统计计算与软件

实用统计计算

高祖新 尹勤 编著

南 京 大 学 出 版 社

内 容 提 要

本书从实用出发，系统而全面地介绍了统计计算和应用的各种原理、方法及计算机上实现的步骤。其内容包括：数值计算基础；矩阵计算方法；基础统计计算；随机数与统计模拟法（即 Monte Carlo 法）；回归分析；方差分析以及主成分分析，因子分析，典型相关分析，判别分析和聚类分析等多元分析方法的应用等。所述内容简明扼要，实用性强，使读者在掌握统计计算的各种原理、方法的同时，能够应用这些统计方法，编写具体程序来解决各种实际问题，从而培养其统计应用的实际操作能力，也为其应用统计软件(如SAS、SPSS等)奠定良好的基础。

本书可作为高等院校统计专业、计算数学专业和其它应用性专业的教材或参考书。也可供从事数据处理及统计应用的统计工作者和各有关人员参考。

统计计算与软件

实 用 统 计 计 算

高祖新 尹 勤 编著

*

南京大学出版社出版

（南京大学校内 邮编 210093）

江苏省新华书店发行　　丹阳兴华印刷厂印刷

*

开本 787×1092 1/16 印张 16.625 字数 415 千

1996 年 7 月第 1 版　1996 年 7 月第 1 次印刷

印数 1—1000

ISBN 7-305-02971-8/O·207

定价 20.00 元

前　言

统计计算作为概率统计与计算数学、计算机科学相结合的应用性分支学科，几十年来随着电子计算机的迅猛发展和广泛应用，已在自然科学、社会科学和生产实践等人类社会各个领域日益显示出其不可缺少的重要地位。

早在 19 世纪末，人们就开始设计并制造台式计算机器用于数据处理和计算，而统计与计算的密不可分性，使得人们利用机器进行统计计算的能力日益提高。本世纪 40 年代以来，随着电子计算机的产生和发展，统计计算也进入了正规发展阶段并于 60 年代后逐渐确立了其统计应用的分支学科地位。1967 年，由 W. Hemmerle 编写的第一本统计计算教科书《Statistical Computations on Digital Computer》问世，与此同时，统计计算作为一门正规课程也开始在世界上各大学陆续开设。目前，随着电子计算机的普及和发展，统计计算及应用软件也得到了迅速发展，成为人们从事科学研究、生产实践特别是数据处理及统计分析的重要手段。

本书从实用出发，系统而全面地介绍了统计计算和应用的各种原理、方法及在计算机上应用的步骤，以帮助读者在掌握这些原理、方法的同时，能应用这些统计方法，结合实际问题的特点，编写具体程序，解决实际问题，从而提高其统计应用的实际能力。

本书共分八章。第一章、第二章简要介绍了统计计算中所用的基础数值计算方法和矩阵计算方法，包括方程求根，数值逼近，数值积分，数值微分，矩阵的各种分解，矩阵的广义逆及应用，消去变换等计算方法及算法步骤；第三章讨论了基础统计计算，包括常用数字特征及检验，常用分布函数及分位数的计算等；第四章则系统地介绍了各种分布的随机数的产生及检验和统计模拟法（即 Monte Carlo 法）及其应用；第五章至第八章则全面介绍了各种多元统计方法，包括回归分析，方差分析，主成分分析，因子分析，典型相关分析，判别分析和聚类分析的原理、方法应用及算法步骤等。在各章中我们都给出了较为简要的原理和各种算法的具体步骤或算法框图等，同时还配有例题、习题和上机实习题，可供练习或上机实习，以加深对所学各部分内容的理解和掌握。

本书是在编者多年来讲授"统计计算与软件"课程所编写的讲义基础上修订而成的，曾经南京大学统计专业、计算数学专业及其它相关专业数届学生使用，对培养学生掌握统计计算方法，提高应用统计方法解决实际问题的能力等方面起了很好的作用，同时也为学生学习并正确掌握统计软件包（如国际上流行的 SAS、SPSS 等）的应用奠定了良好的基础。因此，本书可作为高校统计专业、计算数学与计算机应用专业及其它应用性专业开设"统计计算"、"统计计算与软件"等课程的教材或参考书，读者只需具备一般的高等数学和概率统计知识即可使用；同时也可供从事数据处理及统计分析的实际工作者参考使用。

本书原讲义的编写是在南京大学数学系胡宣达教授的倡议和支持下进行的，同时还得到了南京大学概率统计专业各位老师的帮助。作为南京大学首批教材、专著基金资助出版物，本书的编写和出版，得到了南京大学数学系主任苏维宜教授、副主任孙麟平副教授和系教学委员

会、南京大学教材建设领导小组的各位领导、专家的大力支持和指导，同时还得到了南京大学出版社、教务处等部门的热情支持和帮助；南京大学出版社王兆先先生为本书的编辑出版付出了辛勤的劳动，在此编者一并表示衷心的感谢！

由于本书的编写是在较为繁忙的教学工作中进行的，同时编者水平有限，错误疏漏之处在所难免，恳请读者批评指正。

编　者

1995.10.于南京

目　录

第一章　数值计算方法基础

随着社会生产和科学技术的发展，大量复杂的计算问题需要人们去解决，而电子计算机的应用和发展，为人们解决科学计算问题提供了强有力的工具。在运用计算机解决实际计算问题时，我们通常根据其特点，首先建立数学模型，然后选用数值计算方法，进行程序设计，最后上机计算得出结果。一个高质量的计算机程序，不仅要能解决实际问题，而且应具有程序的逻辑结构简单、思路清晰、计算量小、占用内存少等特点，使程序易读易改易用。而选择合适有效的数值计算方法，对于提高程序质量，快速而准确地解决实际计算问题，无疑是非常重要的。

在进行数值计算时，人们经常使用的基本方法和手段主要有：

(1) **离散化**　为适应计算机的特点，数值计算中常采用离散变量及对连续变量利用取等距点列表等形式转化为离散变量。

(2) **逼近**　主要指以可用四则基本运算进行计算的简单函数来近似代替一般函数 $f(x)$。而用作逼近的简单函数一般形式为有理分式函数，其中最简单最常用的是多项式。

(3) **递推**　即将一个复杂的计算过程转化为简单计算的多次重复过程。我们称这种多次重复的简单计算过程为递推结构或递推过程，它在程序设计中是用循环来实现的。

在运用计算机进行计算时，几乎每步计算都可能带来一定的误差。这主要有用收敛无穷级数的前几项代替无穷级数所产生的"截断误差"和用于处理无理数、循环小数(如 e、$\sqrt{2}$、1/3 等)以及保留有效数字所产生的"舍入误差"等。为防止计算中这些误差的传播和积累超过限度，导致计算失败，应注意以下几点：

(1) 注意选用数值较稳定即受误差影响小的计算公式或方法；

(2) 尽量简化计算过程，减少计算步骤和运算次数；

(3) 避免两个相近的数相减和两个相差悬殊的数相加减；

(4) 在一系列数据相加时，要按数的大小递增顺序相加；

(5) 避免绝对值小的数作除数；等等。

例如，在计算多项式 $P_n(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$ 时，若用"秦九韶计算公式"：

$$P_n(x)=a_0+x(a_1+x(a_2+\cdots+x(a_{n-1}+a_nx)\cdots)$$

比用直接计算法所做的乘法次数减少一半，且数值稳定。又如，对充分大的 x，直接计算 $\sqrt{x+1}-\sqrt{x}$ 这两个很接近的数之差时，其误差影响就大，此时应采用以下等价公式来进行计算：

$$\sqrt{x+1}-\sqrt{x}=\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}。$$

另外要注意，一般不应根据两个浮点数是否相等来决定某一步运算的中止，而要允许浮点运算有一定范围的误差精度。

由于本书主要讨论概率统计中有关问题的常用计算方法及程序设计，故这里我们只介绍在统计计算中常用的几种数值计算方法：方程求根法、函数逼近法、数值积分法及数值微分法

等计算方法。在下一章中我们还将介绍有关矩阵的计算方法。

§1.1 方 程 求 根 法

对于一般的实值函数方程 $f(x)=0$ 的问题，我们常用数值解法去求解该方程的实数近似根，其求解步骤一般为：

(1) 判定根的存在性，即确定有根区间及其个数，从而得到方程各根的初始近似值；

(2) 在有根区间内，由初始近似值求出达到一定精度的根。

对于步骤(1)，我们可用图解法，即产生 $f(x)$ 的大致图形，以得到其图像近似解，或用逐步扫描法。对于步骤(2)，则介绍几个常用的求根数值解法：二分法、牛顿法、割线法及迭代法等。

一、逐步扫描法

设 $f(x)$ 在给定区间 $[a, b]$ 上连续且至多有 k 个实根，将 $[a, b]$ n 等分，得到子区间 $\{[x_i, x_{i+1}]\}$，其中 $x_i=a+ih$，$h=\dfrac{b-a}{n}$。现从 $[a, b]$ 的左端点 $x_0=a$ 出发，按步长 h 向右搜索有根区间，即对每个子区间 $[x_i, x_{i+1}]$，计算 $f(x_i)f(x_{i+1})$ 的值，若该值 $\leqslant 0$，由函数的中值定理知，$[x_i, x_{i+1}]$ 为有根区间。显然，若需要时，可逐步缩小步长 h，由此即可找到 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的各有根区间，且只要步长 h 取得足够小，总可得到具有任意精度的近似根。但当 h 缩小时，计算量相应增大，故一般应该用下面介绍的二分法、牛顿法等来求高精度的近似根。

二、二 分 法

二分法实际也即根的搜索法，对有根区间 $[x_0, x_1]$ 进行区间等分，保留有根区间，舍去无根区间，如此不断等分从而逐步逼近方程的根。其主要步骤为：

1° 选取满足 $f(x_0)f(x_1)\leqslant 0$ 的初值 x_0、x_1 及预定精度 ε；

2° 将区间 $[x_0, x_1]$ 等分，等分点 $x=\dfrac{(x_0+x_1)}{2}$；

3° 若 $f(x_0)f(x)\leqslant 0$，则 $[x_0, x]$ 为新的有根区间，否则，$[x, x_1]$ 为新的有根区间，仍将其记之为 $[x_0, x_1]$，并等分该区间，如此不断下去；

4° 当 $|x_1-x_0|<\varepsilon$ 时，停止等分迭代，取 $x=(x_0+x_1)/2$ 为方程的近似根。

二分法计算较简单，但收敛速度慢，且不能用于求重根。

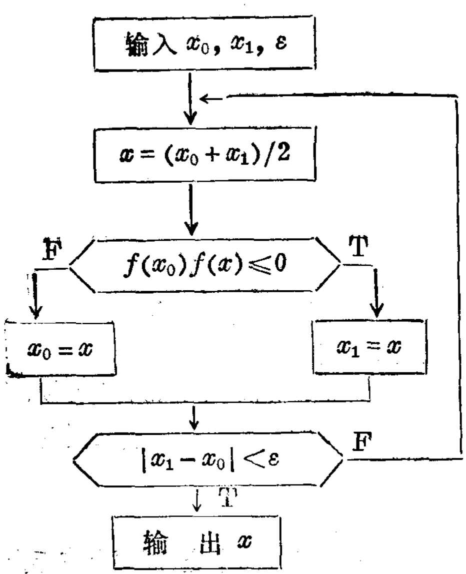

图 1.1

(注：在框图中，用 T 表示不等式条件成立 (Ture)，用 F 表示不等式条件不成立 (False)，下同)

三、牛顿法(切线法)

牛顿(Newton)法，又称切线法，是将一般方程 $f(x)=0$ 逐步转化为线性方程的数值解法。具体地

说，即在方程根的附近用 $f(x)$ 的切线

$$y=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)$$

代替函数本身来求出与 x 轴的交点

$$x=x_0-f(x_0)/f'(x_0)$$

以此作为近似根通过迭代来逼近所求的根。其主要步骤为：

1° 选取适当的初始近似根 x_0 及精度 ε；

2° 计算 $x_1=x_0-\dfrac{f(x_0)}{f'(x_0)}$；

3° 以 x_1 代替 x_0，重复上述迭代过程，直至 $|x_1-x_0|<\varepsilon$，即可得到满足精度的近似根 x_1。

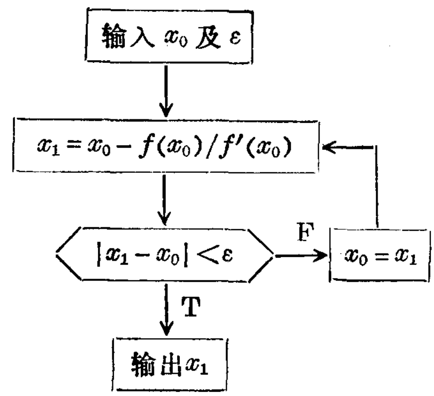

图 1.2

牛顿法的迭代公式收敛速度较快，但使用时需选取适当的初值点 x_0 才收敛。故通常先用图解法或二分法来找到合适的初值点 x_0，再用牛顿法来提高收敛的速度和精度。当 $f''(x)$ 存在时，我们还可用下列牛顿二阶导数公式

$$\begin{cases} g'(x_0)=f'(x_0)-\dfrac{f''(x_0)f(x_0)}{2f'(x_0)} \\ x=x_0-\dfrac{f(x_0)}{g'(x_0)} \end{cases}$$

得到收敛速度更快的求根法。而当知道所求根为方程的 m 重根时，可将原牛顿迭代公式改为

$$x=x_0-\frac{mf(x_0)}{f'(x_0)}$$

以加速牛顿迭代速度。

四、割线法(弦截法)

虽然牛顿法收敛速度快，但需事先求出 $f'(x)$，这在 $f(x)$ 为复杂函数时往往较麻烦。割线法则用函数的差商 $\dfrac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}$ 代替导数 $f'(x)$ 进行迭代求根，其迭代公式为

$$x_{n+1}=x_n-f(x_n)\left(\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}\right)$$

当 $|x_{n+1}-x_n|<\varepsilon$ 时，停止迭代，x_{n+1} 即为所求的根。

从几何上看，牛顿法相当于用 $f(x)$ 在 x_n 处的切线作为 $f(x)$ 的近似。而割线法则用过 $(x_{n-1},f(x_{n-1}))$ 和 $(x_n,f(x_n))$ 两点的割线来近似 $f(x)$，其收敛速度与牛顿法几乎一样快，且不用进行求导运算。但应注意，割线法应选取两个较好的初始点 x_0、x_1，使得 $f(x_0)f(x_1)<0$。通常仅当 $f(x_{n-1})$ 与 $f(x_n)$ 符号相反时，x_{n+1} 比 x_n、x_{n-1} 更接近于所求的根。为保证迭代式中 $f(x_{n-1})$ 与 $f(x_n)$ 总是符号相反，Dowell 和 Jarrett 对算法作如下修改：

(1) 若 $f(x_n)f(x_{n+1})<0$，则按原迭代公式计算 x_{n+2}；

(2) 若 $f(x_n)f(x_{n+1})>0$，则用 $(x_{n-1},f(x_{n-1})/2)$ 替换 $(x_{n-1},f(x_{n-1}))$，用 $(x_{n+1},f(x_{n+1}))$ 替换 $(x_n,f(x_n))$，所得计算值为 x_{n+2}(参见下页图 1.3)。

修改后的算法收敛速度更快。

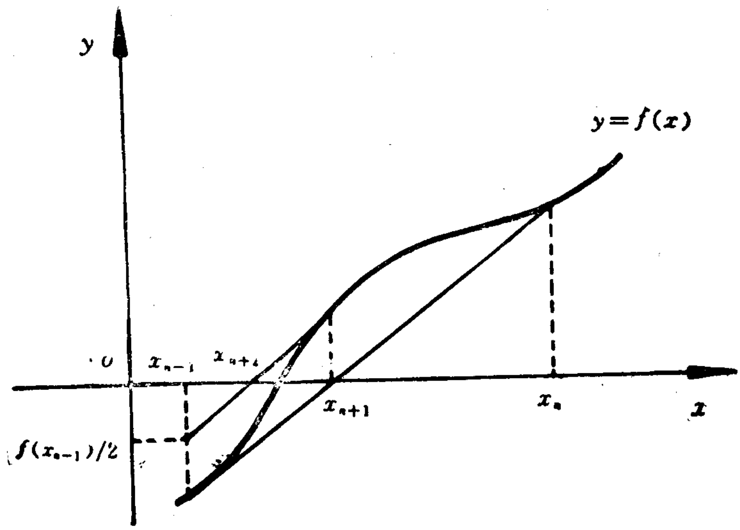

图 1.3

五、迭 代 法

用迭代法求 $f(x)=0$ 的根的基本方法是：先将 $f(x)=0$ 改写成求 x 的恒等形式：$x=g(x)$，并写为迭代形式

$$x_{n+1}=g(x_n)$$

再在根 x 附近选一初始值 x_0，利用上式不断进行迭代，直至 $|x_{n+1}-x_n|<\varepsilon$ 为止，取 x_{n+1} 为 $f(x)=0$ 的根。

迭代算法结构最简单，但仅当选择适当的迭代公式和初始值 x_0 时，算法才收敛。且一般收敛速度慢，计算量大。对此，可对算法进行修正，得到加速迭代公式

$$\begin{cases} x^*_{n+1}=g(x_n) \\ x_{n+1}=x^*_{n+1}+\dfrac{q}{1-q}(x^*_{n+1}-x_n) \end{cases}$$

其中取 $q\approx g'(x_n)$ 且 $|q|<1$，此时，收敛速度加快。(计算框图如图 1.4 所示)。

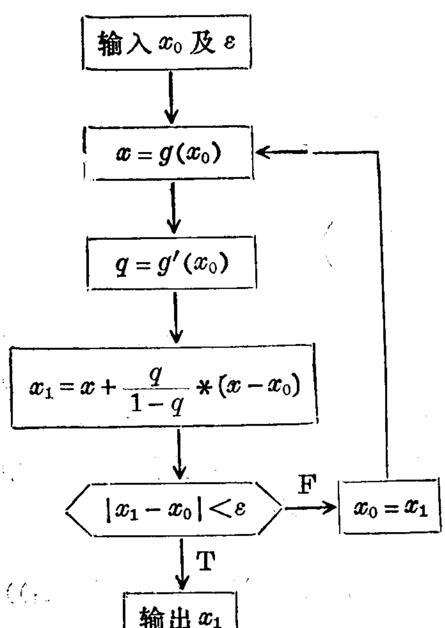

图 1.4

在上述加速迭代法中，为避免计算导数 $q\approx g'(x)$，还可用下列**埃特金(Aitken)迭代公式**

$$\begin{cases} x^*_{n+1}=g(x_n) \\ x'_{n+1}=g(x^*_{n+1}) \\ x_{n+1}=x'_{n+1}-\dfrac{(x'_{n+1}-x^*_{n+1})^2}{x'_{n+1}-2x^*_{n+1}+x_n} \end{cases}$$

得到埃特金迭代法。

除了上述方法外，还有其它近似求根法（例如下列§1.2 四中连分式逼近求根法等），读者可参阅有关计算方法的专业书籍。

例 1.1　试用二分法、牛顿法、割线法、迭代法和

埃特金迭代法求方程 $f(x)=x^3-x-1$ 在[1, 1.5]内的实根，要求其绝对误差 $<10^{-3}$。

解：对方程 $f(x)=x^3-x-1$ 用各种求根法求根的计算结果如下表所示：

k	二分法	牛顿法	割线法	迭代法	埃特金迭代法
	$a=1,\ b=1.5$	$x_0=\frac{a+b}{2}$	$x_0=1,\ x_1=1.5$	$x_0=\frac{a+b}{2}$	$x_0=\frac{a+b}{2}$
0	1.25	1.25	1	1.25	1.25
1	1.375	1.33050	1.5	1.310371	1.361508
2	1.3125	1.324749	1.266667	1.321987	1.330592
3	1.34375	1.324718	1.315962	1.324199	1.324884
4	1.328125		1.325214	1.324619	1.324718
5	1.326313		1.324714	1.324699	
6	1.324219				
7	1.326172				
8	1 325195				

在计算过程中，对二分法，由 $\frac{(b-a)}{2^{k+1}}\leqslant 10^{-3}$ 可得其计算步数 $k=8$。对迭代法，其迭代式取为 $x_{k+1}=(x_k+1)^{1/3}$；若取迭代式 $x_{k+1}=x_k^3-1$，则将得到发散数列。但若用埃特金迭代法，对迭代式 $x_{k+1}=x_k^3-1$ 同样可得到表中快速的收敛结果。

§1.2 函数逼近法

在统计计算及其它实际应用中，我们常需计算函数的值。以往手算时我们常用查函数表法，但在用计算机处理时，由于存贮数表需占用太多的内存，故常考虑产生可用四则运算进行计算的函数近似式，来直接算出给定函数的近似值。这种用简单函数 $\varphi(x)$ 近似代替给定函数 $f(x)$ 的问题称为**函数的逼近**，$\varphi(x)$ 称为**逼近函数**，$f(x)$ 称为**被逼近函数**。一般地，对于某个函数类 A 中给定的函数 $f(x)$，我们在简单函数类 $B\subset A$ 中求 $\varphi(x)$，使得

$$\|f-\varphi\|_a=\min_{g\in B}\|f-g\|_a$$

则称 $\varphi(x)$ 为 $f(x)$ 在 B 中的**最佳逼近**。通常 A 取为区间[a, b]上的连续函数类 $C[a, b]$，而函数类 B 可取为多项式、有理分式或连分式等简单函数类。

对于解析函数 $f(x)$，较简单的逼近法是利用其 Taylor 展式

$$f(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k$$

取其前 n 项的部分和

$$S_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k$$

作为 $f(x)$ 的近似公式(函数表的值常按此法求出)。但该逼近法并不理想，因由此所求的值离 x_0 点近时精度较好，而当 $|x-x_0|$ 较大时，误差较大。

为了得到在所给定区间 [a, b] 上均匀地误差较小的近似式，我们常采用下列两种逼近误差度量标准，一种是

$$\|f-g\|_2=\left[\int_a^b(f(x)-g(x))^2\mathrm{d}x\right]^{\frac{1}{2}}$$

在该度量意义下的函数逼近称为**平方逼近**；另一种是

$$\|f-g\|_\infty=\max_{a<x<b}|f(x)-g(x)|$$

在该度量意义下的函数逼近称为**一致逼近**。本节主要考虑在上述两种逼近原则下的多项式逼近，同时还介绍较为实用的 Padé 有理函数逼近及连分式逼近。

一、正交多项式

由于正交多项式在解决函数逼近问题时起着重要的作用，故先介绍正交多项式的概念、性质及几种常用正交多项式。

定义：设$[a, b]$为有限或无限区间，若$[a, b]$上的函数 $\rho(x)$满足

(1) $\rho(x)\geqslant 0,\ x\in[a, b]$；

(2) $\int_a^b\rho(x)\,\mathrm{d}x>0$；

(3) $\int_a^b x^n\rho(x)\mathrm{d}x$ 存在，$n=0, 1, \cdots$

则称 $\rho(x)$为$[a, b]$上的**权函数**。

定义：若首项系数 $A_k\neq 0$ 的 k 次多项式

$$\varphi_k(x)=A_kx^k+A_{k-1}x^{k-1}+\cdots+A_1x+A_0$$

满足

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

则称多项式序列$\{\varphi_k(x)\}$为区间$[a, b]$上**带权 $\rho(x)$的正交多项式序列**，并称 $\varphi_k(x)$为$[a, b]$上带权 $\rho(x)$的 **k 次正交多项式**。若再有 $\gamma_k=1$，$(k=0, 1, 2, \cdots)$，则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 为**标准正交多项式序列**。

可以证明，正交多项式序列$\{\varphi_k(x)\}$具有下列基本性质：

(1) **(线性无关性)** $\{\varphi_k(x)\}$ 为线性无关的；

(2) **(零点性质)** $\varphi_k(x)$在(a, b)内有 k 个互异的实零点；

(3) **(三项递推关系)** 设 $\varphi_k(x)$ 的首项系数为 A_k，次项系数为 B_k，且满足 $(\varphi_k, \varphi_k)=\int_a^b\rho(x)\varphi_k^2(x)\mathrm{d}x=\gamma_k$，则 $\{\varphi_k(x)\}$ 中任何三个相邻的正交多项式 $\varphi_{k-1}(x)$、$\varphi_k(x)$、$\varphi_{k+1}(x)$ 存在下列递推关系：

$$\varphi_{k+1}(x)=(a_kx+b_k)\varphi_k(x)+c_{k-1}\varphi_{k-1}(x)$$

其中 a_k、b_k、c_k 均为与 x 无关的常数，且

$$\begin{cases}a_k=\dfrac{A_{k+1}}{A_k},\quad b_k=\dfrac{A_{k+1}}{A_k}\left(\dfrac{B_{k+1}}{A_{k+1}}-\dfrac{B_k}{A_k}\right),\\ c_{k-1}=-\dfrac{A_{k+1}A_{k-1}\gamma_k}{A_k^2\gamma_{k-1}}=-\dfrac{a_k\gamma_k}{a_{k-1}\gamma_{k-1}},\end{cases}\quad(k=1, 2, \cdots)。$$

下面我们介绍两类常用的正交多项式及相应的函数逼近。

二、勒让德多项式及最佳平方逼近

勒让德(Legendre)**多项式**为$[-1, 1]$上带权 $\rho(x)=1$的正交多项式,用$\{P_n(x)\}$表示,其表达式为

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

勒让德(Legendre)多项式的主要性质有:

(1) $P_n(x)$是首项系数 $A_n=(2n)!/(2^n(n!)^2)$的 n 次多项式,这只需注意到其定义式中 $(x^2-1)^n$ 为 $2n$ 次多项式即易知;

(2)(正交性) 对 $\{P_n(x)\}$,

$$(P_i, P_j)=\int_{-1}^{1}P_i(x)P_j(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & i\neq j\\ \dfrac{2}{2i+1}, & i=j。\end{cases}$$

这表明$\{P_n(x)\}$为$[-1, 1]$上带权 $\rho(x)=1$ 的正交多项式。另外,n 次 Legendre 多项式 $P_n(x)$ 与次数低于 n 的任一多项式正交,这即

$$\int_{-1}^{1}x^k P_n(x)\,\mathrm{d}x=0,\quad k=0, 1, \cdots, n-1;$$

(3)(递推性质)

$$\begin{cases}P_0(x)=1,\quad P_1(x)=x\\ P_{k+1}(x)=\dfrac{2k+1}{k+1}x\,P_k(x)-\dfrac{k}{k+1}P_{k-1}(x),\quad k=1, 2, \cdots。\end{cases}$$

该递推关系由首项系数 $A_k=(2k)!/[2^k(k!)^2]$,次项系数 $B_k=0$ 及正交多项式三项递推关系即可得。由递推性质,我们即可给出前几次勒让德多项式的具体形式:

$P_0(x)=1,$ $\qquad\qquad$ $P_1(x)=x,$

$P_2(x)=\dfrac{1}{2}(3x^2-1),$ $\qquad\qquad$ $P_3(x)=\dfrac{1}{2}(5x^3-3x),$

$P_4(x)=\dfrac{1}{8}(35x^4-30x^2+3),$ $\qquad\qquad$ $P_5(x)=\dfrac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x),$

$P_6(x)=\dfrac{1}{16}(231x^6-315x^4+105x^2-5),$ $\quad\cdots\cdots$

(4)(奇偶性) $P_n(-x)=(-1)^n P_n(x)$;

(5)(最佳平方逼近性质) 设 $P_n(x)$的首项系数为 A_n,记 $\tilde{P}_n(x)=\dfrac{1}{A_n}P_n(x)$,则在所有首项系数为 1 的 n 次多项式 H_n 中,$\tilde{P}_n(x)$是$[-1, 1]$上对零的最佳平方逼近函数,这即

$$\|\tilde{P}_n\|_2=\min_{g\in H_n}\|g\|_2。$$

现利用 Legendre 多项式来考虑 $f(x)$的最佳平方逼近。对$[a, b]$上连续函数 $f(x)$,考虑其最佳平方逼近时,所用度量也可使之带有权函数 $\rho(x)$,即将

$$\|f-g\|_2^2=\int_a^b\rho(x)\,[f(x)-g(x)]^2\,\mathrm{d}x$$

作为度量函数。对线性无关函数系$\{\varphi_k(x)\}_0^n$,连续函数 $f(x)$在由$\{\varphi_k(x)\}_0^n$的线性组合构成的函数类 S 中,存在唯一的最佳平方逼近函数

$$\varphi^*(x)=a_n^*\varphi_n(x)+a_{n-1}^*\varphi_{n-1}(x)+\cdots+a_0^*\varphi_0(x)$$

其系数 $a_0^*, \cdots, a_n^*$ 为下列方程组的解，

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

当 $\{\varphi_k(x)\}_0^n$ 为 $[a, b]$ 区间上关于权函数 $\rho(x)$ 的正交函数系，即满足

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

时，$f(x)$ 的最佳平方逼近 $\varphi^*(x)$ 的系数可由

$$a_i^*=\frac{(f, \varphi_i)}{(\varphi_i, \varphi_i)}=\frac{1}{\gamma_i}\int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_i(x)\,\mathrm{d}x \quad (i=0, 1, \cdots, n)$$

给出。

显然，由于 Legendre 多项式具有正交性及 $\tilde{P}_n$ 在 H_n 中对零的最佳逼近性，当 $f(x)\in C[-1, 1]$①，而在次数不超过 n 次的多项式 M_n 中求最佳平方逼近 $S_n^*(x)$ 时，若用Legendre多项式 $\{P_n(x)\}$ 来表示，就有较大的优越性。利用上列讨论可知，此时

$$S_n^*(x)=a_n^*P_n(x)+a_{n-1}^*P_{n-1}(x)+\cdots+a_0^*P_0(x)$$

其中
$$a_i^*=\frac{(f, P_i)}{(P_i, P_i)}=\frac{2i+1}{2}\int_{-1}^{1}f(x)P_i(x)\,\mathrm{d}x, \quad (i=0, 1, \cdots, n)。$$

若 $f(x)\in C[a, b]$，而要求 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)=1$ 的最佳平方逼近多项式时，只需作变换

$$x=\frac{(b-a)}{2}t+\frac{(b+a)}{2}, \quad 则\ t=\frac{2x-a-b}{b-a}\in[-1, 1]$$

先令 $\tilde{f}(t)=f\left(\frac{(b-a)}{2}t+\frac{(b+a)}{2}\right)$，在 $[-1, 1]$ 上得 $\tilde{f}(t)$ 的最佳平方逼近多项式 $S_n^*(t)$ 后，即可得 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的最佳平方逼近多项式 $S_n^*\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right)$。

三、切比雪夫多项式及最佳一致逼近

1．切比雪夫多项式及其性质

我们称 $T_n(x)=\cos(n\arccos x)$ $(|x|\leqslant 1)$ 为 **n 次切比雪夫(Чебышев)多项式**。由此构成的切比雪夫多项式序列 $\{T_n(x)\}$ 也为常用的正交多项式序列。

切比雪夫(Чебышев)多项式有以下性质：

(1) $T_n(x)$ 是首项系数为 2^{n-1} 的 n 次多项式；

(2)（正交性） $\{T_n(x)\}$ 为 $[-1, 1]$ 上带权 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 的正交多项式序列；

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

该结果易由 $x=\cos\theta$, $T_n(x)=\cos n\theta$ 推得；

(3)（递推性质）

$$\begin{cases}T_0(x)=1, \quad T_1(x)=x\\ T_{n+1}(x)=2xT_n(x)-T_{n-1}(x), \quad (n\geqslant 1)\end{cases}$$

该递推关系易由 $T_n(x)=\cos n\theta\,(x=\cos\theta)$ 及三角恒等式

注：① $C[-1,1]$ 表示区间 $[-1,1]$ 上的连续函数。

$$\cos(n+1)\theta+\cos(n-1)\theta=2\cos n\theta\cos\theta$$

导出。由上述递推公式即可逐次求出各次切比雪夫多项式：

$T_0(x)=1$, $\quad T_1(x)=x$,

$T_2(x)=2x^2-1$, $\quad T_3(x)=4x^3-3x$,

$T_4(x)=8x^4-8x^2+1$, $\quad T_5(x)=16x^5-20x^3+5x$,

$T_6(x)=32x^6-48x^4+18x^2-1$, $\quad \cdots\cdots$

(4)（零点性质） $T_n(x)$在$(-1, 1)$中有n个相异实零点：

$$x_k=\cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right),\quad k=1, 2, \cdots, n;$$

(5)（选点正交性） $\{T_k(x)\}_0^n$关于$T_{n+1}(x)$的零点$x_1, x_2, \cdots, x_{n+1}$具有选点正交性，即对$k$、$l\leqslant n$，有

$$\sum_{i=1}^{n+1}T_k(x_i)T_l(x_i)=\begin{cases}0, & k\neq l\\ \dfrac{n+1}{2}, & k=l\neq 0\\ n+1, & k=l=0;\end{cases}$$

(6)（极值点） $|T_n(x)|\leqslant 1$, $T_n(x)$在$[-1, 1]$上有$n+1$个极值点：

$$x_k=\cos\left(\frac{k\pi}{n}\right),\quad k=0, 1, \cdots, n$$

且轮流取最大值、最小值：$T_n(x_k)=(-1)^k$，其符号正负交错；

(7)（奇偶性） $T_n(-x)=(-1)^nT_n(x)$；

(8)（最佳逼近性质） 在区间$[-1, 1]$上所有首项系数为1的n次多项式H_n中，$\widetilde{T}_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$是对零的最佳一致逼近多项式，这即

$$\|\widetilde{T}_n\|_\infty=\min_{g\in H_n}\|g\|_\infty=\min_{g\in H_n}\max_{-1<x<1}|g(x)|\left(=\frac{1}{2^{n-1}}\right)。$$

2．函数的切比雪夫逼近

利用切比雪夫多项式，我们即可考虑$f(x)\in C[a, b]$的最佳一致逼近多项式，这即在次数不超过n的多项式M_n中找$\varphi_n^*(x)$，使得

$$\|f-\varphi_n^*\|_\infty=\max_{a\leqslant x\leqslant b}|f(x)-\varphi_n^*(x)|$$

达到最小，该$\varphi_n^*(x)$称为$f(x)$的**最佳一致逼近多项式**。

定理1.1 ［**切比雪夫(Чебыщев)定理**］ 若有n次多项式$\varphi_n^*(x)$使得$|f(x)-\varphi_n^*(x)|$在$[a, b]$上至少$(n+2)$个点处达到同一最大值，且在这些点处，$f(x)-\varphi_n^*(x)$的符号正负交错，则$\varphi_n^*(x)$为$f(x)$的唯一的n次最佳一致逼近多项式。（证略）

由该定理可知，$f(x)-\varphi_n^*(x)$在$[a, b]$上至少变号$n+2$次，即至少存在$(n+1)$个点x_i，满足

$$f(x_i)-\varphi_n^*(x_i)=0,\quad i=1, 2, \cdots, n,$$

以这些点为插值点的$f(x)$的拉格朗日(Lagrange)插值多项式即为$f(x)$的最佳一致逼近$\varphi_n^*(x)$。

切比雪夫定理给出了最佳一致逼近多项式$\varphi_n^*(x)$的特性，但具体求出$\varphi_n^*(x)$却相当困难。为此，我们考虑切比雪夫逼近多项式，虽然该多项式严格地说不是最佳一致逼近，但与之近似，在实际中极为有用。