

第五章

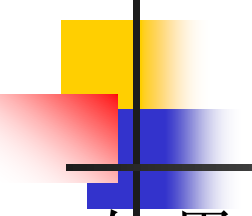
曲线拟合的最小二乘法

§ 5.1 引言

§ 5.2 线性方程组的最小二乘解

§ 5.3 曲线最小二乘拟合

§ 5.4 移动最小二乘近似



§ 5.1 引言

如果实际问题要求解在 $[a,b]$ 区间的每一点都“很好地”逼近 $f(x)$ 的话，运用插值函数有时就要失败。

另外，插值所需的数据往往来源于观察测量，本身有一定的误差。要求插值曲线通过这些本身有误差的点，势必使插值结果更加不准确。

如果由试验提供的数据量比较大，又必然使得插值多项式的次数过高而效果不理想。

从给定的一组试验数据出发，寻求函数的一个近似表达式 $y=\varphi(x)$ ，要求近似表达式能够反映数据的基本趋势而又不一定过全部的点 (x_i, y_i) ，这就是曲线拟合问题，函数的近似表达式 $y=\varphi(x)$ 称为拟合曲线。本章介绍用最小二乘法求拟合曲线。



引例

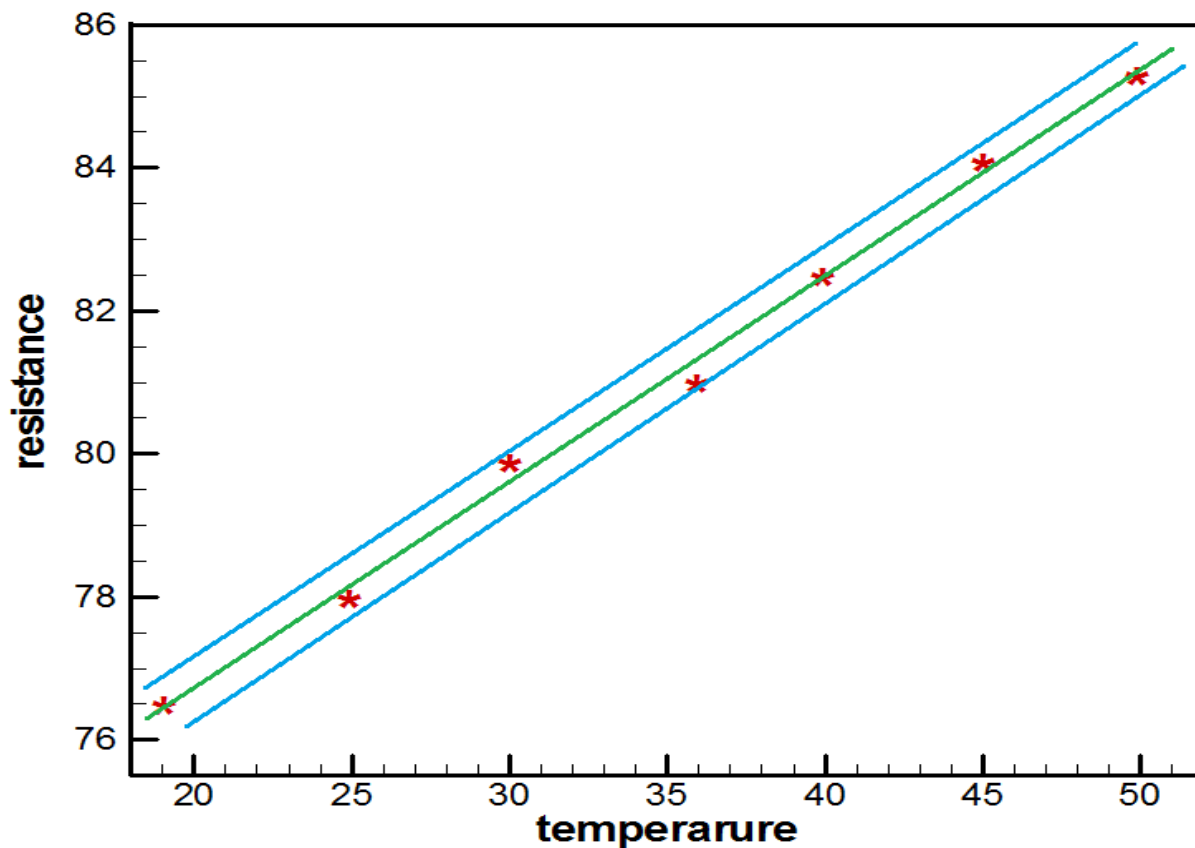
已知某一铜棒的电阻-温度的函数关系为
 $R = a + bt$ ，通过试验，得到在七种不同温度下的电阻值如下：

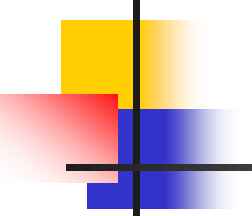
	1	2	3	4	5	6	7
t/ C	19.1	25.0	30.1	36.0	40.0	45.1	50.0
R/ Ω	76.3	77.8	79.7	80.8	82.3	83.9	85.1

其中 a 和 b 是待定参数，**如何确定 a 和 b ？**

引例（续）

- 铜棒的电阻随着温度的增加而增加。
- 可以认为电阻和温度是线性关系。
- 从图上可以看出7个点大致分布在一条直线上。



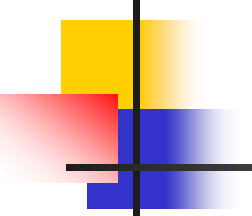


引言（续）

事实上，确定一条直线只需要2个点，但为了找到温度和电阻之间的函数关系，实验数据会远远多于2个，另外由于观测带来的误差，这些点不可能全部分布在一条直线上。

如何从7组数据出发，设计一条直线来准确反映温度和电阻之间的关系？

我们希望这条直线 $R = a + bt$ 与所有的数据点 $\{(t_i, R_i)\}_{i=1}^7$ 越接近越好。必须找到一种度量标准来衡量那条直线最接近所有数据点。



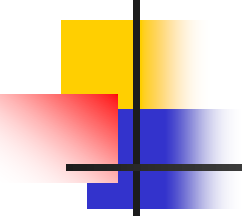
引言（续）

曲线拟合

定义

从给定的一组试验数据出发，寻求函数的一个近似表达式 $y=\varphi(x)$ ，要求近似表达式能够反映数据的基本趋势而又不一定过全部的点，这就是**曲线拟合问题**，函数的近似表达式 $y=\varphi(x)$ 称为**拟合曲线**。

常用的方法是让拟合曲线 $y = \varphi(x)$ 在采样点 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 处的函数值 $\{\varphi(x_i)\}_{i=0}^n$ 与实验数据 $\{y_i\}_{i=0}^n$ 之间的误差最小。



引言（续）

最小二乘法的基本概念

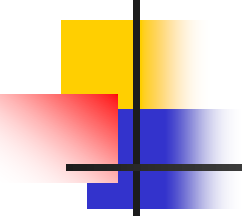
度量误差的方法有很多，如记在 x_i 处函数值 $\varphi(x_i)$ 与实验数据 y_i 之间的残差

$$\delta_i = \varphi(x_i) - y_i$$

为了让每个残差都很小，可以选择合适的参数使得

$$I = \sum_{i=1}^n \delta_i^2 = \sum_{i=1}^n [\varphi(x_i) - y_i]^2$$

最小，这种选择拟合函数的方法称为曲线拟合的最小二乘法。



引言（续）

将问题一般化

设 $(x_i, y_i)(i = 0, 1, \dots, n)$ 为给定的一组数据。

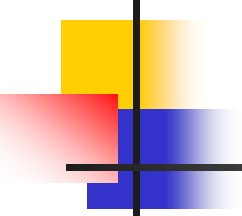
假定 x, y 的关系为 $y = \varphi(x)$

其中 $\varphi(x)$ 来自函数类 Φ , 设函数类 Φ 的基函数为 $\varphi_i(x)(i = 0, 1, \dots, m)$ 。一般要求 $m \leq n$, 则

$$\varphi(x) = \sum_{j=0}^m c_j \varphi_j(x) \in \Phi \quad \text{-----}(1)$$

定义平方误差

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^n \delta_i^2 = \sum_{i=0}^n (\varphi(x_i) - y_i)^2$$



引言（续）

在函数类 Φ 中选取一个函数 $\varphi^*(x)$

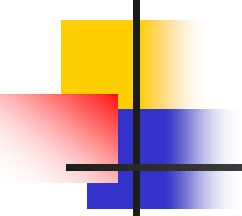
$$\varphi^*(x) = \sum_{j=0}^m c_j^* \varphi_j(x) \quad \text{-----}(2)$$

$$= c_0^* \varphi_0(x) + c_1^* \varphi_1(x) + \cdots + c_m^* \varphi_m(x)$$

使得

$$\begin{aligned} \|\delta^*\|_2^2 &= \sum_{i=0}^n (\varphi^*(x_i) - y_i)^2 \\ &= \min_{\varphi(x) \in \Phi} \|\delta\|_2^2 = \min_{\varphi(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^n (\varphi(x_i) - y_i)^2 \quad \text{-----}(3) \end{aligned}$$

其中 $\varphi(x) = \sum_{j=0}^m c_j \varphi_j(x)$ 为 Φ 中的任意函数。



引言（续）

称满足条件(3)的求函数 $\varphi^*(x) = \sum_{j=0}^m c_j^* \varphi_j(x)$ 的方法为数据拟合的最小二乘法。

$$\varphi^*(x) = \sum_{j=0}^m c_j^* \varphi_j(x) \text{ 为最小二乘解}$$

$\|\delta^*\|_2^2$ 称为最小二乘解的平方误差。

在确定了拟合函数 $\varphi(x)$ 后, 如何求拟合系数 $c_j (j = 0, 1, \dots, m)$

使得 $\varphi^*(x) = \sum_{j=0}^m c_j^* \varphi_j(x)$ 满足拟合条件(2)呢?

矛盾方程组

由于拟合函数(1)的待定系数个数 $m+1$ 少于实验数据的个数 $n+1$ ，将实验数据代入拟合函数会得到一个包含 $m+1$ 个未知数却由 $n+1$ 个方程组成的线性方程组。下面考虑更一般情形。

设有线性方程组 $\sum_{j=1}^m a_{ij}x_j = b_i \quad (i=1,2,\dots,n)$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad \text{-----}(4)$$



线性方程组的最小二乘解(续)

其矩阵形式为 $\mathbf{AX}=\mathbf{b}$

当方程组的系数矩阵和增广矩阵的秩不相等时，方程组无解，此时方程组称为矛盾方程组。

当(4)是矛盾方程组时，其精确解不存在，我们只好退而求其次，寻找未知数的一组取值，使矛盾方程组中的各式尽量好的近似满足。

对于一组数 $(x_1, x_2, \dots, x_m)^T$ 式(4)中第*i*个方程的残差为 $\delta_i = \sum_{j=1}^m a_{ij}x_j - b_i$ ， δ_i 越小，第*i*个方程近似满足的程度越好。

线性方程组的最小二乘解(续)

为了便于分析计算，常选择解向量使所有残差的平方和

$$F(x_1, x_2, \dots, x_m) = \sum_{i=1}^n \delta_i^2 = \sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^m a_{ij} x_j - b_i \right]^2$$

达到最小，这一条件被称为**最小二乘原则**。

基于这一原则来确定未知解向量 $(x_1, x_2, \dots, x_m)^T$

的方法称为**求解矛盾方程组的最小二乘法**，

符合最小二乘原则的解向量被称为矛盾方程组的**最小二乘解**。

线性方程组的最小二乘解(续)

F 是一个关于 $(x_1, x_2, \dots, x_m)^T$ 的二次函数,
使其取得极值的必要条件是

$$\frac{\partial F}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^n [2(\sum_{j=1}^m a_{ij}x_j - b_i) \cdot a_{ik}] = 0 \quad \text{-----}(5)$$
$$(k = 1, 2, \dots, m)$$

将式(5)表示的 m 个方程联立得到方程组 $\mathbf{C}\mathbf{x} = \mathbf{d}$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{i1}^2 & \sum_{i=1}^n a_{i1}a_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^n a_{i1}a_{im} \\ \sum_{i=1}^n a_{i2}a_{i1} & \sum_{i=1}^n a_{i2}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^n a_{i2}a_{im} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{im}a_{i1} & \sum_{i=1}^n a_{im}a_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^n a_{im}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{i1}b_i \\ \sum_{i=1}^n a_{i2}b_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{im}b_i \end{bmatrix} \quad \text{-----}(6)$$

线性方程组的最小二乘解(续)

包含 m 个方程 m 个未知数的线性方程组(6)被称为对应于矛盾方程组(4)的正规方程组（法方程组）。对比方程组(4)和(6)的系数矩阵，发现

$$C = A^T A, \quad d = A^T b$$

如果系数矩阵 A 的 m 个列向量线性无关，可以证明正规方程组的系数矩阵 C 对称正定，这时正规方程组有惟一解，此解就是矛盾方程组的最小二乘解。

矛盾方程组的求解过程

$$Ax = b \xrightarrow{\quad} A^T Ax = A^T b \xrightarrow{\quad} Cx = d$$

$C = A^T A, \quad d = A^T b$

线性方程组的最小二乘解(续)

例 求下列矛盾方程组的最小二乘解

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 4 \\ x_1 + 2x_2 = 7 \\ x_1 - x_2 = 2 \end{cases}$$

解法1

$$\text{假设} \begin{cases} \delta_1 = x_1 + x_2 - 4 \\ \delta_2 = x_1 + 2x_2 - 7 \\ \delta_3 = x_1 - x_2 - 2 \end{cases}$$

$$F(x_1, x_2) = \delta_1^2 + \delta_2^2 + \delta_3^2 = (x_1 + x_2 - 4)^2 + (x_1 + 2x_2 - 7)^2 + (x_1 - x_2 - 2)^2$$

$$\text{由} \begin{cases} \frac{\partial F}{\partial x_1} = 2(3x_1 + 2x_2 - 13) = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial x_2} = 2(2x_1 + 6x_2 - 16) = 0 \end{cases}$$

得法方程组

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 13 \\ 2x_1 + 6x_2 = 16 \end{cases} \quad \text{解得}$$

$$x_1 = \frac{23}{7} \quad x_2 = \frac{11}{7}$$

线性方程组的最小二乘解(续)

解法2

矛盾方程组的矩阵形式

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ 2 \end{bmatrix}$$

由 $\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}, \quad \mathbf{d} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \quad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 16 \end{bmatrix}$$

得到正规方程组
$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 13 \\ 2x_1 + 6x_2 = 16 \end{cases}$$

解得

$$x_1 = \frac{23}{7} \quad x_2 = \frac{11}{7}$$

§ 5.3 曲线的最小二乘拟合

重点精讲5.2
曲线最小二
乘拟合

假定拟合曲线为

$$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + \cdots + c_m\varphi_m(x) \quad (m < n)$$

拟合的目标仍然为找一组 $c_j^* (j = 0, 1, \dots, m)$, 使得

$$\begin{aligned} \|\delta^*\|_2^2 &= \sum_{i=0}^n (\varphi^*(x_i) - y_i)^2 \\ &= \min_{\phi(x) \in \Phi} \|\delta\|_2^2 = \min_{\phi(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^n (\varphi(x_i) - y_i)^2 \end{aligned}$$

最小。问题转化为

$$\text{求 } F(c_0, c_1, \dots, c_m) = \sum_{i=0}^n \left(\sum_{j=0}^m c_j \varphi_j(x_i) - y_i \right)^2 \quad \text{-----}(7)$$

的最小值(极小值)点 $c_0^*, c_1^*, \dots, c_n^*$ 的问题。





曲线的最小二乘拟合（续）

显然(7)可以转化为一个关于 c_0, c_1, \dots, c_m 的 $m+1$ 元矛盾方程组。

引入记号

$$\varphi_r = (\varphi_r(x_0), \varphi_r(x_1), \dots, \varphi_r(x_n))$$

$$f = (y_0, y_1, \dots, y_n)$$

定义内积

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^n \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) \quad (\varphi_k, f) = \sum_{i=0}^n \varphi_k(x_i) y_i$$

显然内积满足交换律 $(\varphi_k, \varphi_j) = (\varphi_j, \varphi_k)$

曲线的最小二乘拟合（续）

方程组(7)便可化为

$$c_0(\varphi_k, \varphi_0) + c_1(\varphi_k, \varphi_1) + \cdots + c_m(\varphi_k, \varphi_m) = (\varphi_k, f) \\ k = 0, 1, \cdots, m$$

这是一个系数为 (φ_k, φ_j) , 常数项为 (φ_k, f) 的线性方程组, 其矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_m) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_m) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_m, \varphi_0) & (\varphi_m, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_m, \varphi_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \\ \vdots \\ (\varphi_m, f) \end{pmatrix} \quad \text{---(8)}$$

简单记为 $\mathbf{G}_{m+1} \mathbf{a} = \mathbf{b}$

曲线的最小二乘拟合（续）

称(8)式为函数序列 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ 在点 x_0, x_1, \dots, x_n 上的法方程组。系数矩阵为对称阵。由于 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_m(x)$ 为函数类 Φ 的线性无关的基函数，所以法方程组的系数矩阵非奇异，即根据Cramer法则，法方程组有唯一解。

$$F(c_0^*, c_1^*, \dots, c_m^*) = \sum_{i=0}^n \left(\sum_{j=0}^m c_j^* \varphi_j(x_i) - y_i \right)^2 \text{ 是}$$
$$F(c_0, c_1, \dots, c_n) = \sum_{i=0}^n \left(\sum_{j=0}^m c_j \varphi_j(x_i) - y_i \right)^2 \text{ 的最小值}$$

因此 $\varphi^*(x) = \sum_{j=0}^m c_j^* \varphi_j(x)$ 为最小二乘解。

曲线的最小二乘拟合（续）

例：为了测定刀具的磨损速度，我们做这样的实验：经过一定时间(如每隔一小时)，测量一次刀具的厚度, 得到一组试验数据如下：

顺序编号 <i>i</i>	0	1	2	3	4	5	6	7
时间 t_i (小时)	0	1	2	3	4	5	6	7
刀具厚度 y_i (毫米)	27.0	26.8	26.5	26.3	26.1	25.7	25.3	24.3

试根据上面的试验数据建立 y 和 t 之间的经验公式 $y = f(t)$.

解 首先确定 $f(t)$ 的类型.

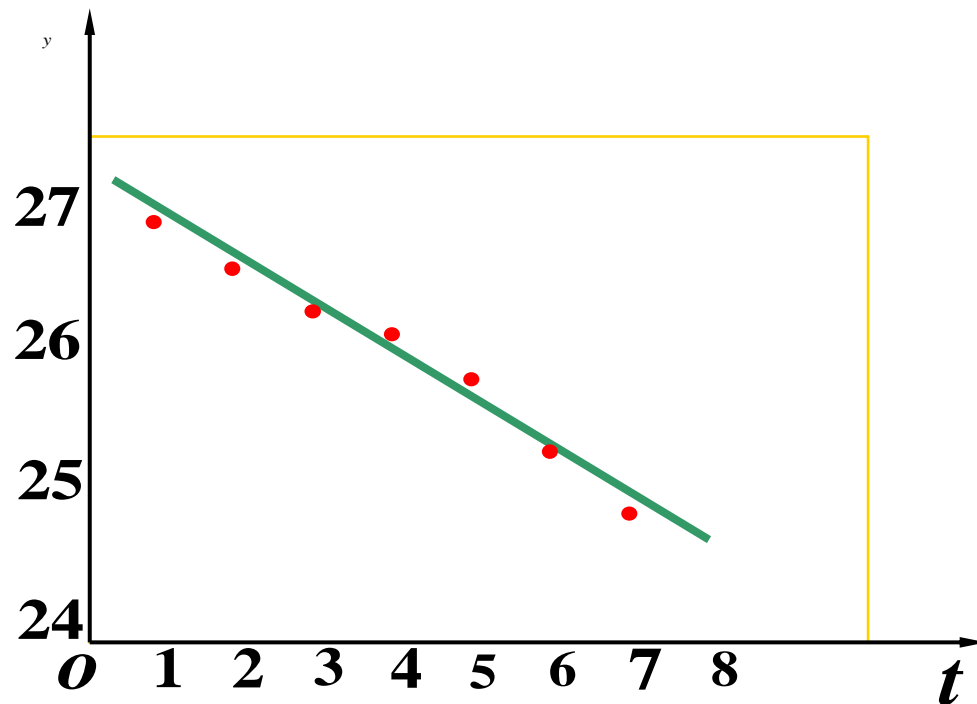
曲线的最小二乘拟合（续）

如图，在坐标纸上画出这些点，经观察可以认为 $y=f(t)$ 服从线性关系。

$$y = c_0 \varphi_0(t) + c_1 \varphi_1(t)$$

$$\varphi_0(t) = 1$$

$$\varphi_1(t) = t$$



建立法方程组

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \end{bmatrix}$$

计算系数

$$\begin{aligned}(\varphi_0, \varphi_0) &= \sum_{i=0}^7 1 = 8 & (\varphi_0, \varphi_1) &= \sum_{i=0}^7 t_i = 28, \\(\varphi_1, \varphi_0) &= \sum_{i=0}^7 t_i = 28, & (\varphi_1, \varphi_1) &= \sum_{i=0}^7 t_i^2 = 140, \\(\varphi_0, f) &= \sum_{i=0}^7 y_i = 208.5, & (\varphi_1, f) &= \sum_{i=0}^7 y_i t_i = 717.0\end{aligned}$$

代入方程组得

$$\begin{cases} 8c_0 + 28c_1 = 208.5 \\ 28c_0 + 140c_1 = 717 \end{cases}$$

解此方程组，得到

$$c_0 = 27.125, \quad c_1 = -0.3036$$

曲线的最小二乘拟合（续）

这样便得到所求拟合曲线为

$$y = f(t) = 27.125 - 0.3036t$$

由上式算出的函数值 $f(t_i)$ 与实测 y_i 的有一定的偏差.
现列表比较如下:

t_i	0	1	2	3	4	5	6	7
实测 y_i	27.0	26.8	26.5	26.3	26.1	25.7	25.3	24.3
$f(t_i)$	27.125	26.821	26.518	26.214	25.91	25.607	25.303	25.0
偏差	-0.125	-0.021	-0.018	-0.086	0.189	0.093	-0.003	-0.20

偏差的平方和 $\|\delta\|_2^2 = 0.108165$

仿此可以完全类似的解决我们提出的引例

最小二乘法拟合曲线的步骤

1. 通过观察、分析得到拟合曲线的数学模型，或根据经验公式确定数学模型。
2. 将拟合曲线的数学模型转换为多项式。
3. 写出矛盾方程组。
4. 写出正则方程组。（可由多项式模型直接得到）
5. 求解正则方程组，得到拟合曲线的待定系数。
6. 将正则方程组的解带回到数学模型中，得到拟合曲线。



Remark

1. 同一问题可以有不同的拟合曲线，通常根据均方误差 $\sqrt{\sum_{i=1}^N [\varphi(x_i) - y_i]^2}$ 和最大偏差 $\max_{1 \leq i \leq N} |\varphi(x_i) - y_i|$

的大小来衡量拟合曲线的优劣。均方误差和最大偏差较小的拟合曲线为较优的拟合曲线。

2. 在解决实际问题时，有时通过观察选择多个函数类型进行计算、分析、比较，最终获得较好的数学模型；有时把经验公式作为数学模型，只是用最小二乘法来确定公式中的待定常数。

Remark

3. 当拟合曲线 $\varphi(x)$ 中的待定常数是线性形式时，可直接根据矛盾方程组得到正则方程组而求解。当待定常数不是线性形式时，则应该先将待定常数线性化，再根据矛盾方程组写出正则方程组而求解。

例： $y = ae^{bx} \longrightarrow \ln y = \ln a + bx \longrightarrow$
 $u = \ln y, A = \ln a, B = b \longrightarrow u = A + Bx$

$y = \frac{1}{a + bx} \longrightarrow \frac{1}{y} = a + bx \longrightarrow$
 $u = \frac{1}{y} \longrightarrow u = a + bx$



§ 5.4 移动最小二乘法

移动最小二乘法，最早由Lancaster和Salkauskas在上世纪80年代初提出，主要用来进行曲线、曲面的拟合。近年来在工程计算领域，特别是偏微分方程数值解方面得到广泛应用。

曲线拟合最小二乘法的优缺点：

优点：模型一旦建立，一劳永逸，对所有的自变量 x 均适用。

缺点：

一是模型由于问题不同而千变万化，很难给出一个系统统一的方法。

二是当模型不是已知函数的线性组合时，参数很难确定。

移动最小二乘法（续）

对于一个复杂的连续函数，在每一点的局部可以用简单的函数如一次函数、二次函数等的线性组合来近似，其参数可以用最小二乘法确定。由于每一点的局部都是用最小二乘法确定参数，故称这一方法为移动最小二乘法。

下面在一维情形下对这种方法作简单介绍。

已知函数 $y = f(x)$ 上 n 个节点 $\{x_i\}_{i=1}^n$ 处的函数值 $\{y_i\}_{i=1}^n$

在点 $x \in [a, b]$ 附近的近似函数 $\phi(x)$ 可表示为

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^m p_i(x) a_i(x) = \mathbf{p}^T(x) \mathbf{a}(x) \quad \text{---(1)}$$

这里 $\mathbf{p}^T(x)$ 表示一组基函数， m 为基函数的个数， $\mathbf{a}(x) = (a_1(x), a_2(x), \dots, a_m(x))^T$ 为待定系数。

移动最小二乘法（续）

➤这里的参数向量 $\mathbf{a}(x)$ 不是常数向量，而是随坐标 x 的变化而变化。

➤引入紧支（Compact Support）概念，认为点 x 处的值 y 只受 x 附近子域内节点影响，这个子域称作点 x 的影响区域，影响区域外的节点对 x 的取值没有影响。在影响区域上定义一个权函数 $w(x)$ ，如果权函数在整个区域取为常数，就得到传统的最小二乘法。

一维基函数常选用如下的完全单项式基函数

线性基函数: $p^T(x) = (1, x)$

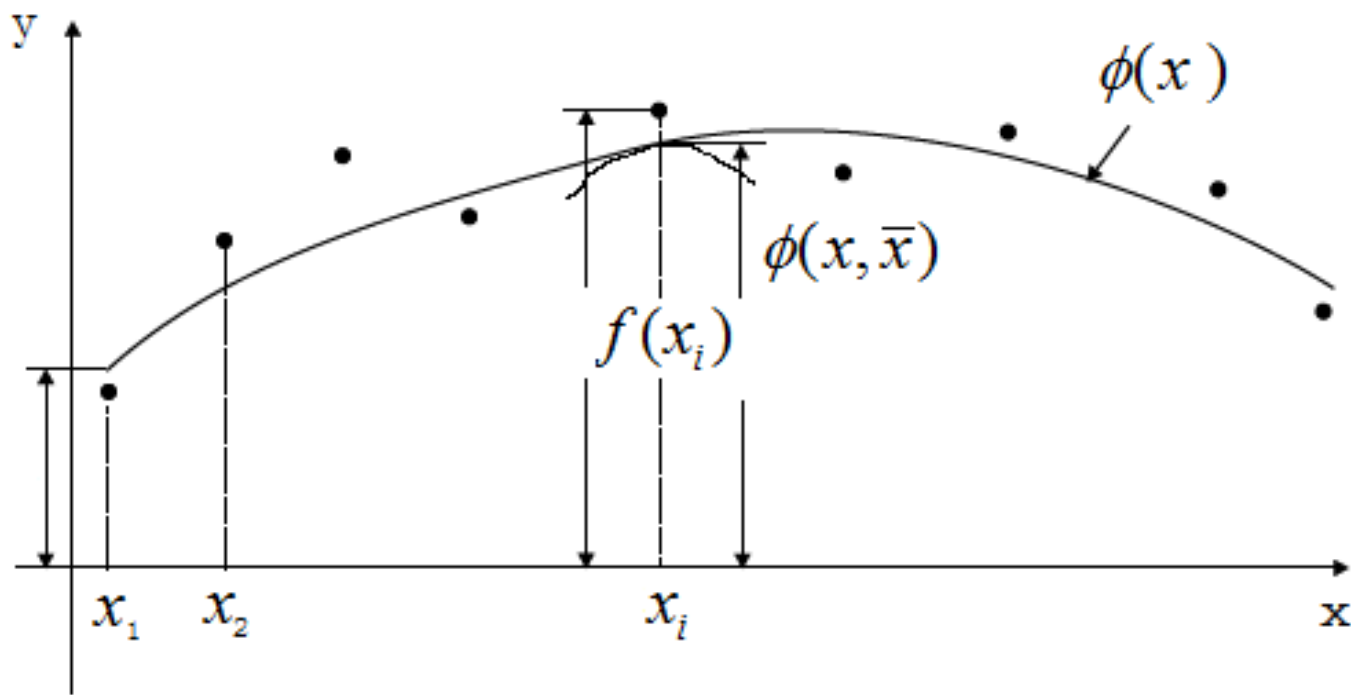
二次基函数: $p^T(x) = (1, x, x^2)$

移动最小二乘法（续）

式(1)对应的局部近似为

$$\phi(x, \bar{x}) = \sum_{i=1}^m p_i(\bar{x}) a_i(x) = \mathbf{p}^T(\bar{x}) \mathbf{a}(x) \quad \text{---(2)}$$

这里 \bar{x} 表示 x 的邻域内的点的坐标。



移动最小二乘法（续）

将 x 的影响区域内的节点进行编号，不妨依然记为 $\{x_i\}_{i=1}^N$ ($N \leq n$)，用最小二乘法确定式中的系数 $\mathbf{a}(x)$ 使得近似函数 $\phi(x, \bar{x})$ 在这 N 个节点处的函数值与 $f(x)$ 的函数值误差的加权平方和最小

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sum_{i=1}^N w_i(x) [\phi(x_i) - f(x_i)]^2 \\ &= \sum_{i=1}^N w_i(x) \left[\sum_{j=1}^m p_j(x_i) a_j(x) - f(x_i) \right]^2 \quad \text{---(3)} \end{aligned}$$

所以有

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial a_k(x)} &= 2 \sum_{i=1}^N w_i(x) \left[\sum_{j=1}^m p_j(x_i) a_j(x) - f(x_i) \right] p_k(x_i) = 0 \\ &\quad (k = 1, 2, \dots, m) \end{aligned}$$

移动最小二乘法（续）

由此得到

$$\sum_{j=1}^m \left[\sum_{i=1}^N w_i(x) p_j(x_i) p_k(x_i) \right] a_j(x) = \left[\sum_{i=1}^N w_i(x) p_k(x_i) \right] f(x_i) \quad \text{---(4)}$$

将式(4)表示的方程组表示成矩阵形式为

$$\mathbf{A}(x) \mathbf{a}(x) = \mathbf{B}(x) \mathbf{f}$$

其中

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{P}^T \mathbf{W}(x) \mathbf{P}, \mathbf{B}(x) = \mathbf{P}^T \mathbf{W}(x)$$

$$\mathbf{a}(x) = (a_1(x), a_2(x), \dots, a_m(x))^T$$

$$\mathbf{f} = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_N))^T$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_1(x_1) & p_2(x_1) & \dots & p_m(x_1) \\ p_1(x_2) & p_2(x_2) & \dots & p_m(x_2) \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ p_1(x_N) & p_2(x_N) & \dots & p_m(x_N) \end{bmatrix} \quad \mathbf{W}(x) = \begin{bmatrix} w_1(x) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & w_2(x) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & w_N(x) \end{bmatrix}$$

移动最小二乘法（续）

由式 (4)可知

$$\mathbf{a}(x) = \mathbf{A}^{-1}(x)\mathbf{B}(x)\mathbf{f} \quad \text{---(5)}$$

为保证 $\mathbf{A}(x)$ 可逆， x 的影响区域要包含足够的节点。

将式(5)代入式得(2)

$$\phi(x, \bar{x}) = \mathbf{p}^T(\bar{x}) \mathbf{a}(x) = [\mathbf{p}^T(\bar{x}) \mathbf{A}^{-1}(x) \mathbf{B}(x)] \cdot \mathbf{f}$$

取 $\phi(x) = \phi(x, \bar{x})|_{\bar{x}=x}$ ，即对任意计算点 x 采用如上相同的计算过程进行近似，于是对求解域 $[a, b]$ 中的所有点都可以建立相应的近似。