《数值分析》之

平方最佳逼近

徐岩、夏银华

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

https://bb.ustc.edu.cn/

- 函数逼近是与函数插值理论同时发展起来的。其经典问题为：已知区间$[a, b]$上的连续函数f，对某一固定整数n，找一个次数至多是n次的多项式p，使其与f的偏差最小。这里的偏差可以有不同的定义，如最大值或平方积分。
- 一般的函数逼近问题是：给定一个赋范函数空间E以及它的一个子空间G。若$f \in E$，计算$p \in G$使得$\|f - p\|$最小。同样这里的$\|\cdot\|$定义也可以有多种选择。所得到的p称为f的在$\|\cdot\|$ 意义下的最佳逼近
- 函数逼近中比较成熟的理论是单变量函数的最小二乘理论和Tchebyshev理论

Theorem

若G是E的一个有限维子空间，则E的每一个元素在G中至少有一个最佳逼近。

证明：给定$f \in E$，则f在G中最佳逼近的候选者g必定在下述集合中：

$$K = \{g \in G : \|g - f\| \leqslant \|f\|\}$$

K为有界闭集，而G是有限维的，因此K是紧集。而泛函$g \mapsto \|f - g\|$是连续的，因此根据紧集上的连续实值函数能达到下确界得证定理。 □

Theorem

设G是内积空间E的子空间。对$f \in E, g \in G$，下列性质等价：

1. g是G中f的一个最佳逼近
2. $f - g \perp G$

证明：若$f - g \perp G$，对任一$h \in G$，

$$\|f-h\|^2 = \|(f-g)+(g-h)\|^2 = \|f-g\|^2 + \|g-h\|^2 \geqslant \|f-g\|^2$$

反之，设g是f的一个最佳逼近。再设$h \in G, \lambda > 0$,

$$\begin{aligned} 0 &\leqslant \|f-g+\lambda h\|^2 - \|f-g\|^2 \\ &= \lambda\{2\langle f-g, h\rangle + \lambda\|h\|^2\} \end{aligned}$$

令$\lambda \to 0+$, 得到$\langle f-g, h\rangle \geqslant 0$. 类似地，$\langle f-g, -h\rangle \geqslant 0$。所以$\langle f-g, h\rangle = 0$，即$f-g \perp G$. $\square$

Theorem

设G是内积空间E的子空间，则$f \in E$在G中的最佳逼近元是唯一的。

证明：若g_1和g_2同时是f在G中的最佳逼近元，而且$g_1 \neq g_2$，则$\|g_1 - g_2\| > 0$以及$f - g_1 \perp g_2$.

$$\|f-g_2\|^2 = \|(f-g_1)+(g_1-g_2)\|^2 = \|f-g_1\|^2+\|g_1-g_2\|^2 > \|f-g_1\|^2$$

这与g_2也为最佳逼近矛盾。 □

- 设$\{u_1,\ldots,u_n\}$是子空间G的一组基，为了计算f在G中的最佳逼近u，待定$u=\sum_{j=1}^n c_j u_j$. $u-f\perp G$等价于$\langle u-f,u_i\rangle=0$, $i=1,\ldots,n$. 由此得到方程组

$$\sum_{j=1}^n c_j\langle u_j,u_i\rangle=\langle f,u_i\rangle$$

这是一个含有n个未知数，n个线性方程的方程组。其系数矩阵$G=(\langle u_i,u_j\rangle)$称为Gram矩阵。

Theorem

*Gram*矩阵为对称正定阵。

计算函数$f(x) = \sin x$在空间span$(x, x^3, x^5\}$中的最佳逼近。所用范数为

$$\|f\| = \left(\int_{-1}^{1} f^2(x)dx \right)^{1/2}$$

解：令$g_1(x) = x$, $g_2(x) = x^3$, $g_3(x) = x^5$. 待定最佳逼近元为$g(x) = c_1 x + c_2 x^3 + c_3 x^5$, 则由$\langle g - f, g_i \rangle = 0$得到如下方程组：

$$c_1 \langle g_1, g_i \rangle + c_2 \langle g_2, g_i \rangle + c_3 \langle g_3, g_i \rangle = \langle f, g_i \rangle, i = 1, 2, 3$$

即

$$\begin{pmatrix} 1/3 & 1/5 & 1/7 \\ 1/5 & 1/7 & 1/9 \\ 1/7 & 1/9 & 1/11 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin 1 - \cos 1 \\ -3 \sin 1 + 5 \cos 1 \\ 65 \sin 1 - 101 \cos 1 \end{pmatrix}$$

系数矩阵为Hilbert矩阵，一个著名的病态矩阵。

- 根据幂基计算最佳逼近元，计算过程的稳定性不好。而下面的定理说明标准正交基的优势

Theorem

设G的标准正交基为$\{g_1, g_2, \ldots, g_n\}$, $f \in E$.
则$g = \sum_{i=1}^{n} c_i g_i$为$f$在$E$中最佳逼近当且仅当$c_i = \langle f, g_i \rangle$.

证明：$g = \sum_{i=1}^{n} c_i g_i$为$f$在$E$中最佳逼近$\Longleftrightarrow f - g \perp G \Longleftrightarrow f - g \perp g_i$, $i = 1, 2, \ldots, n$.

$$\left\langle f - \sum_{i=1}^{n} c_i g_i, g_j \right\rangle = \langle f, g_j \rangle - \sum_{i=1}^{n} c_i \langle g_i, g_j \rangle$$
$$= \langle f, g_j \rangle - c_j = 0$$

$\square$

- 可以应用Gram-Schmidt过程把一般的基转化为标准正交基
- 前例中$\{x, x^3, x^5\}$的转化结果为$\{x/\sqrt{2/3}, (5x^3 - 3x)/(2\sqrt{2/7}), (63x^5 - 70x^3 + 15x)/(8\sqrt{2/11})\}$
- 如果内积定义满足$\langle fg, h\rangle = \langle f, gh\rangle$，从单项式函数$1, x, \ldots$出发，应用Gram-Schimidt过程的结果称为正交多项式
- 常用的内积

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx$$

满足上述要求

Theorem

如下定义的多项式序列是正交的：

$$p_n(x) = (x - a_n)p_{n-1}(x) - b_n p_{n-2}(x), \quad n \geqslant 2$$

其中$p_0(x) = 1,\ p_1(x) = x - a_1,$

$$a_n = \frac{\langle xp_{n-1}(x), p_{n-1}(x)\rangle}{\langle p_{n-1}(x), p_{n-1}(x)\rangle}$$
$$b_n = \frac{\langle xp_{n-1}(x), p_{n-2}(x)\rangle}{\langle p_{n-2}(x), p_{n-2}(x)\rangle}$$

所用的内积满足$\langle fg, h\rangle = \langle f, gh\rangle$

证明：由归纳定义可知每个p_n都是首一n次多项式，因此a_n和b_n的定义中分母不为零。
下面对n归纳证明：$\langle p_n, p_i\rangle = 0,\ i = 0, 1, \ldots, n-1.$
$n = 0$没有需要证明的。$n = 1$时由a_1的定义可以验证成立.
设$n-1$时成立，$n \geqslant 2$. 那么可以直接验证

$$\langle p_n, p_{n-1}\rangle = \langle p_n, p_{n-2}\rangle = 0$$

对$i = 0, 1, \ldots, n-3$,

$$\begin{aligned}
\langle p_n, p_i\rangle &= \langle xp_{n-1}, p_i\rangle - a_n\langle p_{n-1}, p_i\rangle - b_n\langle p_{n-2}, p_i\rangle \\
&= \langle p_{n-1}, xp_i\rangle \\
&= \begin{cases} \langle p_{n-1}, p_{i+1} + a_{i+1}p_i + b_{i+1}p_{i-1}\rangle = 0 & i \geqslant 1 \\ \langle p_{n-1}, p_1 + a_1 p_0\rangle = 0 & i = 0 \end{cases}
\end{aligned}$$

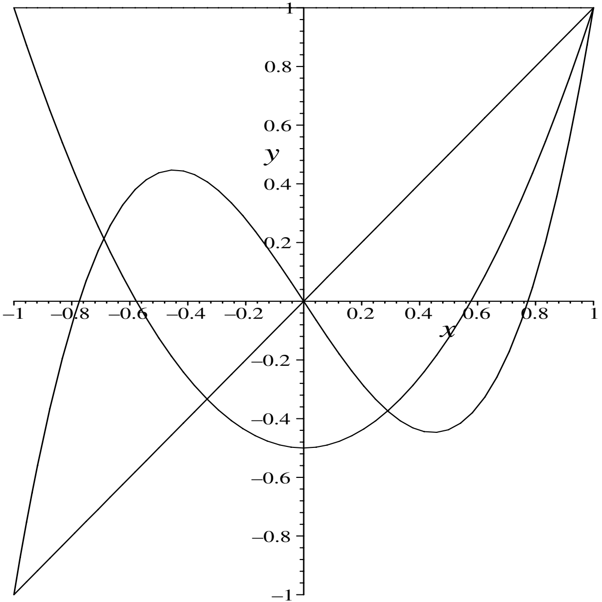
□

Legendre多项式

- 当内积定义为
$$\int_{-1}^{1} f(x)g(x)dx$$
时生成的正交多项式称为Legendre多项式
- 前几个多项式为

$$p_0(x) = 1$$
$$p_1(x) = x$$
$$p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$
$$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$
$$p_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$$
$$p_5(x) = x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{5}{21}x$$

Legendre多项式



- 应用内积

$$\langle f, g\rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

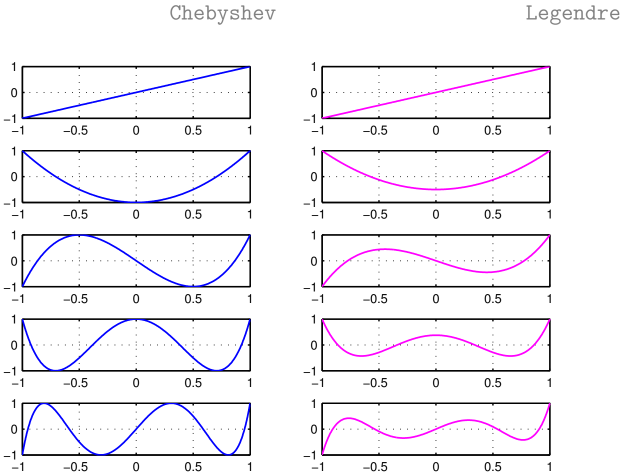
时对应的正交多项式为Tchebyshev多项式

- 应用内积

$$\langle f, g\rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}dx$$

时对应的正交多项式为Jacobian多项式

Tchebyshev多项式与Legendre多项式



- 给定$u=\sum_{k=0}^{n}c_k p_k$，其中p_i为某一正交多项式，那么可以应用下述算法计算$u(x)$的值：

```
d_{n+2} ← 0; d_{n+1} ← 0
for  k = n to  0 step  −1 do
   d_k ← c_k + (x − a_{k+1}) d_{k+1} − b_{k+2} d_{k+2}
end do
```

- 有效性验证：

$$
\begin{aligned}
u(x) &= \sum_{k=0}^{n}[d_k-(x-a_{k+1})d_{k+1}+b_{k+2}d_{k+2}]p_k(x)\\
&= d_0p_0(x)+d_1[p_1(x)-(x-a_1)p_0(x)]\\
&+\sum_{k=2}^{n}d_k[p_k(x)-(x-a_k)p_{k-1}(x)+b_kp_{k-2}(x)]\\
&= d_0
\end{aligned}
$$

Theorem

前面定义的正交多项式p_n是所有的首一n次多项式中范数最小的。

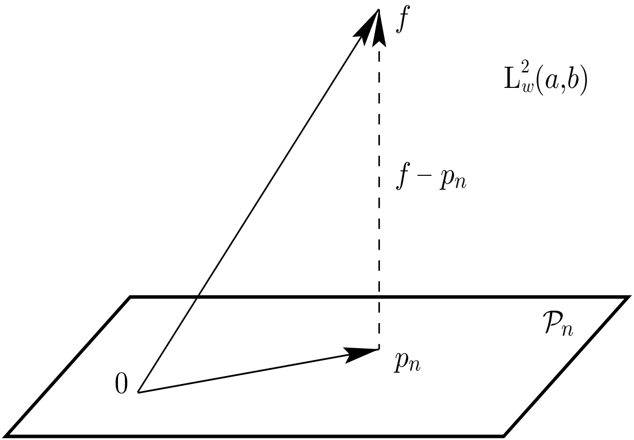
证明：任意首一n次多项式可以写作$q = p_n - \sum_{i=0}^{n-1} c_i p_i$. $\|q\|$具有最小范数相当于在Π_{n-1}空间中寻找p_n的最佳逼近。因此应当有$q \perp \Pi_{n-1}$, 从而需选取$c_i = 0$. □

正交投影

- 给定空间G的一组标准正交基$[u_1, \ldots, u_n]$, 定义正交投影算子：

$$P_n f = \sum_{i=1}^{n} \langle f, u_i \rangle u_i$$

- 算子P_n具有如下性质：
  1. P_n为E到G的线性映射
  2. $P_n^2 = P_n$, 因此称为投影算子
  3. $f - P_n f \perp G$
  4. $P_n f$是f在G中的最佳逼近
  5. 每个P_n都是自伴的，即$\langle P_n f, g \rangle = \langle f, P_n g \rangle$


f
$L_w^2(a,b)$
$f - p_n$
$\mathcal{P}_n$
0
p_n

向量范数

向量范数定义

映射: $\|\cdot\|: \ \mathbb{R}^n \to [0,+\infty)$满足：

1. 非负性: $\forall x \in \mathbb{R}^n$, $\|x\| \geq 0$, $x = 0 \Leftrightarrow \|x\| = 0$.
2. 齐次性: $\forall x \in \mathbb{R}^n$, $a \in R$, $\|ax\| = |a|\|x\|$
3. 三角不等式: $\forall x, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\|x + \mathbf{y}\| \leq \|x\| + \|\mathbf{y}\|$

称该映射为向量的一种范数.

常见向量范数

1. 1范数：$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
2. 2范数：$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$
3. ∞范数：$\|x\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} \{|x_i|\}$

范数的等价性

设$R_1(x)$和$R_2(x)$为任意两种范数，则存在与x无关的正常数C_1和C_2，使得

$$C_1 R_2(x) \le R_1(x) \le C_2 R_2(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

常用范数的等价关系

$$\|x\|_2 \le \|x\|_1 \le \sqrt{n}\|x\|_2$$
$$\|x\|_\infty \le \|x\|_2 \le \sqrt{n}\|x\|_\infty$$
$$\|x\|_\infty \le \|x\|_1 \le n\|x\|_\infty$$

离散内积

定义：函数f，g的关于离散点列$\{x_i\}_{i=0}^{n}$的离散内积为：

$$(f, g)_h = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)g(x_i)$$

离散范数

定义：函数f 的离散范数为

$$\|f\|_h = \sqrt{(f, f)_h}$$

该种内积，范数的定义与向量的2范数一致。

还可以定义函数的离散范数为：

$$\|f\|_h = \max_{1\leq i\leq n}\{f(x_i)\}, \quad \|f\|_h = \sum_{i=1}^{n} |f(x_i)|$$

曲线拟合

- 给出一组离散点，确定一个函数逼近原函数
- 离散数据通常是由观察或者测试得到的，不可避免会有误差
- 需要一种新的逼近原函数的手段：
  1. 不要求过所有的点（可以消除误差影响）
  2. 尽可能表现数据的趋势，靠近这些点
- 需要在给定函数空间Φ上找到函数ϕ，使得ϕ到f的距离最小。函数$\phi(x)$称为$f(x)$在空间Φ上的拟合曲线。
- 曲线拟合在实际中有广泛的应用，特别是在实验、统计等方面。
  1. 根据实验或观察得到数据，将数据在平面上标出，然后确定拟合曲线的类型
  2. 拟合曲线的类型已知，需要确定曲线的具体参数

定义

$f(x)$为定义在区间$[a,b]$上的函数，$\{x_i\}_{i=0}^m$为区间上$m+1$个互不相同的点，Φ为给定的某一函数类。求Φ上的函数$\phi(x)$满足$f(x)$和$\phi(x)$在给定的$m+1$点上的距离最小，如果这种距离取为$2-$范数的话，称为最小二乘问题。即：求$\phi(x)\in\Phi$，使得

$$R_2=\sqrt{\sum_{i=0}^{m}(\phi(x_i)-f(x_i))^2}$$

最小。

设$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots \varphi_n\}$,

$$\phi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) \cdots + a_n\varphi_n(x)$$

则最小二乘问题为

$$\|f(x) - (a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) \cdots + a_n\varphi_n(x))\|_h$$

关于系数$\{a_0, a_1, \cdots, a_n\}$最小。

$$
\begin{aligned}
&\|f(x)-(a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)\cdots+a_n\varphi_n(x))\|_h^2\\
=&\|f\|_h^2-2(f,a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)\cdots+a_n\varphi_n(x))_h\\
&+\|a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)\cdots+a_n\varphi_n(x)\|_h^2\\
=&\|f\|_h^2-2\sum_{k=0}^{n}a_k(f,\varphi_k)_h+\sum_{i,k=0}^{n}a_ia_k(\varphi_i,\varphi_k)_h\\
=&Q(a_0,a_1,\cdots,a_n)
\end{aligned}
$$

由于它关于系数$\{a_0,a_1,\cdots,a_n\}$最小,因此有

$$
\frac{\partial Q}{\partial a_i}=0,\quad i=0,1,\cdots,n
$$

$$
\text{i.e.}\quad \sum_{k=0}^{n}a_k(\varphi_i,\varphi_k)_h=(f,\varphi_i)_h,\quad i=0,1,\cdots,n
$$

最小二乘问题的求解

写成矩阵形式有：

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0)_h & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)_h \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0)_h & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\varphi_0)_h \\ \vdots \\ (f,\varphi_n)_h \end{pmatrix}$$

称为拟合曲线的法方程。由$\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots,\varphi_n\}$的线性无关性，知道该方程存在唯一解。

注

法方程的系数矩阵是病态的，即在实际求解中，舍入误差会引起解的较大误差，因此在计算机上可用双精度计算。

线性拟合

取Φ为线性多项式空间，函数空间的基为$\{1, x\}$，拟合曲线为$y = a + bx$, 则法方程为

$$\begin{pmatrix} (1,1)_h & (1,x)_h \\ (x,1)_h & (x,x)_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,1)_h \\ (f,x)_h \end{pmatrix}$$

二次拟合

取Φ为二次多项式空间，函数空间的基为$\{1, x, x^2\}$，拟合曲线为$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$，则法方程为

$$\begin{pmatrix} (1,1)_h & (1,x)_h & (1,x^2)_h \\ (x,1)_h & (x,x)_h & (x,x^2)_h \\ (x^2,1)_h & (x^2,x)_h & (x^2,x^2)_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,1)_h \\ (f,x)_h \\ (f,x^2)_h \end{pmatrix}$$

形如ae^{bx}拟合

取函数空间$\Phi = \{ae^{bx}, a, b \in R\}$，该函数空间并不构成线性空间，不易得到平方误差极小意义下的拟合曲线$y = ae^{bx}$。但由

$$\ln y = \ln a + bx$$

可以先做$y^* = a^* + bx$,由此得到

$$y = e^{y^*}$$

则法方程为

$$\begin{pmatrix} (1,1)_h & (1,x)_h \\ (x,1)_h & (x,x)_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\ln y, 1)_h \\ (\ln y, x)_h \end{pmatrix}$$

求如下数据的最小二乘拟合曲线

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	2	3	5	7	11	13	17	19	23	29

- 线性拟合

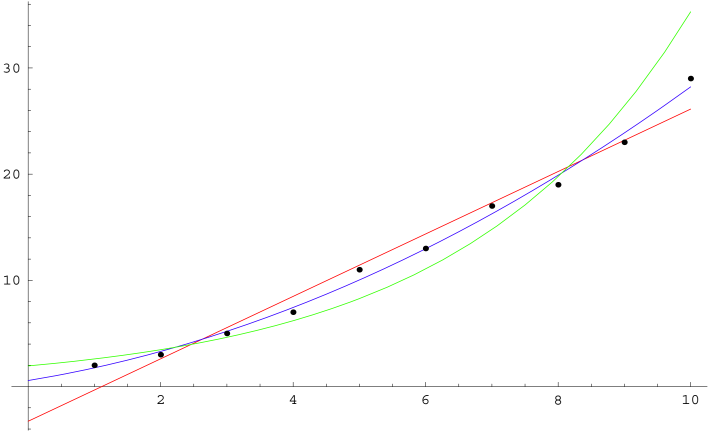
$$y = -3.26667 + 2.93939x$$

- 二次拟合

$$y = 0.566667 + 1.02273x + 0.174242x^2$$

- ae^{bx}拟合

$$y^* = 0.664723 + 0.289876x$$


30
20
10
2
4
6
8
10

矛盾方程组

给定数据序列(x_i, y_i), $i = 1, 2, \cdots, m$，作拟合直线$p(x) = a + bx$。如果要求直线$p(x)$通过这些点，则有

$$p(x_i) = a + bx_i = y_i, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

写成矩阵形式有

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

若秩$(A, b) \neq$秩A，则方程组$Ax = b$无解，该方程组被称为矛盾方程组。

求解一个矛盾方程组

$$\begin{array}{cccc} A & x & = & b \\ m\times n & n\times 1 & & m\times 1 \end{array}$$

$m>n$, 计算的是在均方误差$\|Ax-b\|_h$极小意义下的解，也就是最小二乘问题。

定理

1. A为$m\times n$矩阵，b为$m\times 1$列向量，$A^TAx=A^Tb$成为方程$Ax=b$的法方程，法方程恒有解。
2. $A^TAx=A^Tb \Longleftrightarrow \|Ax-b\|_h=\min\limits_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n}\|A\mathbf{y}-b\|_h$

对离散数据$(x_i, y_i), i = 1, 2, \cdots, m$作$n$次多项式曲线拟合，即求解

$$Q(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=1}^{m} (a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_n x_i^n - y_i)^2$$

的极小问题与求解矛盾方程组$A\alpha = \mathbf{y}$是等价的，其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$