}=0,\quad \beta_2=\frac{(\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}x_i^2}{\sum_{i=1}^{9}1}=\frac{3.75}{9}=0.416\,67$$

故

$$\varphi_2(x)=(x-\alpha_2)\varphi_1(x)-\beta_2\varphi_0(x)=x^2-0.416\,67$$

所以由式(3.8)得

$$a_0=\frac{(y,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}y_i}{\sum_{i=1}^{9}1}=\frac{18.1723}{9}=2.019\,14$$

$$a_1=\frac{(y,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}y_ix_i}{\sum_{i=1}^{9}x_i^2}=\frac{8.4842}{3.75}=2.2625$$

$$a_2=\frac{(y,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}y_i(x_i^2-0.416\,67)}{\sum_{i=1}^{9}(x_i^2-0.416\,67)^2}=\frac{0.045\,45}{1.2031}=0.0378$$

将上述结果代入式(3.9)，得最小二乘二次拟合多项式为

$$\begin{aligned}\varphi(x)&=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+a_2\varphi_2(x)\\&=2.019\,14+2.2625x+0.0378(x^2-0.416\,67)\\&=0.0378x^2+2.2625x+2.0034\end{aligned}$$

这与例3.2计算结果相同.

## 3.3　最佳平方逼近

从离散点的最小二乘曲线拟合，可以很自然地过渡到连续函数的最佳平方逼近.类似于离散情形，我们先给出正交多项式的概念.

### 3.3.1　正交多项式

**定义 3.2**　若函数 $\rho(x)$ 满足

(1) 当 $x\in(a,b)$ 时，$\rho(x)\geqslant 0$ 且 $\rho(x)$ 几乎处处不为零；

(2) $\int_a^b\rho(x)\mathrm{d}x>0$，

则称 $\rho(x)$ 为区间 $[a,b]$ 上的权函数.

**定义 3.3**　设函数 $f(x),g(x)\in C[a,b]$，$\rho(x)$ 是 $[a,b]$ 上给定的权函数，定义 $f(x)$ 与 $g(x)$ 的内积为

$$(f,g)=\int_a^b\rho(x)f(x)g(x)\mathrm{d}x \tag{3.12}$$

若 $(f,g)=0$，则称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交.

**定义 3.4**　如果函数系 $\{\varphi_k(x)\}$ 中每个函数 $\varphi_k(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续，不恒等于零，且满足条件

$$\int_a^b\rho(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & i\neq j\\(\varphi_i,\varphi_i)>0, & i=j\end{cases}\quad(i,j=0,1,2,\cdots) \tag{3.13}$$

则称函数系 $\{\varphi_k(x)\}$ 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 为正交函数系.

例如，三角函数系 $1,\cos x,\sin x,\cos 2x,\sin 2x,\cdots$ 在 $[-\pi,\pi]$ 上关于权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 是正交函数系.

**定义 3.5**　若函数系 $\{\varphi_k(x)\}$ 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交，$\varphi_k(x)$ 是首项系数非零的 $k$ 次多项式，则称多项式函数系 $\{\varphi_k(x)\}$ 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交，$\varphi_k(x)$ 称为 $k$ 次正交多项式.

**性质 1**　设 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交多项式，则它在

$[a,b]$上线性无关.

**性质 2** 关于权函数 $\rho(x)$ 和 $[a,b]$ 上的 $k$ 次正交多项式 $\varphi_k(x)$ 在 $(a,b)$ 内具有 $k$ 个互异实零点.

下面介绍几个常用的正交多项式.

**1. 勒让德(Legendre)多项式**

$n$ 次勒让德多项式为

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2-1)^n \quad (n=0,1,2,\cdots) \tag{3.14}$$

其最高次项系数为 $\dfrac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$. 勒让德多项式 $\{P_n(x)\}$ 在区间 $[-1,1]$ 上关于权函数 $\rho(x)\equiv 1$ 是正交的,即

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

具有递推公式

$$\begin{cases}P_0(x)=1,\\ P_{i+1}(x)=\dfrac{2i+1}{i+1}xP_i(x)-\dfrac{i}{i+1}P_{i-1}(x)\end{cases} \quad (i=1,2,\cdots)$$

勒让德多项式的奇偶性可表示为

$$P_n(-x)=(-1)^n P_n(x)$$

**2. 切比雪夫(Chebyshev)多项式**

$n$ 次切比雪夫多项式为

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x), \quad -1\leqslant x\leqslant 1 \tag{3.15}$$

其最高次项系数为 $2^{n-1}(n\geqslant 1)$. 切比雪夫多项式满足正交关系:

$$\int_{-1}^{1}\frac{T_i(x)T_j(x)}{\sqrt{1-x^2}}\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & i\neq j\\ \pi, & i=j=0\\ \dfrac{\pi}{2}, & i=j\neq 0\end{cases}$$

具有递推关系

$$\begin{cases}T_0(x)=1, \quad T_1(x)=x\\ T_{i+1}(x)=2xT_i(x)-T_{i-1}(x)\end{cases} \quad (i=1,2,\cdots)$$

此外,切比雪夫多项式还具有性质:

(1) $T_n\left(\cos\dfrac{k\pi}{n}\right)=(-1)^k$, $k=0,1,\cdots,n$;

(2) $T_n\left(\cos\dfrac{2k+1}{2n}\pi\right)=0$, $k=0,1,\cdots,n-1$;

(3) 当 $|x|\leqslant 1$ 时, $|T_n(x)|\leqslant 1$;

(4) 在最高次项的系数为 1 的所有 $n$ 次多项式中, $2^{1-n}T_n(x)$ 对零的逼近误差最小.

**3. 拉盖尔(Laguerre)多项式**

$n$ 次拉盖尔多项式为

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n(x^n e^{-x})}{dx^n}\quad (n=0,1,2,\cdots)\tag{3.16}$$

其最高次项的系数为$(-1)^n$. 拉盖尔多项式满足正交关系

$$\int_0^{+\infty}e^{-x}L_i(x)L_j(x)dx=\begin{cases}0, & i\neq j\\ (i!)^2, & i=j\end{cases}$$

具有递推关系

$$\begin{cases}L_0(x)=1,\quad L_1(x)=1-x\\ L_{i+1}(x)=(2i+1-x)L_i(x)-i^2L_{i-1}(x)\end{cases}\quad (i=1,2,\cdots)$$

**4. 埃尔米特(Hermite)多项式**

$n$ 次埃尔米特多项式为

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n(e^{-x^2})}{dx^n}\quad (n=0,1,2,\cdots)\tag{3.17}$$

其最高次项的系数为 $2^n$. 埃尔米特多项式满足正交关系

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}H_i(x)H_j(x)dx=\begin{cases}0, & i\neq j\\ 2^i i!\sqrt{\pi}, & i=j\end{cases}$$

具有递推关系

$$\begin{cases}H_0(x)=1,\quad H_1(x)=2x\\ H_{i+1}(x)=2xH_i(x)-2iH_{i-1}(x)\end{cases}\quad (i=1,2,\cdots)\tag{3.18}$$

## 3.3.2 最佳平方逼近

**定义 3.6** 设函数 $f(x)\in C[a,b]$,称 $\|f\|_2=\sqrt{(f,f)}$ 为 $f(x)$的欧氏范数(2-范数).

设 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\in C[a,b]$是一族在$[a,b]$上线性无关的连续函数,以它们为基底构成的线性空间为 $\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$. 所谓最佳平方逼近问题就是求广义多项式 $p(x)\in\Phi$,即确定

$$p(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)\tag{3.19}$$

的系数 $a_j(j=0,1,\cdots,n)$,使函数

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\int_a^b\rho(x)[p(x)-f(x)]^2dx\tag{3.20}$$

取最小值,这里 $\rho(x)$为权函数.

显然,使 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$达到最小的 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 必须满足方程组

$$\frac{\partial I}{\partial a_j}=2\int_a^b\rho(x)[p(x)-f(x)]\varphi_j(x)dx=0$$

或写成

$$\int_a^b \rho(x)p(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x \quad (j=0,1,\cdots,n) \tag{3.21}$$

把式(3.19)代入式(3.21)得

$$\sum_{k=0}^{n} a_k \int_a^b \rho(x)\varphi_k(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_j(x)\mathrm{d}x \quad (j=0,1,\cdots,n) \tag{3.22}$$

利用内积定义及范数定义将式(3.21)和式(3.22)改写成

$$(p-f,\varphi_j)=0 \quad (j=0,1,\cdots,n)$$

$$\sum_{k=0}^{n} a_k(\varphi_k,\varphi_j)=(f,\varphi_j) \quad (j=0,1,\cdots,n) \tag{3.23}$$

所以若 $p(x)$使 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$为极小,其系数 $a_k$ 必须满足式(3.23).而式(3.23)的系数行列式必不等于0,从而方程组(3.23)有唯一解.我们称方程组(3.23)为法方程.

此外容易证明 $p(x)$就是使 $I(a_0,a_1,\cdots,a_n)$取极小值的函数.特别当$\{\varphi_k(x)\}$为$[a,b]$上关于权函数 $\rho(x)$的正交函数系时,可由式(3.23)求出

$$a_j=\frac{(f,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)} \quad (j=0,1,\cdots,n)$$

而最佳平方逼近函数为

$$p(x)=\sum_{j=0}^{n}\frac{(f,\varphi_j)}{(\varphi_j,\varphi_j)}\varphi_j(x) \tag{3.24}$$

直接求解法方程是相当困难的,通常采用正交多项式做基来求解.我们称上述求最佳平方逼近函数的方法为按正交多项式展开的方法.关于误差估计有下面的结论.

**定理 3.1** 设 $f(x)\in C[a,b]$,$p(x)=\sum\limits_{j=0}^{n}c_j\varphi_j(x)$是 $f(x)$在$[a,b]$上的最佳平方逼近函数,则误差 $R=f-p$ 满足

$$\|R\|_2=[\|f\|_2^2-(f,p)]^{\frac{1}{2}}=\left[\|f\|_2^2-\sum_{j=0}^{n}c_j(f,\varphi_j)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{3.25}$$

**例 3.5** 求函数 $y=\arctan x$ 在$[0,1]$上的一次最佳平方逼近多项式.

**解** 方法一(直接法) 设 $\varphi_0(x)=1$,$\varphi_1(x)=x$,所求函数为 $p(x)=a_0+a_1x$.首先计算各内积

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\int_0^1 1\mathrm{d}x=1,\quad (\varphi_0,\varphi_1)=\int_0^1 x\mathrm{d}x=\frac{1}{2},\quad (\varphi_1,\varphi_1)=\int_0^1 x^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3}$$

$$(\varphi_0,y)=\int_0^1 \arctan x\mathrm{d}x=\frac{\pi}{4}-\frac{1}{2}\ln 2,\quad (\varphi_1,y)=\int_0^1 x\arctan x\mathrm{d}x=\frac{\pi}{4}-\frac{1}{2}$$

于是得法方程

$$\begin{cases} a_0+\dfrac{1}{2}a_1=\dfrac{\pi}{4}-\dfrac{1}{2}\ln 2 \\ \dfrac{1}{2}a_0+\dfrac{1}{3}a_1=\dfrac{\pi}{4}-\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

解得

$$a_0=3-2\ln 2-\frac{\pi}{2}\approx 0.0430,\quad a_1=\frac{3\pi}{2}-6+3\ln 2\approx 0.7917$$

故所求一次最佳平方逼近多项式为