第 3 章 函数逼近与计算

姚遥

南京大学智能科学与技术学院

本章目录

- 引言与预备知识
- 最佳一致逼近多项式
- 最佳平方逼近
- 正交多项式
- 函数按正交多项式展开
- 曲线拟合的最小二乘法

定义3.9 设 $g_n(x)$ 是首项系数 $a_n \neq 0$ 的 n 次多项式，如果多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \cdots$ 满足

$$(g_j, g_k) = \int_a^b \rho(x) g_j(x) g_k(x) \mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases} \quad (j, k = 0,1, \dots)$$

则称多项式序列 $g_0(x), g_1(x), \cdots$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交，并称 $g_n(x)$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 n 次正交多项式

- 一般来说，当权函数 $\rho(x)$ 及区间 $[a, b]$ 给定以后，可以由线性无关的一组基 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 并利用正交化方法构造出正交多项式

正交化方法

$$g_0(x) = 1,$$

$$g_n(x) = x^n - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(x^n, g_k(x))}{(g_k(x), g_k(x))} g_k(x) \qquad (n = 1,2,\ldots)$$

$g_n(x)$ 有以下性质

- **性质1**：$g_n(x)$ 是最高项系数为 1 的 n 次多项式
- **性质2**：任一 n 次多项式 $P_n(x) \in H_n$ 均可表示为 $g_0(x),\cdots,g_n(x)$ 的线性组合
- **性质3**：当 $n \neq m$时，$(g_n, g_m) = 0$ 且 $g_n(x)$ 与任一次数小于 n 的多项式正交

函数逼近丨正交化方法

- **性质4**：有递推关系

$$g_{n+1}(x) = (x - \alpha_n)g_n(x) - \beta_n g_{n-1}(x), \quad (n = 0,1,\ldots)$$

其中
$$g_0(x) = 1, \quad g_{-1}(x) = 0$$

$$\alpha_n = \frac{(xg_n, g_n)}{(g_n, g_n)}, \quad (n = 0,1,\ldots)$$

$$\beta_n = \frac{(g_n, g_n)}{(g_{n-1}, g_{n-1})}, \quad (n = 1,2, \ \ldots)$$

- **性质5**：设 $g_0(x), g_1(x), \cdots$ 是在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列，则 $g_n(x)(n \geq 1)$ 的 n 个根都是单重实根，且都在区间 (a, b) 内

Legendre多项式 在区间 $[-1,1]$ 带权 $\rho(x) \equiv 1$ ，由 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 正交化得到的多项式

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

归一化：

- $(x^2-1)^n$ 是 $2n$ 次多项式，求 n 阶导数后得

$$P_n(x) = \frac{1}{2^2 n!}(2n)(2n-1)\cdots(n+1)x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_0$$

- 故最高项系数为 1 的Legendre多项式：

$$\tilde{P}_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}[(x^2-1)^n]$$

函数逼近 | Legendre多项式

$P_0(x) = 1$

$P_1(x) = x$

$P_2(x) = (3x^2 - 1)/2$

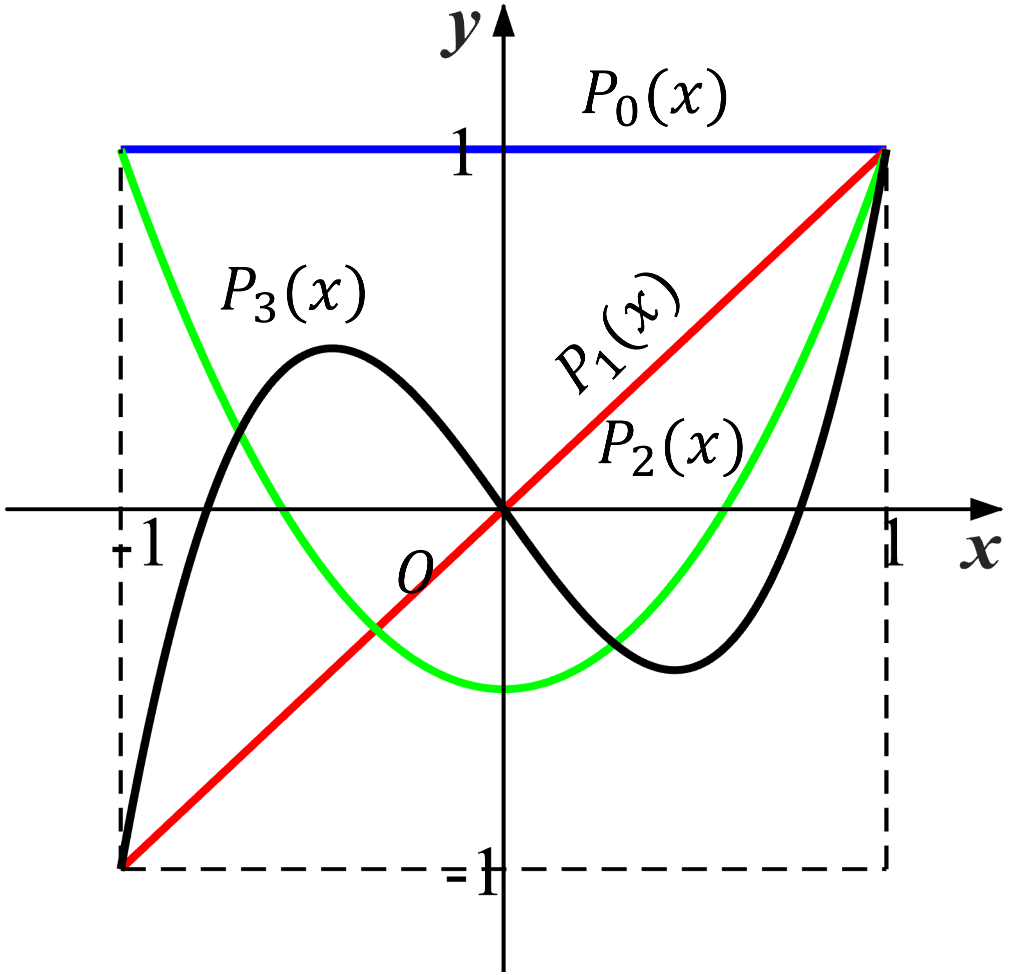
$P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$

$P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + x)/8$

$P_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$

$P_6(x) = (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5)/16$

$\cdots$



函数逼近 | Legendre多项式：性质

- **性质1**：正交性
$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \dfrac{2}{2n+1}, & m = n \end{cases}$$

- **性质2**：奇偶性，n 为偶数时 $P_n(x)$ 为偶函数，n 为奇数时为奇函数
$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$$

- **性质3**：递推关系
$$(n+1)\,p_{n+1}(x) = (2n+1)\,x\,p_n(x) - n\,p_{n-1}(x) \qquad (n = 1,2\cdots)$$

- **性质4**：所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，$\tilde{P}_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 上与零的平方误差最小

- **性质5**：$P_n(x)$ 在区间 $(-1,1)$ 内有 n 个不同实零点

Chebyshev多项式 在区间 $[-1,1]$ 带权 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ ，由序列 $\{1,x,x^2,\dots,x^n\}$ 正交化得到的正交多项式

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x),|x|\le 1$$

若令 $x=\cos\theta$ ，则

$$T_n(x)=\cos(n\theta),0\le\theta\le\pi$$

- Chebyshev多项式并不是三角函数
- 权函数不同、正交多项式也不同

函数逼近 | Chebyshev多项式

- **性质1**：递推关系 $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)\ \ (n = 1,2,\dots)$

$T_0(x) = 1$

$T_1(x) = x$

$T_2(x) = 2x^2 - 1$

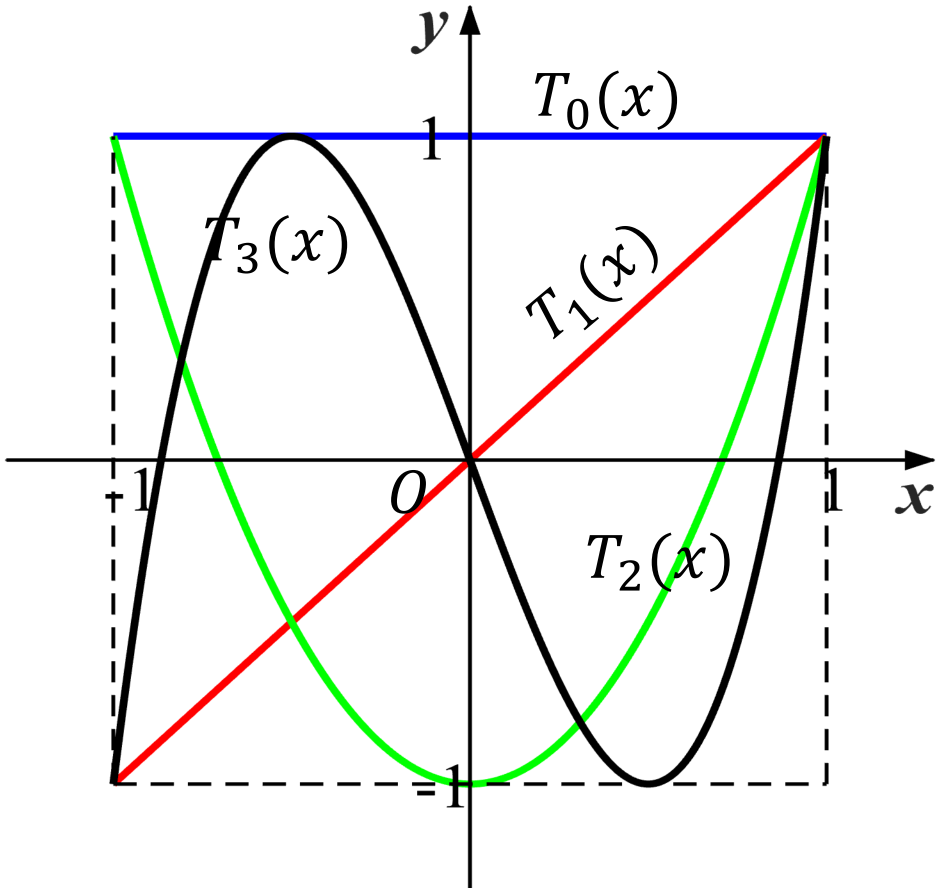
$T_3(x) = 4x^3 - 3x$

$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$

$T_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$

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

…



$T_n(x)$ 的最高项系数是 $2^{n-1}(n \geq 1)$

- **性质2**： $T_n(x)$ 对零的偏差最小

➢ **定理3.7** 在区间 $[-1,1]$ 上所有最高项系数为 1 的 n 次多项式中，$\omega_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$ 与零的偏差最小，其偏差为$\frac{1}{2^{n-1}}$

➢ 在区间 $[-1,1]$ 上，将 x^n 在 H_{n-1} 中的"最佳一致逼近多项式"记为 $P_{n-1}^*(x)$，则误差

$$x^n-P_{n-1}^*(x)=\omega_n(x)=\frac{1}{2^{n-1}}T_n(x)$$

函数逼近 | Chebyshev多项式：性质

例3.3 求 $f(x) = 2x^3 + x^2 + 2x - 1$ 在 $[-1,1]$ 上的最佳二次逼近多项式

- 考虑“最佳一致逼近多项式”，$P_2^*(x)$ 应满足 $\max\limits_{-1\le x\le 1}|f(x) - P_2^*(x)|$ 最小
- 注意到，$x^2 + 2x - 1$能够被二次函数完美表达，因此只有 $2x^3$ 会导致逼近误差
- 由定理3.7可知

$$\frac{1}{2}[f(x) - P_2^*(x)] = x^3 - \hat{P}_2^*(x) = \frac{1}{2^{3-1}}T_3(x)$$

- 由 $T_3(x) = 4x^3 - 3x$ 可得

$$P_2^*(x) = f(x) - \frac{1}{2}T_3(x)$$

$$= x^2 + \frac{7}{2}x - 1$$

函数逼近 | Chebyshev多项式：性质

- **性质3**：Chebyshev多项式 $\{T_n(x)\}$ 在区间 $[-1,1]$ 上带权 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$正交，且

$$\int_{-1}^{1}\frac{T_n(x)T_m(x)\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}}=\begin{cases}0, & n\neq m\\ \dfrac{\pi}{2}, & n=m\\ \pi, & n=m=0\end{cases}$$

- **性质4**：$T_{2k}(x)$ 只含 x 的偶次幕，$T_{2k+1}(x)$ 只含 x 的奇次幕

- **性质5**：$T_n(x)$ 在区间 $[-1,1]$ 上有 n 个零点

$$x_k=\cos\frac{2k-1}{2n}\pi, k=1,2,\cdots$$

函数逼近 | Chebyshev多项式：性质

- x^n 可以用 $T_0, T_1, \ldots, T_n$ 的线性组合表示

$$x^n = 2^{1-n} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{k} T_{n-2k}(x),$$

其中规定 $T_0 = 1/2$

第二类Chebyshev多项式 在区间 $[-1,1]$ 上带权 $\rho(x)=\sqrt{1-x^2}$ 的正交多项式

$$U_n(x)=\frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{\sqrt{1-x^2}}$$

- 正交关系

$$\int_{-1}^{1} U_n(x)U_m(x)\sqrt{1-x^2}\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n\\ \dfrac{\pi}{2}, & m=n\end{cases}$$

- 递推关系式

$$U_0(x)=1 \qquad U_1(x)=2x$$

$$U_{n+1}(x)=2xU_n(x)-U_{n-1}(x)\ \ (n=1,2,\dots)$$

函数逼近 | Laguerre（拉盖尔）多项式

Laguerre多项式 在区间 $[0,\infty)$ 上带权 $\rho(x)=e^{-x}$ 的正交多项式

$$L_n(x)=e^n\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^n e^{-x}\right)$$

- 正交关系

$$\int_0^{\infty} L_n(x)L_m(x)e^{-x}\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n\\ (n!)^2, & m=n\end{cases}$$

- 递推关系式

$$L_0(x)=1 \qquad L_1(x)=1-x$$

$$L_{n+1}(x)=(1+2n-x)L_n(x)-n^2U_{n-1}(x)\ \ (n=1,2,\dots)$$

Hermite多项式 在区间 $(-\infty,\infty)$ 上带权 $\rho(x)=e^{-x}$ 的正交多项式

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

- 正交关系

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}\mathrm{d}x=\begin{cases}0, & m\neq n\\ 2^n n!\sqrt{\pi}, & m=n\end{cases}$$

- 递推关系式

$$H_0(x)=1 \qquad H_1(x)=2x$$

$$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)\ \ (n=1,2,\dots)$$

本章目录

- 引言与预备知识
- 最佳一致逼近多项式
- 最佳平方逼近
- 正交多项式
- 函数按正交多项式展开
- 曲线拟合的最小二乘法

设 $f(x) \in C[a,b]$ 用正交多项式 $\{g_0(x), g_1(x), \cdots, g_n(x)\}$ 作基，求最佳平方逼近多项式

$$S_n(x) = a_0 g_0(x) + a_1 g_1(x) + \cdots + a_n g_n(x) \qquad (3.5.1)$$

- 根据前面小节，最佳平方逼近有(3.3.13)

$$\sum_{j=0}^{n} (\varphi_k, \varphi_j) a_j = (f, \varphi_k)(k = 0,1, \dots, n) \qquad (3.3.13)$$

- 利用正交性，无需求$\boldsymbol{Ha} = \boldsymbol{d}$，可得系数

$$a_k = \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} (k = 0,1, \dots, n) \qquad (3.5.2)$$

$f(x)$ **的最佳平方逼近多项式为**

$$S_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,g_k)}{(g_k,g_k)}g_k(x) \tag{3.5.3}$$

- 由式(3.3.15)

$$\|\delta\|_2^2=(f,f)-(f,S^*)=\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}a_k^*(\varphi_k,f) \tag{3.3.15}$$

可得均方误差为

$$\|\delta_n\|_2=\|f-S_n\|_2=\sqrt{\|f\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}\frac{(f,g_k)}{(g_k,g_k)}(f,g_k)} \tag{3.5.4}$$

函数逼近 | 函数按正交多项式展开

$f(x)$在 $[a,b]$ 上按正交多项式 $\{g_k(x)\}$ 展开可得

$$f(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} a_k g_k(x) \qquad (3.5.5)$$

- 式(3.5.5)右端级数称为广义Fourier级数
- 系数 a_k 称为广义Fourier系数

任何 $f(x) \in C[a,b]$ 均可展开成广义Fourier级数，其部分和 $S_n(x)$ 是 $f(x)$ 的最佳平方逼近

- 系数 a_k 与 n 无关： n 增加时，只要计算增加的系数
- 在 $f(x)$ 满足一定条件下也可一致收敛到 $f(x)$

举例 考虑函数 $f(x) \in C[-1,1]$ 按Legendre多项式 $\{P_0(x), P_1(x), \cdots\}$ 展开的最佳平方逼近多项式 S_n^*。 由式(3.5.1)和式(3.5.2)可得

$$S^*(x) = a_0^* P_0(x) + a_1^* P_1(x) + \cdots + a_n^* P_n(x) \tag{3.5.6}$$

$$a_k^* = \frac{(f, P_k)}{(P_k, P_k)} = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^{1} f(x) P_k(x) \mathrm{d}x \;\; (k = 0,1, \dots, n)$$

- 根据式(3.5.4)平方误差为

$$\|\delta_n\|_2^2 = \sqrt{\|f\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} \frac{(f, g_k)}{(g_k, g_k)} (f, g_k)} = \int_{-1}^{1} f^2(x) x - \sum_{k=0}^{n} \frac{2}{2k+1} {a_k^*}^2 \tag{3.5.8}$$

例3.4 求 $f(x)=e^x$ 在 $[-1,1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式

- 考虑采用Legendre多项式展开
- 先计算 $(f,P_k)(k=0,1,2,3)$，即

$$(f,P_0)=\int_{-1}^{1}e^x\mathrm{d}x\approx 2.3504 \qquad (f,P_1)=\int_{-1}^{1}xe^x\mathrm{d}x\approx 0.7358$$

$$(f,P_2)=\int_{-1}^{1}\left(\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2}\right)e^x\mathrm{d}x\approx 0.1431 \qquad (f,P_3)=\int_{-1}^{1}\left(\frac{5}{2}x^2-\frac{3}{2}\right)e^x\mathrm{d}x\approx 0.02013$$

- 根据 $a_k^*=\frac{(f,P_k)}{(P_k,P_k)}$ 得 $a_0^*=1.1752, a_1^*=1.1036, a_2^*=0.3578, a_3^*=0.07046$

例3.4 求 $f(x) = e^x$ 在 $[-1,1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式

- 代入式(3.5.6)，得

$$S_3^*(x) = 0.9963 + 0.9979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3$$

- 均方误差为

$$\|\delta_n\|_2 = \|e^x - S_3^*(x)\|_2 = \sqrt{\int_{-1}^{1} e^{2x}\mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{3} \frac{2}{2k+1} {a_k^*}^2} \leq 0.0084$$

- 最大误差为

$$\|\delta_n\|_\infty = \|e^x - S_3^*(x)\|_\infty \leq 0.0112$$

函数逼近 | 函数任意区间上的函数逼近

如果 $f(x) \in C[a,b]$，求 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上的最佳平方逼近多项式

- （**normalization**）作变换

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}(-1 \le t \le 1)$$

得到 $F(t) = f(x) = f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)$ 为定义在 $[-1,1]$ 上的函数

- 用Legendre多项式，求 $F(t)$ 的最佳平方逼近多项式 $S_n^*(t)$

- （**de-normalization**）回代，得到结果 $S(x) = S_n^*\left(\frac{1}{b-a}(2x-a-b)\right)$

函数逼近 | 正交多项式逼近：讨论

- Legendre多项式 $\{P_k(x)\}$ 是在区间 $[-1,1]$ 上由 $\{1, x, x^2, \dots, x^k, \dots\}$ 正交化得到的
- 利用函数的**Legendre展开**部分和得到的最佳平方逼近多项式与**解法方程**得到的 H_n 中的最佳平方逼近多项式是一致的
- **解法方程**：当 n 较大时求法方程会出现病态方程，计算误差较大，不能使用
- **Legendre展开**：不用解线性方程组，不存在病态问题，计算公式使用起来也较方便，因此通常都用此法求最佳平方逼近多项式

本章目录

- 引言与预备知识
- 最佳一致逼近多项式
- 最佳平方逼近
- 正交多项式
- 函数按正交多项式展开
- 曲线拟合的最小二乘法

函数逼近 | 数据拟合

在科学实验的统计方法研究中，往往要从一组实验数据 $(x_i, y_i)(i = 0,1,\dots,m)$ 中寻找自变量 x 与因变量 y 之间的函数关系 $y = F(x)$

- 由于观测数据往往不准确，因此不要求 $y = F(x)$ 经过所有点 (x_i, y_i) 而只要求在给定点 x_i 上误差 $\delta_i = F(x_i) - y_i\ (i = 0,1,\dots,m)$ 按某种标准最小

- 若记 $\boldsymbol{\delta} = (\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_m)^{\mathrm{T}}$ ，就是要求向量 $\boldsymbol{\delta}$ 的范数 $\|\boldsymbol{\delta}\|$ 最小
  - 如果用最大范数，计算上困难较大
  - 通常就采用Euclid范数$\|\boldsymbol{\delta}\|_2$作为误差度量的标准

对于给定的 $(x_i, y_i)(i = 0,1, \dots, m)$，在函数空间 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 中找一个函数 $y = S^*(x)$，使误差平方和满足

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} [S^*(x_i) - y_i]^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} [S(x_i) - y_i]^2 \qquad (3.6.1)$$

其中

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x) \quad (n < m) \qquad (3.6.2)$$

若 $\varphi_k(x)$ 是 k 次多项式， $S(x)$就是 n 次多项式

几何语言说，就称为曲线拟合的最小二乘

确定 $S(x)$ 的具体形式

- 不是单纯数学问题，还与所研究问题的运动规律及所得观测数据 (x_i, y_i) 有关
- 通常要从问题的运动规律及给定数据描图来确定 $S(x)$ 的形式，并通过实际计算选出较好的结果

把最小二乘法中 $\|\delta\|_2^2$ 考虑为加权平方和

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)[S^*(x_i) - f(x_i)]^2 \qquad (3.6.3)$$

- $\omega(x)$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，它表示不同点 $(x_i, f(x_i))$ 处的数据比重
- $\omega(x_i)$ 可表示在点 $(x_i, f(x_i))$ 处重复观测的次数

求解过程

- 求函数 $y=S^*(x)$，使式(3.6.3)取得最小

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[S^*(x_i)-f(x_i)]^2 \tag{3.6.3}$$

- 等价于求多元函数极小点 $(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)$

$$I(a_0,a_1,\cdots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)\left[\sum_{i=0}^{n}a_i\varphi_i(x_i)-f(x_i)\right]^2 \tag{3.6.4}$$

➢ 与3.3节讨论的“函数的最佳平方逼近”类似，积分 -> 求和

函数逼近 | 最小二乘逼近 | 求解

- 由求多元函数极值的必要条件，有

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2\sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - f(x_i)\right]\varphi_k(x_i) = 0\ (k = 0,1,\dots,n)$$

- 若记

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\,\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) \qquad (3.6.5)$$

$$(f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\,f(x_i)\varphi_k(x_i) \equiv d_k \quad (k = 0,1,\cdots,n)$$

- 则必要条件可改写为

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

与函数逼近相似

- 此方程称为法方程它也可写成矩阵形式

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{d}$$

其中

$$\boldsymbol{a} = (a_0, a_1, \cdots, a_n)^{\mathrm{T}} \qquad \boldsymbol{d} = (d_0, d_1, \cdots, d_n)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix}$$

函数逼近 | 最小二乘逼近 | 求解

- 由于 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 线性无关，故系数行列式 $|\boldsymbol{G}| \neq 0$，于是方程组(3.6.6)有唯一解

$$a_k = a_k^* \ (k = 0,1, \dots, n)$$

- 从而得到函数 $f(x)$ 的最小二乘解为

$$S^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x) \qquad (3.3.14)$$

- 同样可以证明充分性：对于任何 $S(x) \in \Phi$，都有

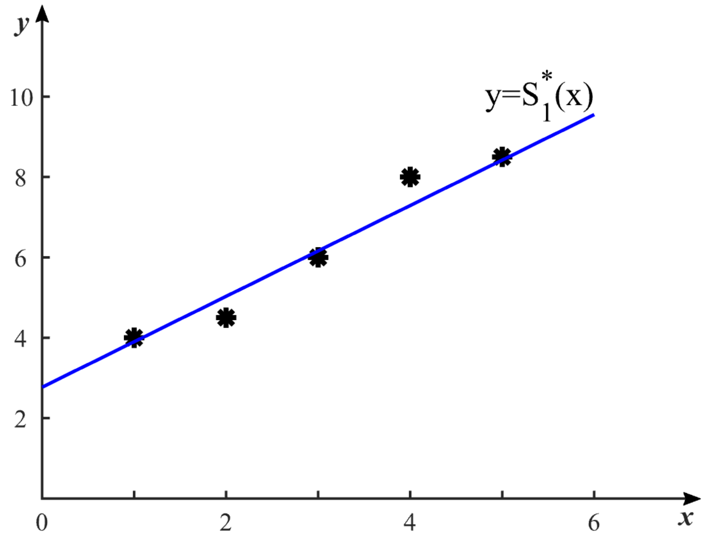
$$\sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)[S^*(x_i) - f(x_i)]^2 \leq \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)[S(x_i) - f(x_i)]^2$$

故 $S^*(x)$ 确是所求最小二乘解

例3.5 已知一组实验数据如下表，求它的拟合曲线

x_i	1	2	3	4	5
f_i	4	4.5	6	8	8.5
ω_i	2	1	3	1	1

- **观察**：在坐标纸上标出所给数据，观测到各点分布在一条直线附近，故可选择线性函数作拟合曲线



- 令 $S_1(x) = a_0 + a_1 x$，这里 $m = 4, n = 1$, $\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x$

例3.5 已知一组实验数据如下表，求它的拟合曲线

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i=8 \qquad (\varphi_0,\varphi_1)=(\varphi_1,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i=22$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i^2=74 \qquad (\varphi_0,f)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i f_i=47 \qquad (\varphi_1,f)=\sum_{i=0}^{4}\omega_i x_i f_i=145.5$$

- 由式(3.6.6)得方程组

$$\begin{cases} 8a_0+22a_1=47 \\ 22a_0+74a_1=145.5 \end{cases}$$

- 解得 $a_0=2.77, a_1=1.13$，拟合曲线为：

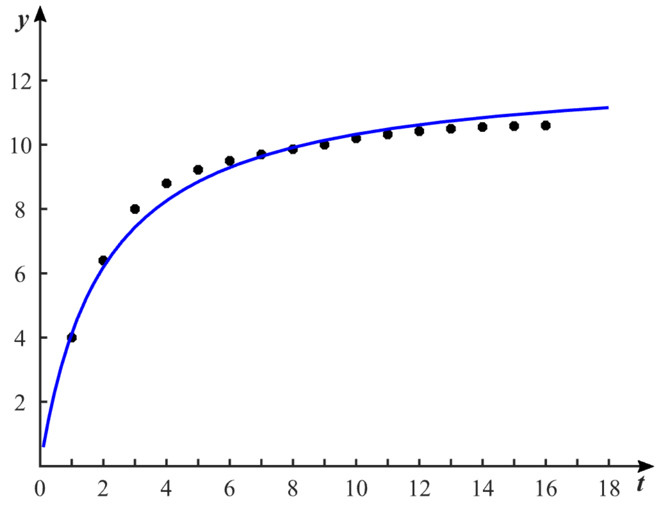
$$S_1^*(x)=2.77+1.13x$$

例3.6 在某化学反应过程中，根据实验所得生成物的质量分数与时间的关系如下表所示，求质量分数 y 与时间 t 的拟合曲线 $y = F(t)$

t/min	1	2	3	……	14	15	16
y/$\times 10^{-3}$	4.00	6.40	8.00	……	10.55	10.58	10.60

观察：质量分数开始时增加较快，后来逐渐减慢，到一定时间就基本稳定在一个水平上

- $t = 0$时，反应未开始，y 为零
- $t \to \infty$时，y 趋于某个数，$y = F(t)$ 有一水平渐近线



方法一：设 $y = F(t)$ 是双曲线型 $1/y = a + b/t$

例3.6 在某化学反应过程中，根据实验所得生成物的质量分数与时间的关系如下表所示，求质量分数 y 与时间 t 的拟合曲线 $y = F(t)$

- 令 $\bar{y} = \frac{1}{y}$, $x = \frac{1}{t}$
- (t_i, y_i) -> $(x_i, \bar{y}_i)$ ，可用线性函数 $S_1(x) = a + bx$ 拟合数据 $(x_i, \bar{y}_i)$ $(i = 1,2,\dots,16)$
- 与例3.5类似，可得方程组

$$\begin{cases} 16a + 3.38073b = 1.8372\times 10^3 \\ 3.38073a + 1.58435b = 0.52886\times 10^3 \end{cases}$$

- 解得

$$y = t/(80.6621t + 161.6822) = F^{(1)}(t)$$

例3.6 在某化学反应过程中，根据实验所得生成物的质量分数与时间的关系如下表所示，求质量分数 y 与时间 t 的拟合曲线 $y = F(t)$

方法二：符合给定数据的函数还可选为指数形式，此时令曲线为

$$y = ae^{b/t}$$

- 为了确定 a 与 b ，对上式两端取对数 $\ln y = \ln a + \frac{b}{t}$
- 令$\hat{y} = \ln y, A = \ln a, x = 1/t$
- (t_i, y_i) -> $(x_i, \hat{y}_i)$，拟合数据 $(x_i, \hat{y}_i)$ 的曲线仍为 $S_1(x) = A + bx$
- 求解并代入可得

$$y = 11.3253\times10^{-3}e^{-1.0567/t} = F^{(2)}(t)$$

例3.6 在某化学反应过程中，根据实验所得生成物的质量分数与时间的关系如下表所示，求质量分数 y 与时间 t 的拟合曲线 $y = F(t)$

如何选用不同方法？

$$\delta_i^{(1)} = y_i - F^{(1)}(t_i) \quad (i = 1,2,\dots,16)$$

$$\delta_i^{(2)} = y_i - F^{(2)}(t_i) \quad (i = 1,2,\dots,16)$$

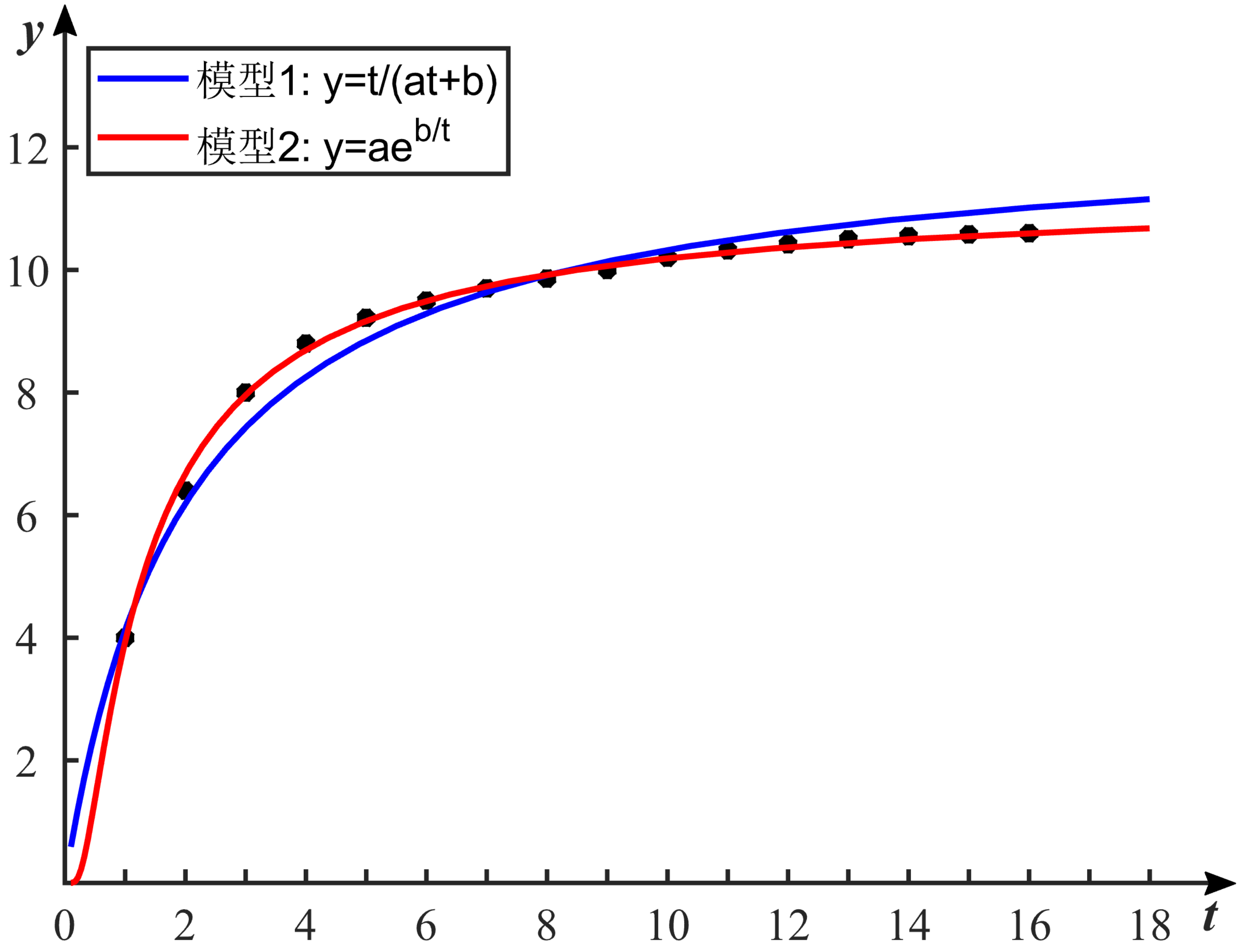
$\|\boldsymbol{\delta}^{(2)}\|_2$及$\|\boldsymbol{\delta}^{(2)}\|_\infty$都比较小，所以用 $y = F^{(2)}(t)$ 作拟合曲线比较好

- 计算可得

$$\|\boldsymbol{\delta}^{(1)}\|_\infty = 0.568\times10^{-3} \qquad \|\boldsymbol{\delta}^{(2)}\|_\infty = 0.277\times10^{-3}$$

$$\|\boldsymbol{\delta}^{(1)}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\left(\delta_i^{(1)}\right)^2} = 1.19\times10^{-3} \qquad \|\boldsymbol{\delta}^{(2)}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\left(\delta_i^{(2)}\right)^2} = 0.34\times10^{-3}$$

函数逼近 | 最小二乘逼近



函数逼近 | 数据拟合流程

- 在坐标系中画出数据点，观察分布特点
- 由数据点的分布，取基函数系（多项式、指数函数、三角函数...）

$$\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$$

- 构成法方程并求解，得到拟合曲线，分析误差
  - 拟合曲线的数学模型并不是一开始就能选得好的，往往要通过分析确定若干模型后，再经过实际计算，才能选到较好的模型
  - 存在过拟合的风险

函数逼近 | 正交函数作数据拟合

最小二乘法得到的法方程组 $\boldsymbol{Ga} = \boldsymbol{d}$，其系数矩阵 $\boldsymbol{G}$ 可能是病态的

- 考虑 $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$ 是关于点集 $\{x_i\}$ $(i = 0,1, \dots, m)$带权 $\omega(x)$ $(i = 0, 1, \dots, m)$ 的正交函数族

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases} \qquad (3.6.8)$$

- 根据法方程： $\sum_{j=0}^{n}(\varphi_k, \varphi_j)a_j = d_k \quad (k = 0,1, \cdots, n) \qquad (3.6.6)$

- 可得

$$a_k^* = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)} = \frac{\sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) f(x_i)\varphi_k(x_i)}{\sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\varphi_k^2(x_i)} \ (k = 0,1, \cdots, n) \qquad (3.6.9)$$

$$\|\boldsymbol{\delta}\|_2^2 = \|f\|_2^2 - \sum_{i=0}^{m} A_k (a_k^*)^2$$

与函数的正交多项式逼近相似

函数逼近 | 多元最小二乘拟合

已知多元函数 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_l)$ 的一组测量数据 $(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li}, y_i)$，以及一组权系数 $\omega_i > 0(i = 0, 1, \dots, m)$，要求函数

$$S_n(x_1, x_2, \dots, x_l) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x_1, x_2, \dots, x_l), n \le m$$

使得 F 最小

$$F(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=1}^{m} \omega_i [y_i - S_n(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li})]^2$$

- 同样可得

$$\sum_{j=0}^{n} (\varphi_k, \varphi_j) a_j = d_k \qquad (k = 0,1, \cdots, n)$$

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=1}^{m} \omega(x_i)\, \varphi_k(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li}) \varphi_j(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{li})$$

函数逼近 | 数据拟合 vs 数据差值

数据拟合

- 对拟合函数不要求它通过所给的数据点
- 所处理的数据量大且不能保证每一个数据没有误差
- 要求一个函数严格通过每一个数据点是不合理的
- 数据拟合方法求拟合函数

数据插值

- 插值函数则必须通过每一个数据点
- 插值方法求插值函数

本章总结

3.1 引言与预备知识

- 一致逼近、均方逼近、一致逼近的存在性、连续函数空间

3.2 最佳一致逼近多项式

- 定义、最佳逼近多项式、Chebyshev定理及推论、最佳一次逼近多项式

3.3 最佳平方逼近

- 定义、函数内积、函数范数、正交函数、线性无关函数、最佳平方逼近函数、法方程

本章总结

3.4 正交多项式

- 带权$\rho(x)$正交、正交化、Legendre多项式、Chebyshev多项式

3.5 函数按正交多项式展开

- 简化的计算过程、任意区间上的函数逼近

3.6 曲线拟合的最小二乘法

- 数据拟合、最小二乘逼近、正交函数作最小二乘拟合

作业

第三章

习题 7，15，18，21，23