数 值 分 析 (6)

Numerical Analysis

计算机系 软件所 喻文健

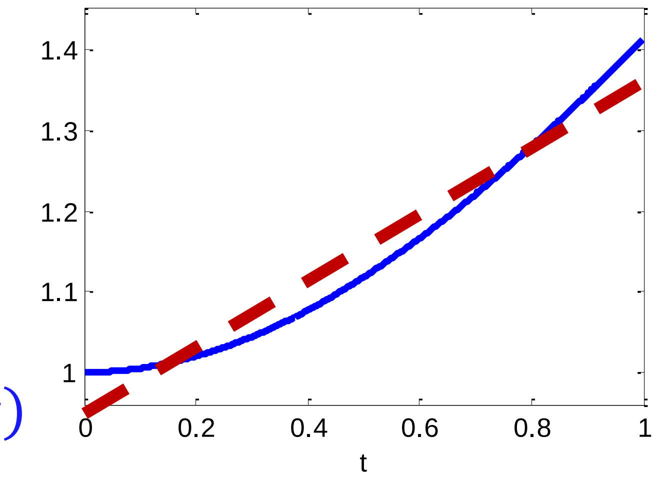
第六章 函数逼近与函数插值

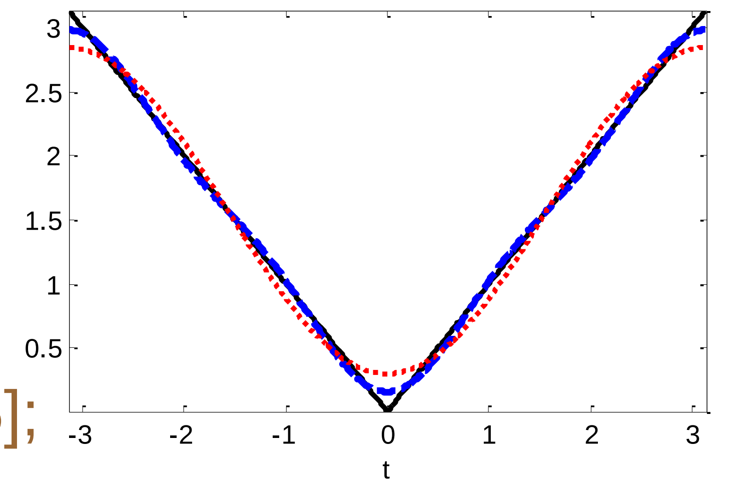
- 用较简单的函数近似表示未知函数、或已知复杂函数
- 逼近：整体上近似 (整体误差最小)
- 插值：在若干点上两者的值相等 (误差为0)
- 本章内容
  - 函数逼近的基本概念
  - 连续函数的最佳平方逼近
  - 曲线拟合的最小二乘法
  - 多项式插值 (拉格朗日, 牛顿)
  - 分段多项式插值
  - 样条函数插值

函数逼近问题的例子

- 已知表达式的函数的逼近
  - $f(t)=\sqrt{1+t^2}\ \approx a_0+a_1 t$
  - $f(t)=|t|\ \approx \frac{\pi}{2}-\frac{4}{\pi}\cos(t)$
  - $\approx \frac{\pi}{2}-\frac{4}{\pi}\cos(t)-\frac{4}{9\pi}\cos(3t)$

  傅里叶变换, 信号的频谱分析





- 一系列数据点的逼近
  - t=[1, 1.5, 2, 2.5, 3 , 3.5 , 4];
  - f=[33.4, 79.5, 122.65, ... 159.05, 189.15, 214.15, 238.65];

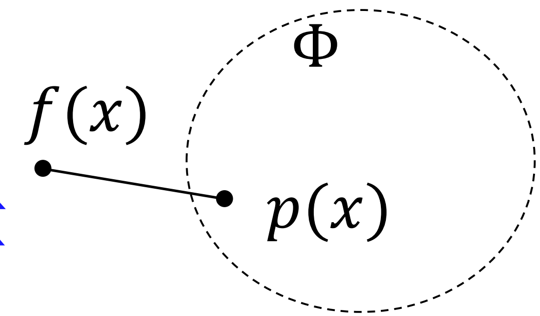
  表格函数, 曲线拟合

函数逼近的基本概念

Wenjian Yu

函数逼近的基本概念

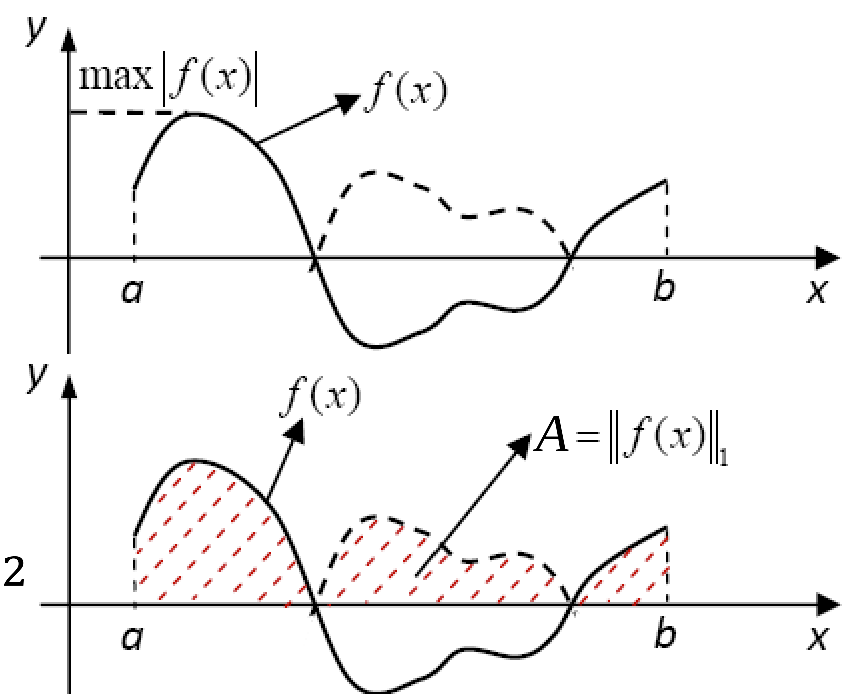
- 问题描述
  - 对给定函数$f(x)$, 在某个较简单的函数类Φ中找$p(x)$, 使得在某种度量意义下误差函数$p(x)-f(x)$最小



  - $f(x)$: 有解析表达式的函数, 或表格函数
  - Φ: 多项式,指数函数,三角函数,有理分式,分段多项式等
- 函数空间
  - 某定义域上的所有函数构成线性空间 (值域ℝ, or ℂ)
  - 实连续函数集合$C[a,b]$, k阶导数连续函数集合$C^k[a,b]$均构成无限维的线性空间
  - 用范数度量函数的大小、误差函数的大小

函数逼近的基本概念

- $C[a,b]$的常用范数
  - ∞-范数
  - $\|f(x)\|_\infty = \max\limits_{x\in[a,b]} |f(x)|$
  - 1-范数
  - $\|f(x)\|_1 = \int_a^b |f(x)|dx$
  - 2-范数
  - $\|f(x)\|_2 = \left[\int_a^b f^2(x)dx\right]^{1/2}$



- $C[a,b]$ 上的内积(一般见定义6.1)
  - $\langle u(x), v(x)\rangle = \int_a^b u(x)v(x)dx$, 内积范数$||u||\equiv\sqrt{\langle u,u\rangle} \equiv \|u\|_2$ (复内积有所不同)

函数逼近的基本概念

(用向量内积理解含义)

- **Th6.1**: Cauchy-Schwarz不等式 $|\langle u,v\rangle|^2 \le \langle u,u\rangle\cdot\langle v,v\rangle$
- **Th6.2**: 设S为<u>实内积空间</u>,$u_1,\dots,u_n \in S$, 则格莱姆(Gram)矩阵

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \langle u_1,u_1\rangle & \langle u_2,u_1\rangle & \cdots & \langle u_n,u_1\rangle \\ \langle u_1,u_2\rangle & \langle u_2,u_2\rangle & \cdots & \langle u_n,u_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle u_1,u_n\rangle & \langle u_2,u_n\rangle & \cdots & \langle u_n,u_n\rangle \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{G}\boldsymbol{x} = \langle \Sigma_{j=1}^n x_j u_j, \Sigma_{j=1}^n x_j u_j\rangle$

实际上, $\boldsymbol{G}$对称正定

非奇异的充要条件是$u_1,\dots,u_n$线性无关 $\overset{?}{\Leftrightarrow}$

- 证明: 矩阵$\boldsymbol{G}$非奇异$\Leftrightarrow$线性方程组$\boldsymbol{Ga}=\boldsymbol{0}$只有全零解

反证法证<u>必要性</u>, 若$u_1,\dots,u_n$线性相关, 存在非零向量$\boldsymbol{a}$

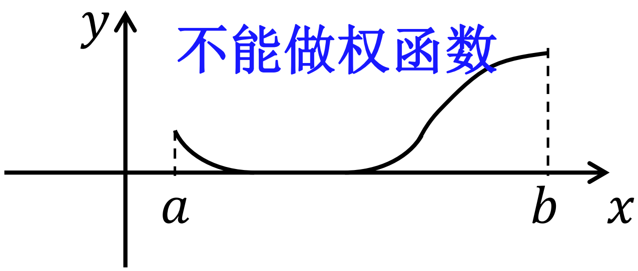
$$\sum_{j=1}^n a_j u_j = 0 \Rightarrow \forall k, \sum_{j=1}^n a_j\langle u_j,u_k\rangle = \langle \sum_{j=1}^n a_j u_j, u_k\rangle = 0\text{, 即}\boldsymbol{Ga}=\boldsymbol{0}$$

矛盾!

充分性的证明 …

函数逼近的基本概念

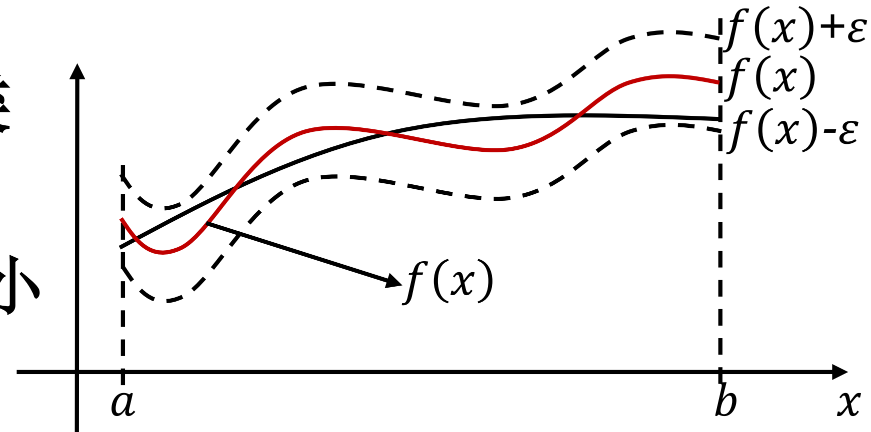
- 定义6.2:权函数$\rho(x)$, 针对实连续函数空间$C[a,b]$
  - $\rho(x) \geq 0, \forall x \in [a,b]$ (非负)
  - $\int_a^b x^k \rho(x) dx$存在, $(k = 0,1,\ldots)$ (多项式可积)
  - 对非负连续函数$g(x)$, 若$\int_a^b g(x)\rho(x)dx = 0$, 则$g(x) \equiv 0$ (无局部恒为零)
- $C[a,b]$中一般的非负函数, 无某个局部恒为0, 可当权函数



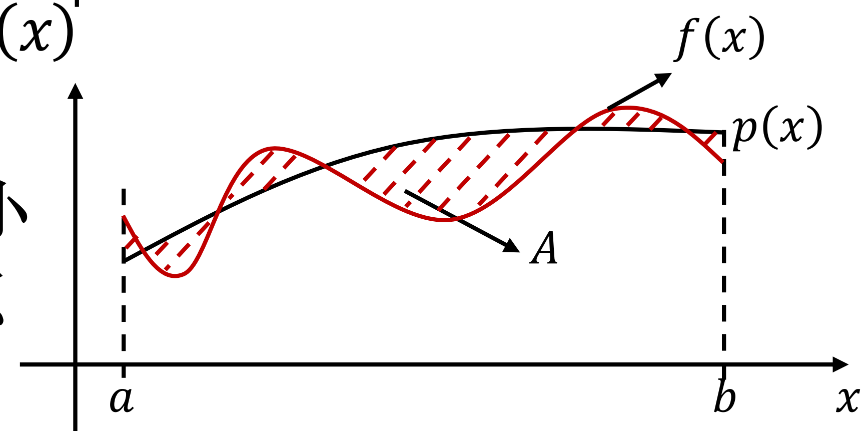
- 定义6.3: 加权内积
  - $\langle u(x), v(x) \rangle = \int_a^b \rho(x)u(x)v(x)dx$ 特例: $\rho(x) \equiv 1$
  - 内积范数: $\|f(x)\| = \left[\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx\right]^{1/2}$ (广义的2-范数)

函数逼近的基本概念

- 根据度量误差用的范数分类
- ∞-范数：最佳一致逼近
  - 要求$\varepsilon = \|p(x) - f(x)\|_\infty$最小
  - $f(x) - \varepsilon \le p(x) \le f(x) + \varepsilon$
  - $p(x)$在区间上一致地接近$f(x)$



- 1-范数, 2-范数
  - 要求$A = \|p(x) - f(x)\|_1$最小
  - A为两条曲线间区域的面积
  - 区间上”平均”误差尽量小
  - 2-范数有类似意义, 易于求解, 为最佳平方(最小二乘)逼近



- 求最佳一致逼近很复杂、困难, 仅考虑求最佳平方逼近

连续函数的最佳平方逼近

Wenjian Yu

最佳平方逼近

- 问题描述　　函数自变量改为t
  - 对$f(t) \in C[a,b]$进行函数逼近
  - 函数类Φ一般是线性空间, $span\{\varphi_1(t), \ldots, \varphi_n(t)\}$
  - 求$S(t) \in \Phi$, $S(t) = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(t)$, 使$\|S(t) - f(t)\|_2$最小
- 问题的求解

$$F \equiv \|S(t) - f(t)\|_2^2 = \langle \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j - f, \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j - f \rangle$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} x_j x_l \langle \varphi_j, \varphi_l \rangle - 2\sum_{j=1}^{n} x_j \langle f, \varphi_j \rangle + \langle f, f \rangle$$ *n元二次函数*

$$\frac{\partial F}{\partial x_k} = 2x_k \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle + 2\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{n} x_j \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle - 2\langle f, \varphi_k \rangle = 0, (k = 1, \ldots, n)$$

求解线性方程组$\boldsymbol{Gx} = \boldsymbol{b}$, 即得到$\boldsymbol{x}$, 进而得到$S(t)$ *法方程方法*

最佳平方逼近

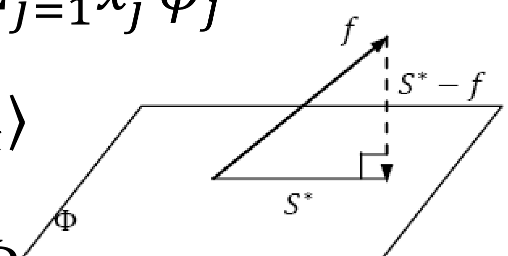
- 法方程方法: 求解$\boldsymbol{Gx}=\boldsymbol{b}$

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\langle\varphi_1,\varphi_1\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_1\rangle\\ \langle\varphi_1,\varphi_2\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_2\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_2\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\varphi_1,\varphi_n\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_n\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}\langle f,\varphi_1\rangle\\ \langle f,\varphi_2\rangle\\ \vdots\\ \langle f,\varphi_n\rangle\end{bmatrix}$$

  - $\boldsymbol{G}$为Gram矩阵, 对称正定, 法方程存在唯一解
  - 这个解会让$\|S(t)-f(t)\|_2^2$达到最小值吗？ (充分性)
  - 设法方程的解为$\boldsymbol{x}^*$，逼近问题的解$S^*=\sum_{j=1}^{n}x_j^*\varphi_j$

法方程中第k个方程$\sum_{j=1}^{n}x_j^*\langle\varphi_j,\varphi_k\rangle=\langle f,\varphi_k\rangle$

即$\langle S^*,\varphi_k\rangle=\langle f,\varphi_k\rangle \Longrightarrow \langle S^*-f,S\rangle=0,\ \forall S\in\Phi$

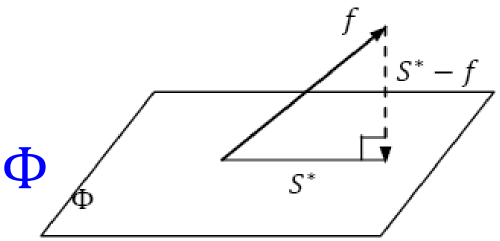


重要性质: $S^*-f\perp\Phi$

最佳平方逼近

- 法方程方法

$S^* - f \perp \Phi$



  - 要证充分性, 考虑任意$S \in \Phi$, $\langle S-f, S-f\rangle - \langle S^*-f, S^*-f\rangle$
  - $= \langle S, S\rangle - 2\langle f, S\rangle - \langle S^*, S^*\rangle + 2\langle f, S^*\rangle$
  - $= \langle S, S\rangle - 2\langle S, S^*\rangle + \langle S^*, S^*\rangle + 2\langle S, S^*\rangle - 2\langle f, S\rangle - 2\langle S^*, S^*\rangle + 2\langle f, S^*\rangle$
  - $= \|S - S^*\|_2^2 + \cancel{2\langle S, S^* - f\rangle} - \cancel{2\langle S^* - f, S^*\rangle} \geq 0$ 得证!
  - 算法6.1: 根据被逼近函数f, 基函数$\varphi_1, \ldots, \varphi_n$形成法方程
  - 对矩阵$\boldsymbol{G}$进行Cholesky分解$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T$
  - 分两步求解方程$\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，得到$\boldsymbol{x}$, $S^* := \sum_{i=1}^{n} x_i \varphi_i$
  - 计算逼近误差: $\|\delta\|_2 = \|S^* - f\|_2$

$\|\delta\|_2^2 = \cancel{\langle S^* - f, S^*\rangle} - \langle S^* - f, f\rangle = -\langle S^* - f, f\rangle = \|f\|_2^2 - \Sigma_{j=1}^{n} x_j^* \langle \varphi_j, f\rangle$

最佳平方逼近

为什么用多项式? 见pp.190
定理6.3 (Weierstrass定理)

- 最佳平方逼近多项式
  - $\Phi = \mathbb{P}_{n-1}$, 次数不超过n-1的所有多项式函数
  - 基函数为$\{1, t, \dots, t^{n-1}\}$, 不妨考虑定义域为[0, 1]
  - 列法方程求解, 系数$G_{kj} =$

$$\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle = \int_0^1 t^{k+j-2} dt = \frac{1}{k+j-1}, \text{则} \boldsymbol{G}_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}$$

Hilbert矩阵

- 两方面问题
  - n较大时, $\boldsymbol{G}_n$高度病态
  - 当n很大时, 求解稠密线性方程组的计算量很大
  - 改进方法：用正交基函数, $\boldsymbol{G}_n$变为对角阵 *6.2.2小节*

正交函数族与正交多项式

- 正交函数族
  - 带权内积$\langle f(t), g(t)\rangle = \int_a^b \rho(t) f(t) g(t) dt = 0$ 正交
  - [a, b]上的正交函数族$\{\varphi_k(t)\}$: 若它们两两正交 (定义6.4)
  - 例: $[-\pi, \pi]$上的函数族: 1, $\cos t, \sin t, \cos(2t), \sin(2t), \cdots,$
- 正交多项式

  $\mathbb{P}_{n-1}$的一组正交基
  - n个次数不超过n-1的正交多项式函数$\{\varphi_1(t), \cdots, \varphi_n(t)\}$
  - 逐个正交化过程(Gram-Schmidt)构造正交基

由一般的基$\{1, t, t^2, \cdots, t^n\}$开始，$\varphi_1(t) = 1$,

$$\varphi_k(t) = t^{k-1} - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{\langle t^{k-1}, \varphi_j(t)\rangle}{\langle \varphi_j(t), \varphi_j(t)\rangle} \varphi_j(t)$$

适合于任意线性空间基的正交化

正交多项式的特性见pp.195

几种正交多项式

名称	定义域	权函数	表达式 / 递推公式
勒让德多项式	[-1, 1]	$\rho(t)=1$	$\begin{cases} P_0(t)=1, \quad P_1(t)=t, \\ (k+1)P_{k+1}(t)=(2k+1)tP_k(t)-kP_{k-1}(t), k=1,2,\cdots \end{cases}$
切比雪夫多项式	[-1, 1]	$\rho(t)=\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}$	$\begin{cases} T_0(t)=1, \quad T_1(t)=t, \\ T_{k+1}(t)=2tT_k(t)-T_{k-1}(t), \quad k=1,2,\cdots \end{cases}$
切比雪夫多项式-2	[-1, 1]	$\rho(t)=\sqrt{1-t^2}$	$\begin{cases} U_0(t)=1, \quad U_1(t)=2t, \\ U_{k+1}(t)=2tU_k(t)-U_{k-1}(t), \quad k=1,2,\cdots \end{cases}$
拉盖尔多项式	[0,+∞]	$\rho(t)=e^{-t}$	$\begin{cases} L_0(t)=1, \quad L_1(t)=1-t, \\ L_{k+1}(t)=(1+2k-t)L_k(t)-k^2L_{k-1}(t), k=1,2,\cdots \end{cases}$
埃尔米特多项式	(-∞,+∞)	$\rho(t)=e^{-t^2}$	$\begin{cases} H_0(t)=1, \quad H_1(t)=2t, \\ H_{k+1}(t)=2tH_k(t)-2kH_{k-1}(t), \quad k=1,2,\cdots \end{cases}$

法方程的求解变得简单, 直接计算 $S^*(t)=\sum_{k=1}^{n}\frac{\langle f(t),\varphi_k(t)\rangle}{\langle \varphi_k(t),\varphi_k(t)\rangle}\varphi_k(t)$

正交函数族与正交多项式

- 一般定义域上的勒让德(Legendre)多项式
  - $P_k(t)$ ~ [-1, 1]　　　　**?** ~ [a, b]
  - $\{P_k(t)\}$的特点是: 积分$I=\int_{-1}^{1}P_j(t)P_k(t)\mathrm{d}t=\begin{cases}0, & j\neq k\\ 2/(2k+1), & j=k\end{cases}$
  - 要求[a, b]上正交多项式, 修改积分限, 结果特点不变
  - 变量代换$\begin{cases}-1\to a\\ 1\to b\end{cases}$, $s=\dfrac{b-a}{2}t+\dfrac{b+a}{2}$, $t=\dfrac{2s-(a+b)}{b-a}$

$$I=\int_a^b P_j\left(\frac{2s-(a+b)}{b-a}\right)P_k\left(\frac{2s-(a+b)}{b-a}\right)\cdot\frac{2}{b-a}\mathrm{d}s$$

即[a, b]上的正交多项式 $\tilde{P}_k(s)=P_k\left(\dfrac{2s-(a+b)}{b-a}\right)$

$$\langle\tilde{P}_k(t),\tilde{P}_k(t)\rangle=\frac{b-a}{2}\cdot\frac{2}{2k+1}$$

$$\langle\tilde{P}_k(t),\tilde{P}_j(t)\rangle=0,\qquad k\neq j$$

正交函数族与正交多项式

$$\tilde{P}_k(t) = P_k\left(\frac{2t-(a+b)}{b-a}\right)$$

- **例6.3**: $f(t) = \sqrt{1+t^2}, t \in [0,1]$，用正交多项式求一次最佳平方逼近多项式
- 解：$\tilde{P}_0(t) = 1$， $\tilde{P}_1(t) = P_1(2t-1) = 2t-1$

法方程的解为

$$x_1^* = \frac{\langle f(t), \tilde{P}_0(t)\rangle}{\langle \tilde{P}_0(t), \tilde{P}_0(t)\rangle} = \frac{\int_0^1 \sqrt{1+t^2}dt}{\int_0^1 dt} \approx 1.147$$

$$x_2^* = \frac{\langle f(t), \tilde{P}_1(t)\rangle}{\langle \tilde{P}_1(t), \tilde{P}_1(t)\rangle} = \frac{\int_0^1 \sqrt{1+t^2}(2t-1)dt}{(1-0)/(2\times 1+1)} \approx 0.213$$

$$S_1^*(t) = 1.147 + 0.213(2t-1)$$
$$= 0.934 + 0.426t$$

与例6.1结果一致

- 正交函数族做最佳平方逼近
  - 计算方便，算法稳定性好
  - 便于基函数的增加、删除

(一致逼近效果, pp.198定理6.5)

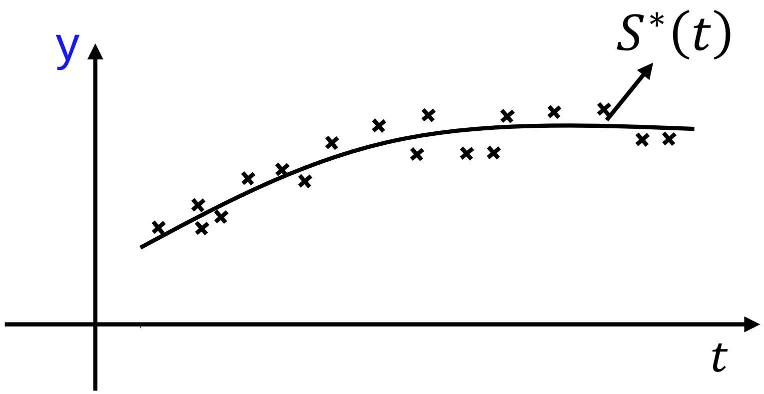
曲线拟合的最小二乘法

Wenjian Yu

曲线拟合问题

实例演示Matlab, Excel

- **Motivation**
  - 发现数据的规律, “回归分析”
  - 由于数据存在误差, 逼近曲线不必通过所有点



- **问题描述**
  - 数据点为(t_i, f_i), $(i = 1, \cdots, m)$, 用函数$S(t)$来拟合
  - 拟合的标准: $\sum_{i=1}^{m}[S(t_i) - f_i]^2$最小, “最小二乘拟合” 几何意义?
  - 若$S(t) \in \Phi$, $S(t) = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(t)$, 求系数$x_j$, 线性最小二乘 $m \geq n$
  - 定义在离散点t_i上的表格函数构成线性空间, 函数可用其离散点函数值构成的向量表示 (要求点t_i各不相同)

最佳平方逼近问题!

线性最小二乘

- 问题的矩阵表述
  - 用函数值构成的向量表示定义在离散点t_i, $(i = 1, \cdots, m)$ 上的表格函数$f(t)$ $\quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{f} = [f_1, \cdots, f_m]^T$
  - 表格函数的2-范数: $\|f(t)\|_2 = \left[\sum_{i=1}^{m} |f(t_i)|^2\right]^{1/2} = \|\boldsymbol{f}\|_2$
  - 曲线拟合的线性最小二乘问题

设$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix}$ 已知$\boldsymbol{f}$, 求$\boldsymbol{x}$, 使 $\|\boldsymbol{f} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$达到最小

常记为$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \cong \boldsymbol{f}$

解$\boldsymbol{x}$称为该问题的最小二乘解, 进而得$S(t) = \sum_{j=1}^{n} x_j \varphi_j(t)$

线性最小二乘 – 法方程法

- 法方程方法: 求解$\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\langle\varphi_1,\varphi_1\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_1\rangle\\ \langle\varphi_1,\varphi_2\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_2\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_2\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\varphi_1,\varphi_n\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_n\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle\end{bmatrix},\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}\langle f,\varphi_1\rangle\\ \langle f,\varphi_2\rangle\\ \vdots\\ \langle f,\varphi_n\rangle\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1)\\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m)\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{\varphi}_1\quad\boldsymbol{\varphi}_2\quad\cdots\quad\boldsymbol{\varphi}_n]$$

$$\boldsymbol{A}^T=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\varphi}_1^T\\ \boldsymbol{\varphi}_2^T\\ \vdots\\ \boldsymbol{\varphi}_n^T\end{bmatrix} \Longrightarrow \begin{aligned}\boldsymbol{G}&=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{b}&=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{f}\end{aligned}$$

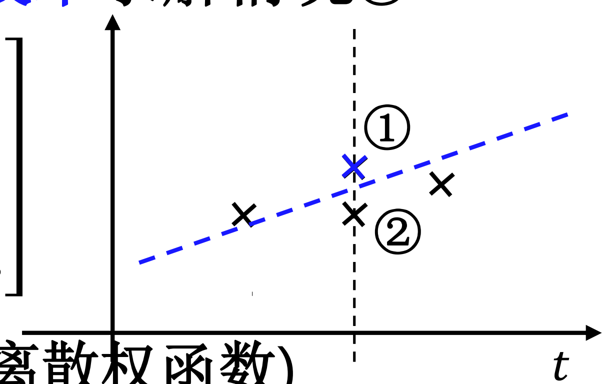
算法6.2

- □ 需求解的法方程为$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{f}$
- □ 若表格函数$\varphi_1(t),\dots,\varphi_n(t)$线性无关, 法方程存在唯一解 → $\boldsymbol{A}$列满秩

线性最小二乘 – 法方程法

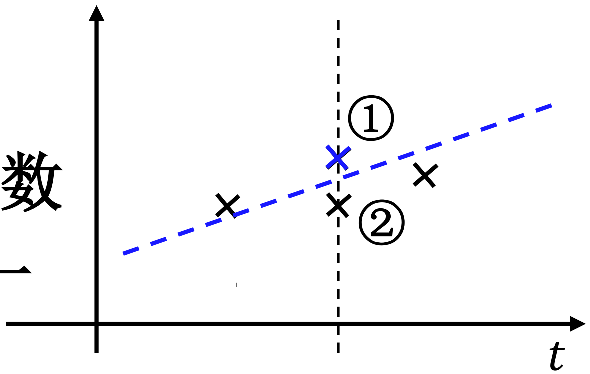
- 法方程方法: 求解$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{f}$
  - 不同于连续函数, 表格函数是否线性无关受$\{t_i\}$取值影响
  - 例: $\{t_i=0,\pi,2\pi\}$时, 表格函数$\sin t, \sin(2t)$是线性相关的
  - 一个结论: 若t_i值各不相同, $\mathbb{P}_{n-1}$多项式基函数对应的表格函数线性无关(多项式拟合很好) 一般情况, 不保证$\boldsymbol{A}$列满秩
- 若离散点t_i有相同的　用加权内积技术求解情况①

$$\begin{bmatrix} \langle\varphi_1,\varphi_1\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_1\rangle \\ \langle\varphi_1,\varphi_2\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_2\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\varphi_1,\varphi_n\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_n\rangle & \cdots & \langle\varphi_n,\varphi_n\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f,\varphi_1\rangle \\ \langle f,\varphi_2\rangle \\ \vdots \\ \langle f,\varphi_n\rangle \end{bmatrix}$$



$\langle\varphi_i,\varphi_j\rangle=\sum_{i=1}^{m}\rho_i\varphi_j(t_i)\varphi_k(t_i)$, 权ρ_i为点的重数(离散权函数)

线性最小二乘 – 法方程法



- 若离散点t_i有相同的
  - 加权内积+法方程求解①, ρ_i为点的重数
  - 保证点t_i各不相同, 多项式拟合解唯一
  - 更通用的方法是算法6.2: 情况①②
    按数据点逐行形成矩阵$\boldsymbol{A}$、向量$\boldsymbol{f}$, 再求解$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{f}$
  - $\boldsymbol{A}$中有相同行
  - 拟合阶数**n**不应超过不同自变量点(t_i)的总数
  - 处理情况①时与采用加权内积的一般法方程方法等价

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1)\\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m)\end{bmatrix}$$

看例**6.5**, 见后面

线性最小二乘 – 正交变换法

- 矩阵正交变换法解LLS问题
  - 法方程方法的缺点: 当n较大时, 病态性(类似于连续函数)
  - 计算A^TA, 数值误差也较显著
  - 解决办法: 构造表格函数的正交基 例6.7
  - 等价的、实用的方法: 用QR分解实现基函数的正交化

1965, 由 G. Golub 提出

设按任意一组基函数$\{\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t)\}$, 它们在自变量点上的函数值构成矩阵$\boldsymbol{A}$, 被逼近函数值向量为$\boldsymbol{f}$

求拟合系数$\boldsymbol{x}$, 它使得$\|\boldsymbol{f}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$达到最小值

$$\boldsymbol{A}=\underbrace{\boldsymbol{Q}}_{\text{正交阵}}\boldsymbol{R} \Longrightarrow \boldsymbol{f}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{f}-\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}) \Longrightarrow \|\boldsymbol{f}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{f}-\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\|_2$$

正交阵

问题转化为: 求$\boldsymbol{x}$, 使得$\|\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{f}-\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\|_2$达到最小值

线性最小二乘 – 正交变换法

- 矩阵正交变换法解LLS问题 (续)　　解$Ax \cong f$

$\underset{m\times n}{A} = \underset{m\times m}{Q}\ \underset{m\times n}{R}$　　求x, 使得$\|Q^T f - Rx\|_2$达到最小值

设$Q = [\underset{n列}{Q_1} \quad Q_2]$, $R = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix}^{n行}$, $Q^T f - Rx = \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{bmatrix} f - \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} Q_1^T f - R_1 x \\ Q_2^T f \end{bmatrix}$

$\|Q^T f - Rx\|_2^2 = \|Q_1^T f - R_1 x\|_2^2 + \|Q_2^T f\|_2^2 \geq \|Q_2^T f\|_2^2$　取等号条件: $R_1 x = Q_1^T f$

- 算法6.3　Householder变换作用于f得$Q^T f$, $Q_1^T f$是它一部分
  - 根据基函数$\varphi_1, \ldots, \varphi_n$在离散点$t_1, \ldots, t_m$上的取值形成$A$
  - 用算法5.3将A正交三角化成R,同时将f变换为$\tilde{f} = Q^T f$
  - $R_1 := R[1:n, :], b := \tilde{f}[1:n]$, 用回代法(算法3.2)解$R_1 x = b$

例6.6
例6.8
见后面

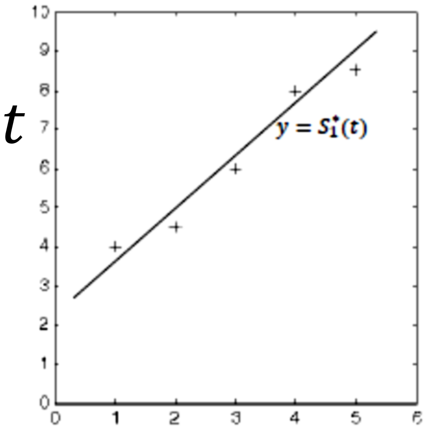
数值稳定, 实用　　若A不是列满秩，需加以改进

线性最小二乘 – 例题

- 例6.5: 一组数据如下表, 其中ρ_i为各数据点出现的次数, 用最小二乘法求这些数据的拟合曲线

t_i	1	2	3	4	5
f_i	4	4.5	6	8	8.5
ρ_i	2	1	3	1	1

用加权内积+法方程法



- 解: 估计是直线,设拟合函数为$S_1(t)=x_1+x_2t$ 基函数$\varphi_1(t)=1$, $\varphi_1(t)=t$. 列法方程

$$\begin{bmatrix}\langle\varphi_1,\varphi_1\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_1\rangle \\ \langle\varphi_1,\varphi_2\rangle & \langle\varphi_2,\varphi_2\rangle\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle\varphi_1,f\rangle\\\langle\varphi_2,f\rangle\end{bmatrix}$$

$$\langle\varphi_1,\varphi_1\rangle=\sum_{i=1}^{5}\rho_i=8$$

…… ……

$$\Rightarrow \begin{cases}8x_1+22x_2= & 47\\ 22x_1+74x_2= & 145.5\end{cases}$$

$$\langle\varphi_1,\varphi_2\rangle=\langle\varphi_2,\varphi_1\rangle=\sum_{i=1}^{5}\rho_i t_i=22,$$

解得: $S_1^*(t)=2.5648+1.2037t$

线性最小二乘 – 例题

- 例6.6: 一组数据如下表, 用适当的函数对它们进行拟合

t_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46
$\tilde{y}_i$	1.6292	1.7561	1.8764	2.0082	2.1353

非线性问题怎么用线性最小二乘拟合

- 解：将数据点在坐标纸上标出, 根据其分布, 大体上确定以指数函数形式来描述：$y \approx x_1 e^{x_2 t}$ $\tilde{y}=\tilde{x}_1+x_2 t$
不能直接用线性最小二乘, 需做变换$\ln y \approx \ln x_1 + x_2 t$
法方程方法的矩阵形式, 线性拟合基函数$\varphi_1(t)=1,\ \varphi_1(t)=t$

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1.00\\ 1 & 1.25\\ 1 & 1.5\\ 1 & 1.75\\ 1 & 2.00\end{bmatrix},\ f=\begin{bmatrix}1.6292\\ 1.7561\\ 1.8764\\ 2.0082\\ 2.1353\end{bmatrix}$$

要解$A^T A x = A^T f$, 即

$$\begin{bmatrix}5 & 7.5\\ 7.5 & 11.875\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\tilde{x}_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}9.4052\\ 14.4239\end{bmatrix}$$

解得:

$$\begin{bmatrix}\tilde{x}_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.1225\\ 0.5057\end{bmatrix}$$

$$x_1=e^{\tilde{x}_1}=3.0725$$

最后的解为$y=3.0725e^{0.5057t}$

线性最小二乘 – 例题

- 例6.8: 对例6.6的问题, 用矩阵正交变换的方法求解

t_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46
$\tilde{y}_i$	1.6292	1.7561	1.8764	2.0082	2.1353

- 解: 用指数函数形式$y \approx x_1 e^{x_2 t}$, 变换为$\ln y \approx \ln x_1 + x_2 t$
  线性最小二乘拟合 $\tilde{y} = \tilde{x}_1 + x_2 t$ (基函数$\varphi_1(t)=1$, $\varphi_1(t)=t$)
  解$\boldsymbol{Ax} \cong \boldsymbol{f}$: 用Householder变换对$\boldsymbol{A}$作正交三角化

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1.00\\1 & 1.25\\1 & 1.5\\1 & 1.75\\1 & 2.00\end{bmatrix}, \boldsymbol{f}=\begin{bmatrix}1.6292\\1.7561\\1.8764\\2.0082\\2.1353\end{bmatrix}$$

$\sigma_1=\sqrt{5}$

第一个变换用的$\boldsymbol{v}_1$为 $\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}1+\sqrt{5}\\1\\1\\1\\1\end{bmatrix}$

$$\begin{bmatrix}-2.236 & -3.354\\0 & -0.095\\0 & 0.155\\0 & 0.405\\0 & 0.655\end{bmatrix}\boldsymbol{x}\cong\begin{bmatrix}-4.206\\-0.047\\0.073\\0.205\\0.332\end{bmatrix}$$

做第2次变换得

$$\begin{bmatrix}-2.236 & -3.354\\0 & 0.791\\0 & 0\\0 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}\boldsymbol{x}\cong\begin{bmatrix}-4.206\\0.400\\-0.005\\0.001\\0.002\end{bmatrix}$$

解得:

$$\begin{bmatrix}\tilde{x}_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.1225\\0.5057\end{bmatrix}$$

线性最小二乘

- **Matlab命令**

$m \times n$矩阵, $m > n$

$$A=\begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix}$$

  - 线性最小二乘问题$\boldsymbol{Ax} \cong \boldsymbol{b}$,
  - \>> x=A \ b
  - 其内部算法主要是算法6.3
  - 用不超过n次的多项式拟合离散点(x_i, y_i)
  - \>> p = polyfit (x, y, n)
  - 拟合多项式的系数存于p, 相关命令还有polyval