Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

最佳一致逼近多项式存在正负偏离点

记 $\varepsilon(x) = P(x) - f(x)$, 称 $x_0 \in [a, b]$ 为 $P(x)$ 关于 $f(x)$ 的

- 偏离点，如果 $|\varepsilon(x_0)| = \triangle(P)$;
- 正偏离点，如果 $\varepsilon(x_0) = \triangle(P)$;
- 负偏离点，如果 $\varepsilon(x_0) = -\triangle(P)$.

命题： 若 $P(x)$ 是 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最佳一致逼近多项式，则正、负偏离点都必存在。

证明： 用反证法。若仅存在正偏离点，即

$$\varepsilon(x) > -\triangle(P), \quad \forall x \in [a, b],$$

则有 $\min\limits_{x\in[a,b]} \varepsilon(x) > -\triangle(P)$. 令 $h = (\triangle(P) + \min\limits_{x\in[a,b]} \varepsilon(x))/2$.

最佳一致逼近多项式存在正负偏离点的证明（续）

令 $\tilde{P}(x) = P(x) - h$, 则有

$$\tilde{\varepsilon}(x) = \tilde{P}(x) - f(x) = P(x) - h - f(x) = \varepsilon(x) - h.$$

注意 $h \in (0, \triangle(P)]$, 于是得

$$\max_{x\in[a,b]} \tilde{\varepsilon}(x) = \triangle(P) - h = \frac{\triangle(P) - \min_{x\in[a,b]} \varepsilon(x)}{2} < \triangle(P),$$

$$\min_{x\in[a,b]} \tilde{\varepsilon}(x) = \min_{x\in[a,b]} \varepsilon(x) - h = -\frac{\triangle(P) - \min_{x\in[a,b]} \varepsilon(x)}{2} > -\triangle(P).$$

即 $\triangle(\tilde{P}) < \triangle(P)$. 这与 P 是最佳一致逼近矛盾。 ■

注： 该结论几何意义明显，即只有单侧偏离点的多项式做一适当的充分小的纵向平移后偏离度会下降.

Vallée-Poussin 定理

定理： 设 $P(x) \in \mathbb{P}_n$, $\varepsilon(x) \triangleq P(x) - f(x)$ 在 $a \le x_1 < x_2 < \cdots < x_N \le b$ 上取到非零的正负相间值 $\lambda_1, -\lambda_2, \cdots, (-1)^{N-1}\lambda_N$, $(sign(\lambda_j) = sign(\lambda_1), \forall j)$, 且 $N \ge n+2$, 则对 $\forall Q(x) \in \mathbb{P}_n$, 有

$$\triangle(Q) \ge \min_{1 \le i \le N} |\lambda_i|.$$

证明： 用反证法. 设存在 $Q(x) \in \mathbb{P}_n$ 使得 $\triangle(Q) < \min\limits_{1 \le i \le N} |\lambda_i|$.

令 $\eta(x) = P(x) - Q(x) = (P(x) - f(x)) - (Q(x) - f(x))$. 则有

$$\mathrm{sign}(\eta(x_j)) = \mathrm{sign}(P(x_j) - f(x_j)) = (-1)^{j-1}\mathrm{sign}(\lambda_1), \quad \forall j.$$

于是由中值定理知 $\exists N-1 > n+1$ 个点 $x_i < x_i^* < x_{i+1}$, 使得

$$\eta(x_i^*) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, N-1.$$

而 $\eta(x) = P(x) - Q(x) \in \mathbb{P}_n$, $\therefore P(x) = Q(x)$. 矛盾。 ■

最佳一致逼近多项式的充要条件和唯一性定理

Chebyshev **定理：** 设 $f \in \mathbb{C}[a,b]$, 则 $\mathbb{P}_n$ 中存在唯一的最佳一致逼近多项式，且 $P(x) \in \mathbb{P}_n$为最佳一致逼近多项式的充要条件是 $\varepsilon(x) \triangleq P(x) - f(x)$ 在 $[a,b]$ 中个数不少于 $n+2$ 的点列 $x_1 < x_2 < \cdots < x_N$, $(N \geq n+2)$ 上正负交错地取到 $\triangle(P)$.

证明： 存在性已由 Borel 定理证明. 下面先证充要条件.

- 充分性：由 Vallée-Poussin 定理知，对 $\forall Q \in \mathbb{P}_n$, 都有 $\triangle(Q) \geq \triangle(P)$, 故 $P(x)$ 是最佳一致逼近多项式.
- 必要性：不妨设 $\triangle(P) > 0$. 用反证法. 设 $P(x)$ 的交错偏离点个数 $N \leq n+1$, 则总可以取到 $[a,b]$ 的 N 个子区间 $[a,\xi_1]$, $[\xi_1,\xi_2]$, $\cdots$, $[\xi_{N-1},b]$ 使得在任一子区间内 x 总满足以下两条件之一：

最佳一致逼近多项式的充要条件和唯一性证明（续）

$$-\triangle(P) \le \varepsilon(x) \le \triangle(P) - \alpha,$$

$$-\triangle(P) + \alpha \le \varepsilon(x) \le \triangle(P),$$

其中$\alpha > 0$ 是一个充分小的正数. 取在这些子区间上正负交错取值的多项式

$$\phi(x) = \prod_{i=1}^{N-1}(x - \xi_i),$$

令 $Q(x) = P(x) + \omega\phi(x) \in \mathbb{P}_n$, 则

$$Q(x) - f(x) = P(x) - f(x) + \omega\phi(x).$$

当 $|\omega| \in (0, \alpha/(2\|\phi\|_\infty))$, 且取适当符号时, 则有 $\triangle(Q) < \triangle(P)$. 矛盾. 必要性得证.

最佳一致逼近多项式的充要条件和唯一性证明（续）

最后证唯一性。用反证法。设存在 $Q(x) \in \mathbb{P}_n$, $Q \neq P$, 使得 $\triangle(Q) = \triangle(P) = E_n$.

由最佳一致逼近的充要条件知，存在交错点数 $N_q \geq n+2$, $N_p \geq n+2$ (不妨设 $N_q \geq N_p$). 记与 $Q(x)$ 对应的交错点坐标为 $\beta_1 < \beta_2, \cdots < \beta_{N_q}$.

考察 $\eta(x) \triangleq Q(x) - P(x) = (Q(x) - f(x)) - (P(x) - f(x)) \in \mathbb{P}_n$,

- 如果 $\eta(\beta_j) = 0$ 的点数 $\geq n+1$, 则由 $\eta \in \mathbb{P}_n \quad \Rightarrow \quad \eta(x) \equiv 0$, 即 $Q(x) \equiv P(x)$. 这与 $Q \neq P$ 矛盾.

最佳一致逼近多项式的充要条件和唯一性证明（续）

- 若 $\eta(\beta_i)=0$ 的点数 $m<n+1$, 则至少在 $n-m+2\geq 2$ 个 β_j 点上 $\eta(\beta_j)\neq 0$. 注意，在这些非零点上有

$$\mathrm{sign}(\eta(\beta_j))=\mathrm{sign}(Q(\beta_j)-f(\beta_j)).$$

现设 β_i 和 β_{i+k} 为两个相邻的非零点. 由符号的交错性, 有 $\mathrm{sign}(\eta(\beta_i))=(-1)^k\mathrm{sign}(\eta(\beta_{i+k}))$.

1. 若 k 为奇数, 则 $\eta(x)$ 在 (β_i,β_{i+k}) 上的零点个数(含重数)应为奇数, 所以除已知的 $\{\beta_j\}_{j=i+1}^{i+k-1}$ 偶数个点外必然还有至少一个零点(不排除 $\{\beta_j\}_{j=i+1}^{i+k-1}$ 中有重零点);
2. 若 k 为偶数, 则 $\eta(x)$ 在 (β_i,β_{i+k}) 上的零点个数(含重数)应为偶数, 所以除已知的 $\{\beta_j\}_{j=i+1}^{i+k-1}$ 奇数个点外必然还有至少一个零点(不排除 $\{\beta_j\}_{j=i+1}^{i+k-1}$ 中有重零点);

因此 $\eta(x)$ 在 $[a,b]$ 上至少有 $m+[(n-m+2)-1]=n+1$ 个零点 $\Rightarrow$ $\eta(x)=Q(x)-P(x)\equiv 0$. 矛盾. ■

x^n 在 $\mathbb{P}_{n-1}[-1,1]$ 中的最佳一致逼近多项式

Chebyshev 定理揭示了最佳一致逼近多项式的特征, 但却没有给出求解最佳一致逼近多项式的方法.

事实上, 求解最佳一致逼近多项式并不简单。目前，已有一些针对某些类型的函数的最佳一致逼近多项式的算法. 一般来说，求解最佳一致逼近多项式，特别是很高次的多项式, 工作量很大.

但在一些特殊情形，却有很简单的结果。例如，求 x^n 在 $\mathbb{P}_{n-1}[-1,1]$ 中的最佳一致逼近多项式，或等价地, 对 $f=0$, 求形如 $P(x)=x^n+C_{n-1}x^{n-1}+\cdots+C_0$ 的最佳一致逼近多项式. 其解是著名的 Chebyshev 多项式, 也称作**最小零偏差多项式**.

Chebyshev 最佳一致逼近多项式—最小零偏差多项式

定理： 最小零偏差多项式为 $2^{1-n}T_n(x)$, 其中 $T_n(x)$ 为 *Chebyshev* 多项式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)).$$

证明: 由 $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$, 及三角恒等式 (令 $y = \arccos(x)$) $\cos(n+1)y + \cos(n-1)y = 2\cos y \cos ny$ 得递推关系式

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \cdots .$$

由此知 $2^{1-n}T_n(x)$ 是 x^n 项系数为 1 的 n 次多项式. 又，在 $n+1$ 个点 $x_k = \cos\frac{k\pi}{n}$, $k = 0, 1, \cdots, n$, 上取到正负交错的极值 $T_n(x_k) = (-1)^k$. 即 $2^{1-n}T_n(x)$ 有至少$(n-1)+2 = n+1$ 个交错偏离点. 由 Chebyshev 定理知 $x^n - 2^{1-n}T_n(x) \in \mathbb{P}_{n-1}$ 是 x^n 在 $[-1, 1]$ 上的最佳一致逼近多项式. 于是, $2^{1-n}T_n(x)$ 是最小零偏差多项式.

数据拟合

数值逼近中另一类重要问题是数据拟合. 当所需要逼近的对象有以下特点时, 通常建议采用数据拟合的方法(而非插值的方法).

- 数据本身有误差（实验通常会有不可避免的随机误差）;
- 数据量比较大;
- 数据的采样分布能基本反映函数的变化趋势（如可以给出有待定系数的经验公式）.

数据拟合是指在特定的有限维函数空间（逼近函数的模型）中寻找一个在特定意义下“最佳”的逼近函数.

最小二乘多项式拟合问题的提法

给定数据 $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^n$,

- 选 $\mathbb{P}_k$ 为有限维逼近函数空间, $k < n$ (一般小很多);
- 在 $\mathbb{R}^{n+1}$ 的欧氏距离意义下寻找最佳逼近函数;

即

$$\begin{cases} \text{找 } P(x) \in \mathbb{P}_k, \text{ s.t.} \\ I(P) \triangleq \sum_{i=0}^{n} [y_i - P(x_i)]^2 = \min_{P^* \in \mathbb{P}_k} I(P^*). \end{cases}$$

最小二乘 1 次多项式拟合问题的求解

$$\begin{cases} \text{找 } P(x) = ax + b, \text{ s.t.} \\ I(a,b) \triangleq \sum_{i=0}^{n} [y_i - ax_i - b]^2 = \min_{a^*,b^*} I(a^*, b^*). \end{cases}$$

- 非负二次函数 $I(a,b)$ 在 (a,b) 取到最小值的必要条件是

$$\begin{cases} \frac{\partial I}{\partial a} = \sum_{i=0}^{n} 2(y_i - ax_i - b)(-x_i) = 0, \\ \frac{\partial I}{\partial b} = \sum_{i=0}^{n} 2(y_i - ax_i - b)(-1) = 0. \end{cases}$$

整理得最小二乘 1 次多项式拟合问题的法方程组:

$$\begin{cases} \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right) a + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right) b = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i, \\ \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right) a + (n+1) b = \sum_{i=0}^{n} y_i. \end{cases}$$

最小二乘 1 次多项式拟合问题的求解

- 如果 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 不完全彼此相等，则此时由不等式 $\left(\sum_{i=0}^n x_i\right)^2 < (n+1)\left(\sum_{i=0}^n x_i^2\right)$ 知法方程存在唯一解.

- 又由于 $I(a^*, b^*)$ 的 Hassian 阵

$$\nabla^2 I(a^*, b^*) = 2\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x_i \\ \sum_{i=0}^n x_i & n+1 \end{bmatrix}$$

  正定对称, 所以 $I(a, b)$ 是最小值点.

- 因此，当 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 不完全彼此相等时，最小二乘 1 次多项式拟合问题的解可以通过求解其法方程得到.

最小二乘 k 次多项式拟合问题的法方程

$$\begin{cases} \text{找 } P(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_k x^k, \text{ s.t.} \\ I(a_0, a_1, \cdots, a_k) = \min\limits_{a_0^*, a_1^*, \cdots, a_k^*} I(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_k^*), \end{cases}$$

其中 $I(a_0, a_1, \cdots, a_k) \triangleq \sum\limits_{i=0}^{n} \left[y_i - a_0 - a_1 x_i - \cdots - a_k x_i^k \right]^2$.

- 非负二次函数 $I(a_0, a_1, \cdots, a_k)$ 取到最小值的必要条件是

$$\frac{\partial I}{\partial a_l} = \sum_{i=0}^{n} 2 \left[y_i - a_0 - a_1 x_i - \cdots - a_k x_i^k \right] (-x_i)^l = 0, \quad l = 0, 1, \cdots, k.$$

整理得最小二乘 k 次多项式拟合问题的法方程组:

$$\sum_{j=0}^{k} \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{j+l} \right) a_j = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^l, \quad l = 0, 1, \cdots, k.$$

- 可以证明，当 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 中至少有 $k+1$ 个互不相同的点时，法方程组存在唯一解 (最小二乘 k 次多项式拟合问题的解).

最小二乘 k 次多项式拟合问题的实际求解方法

在实际计算中找 $P(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_k x^k$ 形式的解并不是一个好方法。原因是由此得到的法方程组的矩阵通常很病态（类似于Vandermonde 矩阵）.

我们希望选择 $\mathbb{P}_k$ 的适当的一组基，使得在此基底下导出的法方程组的矩阵是良态的.

例如，如果所选基底 $\{b_j(x)\}_{j=0}^k \subset \mathbb{P}_k$ 有以下形式的规范正交性 $\sum_{i=0}^n b_j(x_i) b_l(x_i) = \delta_{jl}$, 则法方程组的矩阵是单位阵.

最佳平方逼近多项式问题的提法

- 设给定的数据点不是有限个，而是在区间 $[a, b]$ 上定义的平方可积函数 $f(x)$.
- 有限维逼近函数空间仍取作 $\mathbb{P}_k$.
- 在 $L^2[a, b]$ 的意义下寻找最佳逼近函数.

即

$$\begin{cases} \text{找 } P(x) \in \mathbb{P}_k, \text{ s.t.} \\ I(P) \triangleq \int_a^b |f(x) - P(x)|^2 \, dx = \min\limits_{P^* \in \mathbb{P}_k} I(P^*). \end{cases}$$

最佳平方逼近一次多项式问题的求解

$$\begin{cases} \text{找 } P(x) = \alpha x + \beta, \text{ s.t.} \\ I(\alpha, \beta) \triangleq \displaystyle\int_a^b |f(x) - \alpha x - \beta|^2 \, dx = \min_{\alpha^*, \beta^*} I(\alpha^*, \beta^*). \end{cases}$$

- 非负二次函数 $I(\alpha, \beta)$ 在 (α, β) 取到最小值的必要条件是

$$\begin{cases} \frac{\partial I}{\partial \alpha} = \int_a^b 2[f(x) - \alpha x - \beta](-x) \, dx = 0, \\ \frac{\partial I}{\partial \beta} = \int_a^b 2[f(x) - \alpha x - \beta](-1) \, dx = 0. \end{cases}$$

整理得最佳平方逼近一次多项式问题的法方程组:

$$\begin{cases} \left(\displaystyle\int_a^b x^2 \, dx \right) \alpha + \left(\int_a^b x \, dx \right) \beta = \int_a^b x f(x) \, dx, \\ \\ \left(\displaystyle\int_a^b x \, dx \right) \alpha + (b - a)\beta = \int_a^b f(x) \, dx. \end{cases}$$

最佳平方逼近 k 次多项式问题的实际求解方法

同样，在实际计算中找 $P(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_k x^k$ 形式的解并不是一个好方法。原因是由此得到的法方程组的矩阵通常很病态（类似于离散情形）.

我们希望选择 $\mathbb{P}_k$ 的适当的一组基，使得在此基底下导出的法方程组的矩阵是良态的.

例如，如果所选基底 $\{b_j(x)\}_{j=0}^k \subset \mathbb{P}_k$ 有以下形式的规范正交性 $\int_a^b b_j(x) b_l(x)\, dx = \delta_{jl}$, 则法方程组的矩阵是单位阵.

为了理论和应用上的方便，平方积分也可以换为加权平方积分 $\displaystyle\int_a^b \rho(x)\,|f(x) - P(x)|^2\, dx$, 其中 $\rho > 0$ $a.e.$ on $[a, b]$ 称为权函数.

带权内积和带权 2 范数

定义： 设 $\rho \geq 0$ 为区间 $[a, b]$ 上的给定函数，满足: 对任一非负连续函数 $g(x)$,

$$\int_a^b \rho(x)g(x)\,dx = 0 \quad \Leftrightarrow \quad g(x) = 0,\ \forall x \in [a, b].$$

对任取的两个平方可积函数 $f, g \in L^2[a, b]$, 称

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

为函数 f 和 g 的带权内积，称 $\|f\|_{\rho,2} = \sqrt{(f, f)_\rho}$ 为函数 f 的带权 2 范数，称 ρ 为权函数.

为记号简单起见，下标 ρ 通常省略。

正交函数和正交多项式系的定义

定义： 两个平方可积函数 $f, g \in L^2[a,b]$, 称为（关于内积 $(\cdot,\cdot)_\rho$）是正交的, 如果

$$(f,g)_\rho = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x)\, dx = 0.$$

定义： 记 $\mathbb{P}[a,b]$ 为区间 $[a,b]$ 上所有实系数多项式函数组成的线性空间. 设 $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty} \subset \mathbb{P}[a,b]$ 是 $\mathbb{P}[a,b]$ 的一组基, 且满足

$$(\varphi_i, \varphi_j)_\rho = \int_a^b \rho(x) \varphi_i \varphi_j\, dx = \delta_{ij}, \quad \forall\, 0 \le i, j < \infty,$$

则称 $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ 为区间 $[a,b]$ 上关于权函数 ρ 的(规范化)正交多项式系.

正交多项式系的生成及其性质

一般可取 $\{1, x, x^2, \cdots, x^k, \cdots\}$ 作为 $\mathbb{P}[a, b]$ 的一组基函数, 并在此基础上生成正交多项式系. 例如, 可以用 Gram-Schmidt 正交化方法实现. 不过该算法数值上不稳定, 所以在实际计算时并不常用. 但可以证明以下理论结果:

定理: 由以上方式形成的(规范化)正交多项式系有下列性质:

1. φ_i 是 i 次多项式, 且 $\{\varphi_i\}_{i=0}^k$ 是 $\mathbb{P}_k$ 的一组基;
2. 存在三项递推公式: $\varphi_{i+1}(x) = (a_i x + b_i)\varphi_i(x) - c_i \varphi_{i-1}(x)$;
3. $\varphi_i(x) = 0$ 在 (a, b) 中恰有 i 个互异的根.

(1) 显然. **(2)** 由定义归纳可证. **(3)** 用反证法, 设 $\xi_j \in (a, b)$, $j = 1, \cdots, k$, $k \le i - 1$ 为 $\varphi_i(x) = 0$ 的互不相同的奇重根, 取 $\psi(x) = \prod_{j=1}^k (x - \xi_j) \in \mathbb{P}_{i-1}$, 则 $\psi(x)\varphi_i(x)$ 在 $[a, b]$ 上不变号, 与 $\int_a^b \psi(x)\varphi_i(x)dx = 0$ 矛盾.

常用的正交多项式系

1. 区间 $[-1,1]$, $\rho(x)\equiv 1$, 的正交多项式系, Legendre 多项式:

$$\begin{cases}\varphi_0(x)=1, \quad \varphi_1(x)=x,\\ \varphi_{k+1}(x)=\frac{2k+1}{k+1}x\varphi_k(x)-\frac{k}{k+1}\varphi_{k-1}(x), \quad k=1,2,\cdots.\end{cases}$$

2. 区间 $[-1,1]$, $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的 Chebyshev 多项式:

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

3. 区间 $[0,+\infty)$, $\rho(x)=\exp(-x)$ 的 Laguerre 多项式:

$$\begin{cases}Q_0(x)=1, \quad Q_1(x)=1-x,\\ Q_{k+1}(x)=(1+2k-x)Q_k(x)-k^2Q_{k-1}(x), \quad k=1,2,\cdots.\end{cases}$$

4. 区间 $(-\infty,+\infty)$, $\rho(x)=\exp(-x^2)$ 的 Hermite 多项式:

$$\begin{cases}H_0(x)=1, \quad H_1(x)=2x,\\ H_{k+1}(x)=2xH_k(x)-2kH_{k-1}(x), \quad k=1,2,\cdots.\end{cases}$$

习题二：8，16，18，上机习题二：1

Thank You!