



数值分析 (6)

Numerical Analysis

中山大学计算机学院 纪庆革

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

□ $f(t) = \sqrt{1+t^2} \approx a_0 + a_1 t$

□ $f(t) = |t| \approx \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \cos(t)$

□ $\approx \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \cos(t) - \frac{4}{9\pi} \cos(3t)$

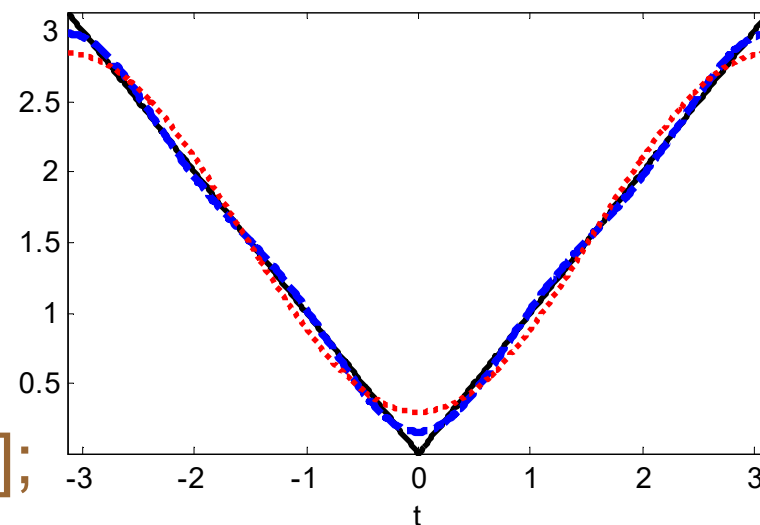
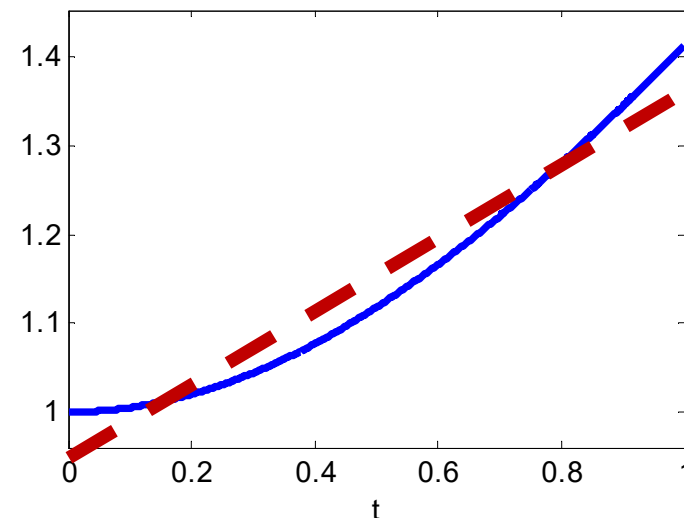
傅里叶变换, 信号的频谱分析

■ 一系列数据点的逼近

□ $t = [1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4];$

□ $f = [33.4, 79.5, 122.65, \dots$
 $159.05, 189.15, 214.15, 238.65];$

表格函数, 曲线拟合



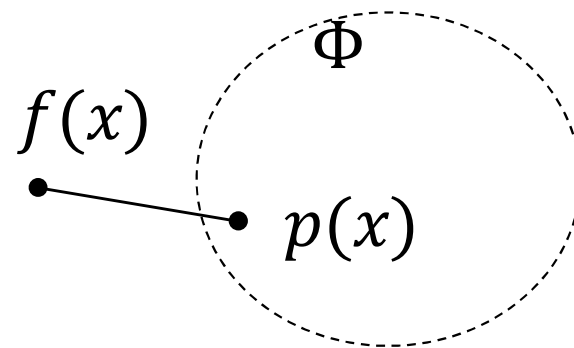


函数逼近的基本概念

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 \mathbb{R} , or \mathbb{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

□ $\|f(x)\|_{\infty} = \max_{x \in [a, b]} |f(x)|$

□ 1-范数

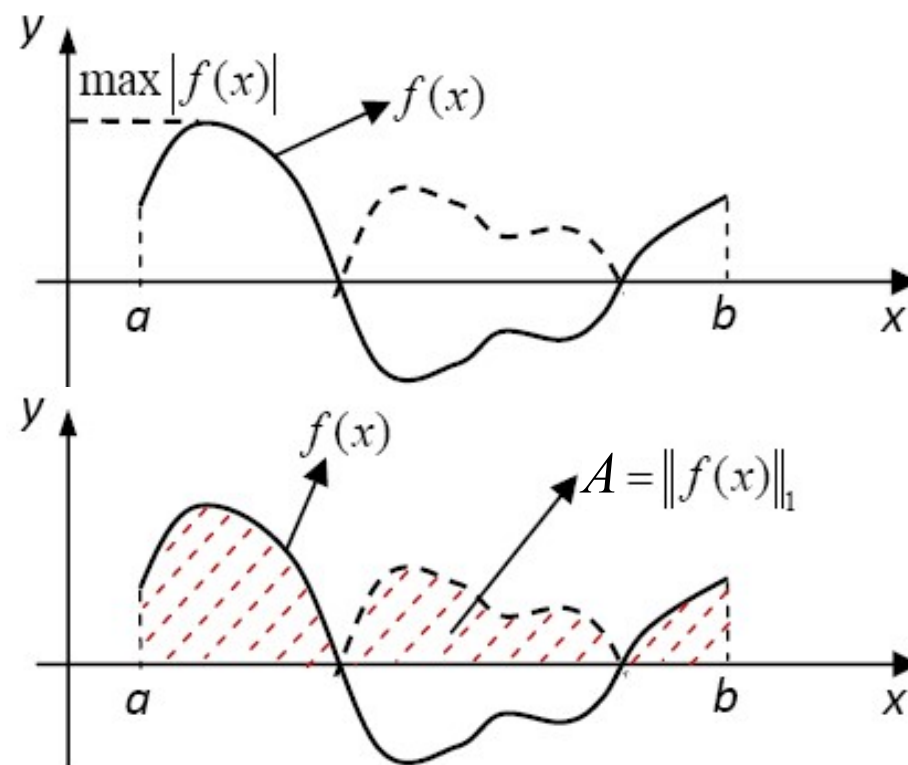
□ $\|f(x)\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx$

□ 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)



■ 定义6.1: 设 S 为实数域 R 上的线性空间,
 $\forall u, v \in S$, 定义值域为 R 的二元运算 $\langle u, v \rangle$
,若满足

(1) $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$, (可交换性)

(2) $\langle \alpha u, v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle$, $\forall \alpha \in S$, (线性性1)

(3) $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$, $\forall w \in S$,
(线性性2)

(4) $\langle u, u \rangle \geq 0$, 当且仅当 $u = 0$ 时, $\langle u, u \rangle = 0$,
(非负性)

则称 $\langle u, v \rangle$ 为一种实内积运算。

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 $|\langle u, v \rangle|^2 \leq \langle u, u \rangle \cdot \langle v, v \rangle$

■ **Th6.2:** 设 S 为实内积空间, $u_1, \dots, u_n \in S$, 则格莱姆(Gram)

矩阵

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

$x^T G x = \langle \sum_{j=1}^n x_j u_j, \sum_{j=1}^n x_j u_j \rangle$
实际上, G 对称正定

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

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

反证法证必要性, 若 u_1, \dots, u_n 线性相关, 存在非零向量 a

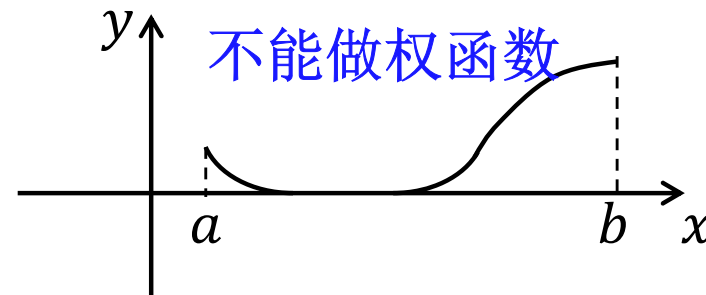
$$\sum_{j=1}^n a_j u_j = 0 \xrightarrow{\text{绿色箭头}} \forall k, \sum_{j=1}^n a_j \langle u_j, u_k \rangle = \langle \sum_{j=1}^n a_j u_j, u_k \rangle = 0, \text{ 即 } Ga = 0$$

充分性的证明 ...

注: 定义了实内积线性空间被称为实内积空间。

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, $(k = 0, 1, \dots)$ (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

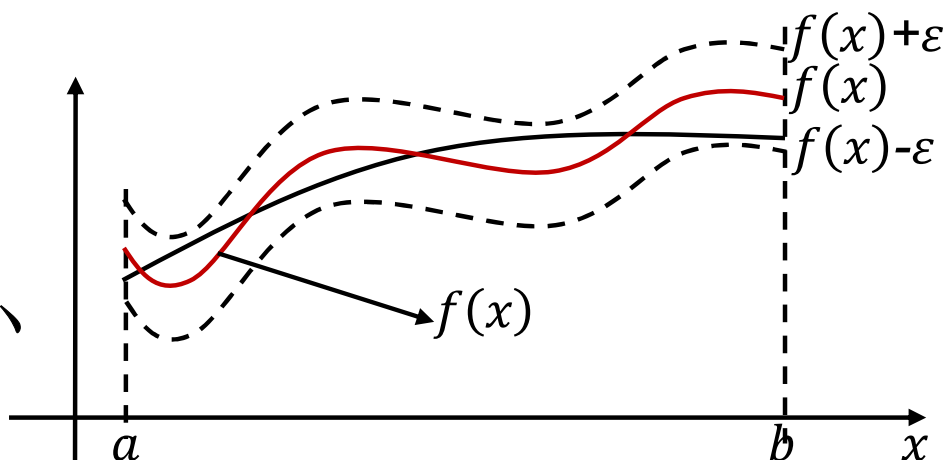
- 根据度量误差用的范数分类

- ∞ -范数: **最佳一致逼近**

- 要求 $\varepsilon = \|p(x) - f(x)\|_{\infty}$ 最小

- $f(x) - \varepsilon \leq p(x) \leq f(x) + \varepsilon$

- $p(x)$ 在区间上 **一致地** 接近 $f(x)$

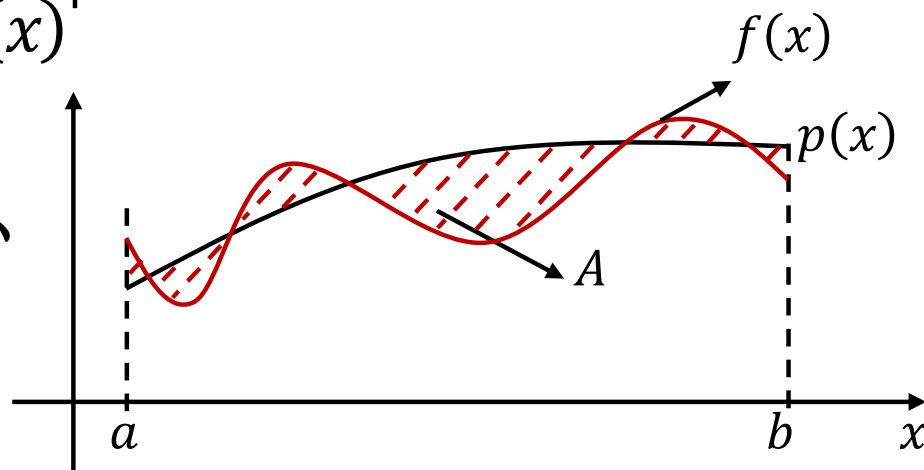


- 1-范数, 2-范数

- 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

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, $\text{span}\{\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t)\}$
- 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

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

求解线性方程组 $Gx = b$, 即得到 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 $Gx = b$

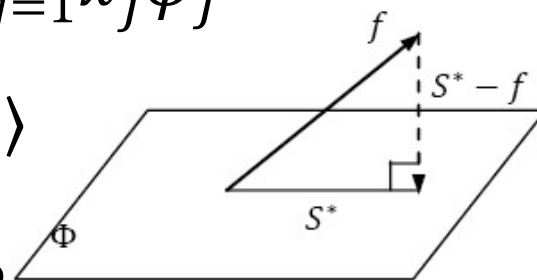
$$G = \begin{bmatrix} \langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2, \varphi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_1 \rangle \\ \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle & \langle \varphi_2, \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_2 \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots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

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

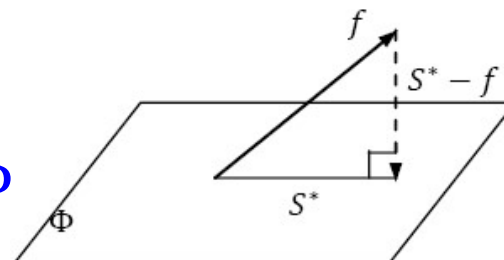
重要性质: $S^* - f \perp \Phi$



最佳平方逼近

■ 法方程方法

$$S^* - f \perp \Phi$$



□ 要证充分性, 考虑任意 $S \in \Phi$, $\langle S - f, S - f \rangle - \langle S^* - f, S^* - f \rangle$

$$= \langle S, S \rangle - 2\langle f, S \rangle - \langle S^*, S^* \rangle + 2\langle f, S^* \rangle$$

$$\square = \langle S, S \rangle - 2\langle S, S^* \rangle + \langle S^*, S^* \rangle + 2\langle S, S^* - f \rangle - 2\langle f, S \rangle - 2\langle S^*, S^* - f \rangle + 2\langle f, S^* \rangle$$

$$\square = \|S - S^*\|_2^2 + 2\langle S, S^* - f \rangle - 2\langle S^* - f, S^* \rangle \geq 0 \quad \text{得证!}$$

□ 算法6.1: 根据被逼近函数 f , 基函数 $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ 形成法方程

□ 对矩阵 G 进行Cholesky分解 $G = LL^T$

□ 分两步求解方程 $LL^T x = b$, 得到 x , $S^* = \sum_{i=1}^n x_i \varphi_i$

□ 计算逼近误差: $\|\delta\|_2 = \|S^* - f\|_2$

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

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 $G_{kj} =$

$$\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle = \int_0^1 t^{k+j-2} dt = \frac{1}{k+j-1}, \text{ 则 } \mathbf{G}_n =$$

Hilbert矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}$$

■ 两方面问题

- n较大时, \mathbf{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**, \mathbf{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: $1, \cos t, \sin t, \cos(2t), \sin(2t), \dots$

■ 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 $\{\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t)\}$
- 逐个正交化过程(Gram-Schmidt)构造正交基

由一般的基 $\{1, t, t^2, \dots, t^n\}$ 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	$[-1, 1]$	$\rho(t) = 1$	$\begin{cases} P_0(t) = 1, P_1(t) = t, \\ (k+1)P_{k+1}(t) = (2k+1)tP_k(t) - kP_{k-1}(t), k = 1, 2, \dots \end{cases}$
切比雪夫多项式	$[-1, 1]$	$\rho(t) = \frac{1}{\sqrt{1-t^2}}$	$\begin{cases} T_0(t) = 1, T_1(t) = t, \\ T_{k+1}(t) = 2tT_k(t) - T_{k-1}(t), k = 1, 2, \dots \end{cases}$
切比雪夫多项式-2	$[-1, 1]$	$\rho(t) = \sqrt{1-t^2}$	$\begin{cases} U_0(t) = 1, U_1(t) = 2t, \\ U_{k+1}(t) = 2tU_k(t) - U_{k-1}(t), k = 1, 2, \dots \end{cases}$
拉盖尔多项式	$[0, +\infty]$	$\rho(t) = e^{-t}$	$\begin{cases} L_0(t) = 1, L_1(t) = 1-t, \\ L_{k+1}(t) = (1+2k-t)L_k(t) - k^2L_{k-1}(t), k = 1, 2, \dots \end{cases}$
埃尔米特多项式	$(-\infty, +\infty)$	$\rho(t) = e^{-t^2}$	$\begin{cases} H_0(t) = 1, H_1(t) = 2t, \\ H_{k+1}(t) = 2tH_k(t) - 2kH_{k-1}(t), k = 1, 2, \dots \end{cases}$

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

□ $P_k(t) \sim [-1, 1]$

$? \sim [a, b]$

□ $\{P_k(t)\}$ 的特点是: 积分 $I = \int_{-1}^1 P_j(t)P_k(t)dt = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ 2/(2k+1), & j=k \end{cases}$

□ 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 $\begin{cases} -1 \rightarrow a \\ 1 \rightarrow b \end{cases}, \quad s = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}, \quad t = \frac{2s - (a+b)}{b-a}$

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

即 $[a, b]$ 上的
正交多项式

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

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

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

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

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

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

- 正交函数族做最佳平方逼近 $S_1^*(t) = 1.147 + 0.213(2t - 1) = 0.934 + 0.426t$ 与例6.1 结果一致
- 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

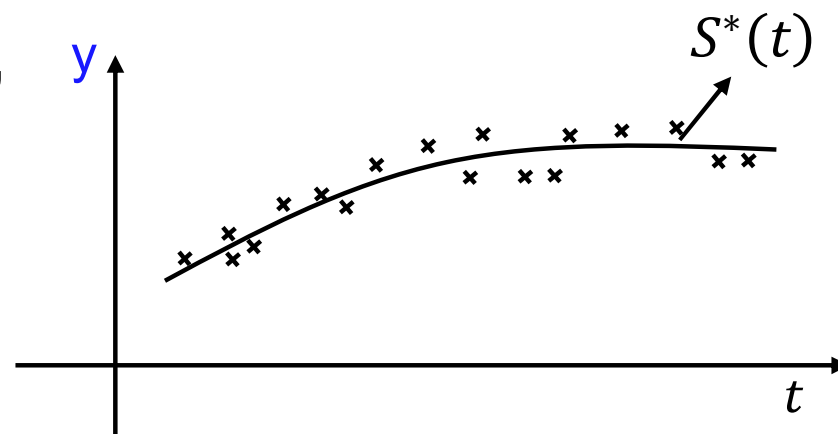
曲线拟合问题



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) , $(i = 1, \dots, m)$, 用函数 $S(t)$ 来拟合 几何
 - 拟合的标准: $\sum_{i=1}^m [S(t_i) - f_i]^2$ 最小, “**最小二乘拟合**” 意义?
- $m \geq n$
- 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**
 - 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 **最佳平方逼近问题!**
(要求点 t_i 各不相同)

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 , ($i = 1, \dots, m$) 上的表格函数 $f(t) \Rightarrow \mathbf{f} = [f_1, \dots, f_m]^T$

□ 表格函数的2-范数: $\|f(t)\|_2 = \left[\sum_{i=1}^m |f(t_i)|^2 \right]^{1/2} = \|\mathbf{f}\|_2$

□ 曲线拟合的线性最小二乘问题

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

解 \mathbf{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 $Gx = b$

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

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

$$A^T = \begin{bmatrix} \varphi_1^T \\ \varphi_2^T \\ \vdots \\ \varphi_n^T \end{bmatrix} \quad \xrightarrow{\text{green arrow}} \quad G = A^T A$$

$$b = A^T f$$

算法6.2

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

A 列满秩

线性最小二乘 – 法方程法

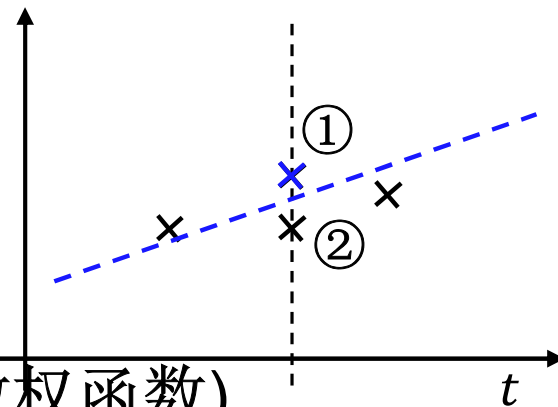
■ 法方程方法: 求解 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{f}$

- 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 \mathbf{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

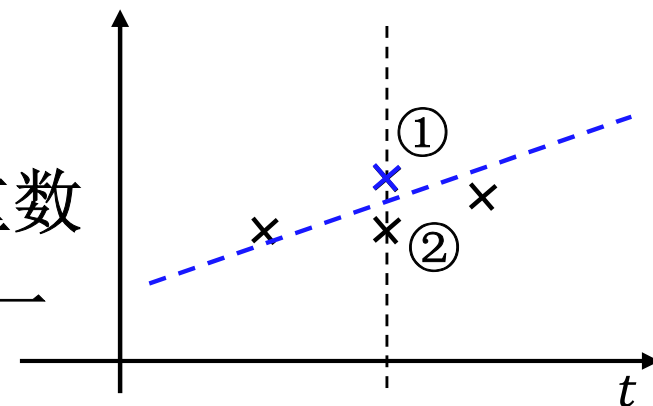
按数据点逐行形成矩阵 A 、向量 f , 再求解 $A^T A x = A^T f$

□ 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

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(linear least square)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 $A^T A$, 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

1965, 由 □ 等价的、实用的方法: 用QR分解实现基函数的正交化

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 A , 被逼近函数值向量为 f

求拟合系数 x , 它使得 $\|f - Ax\|_2$ 达到最小值

$$A = QR \longrightarrow f - Ax = Q(Q^T f - Rx) \longrightarrow \|f - Ax\|_2 = \|Q^T f - Rx\|_2$$

正交阵 \swarrow 问题转化为: 求 x , 使得 $\|Q^T f - Rx\|_2$ 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 $Ax \cong f$

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

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

$$\|Q^T f - Rx\|_2^2 = \|Q_1^T f - R_1 x\|_2^2 + \|Q_2^T f\|_2^2 \geq \|Q_2^T f\|_2^2 \quad \begin{array}{l} \text{取等号} \\ \text{条件:} \end{array} \quad R_1 x = Q_1^T f$$

- **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 $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ 在离散点 t_1, \dots, t_m 上的取值形成 A

例6.6 ■ 用算法5.3将 A 正交三角化成 R , 同时将 f 变换为 $\tilde{f} = Q^T f$

例6.8 ■ $R_1 := R[1:n, :]$, $b := \tilde{f}[1:n]$, 用回代法(算法3.2)解 $R_1 x = b$
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 $S_1(t) = x_1 + x_2 t$
基函数 $\varphi_1(t) = 1, \varphi_2(t) = t$. 列法方程

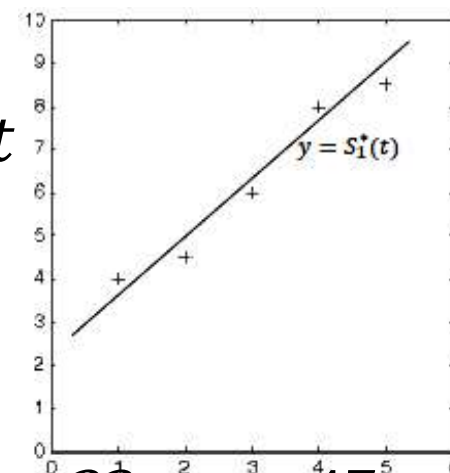
$$\begin{bmatrix} \langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_2, \varphi_1 \rangle \\ \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle & \langle \varphi_2, \varphi_2 \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_1, f \rangle \\ \langle \varphi_2, f \rangle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

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

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

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

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: $y \approx x_1 e^{x_2 t}$
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 $\varphi_1(t)=1, \varphi_2(t)=t$

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

要解 $A^T A x = A^T f$, 即 解得:

$$\begin{bmatrix} 5 & 7.5 \\ 7.5 & 11.875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.4052 \\ 14.4239 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.1225 \\ 0.5057 \end{bmatrix}$$

→ $x_1 = e^{\tilde{x}_1} = 3.0725$

最后的解为 $y = 3.0725 e^{0.5057 t}$

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 $\varphi_1(t) = 1, \varphi_2(t) = t$)

解 $Ax \cong f$: 用Householder变换对 A 作正交三角化

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

第一个变换 $\sigma_1 = \sqrt{5}$ 换用的 v_1 为

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1+\sqrt{5} \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$x \cong \begin{bmatrix} -2.236 & -3.354 \\ 0 & 0.791 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

做第2次变换得

$$x \cong \begin{bmatrix} -4.206 \\ 0.400 \\ -0.005 \\ 0.001 \\ 0.002 \end{bmatrix}$$

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, $m > n$

- 线性最小二乘问题 $Ax \cong b$,
- `>> 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`

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

感谢喻文健教授！