

# 数值计算方法

## 第三章 函数逼近与曲线拟合

---

刘春风

2022 年 11 月 15 日



# 函数逼近与曲线拟合



- ▶ 函数逼近的基本概念
- ▶ 正交多项式
- ▶ 最佳一致逼近
- ▶ 最佳平方逼近

# 函数逼近的基本概念



## 一、函数逼近与函数空间

- ▶ 实际需求：用简单函数 $p(x)$ 逼近已知复杂函数 $f(x)$
- ▶ 函数逼近问题：对于函数类 $A$ 中给定的函数 $f(x)$ ，要求在另一类较简单的便于计算的函数类 $B \subset A$ 中找一个函数 $p(x)$ ，使 $p(x)$ 与 $f(x)$ 的误差在某种度量意义下达到最小。
- ▶ 为此，需要介绍代数和分析中的一些基本概念  
空间 如： $R^n, H_n, C[a, b], C^p[a, b]$

# 函数逼近的基本概念



►  $N$  维空间,  $R^n$

►  $H_n \triangleq \{P_n(x), +, \text{数乘}\}$

►  $C[a, b] \triangleq [[a, b] \text{ 区间上的连续函数}, +, \text{数乘}]$

►  $C^p[a, b] \triangleq [[a, b] \text{ 区间上具有 } p \text{ 阶连续导数的函数}, +, \text{数乘}]$

# 函数逼近问题



## ► 函数逼近问题:

对  $f(x) \in C[a, b]$ , 求  $\varphi^*(x) \in \Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ , 使得误差  $f(x) - \varphi^*(x)$  在某种度量意义下最小, 其中  $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n \subset C[a, b]$  线性无关。

# 函数逼近的原理



► 定理1: 如果  $f(x) \in C[a, b]$ , 那么  $\forall \varepsilon > 0, \exists$  多项式  $p(x)$ , 使得

$$|f(x) - p(x)| < \varepsilon,$$

对于一切  $a \leq x \leq b$  成立。

# 如何判断近似解的精确程度



精确解

$$x = \{x_1, x_2, \dots\}$$

近似解

$$\tilde{x} = \{\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots\}$$



精确值

$$f(x) = \{f(x_1), f(x_2), \dots\} \quad p(x) = \{p(x_1), p(x_2), \dots\}$$

近似值

▶ 如何判断向量 $\tilde{x}$ 或 $p(x)$ 的精确程度?

▶ 怎样衡量 $x - \tilde{x}$ 的大小, 或函数值 $f(x) - p(x)$ 的大小呢?

▶ 需要引入范数的概念



## 二、范数与赋范线性空间

### ► 范数的定义

**定义1** 设 $S$ 是实数域上的线性空间， $x \in S$ ，

如果存在唯一实数  $|| \cdot ||$ ，满足条件

- (1)  $||x|| \geq 0$ ，当且仅当 $x = 0$ 时， $||x|| = 0$ ; (正定性)
- (2)  $||\alpha x|| = |\alpha| ||x||$ ， $\alpha \in \mathbb{R}$ ; (齐次性)
- (3)  $||x + y|| \leq ||x|| + ||y||$ ， $x, y \in S$ . (三角不等式)

则称  $|| \cdot ||$  为线性空间 $S$ 上的**范数**， $S$ 与  $|| \cdot ||$  一起称为**赋范线性空间**，记为 $X$ 。





## 二、范数与赋范线性空间

### ► 常用范数

例如，对 $\mathbf{R}^n$ 上的向量 $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ ，有三种常用范数：

$$\|x\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|, \quad \text{称为}\infty\text{ - 范数或最大范数,}$$

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad \text{称为1 - 范数,}$$

$$\|x\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{称为2 - 范数.}$$

类似地，对 $C[a, b]$ 上的 $f(x)$ ，可定义三种常用范数：

$$\|f\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|, \quad \text{称为}\infty\text{ - 范数,}$$

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx, \quad \text{称为1 - 范数,}$$

$$\|f\|_2 = \left( \int_a^b f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \text{称为2 - 范数.}$$

## 二、范数与赋范线性空间



### ► 几点说明

- 三种范数均满足范数定义的条件
- 三种范数是等价的(注意不是相等)
- 使用中, 若不做特殊说明,  $\|\cdot\|$  是指任意一种向量范数

# 例题



►例1. 计算向量 $x = (1, -2, 3)^T$ 的各种范数。

$$\text{解: } \|x\|_1 = 6, \|x\|_\infty = 3, \|x\|_2 = \sqrt{14}$$

►例2. 计算向量 $x = (1, -2, 3, \dots, 1000)^T$ 的各种范数。

$$\text{解: } \|x\|_1 = 500500, \|x\|_\infty = 1000, \|x\|_2 = 18271.1$$

# 矩阵的范数



► **矩阵的范数**: 设矩阵  $A \in R^{n \times n}$  — 实矩阵集合, 矩阵范数  $\|A\|$  是定义在  $R^{n \times n}$  上的非负实值函数, 它满足

- (1)  $\|A\| \geq 0$  ( $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$ ) (正定条件)
- (2)  $\|kA\| = k\|A\|$ ,  $k$  为实数 (齐次条件)
- (3)  $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$  (三角不等式)
- (4)  $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$  (乘积不等式)

# 矩阵的范数



▶ 矩阵 $A$ 的列范数:  $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$

▶ 矩阵 $A$ 的行范数:  $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$

▶ 矩阵 $A$ 的E范数:  $\|A\|_E = \sqrt{\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2}$

▶ 矩阵 $A$ 的谱范数:  $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$

其中 $\lambda_{\max}(A^T A)$ 表示 $A^T A$ 的最大特征值

# 例题



►例3. 给定矩阵:  $A = \begin{bmatrix} 4 & -3 \\ -1 & 6 \end{bmatrix}$ , 求  $\|A\|_p$  ( $p = 1, 2, \infty$ ) 和  $\|A\|_E$

$$\text{解: } \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| = 9$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = 7$$

$$\|A\|_E = \sqrt{\sum_{i,j=1}^2 a_{ij}^2} = 7.87401$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)} = 7.335087491$$



# 三、内积与内积空间

## ► 内积的定义

$\mathbf{R}^n$ 中向量 $\mathbf{x}$ 及 $\mathbf{y}$ 定义内积： $(x, y) = x_1y_1 + \cdots, x_ny_n$ .

**定义2** 设 $X$ 是数域 $K$ ( $\mathbf{R}$ 或 $\mathbf{C}$ )上的线性空间, 对 $\forall u, v \in X$ , 有 $K$ 中一个数与之对应, 记为 $(u, v)$ , 并满足条件:

- (1)  $(u, v) = \overline{(v, u)}, \quad \forall u, v \in X;$
- (2)  $(\alpha u, v) = \alpha(u, v), \quad \alpha \in \mathbf{R};$
- (3)  $(u + v, w) = (u, w) + (v, w), \quad \forall u, v, w \in X;$
- (4)  $(u, u) \geq 0$ , 当且仅当 $u = 0$ 时,  $(u, u) = 0$ .

则称 $(u, v)$ 为 $X$ 上的 $u$ 与 $v$ 的**内积**. 定义了内积的线性空间称为**内积空间**.

$\overline{(v, u)}$ 为 $(u, v)$ 的共轭, 当 $K = \mathbf{R}$ 时  $(v, u) = (u, v)$ .

# 内积空间的重要结论



► 定理2: (Cauchy-Schwarz不等式) 设 $X$ 为一内积空间,  
 $\forall u, v, \in X$ ,有:

$$|(u, v)|^2 \leq (u, u)(v, v)$$

$$\begin{aligned} \text{即 } (x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n)^2 \\ \leq (x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2)(y_1^2 + y_2^2 + \cdots + y_n^2) \end{aligned}$$

特别地:

$$(x_1 y_1 + x_2 y_2)^2 \leq (x_1^2 + x_2^2)(y_1^2 + y_2^2)$$



# 内积空间的重要结论



► 定理3: 设 $X$ 为一内积,  $u_1, u_2, \dots, u_n \in X$ , 矩阵

$$G = \begin{bmatrix} (u_1, u_1) & (u_1, u_2) & \dots & (u_1, u_n) \\ (u_2, u_1) & (u_2, u_2) & \dots & (u_2, u_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (u_n, u_1) & (u_n, u_2) & \dots & (u_n, u_n) \end{bmatrix}$$

称为Gram矩阵, 则 $G$ 非奇异的充要条件是 $u_1, u_2, \dots, u_n$ 线性无关。

# 内积空间的重要结论



## ► 证明:

1)  $G$ 非奇异  $\Leftrightarrow$  以 $G$ 为系数矩阵的齐次线性方程组

$$\left(\sum_{j=1}^n \alpha_j u_j, u_k\right) = \sum_{j=1}^n (u_j, u_k) \alpha_j = 0, \quad k = 1, \dots, n.$$

只有零解。

$$\begin{aligned} 2) \quad \sum_{j=1}^n \alpha_j u_j = 0 &\Leftrightarrow \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j u_j, \sum_{j=1}^n \alpha_j u_j\right) = 0 \\ &\Leftrightarrow \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j u_j, u_k\right) = 0, \quad k = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

$\therefore G$ 非奇异  $\Rightarrow u_1, u_2, \dots, u_n$ 线性无关 (反证法); 反之亦然.

# 内积空间的重要结论



► 在内积空间 $X$ 上可以由内积导出一种范数, 即对 $u \in X$ ,

$$\|u\|_2 = \sqrt{(u, u)}$$

► 易证它满足范数定义的正定性和齐次性, 而三角不等式由Cauchy-Schwarz不等式立得。

► 若给定 $\omega_i > 0 (i = 1, \dots, n)$ 为权系数, 则 $R^n$ 中向量 $x, y$ 的加权内积定义为:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n \omega_i x_i y_i$$

$$\text{范数为: } \|x\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n \omega_i x_i^2 \right)^{1/2}$$

# 内积空间的重要结论



►  $C[a, b]$  上的内积定义为:

$$(f(x), g(x)) \triangleq \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx$$

其中  $f(x), g(x) \in C[a, b]$ ,  $\rho(x)$  为  $[a, b]$  上的权函数,

$$\text{当 } \rho \equiv 1, (f(x), g(x)) = \int_a^b f(x) g(x) dx$$

$$\text{范数定义为: } \|f(x)\|_2 = \left( \int_a^b \rho(x) f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{当 } \rho \equiv 1, \|f(x)\|_2 = \left( \int_a^b f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

# 内积空间的重要结论



► 设  $\varphi_0, \dots, \varphi_n \in C[a, b]$ , 则Gram矩阵为:

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

根据定理3,  $\varphi_0, \dots, \varphi_n$  线性无关  $\Leftrightarrow \det(G) \neq 0$

# 函数逼近与曲线拟合



- ▶ 函数逼近的基本概念
- ▶ 正交多项式
- ▶ 最佳一致逼近
- ▶ 最佳平方逼近

# 正交多项式



## 一、正交函数族与正交多项式

► 定义1: 若  $f(x), g(x) \in C[a, b]$ , 且

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b f(x)g(x)dx = 0,$$

则称  $f(x)$  与  $g(x)$  在  $[a, b]$  上正交。

► 设在  $[a, b]$  给定函数族  $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$ , 且满足

$$(\varphi_i(x), \varphi_k(x)) = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ A_k > 0, & i = k \end{cases} \quad (i, k = 0, 1, 2, \dots)$$

则称函数族  $\{\varphi_n(x)\}$  为  $[a, b]$  上的正交函数族

当  $A_k \equiv 1$  时, 则称该函数族为 **标准正交函数**

# 正交多项式



► 定义2: 若 $f(x), g(x) \in C[a, b]$ ,  $\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上的权函数, 且

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0,$$

则称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交。

权函数 $\rho(x)$ 为大于0的函数, 当 $\rho(x) \equiv 1$ , 同定义1.

► 设在 $[a, b]$ 给定函数族 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$ , 且满足

$$(\varphi_i(x), \varphi_k(x)) = \begin{cases} 0, & i \neq k \\ A_k > 0, & i = k \end{cases} \quad (i, k = 0, 1, 2, \dots)$$

则称函数族 $\{\varphi_n(x)\}$ 为 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交函数族

当 $A_k \equiv 1$ 时, 则称该函数族为标准正交函数族



# 正交函数族的性质



## ► 三角函数族

$$\{1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots \quad x \in [-\pi, \pi]\}$$

## ► 正交性

(1) 任意两个不同函数在  $[-\pi, \pi]$  上的积分等于零

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos nx dx = 0, \quad \int_{-\pi}^{\pi} \sin nx dx = 0,$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cos nx dx = 0, \quad (\text{其中 } m, n = 1, 2, \dots),$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nx dx = 0, \quad (\text{其中 } m, n = 1, 2, \dots),$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nx dx = 0, \quad (\text{其中 } m, n = 1, 2, \dots).$$

# 正交函数族的性质



(2)任意两个相同函数在 $[-\pi, \pi]$  上的积分等于 $\pi$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin nx dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \pi, & m = n \end{cases},$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos nx dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \pi, & m = n \end{cases},$$

$$(1,1) = 2\pi, (\sin kx, \sin kx) = (\cos kx, \cos kx) = \pi,$$

而对 $k, j = 1, 2, \dots$ , 当 $k \neq j$ 时, 有

$$(\cos kx, \sin kx) = (1, \cos kx) = (1, \sin kx) = 0,$$

$$(\cos kx, \cos jx) = (\sin kx, \sin jx) = (\cos kx, \sin jx) = 0.$$

通过上述结果可知所给三角函数族为正交函数族, 但不是标准正交的。

# 正交函数族的性质



► 区间 $[a, b]$ 上的正交函数族必定线性无关

证明：设正交函数族为： $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$

(反证) 假设 $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ 线性相关，即存在不全为零的实数 $c_0, c_1, \dots, c_n$ , 使得

$$c_0 \varphi_0 + c_1 \varphi_1 + \dots + c_n \varphi_n = 0$$

不妨假设 $c_i \neq 0$ , 则有:

$$c_0 (\varphi_0, \varphi_i) + c_1 (\varphi_1, \varphi_i) + \dots + c_n (\varphi_n, \varphi_i) = 0$$

而 $(\varphi_i, \varphi_i) \neq 0$ , 只有 $c_i = 0$ , 与假设矛盾。

证毕.

# 正交多项式



► **定义3.** 设 $p_n(x)$ 是 $[a, b]$ 上首项系数 $a_n \neq 0$ 的 $n$ 次多项式,  
 $\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上的权函数, 若多项式序列 $\{p_n(x)\}_0^\infty$ , 满足正交性条件, 则称 $\{p_n(x)\}_0^\infty$ 为以 $\rho(x)$ 为权函数的 $[a, b]$ 上的正交多项式序列, 称 $p_n(x)$ 为以 $\rho(x)$ 为权函数的 $[a, b]$ 上的 $n$ 次正交多项式。

# 正交多项式



► 只要给定 $[a, b]$ 上的权函数 $\rho(x)$ , 由 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$ 利用逐个正交化的方法立得正交多项式序列:

$$p_0(x) = 1,$$

$$p_n(x) = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x^n, p_j)}{(p_j, p_j)} p_j, \quad n = 1, 2, \dots,$$

性质:

(1)  $p_n(x)$ 的首项系数为1;

(2)  $\forall Q_n(x) \in H_n$ 均可表示为 $p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x)$ 的线性组合

(3) 当 $k \neq j$ 时,  $(p_j(x), p_k(x)) = 0$ ,

且 $p_k(x)$ 与任意次数小于 $k$ 的多项式正交。

# 正交多项式



## 二、勒让德多项式

区间 $[-1,1]$ 上带权 $\rho(x) = 1$ 的正交多项式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n], \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

称为 $n$ 次 **Legendre**多项式 .

$$\text{其首项系数 } a_n = \frac{2n \cdot (2n - 1) \cdots (n + 1)}{2^n \cdot n!} = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}$$

首项系数为1的勒让德多项式为

$$\tilde{P}_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n], \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

# 正交多项式



## ►几个低次勒让德正交多项式

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = (3x^2 - 1)/2,$$

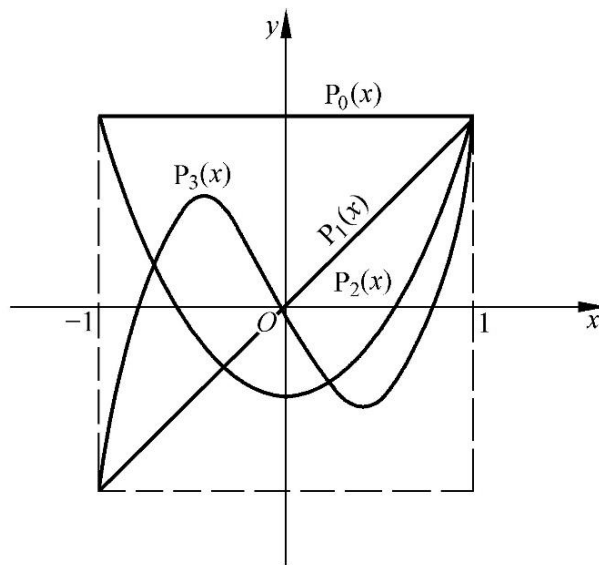
$$P_3(x) = (5x^3 - 3x)/2, P_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + 3)/8,$$

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

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

...

## ►函数曲线如图所示



# 正交多项式



## ► 三、切比雪夫多项式

区间为 $[-1,1]$ , 权函数为 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ , 序列 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$

正交化所得正交多项式称为 $n$ 次**切比雪夫多项式**

可表为

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), \quad (-1 \leq x \leq 1, n = 0, 1, 2, \dots)$$

若令 $x = \cos \theta$ , 则 $T_n(x) = \cos(n\theta), 0 \leq \theta \leq \pi$ .

$$T_0(x) = \cos(0) = 1,$$

$$T_1(x) = \cos(\arccos x) = x,$$

$$T_2(x) = \cos(2 \arccos x) = 2x^2 - 1,$$

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

.....





# 其它常用正交多项式

## ► 1. 第二类切比雪夫多项式

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

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

称为**第二类切比雪夫多项式** .

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

$$\begin{cases} U_0(x) = 1, & U_1(x) = 2x, \\ U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x) \end{cases}$$

# 其它常用正交多项式



## ► 2. 拉盖尔多项式

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

$$L_n(x) = e^{-x} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}),$$

称为**拉盖尔多项式** .

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

$$\begin{cases} L_0(x) = 1, & L_1(x) = 1 - x, \\ L_{n+1}(x) = (1 + 2n - x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x). \end{cases}$$

# 其它常用正交多项式



## ► 3. 埃尔米特多项式

区间 $(-\infty, +\infty)$ 上带权 $\rho(x) = e^{-x^2}$ 的正交多项式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}),$$

称为**埃尔米特多项式** .

# 函数逼近与曲线拟合



- ▶ 函数逼近的基本概念
- ▶ 正交多项式
- ▶ 最佳一致逼近
- ▶ 最佳平方逼近

# 最佳一致逼近



## ► 一、最佳一致逼近问题

对  $f(x) \in C[a, b]$ , 求多项式  $p_n^*(x) \in H_n$ , 使得误差

$$\| f(x) - p_n^*(x) \|_{\infty} = \min_{p_n \in H_n} \| f(x) - p_n(x) \|_{\infty} .$$

此即所谓最佳一致逼近问题.

# 最佳一致逼近



## ► 最佳一致逼近的概念

**定义：** 设  $f(x) \in C[a, b]$ ,  $p_n(x) \in H_n$ , 称

$$\Delta(f, p_n) = \|f - p_n^*\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p_n(x)|$$

是  $f(x)$  与  $p(x)$  在  $[a, b]$  上的 **偏差**

$$E_n = \inf_{p_n \in H_n} \{\Delta(f, p_n)\} = \inf_{p_n \in H_n} \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p_n(x)|$$

称为  $f(x)$  在  $[a, b]$  上的 **最小偏差**

**定义** 设  $f(x) \in C[a, b]$ , 若存在  $p_n^*(x) \in H_n$ , 使得

$$\Delta(f, p_n^*) = E_n,$$

称  $p_n^*(x)$  是  $f(x)$  在  $[a, b]$  上的  $n$  次 **最佳一致逼近多项式** 或 **最小偏差逼近多项式**, 简称 **最佳逼近多项式**.

# 函数逼近与曲线拟合



- ▶ 函数逼近的基本概念
- ▶ 正交多项式
- ▶ 最佳一致逼近
- ▶ 最佳平方逼近

# 最佳平方逼近



## ► 一、函数的最佳平方逼近

设  $f(x) \in C[a, b]$ , 如果  $n$  次多项式  $s^*(x) = \sum_{j=0}^n a_j^* x^j$  满足

$$\int_a^b [f(x) - s^*(x)]^2 dx = \min_{s(x) \in H_n} \int_a^b [f(x) - s(x)]^2 dx,$$

则称  $s^*(x)$  为  $f(x)$  在  $[a, b]$  上的  $n$  次**最佳平方逼近多项式**.

设  $f(x) \in C[a, b]$ ,  $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\} \subset C[a, b]$ , 若存在  $s^*(x) \in \Phi$ , 满足

$$\int_a^b \rho(x) [f(x) - s^*(x)]^2 dx = \min_{s(x) \in \Phi} \int_a^b \rho(x) [f(x) - s(x)]^2 dx,$$

则称  $s^*(x)$  为函数  $f(x)$  在集合  $\Phi$  上的**最佳平方逼近函数**.



# 最佳平方逼近



问题归结为求  $s^*(x) = \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j$ , 即求系数  $a_j^*$ , 使得

$$I(a_0, \dots, a_n) = \int_a^b \rho(x) [f(x) - \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j]^2 dx$$

取得极小值.

$$\because \frac{\partial I}{\partial a_k}(a_0, \dots, a_n) = 2 \int_a^b \rho(x) [f(x) - \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j] \varphi_k dx = 0,$$

$$\therefore \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{bmatrix},$$

此方程组称为**法方程**.

可见,  $(f(x) - \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j, \varphi_k) = 0, k = 0, 1, \dots, n.$

# 最佳平方逼近



因  $\varphi_0, \dots, \varphi_n$  线性无关, 故法方程系数行列式  $G_n \neq 0$ , 法方程有唯一解. 可见, 系数  $a_j^*$  满足法方程.

反之, 法方程确定

的  $s^*(x)$  是  $f(x)$  在集合  $\Phi$  上的最佳平方逼近函数.

平方误差 :

$$\begin{aligned} \| \delta(x) \|_2^2 &= (f - s^*, f - s^*) = (f, f) - (f, s^*) \\ &= \| f(x) \|_2^2 - \sum_{k=0}^n a_k^* (f, \varphi_k). \end{aligned}$$

# 最佳平方逼近



## ► 例1

设  $f(x) = \sqrt{1+x^2}$ , 求  $[0, 1]$  上的一次最佳平方逼近多项式.

$$\text{解: } (f, \varphi_0) = \int_0^1 \sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{2} \ln(1+\sqrt{2}) + \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 1.147,$$

$$(f, \varphi_1) = \int_0^1 x \sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{3} (1+x^2)^{3/2} \Big|_0^1 = \frac{2\sqrt{2}-1}{3} \approx 0.609,$$

得方程组

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.147 \\ 0.609 \end{bmatrix},$$

# 最佳平方逼近



解之

$$a_0 = 0.934, \quad a_1 = 0.426,$$

故

$$S_1^*(x) = 0.934 + 0.426x.$$

平方误差

$$\begin{aligned} \|\delta(x)\|_2^2 &= (f(x), f(x)) - (S_1^*(x), f(x)) \\ &= \int_0^1 (1 + x^2) dx - 0.426d_1 - 0.934d_0 = 0.0026. \end{aligned}$$

最大误差

$$\|\delta(x)\|_\infty = \max_{0 \leq x \leq 1} \left| \sqrt{1 + x^2} - S_1^*(x) \right| \approx 0.066.$$

# 最佳平方逼近



## ►例2:

求  $f(x) = \sqrt{x}$  在  $[\frac{1}{4}, 1]$  上的在  $\Phi = \text{span}\{1, x\}$  中的关于  $\rho(x) = 1$  的最佳平方逼近多项式.

解: 已知  $\varphi_0 = 1, \varphi_1 = x$ , 设所求  $p_1^*(x) = a_0 + a_1 x$ , 得法方程

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \frac{3}{4} & \frac{15}{32} \\ \frac{15}{32} & \frac{21}{64} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{12} \\ \frac{31}{80} \end{bmatrix}, \Rightarrow \begin{cases} a_0 = \frac{10}{27} \\ a_1 = \frac{88}{135} \end{cases}. \quad p_1^*(x) = \frac{10}{27} + \frac{88}{135} x.$$

$$\text{平方误差: } ||\delta(x)||_2^2 = \int_{\frac{1}{4}}^1 x dx - \left( \frac{10}{27} \cdot \frac{7}{12} + \frac{31}{80} \cdot \frac{88}{135} \right) = 0.0001082.$$



# 最佳平方逼近

一般地, 求函数  $f(x) \in C[0,1]$  的在  $\Phi = \text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$  中关于  $\rho(x) = 1$  的  $n$  次最佳平方逼近多项式, 可得法方程系数矩阵

$$G = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n+1} \end{bmatrix},$$

称为希尔伯特(Hilbert)矩阵, 当  $n$  较大时, 该矩阵是高度病态的, 因此直接求解方程组相当困难, 通常采用正交多项式作基。

# 最佳平方逼近



## ► 用正交函数族求最佳平方逼近

设  $f(x) \in C[a, b]$ ,  $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\} \subset C[a, b]$ ,  $\varphi_0, \dots, \varphi_n$  是正交函数族, 则

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & & & \\ & (\varphi_1, \varphi_1) & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0^* \\ a_1^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{bmatrix}$$

$$a_k^* = (f, \varphi_k) / (\varphi_k, \varphi_k), \quad (*)$$

$$S_n^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(f, \varphi_k)}{\|\varphi_k\|_2^2} \varphi_k(x). \quad (**)$$



# 最佳平方逼近

均方误差

$$\begin{aligned} ||\delta_n(x)||_2 &= ||f(x) - s_n^*(x)||_2 = (f(x) - s_n^*(x), f(x))^{1/2} \\ &= \left( (f, f) - \left( \sum_{k=0}^n \frac{(f, \varphi_k)}{||\varphi_k||_2^2} \varphi_k, f \right) \right)^{\frac{1}{2}} = \left( ||f||_2^2 - \sum_{k=0}^n \frac{(f, \varphi_k)^2}{||\varphi_k||_2^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

由此得**Bessel不等式**

$$\sum_{k=0}^n (a_k^* ||\varphi_k(x)||_2)^2 \leq ||f(x)||_2^2.$$

$$a_k^* = (f, \varphi_k) / (\varphi_k, \varphi_k)$$

设  $f(x) \in C[a, b]$ , 按正交函数族  $\{\varphi_k(x)\}$  展开, 得到

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k^* \varphi_k(x)$$

称为  $f(x)$  的**广义傅里叶级数**.



# 最佳平方逼近



**定理** 设  $f(x) \in C[a, b]$ ,  $\{\varphi_k\} \subset C[a, b]$  是正交多项式族, 则由(\*)和(\*\*)确定的  $s_n^*(x)$  满足

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f(x) - s_n^*(x)\|_2 = 0.$$

特别地, 勒让德多项式  $p_n(x)$  在  $[-1, 1]$  上带权  $\rho(x) = 1$  正交, 且

$$\int_{-1}^1 p_m(x)p_n(x)dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \frac{2}{2n+1}, & m = n. \end{cases}$$

于是, 系数

$$a_j^* = \frac{2j+1}{2} (f, p_j),$$

从而

$$s^*(x) = \sum_{j=0}^n \frac{2j+1}{2} (f, p_j) p_j(x).$$

# 最佳平方逼近



## ► 例3

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

**解:**  $(f, p_0) = \int_{-1}^1 e^x dx \approx 2.3504, \quad (f, p_1) = \int_{-1}^1 x e^x dx \approx 0.7358,$

$$(f, p_2) = \int_{-1}^1 \left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}\right)e^x dx \approx 0.1431,$$

$$(f, p_3) = \int_{-1}^1 \left(\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x\right)e^x dx \approx 0.02013.$$

$$a_0^* = \frac{1}{2}(f, p_0) \approx 1.1752, \quad a_1^* = \frac{3}{2}(f, p_1) \approx 1.1036,$$

$$a_2^* = \frac{5}{2}(f, p_2) \approx 0.3578, \quad a_3^* = \frac{7}{2}(f, p_3) \approx 0.07046.$$

$$\begin{aligned} s^*(x) &= 1.1752p_0 + 1.1036p_1 + 0.3578p_2 + 0.07046p_3 \\ &= 0.9963 + 0.09979x + 0.5367x^2 + 0.1761x^3. \end{aligned}$$

# 最佳平方逼近



均方误差

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

最大误差

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

其他说明:

1. 若  $f(x) \in C[a, b]$ , 则可通过  $x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t$  化为

$$F(t) = f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t\right) = g(t), \quad -1 \leq t \leq 1. \quad \dots$$

2. 用正交多项式则不用解方程组, 不出现病态问题.

# 数值计算方法

## 第三章 函数逼近与曲线拟合

---

刘春风

2022 年 11 月 17 日



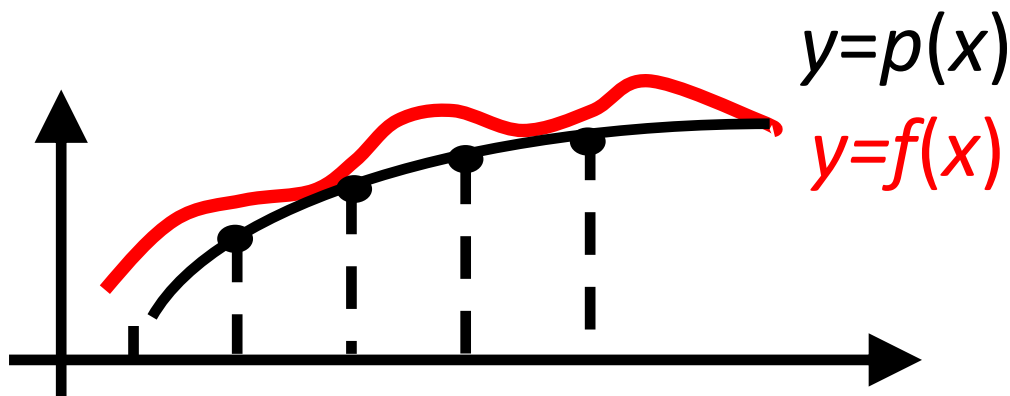


# 曲线拟合的最小二乘法

## 一、拟合问题的提出

- ▶ 测量数据的拟合是一个既古老，但又非常实用的问题。
- ▶ 函数解析式未知,通过实验观测得到的一组数据,即在某个区间  $[a, b]$  上给出一系列点的函数值  $y_i = f(x_i)$
- ▶ 或者给出函数表

| $x$ | $x_0$ | $x_1$ | $x_2$ | ..... | $x_n$ |
|-----|-------|-------|-------|-------|-------|
| $y$ | $y_0$ | $y_1$ | $y_2$ | ..... | $y_n$ |



# 曲线拟合的最小二乘法

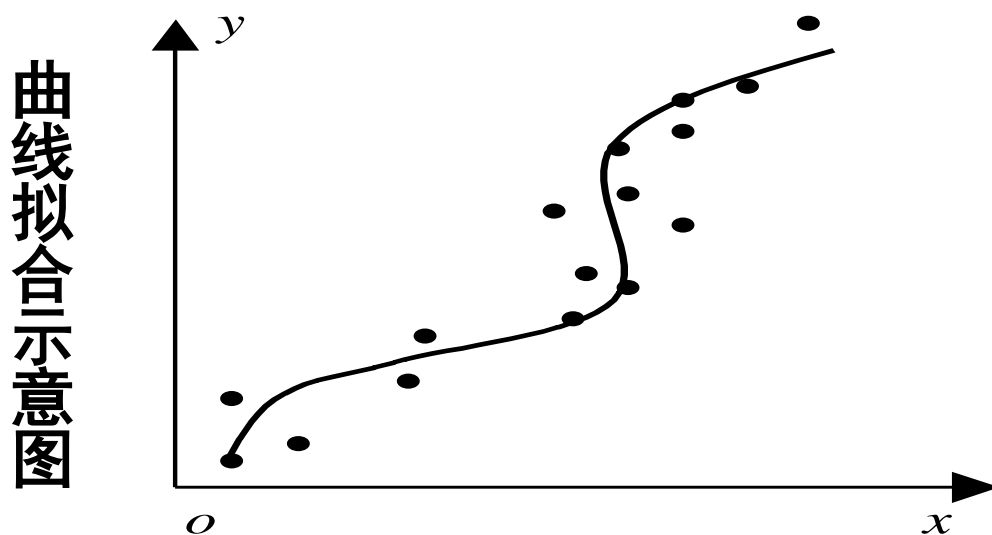


- ▶ 如果已知函数 $f(x)$ 在若干点 $x_i (i=1, 2, \dots, n)$ 处的值 $y_i$ ,便可根据插值原理来建立插值多项式作为 $f(x)$ 的近似。
- ▶ 但在科学实验和生产实践中,往往会遇到这样一种情况,即节点上的函数值并不是很精确的,这些函数值是由实验或观测得到的数据,不可避免地带有测量误差。
- ▶ 如果要求所得的近似函数曲线精确无误地通过所有的点 $(x_i, y_i)$ ,就会使曲线保留着一切测试误差。
- ▶ 当个别数据的误差较大时,插值效果显然是不理想的。
- ▶ 此外,由实验或观测提供的数据个数往往很多,如果用插值法,势必得到次数较高的插值多项式,这样计算起来很烦琐。

# 曲线拟合的最小二乘法



▶ 换句话说:求一条曲线,使数据点均在离此曲线的上方或下方不远处,所求的曲线称为拟合曲线,它既能反映数据的总体分布,又不至于出现局部较大的波动,更能反映被逼近函数的特性,使求得的逼近函数与已知函数从总体上来说其偏差按某种方法度量达到最小,这就是最小二乘法。



# 插值与拟合



- ▶ 与函数插值问题不同,曲线拟合不要求曲线通过所有已知点,而是要求得到的近似函数能反映数据的基本关系。在某种意义上,曲线拟合更有实用价值。
- ▶ 在对给出的实验 (或观测) 数据 $(x_i, y_i)(i = 0, 1, \dots, n)$ 作曲线拟合时, 怎样才算拟合得最好呢? 一般希望各实验 (或观测) 数据与拟合路线的偏差的平方和最小, 这就是最小二乘原理。
- ▶ 两种逼近概念:
  - 插值: 在节点处函数值相同.
  - 拟合: 在数据点处误差平方和最小



# 插值与拟合



- ▶ 函数插值是插值函数  $P(x)$  与被插函数  $f(x)$  在节点处函数值相同，即  $P(x_i) = f(x_i) \quad (i = 0, 1, \dots, n)$
- ▶ 而曲线拟合函数  $S(x)$  不要求严格地通过所有数据点  $(x_i, y_i)$ ，也就是说拟合函数  $S(x)$  在  $x_i$  处的偏差(亦称残差)  $\delta_i = S(x_i) - f(x_i) \quad (i = 0, 1, \dots, n)$ ，不都严格地等于零.
- ▶ 为了近似曲线能尽量反应所给数据点的变化趋势，要求  $|\delta_i|$  按某种度量标准最小.
- ▶ 若记向量  $\delta = [\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_n]^T$ ，即要求向量  $\delta$  的某种范数  $\|\delta\|$  最小，如  $\delta$  的 1-范数  $\|\delta\|_1$  或  $\infty$ -范数  $\|\delta\|_\infty$ ，即



# 曲线拟合的最小二乘法

$$\|\delta\|_{\infty} = \max_i |\delta_i| = \max_i |S(x_i) - f(x_i)|$$

$$\text{或 } \|\delta\|_1 = \sum_{i=0}^n |\delta_i| = \sum_{i=0}^n |S(x_i) - f(x_i)| \text{ 最小.}$$

► 为了便于计算、分析与应用,  $\delta$  通常要求2-范数

$$\|\delta\|_2 = \left( \sum_{i=0}^n \delta_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left\{ \sum_{i=0}^n [S(x_i) - f(x_i)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{即 } \|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^n \delta_i^2 = \sum_{i=0}^n [S(x_i) - f(x_i)]^2 \text{ 最小.}$$

► 这种要求误差 (偏差) 平方和最小的拟合称为 **曲线拟合的最小二乘法**。



# 最小二乘问题一般提法

## ►一般提法:

对于给定的数据 $(x_i, y_i)$  ( $i = 0, 1, \dots, m$ ), 要求在给定函数类  $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  中找一函数

$$s^*(x) = \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j, \quad n < m,$$

使 $s^*(x)$ 满足

$$\begin{aligned} \|\delta\|_2^2 &= \sum_{i=0}^m \delta_i^2 = \sum_{i=0}^m [s(x_i) - f(x_i)]^2 \\ &= \min_{s(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^m [s(x_i) - f(x_i)]^2. \end{aligned}$$



# 最小二乘问题更一般提法

## ► 更一般提法

要求：

$$\begin{aligned} ||\boldsymbol{\delta}||_2^2 &= \sum_{i=0}^m \delta_i^2 = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) [s^*(x_i) - f(x_i)]^2 \\ &= \min_{s(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^m \omega(x_i) [s(x_i) - f(x_i)]^2. \end{aligned}$$

# 最小二乘法



► 问题归结为：

求  $s^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k(x)$ , 即求系数  $a_j^*$ , 使得

$$I(a_0, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \left[ \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) - f(x_i) \right]^2$$

取得极小值.

► 引进内积记号

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

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

# 最小二乘法



## ► 法方程

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{bmatrix}$$

称为法方程. 但是  $\varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)$  在  $C[a, b]$  上线性无关,  
不能保证其系数矩阵非奇异.

例如,  $\varphi_0 = \sin x, \varphi_1 = \sin 2x, x \in [0, 2\pi], x_k = k\pi, k = 0, 1, 2$ .

# 最小二乘法



## ► 哈尔 (Haar) 条件

**定义** 设  $\varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$  的任意线性组合在点集  $\{x_i, i = 0, 1, \dots, m\}$  ( $m \geq n$ ) 上至多只有  $n$  个不同的零点, 则称  $\varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x)$  在点集  $\{x_i, i = 0, 1, \dots, m\}$  上满足 **Haar 条件**.

显然  $1, x, \dots, x^n$  在任意  $m$  ( $m \geq n$ ) 个点上满足 *Haar* 条件.

可以证明, 如果  $\varphi_0(x), \dots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$  在  $\{x_i\}_0^m$  上满足 **Haar 条件**, 则  $\det(G_n) \neq 0$ .

可求出  $a_j^*$ , 得到  $s^*(x) = \sum_{j=0}^n a_j^* \varphi_j$ .

# 最小二乘法



## ► 可以证明

$$\sum_{i=0}^m \omega(x_i) [s * (x_i) - f(x_i)]^2 \leq \sum_{i=0}^m \omega(x_i) [s(x_i) - f(x_i)]^2, \forall s \in \Phi.$$

从而,  $s^*(x)$  是最小二乘解.

## ► 常用多项式拟合 $\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\} = \text{span}\{1, x, \dots, x^n\}$ ,

$$s^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* x^k.$$

## ► 法方程为:

$$\begin{bmatrix} \sum \omega_i & \sum \omega_i x_i & \cdots & \sum \omega_i x_i^n \\ \sum \omega_i x_i & \sum \omega_i x_i^2 & \cdots & \sum \omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \sum \omega_i x_i^n & \sum \omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum \omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \omega_i y_i \\ \sum \omega_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum \omega_i x_i^n y_i \end{bmatrix}$$



# (1) 直线拟合



► 设已知数据点  $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, m$ ，分布大致为一条直线。作拟合直线  $y(x) = a_0 + a_1 x$ ，该直线不是通过所有的数据点  $(x_i, y_i)$ ，而是使偏差平方和

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

为最小，其中每组数据与拟合曲线的偏差为

$$y(x_i) - y_i = a_0 + a_1 x_i - y_i \quad i = 1, 2, \dots, m$$

► 根据最小二乘原理，应取  $a_0$  和  $a_1$  使  $F(a_0, a_1)$  有极小值，故  $a_0$  和  $a_1$  应满足下列条件：

$$\begin{cases} \frac{\partial F(a_0, a_1)}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \\ \frac{\partial F(a_0, a_1)}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i - y_i) x_i = 0 \end{cases}$$

# (1) 直线拟合



► 即得如下法方程：

$$\begin{cases} a_0 m + a_1 \sum_{i=1}^m x_i = \sum_{i=1}^m y_i \\ a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 + a_0 \sum_{i=1}^m x_i = \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{cases}$$

► 例. 设有某实验数据如下：

| $i$   | 1      | 2      | 3      | 4      |
|-------|--------|--------|--------|--------|
| $x_i$ | 1.36   | 1.37   | 1.95   | 2.28   |
| $y_i$ | 14.094 | 16.844 | 18.475 | 20.963 |

用最小二乘法求以上数据的拟合函数

# (1) 直线拟合



►解：把表中所给数据画在坐标纸上，将会看到数据点的分布可以用一条直线来近似地描述，设所求的拟合直线为：

$$y(x) = a_0 + a_1 x$$

则法方程为：

$$\begin{cases} 4a_0 + a_1 \sum_{i=1}^4 x_i = \sum_{i=1}^4 y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^4 x_i + a_1 \sum_{i=1}^4 x_i^2 = \sum_{i=1}^4 x_i y_i \end{cases}$$

►其中

$$\sum_{i=1}^4 x_i = 7.32 \quad \sum_{i=1}^4 x_i^2 = 13.8434 \quad \sum_{i=1}^4 y_i = 70.376 \quad \sum_{i=1}^4 x_i y_i = 132.12985$$

# (1) 直线拟合



► 将所求数据代入法方程，得

$$\begin{cases} 4a_0 + 7.32a_1 = 70.376 \\ 7.32a_0 + 13.8434a_1 = 132.12985 \end{cases}$$

► 解得  $a_0 = 3.9374$ ,  $a_1 = 7.4626$

► 因此所求得 的拟合直线为：

$$y = 3.9374 + 7.4626x$$

## (2) 多项式拟合



- ▶ 有时所给数据点的分布并不一定近似地呈一条直线，这时仍用直线拟合显然是不合适的，可用多项式拟合。
- ▶ 对于给定的一组数据  $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, m$ ，寻求次数不超过  $n$  ( $n \ll m$ ) 的多项式，

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$$

来拟合所给定的数据，与线性拟合类似，使偏差的平方和

$$Q = \sum_{i=1}^m (y_i - \sum_{j=0}^n a_j x_i^j)^2$$

为最小。

## (2) 多项式拟合



- ▶ 由于 $Q$ 可以看作是关于 $a_j, j = 0, 1, 2, \dots, n$ 的多元函数，故上述拟合多项式的构造问题可以归结为多元函数的极值问题。
- 令

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 0, k = 0, 1, 2, \dots, n$$

▶ 得 
$$\sum_{i=1}^m (y_i - \sum_{j=0}^n a_j x_i^j) x_i^k = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

▶ 即有 
$$\begin{cases} a_0 m + a_1 \sum x_i + \dots + a_n \sum x_i^n = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + \dots + a_n \sum x_i^{n+1} = \sum x_i y_i \\ \dots \\ a_0 \sum x_i^n + a_1 \sum x_i^{n+1} + \dots + a_n \sum x_i^{2n} = \sum x_i^n y_i \end{cases}$$

- ▶ 这是关于 $a_j$ 的线性方程组，该方程组有唯一解。

## (2) 多项式拟合



► 例. 设某实验数据如下

| $i$   | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|-------|---|---|---|---|---|---|
| $x_i$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| $y_i$ | 5 | 2 | 1 | 1 | 2 | 3 |

用最小二乘法求一个多项式拟合这组数据

► 解: 将已给数据点描在最表系中, 可以看出这些点接近一条抛物线, 因此可以假设所求的多项式为

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

► 经计算得

$$m=6, \sum_{i=1}^6 x_i = 15, \sum_{i=1}^6 x_i^2 = 55, \sum_{i=1}^6 x_i^3 = 225, \sum_{i=1}^6 x_i^4 = 797, \sum_{i=1}^6 y_i = 14, \sum_{i=1}^6 x_i y_i = 30, \sum_{i=1}^6 x_i^2 y_i = 122$$

## (2) 多项式拟合



► 对应的法方程组为：

$$\begin{cases} 6a_0 + 15a_1 + 55a_2 = 14 \\ 15a_0 + 55a_1 + 225a_2 = 30 \\ 55a_0 + 225a_1 + 979a_2 = 122 \end{cases}$$

► 解得  $a_0 = 4.7143$ ,  $a_1 = -2.7857$ ,  $a_2 = 0.5000$

► 因此，所求的多项式为：

$$y = 4.7143 - 2.7857x + 0.5000x^2$$



### (3)可化为线性拟合的非线性拟合



- ▶ 有些非线性拟合曲线可以通过适当的变量替换转化为线性曲线，从而用线性拟合进行处理。
- ▶ 对于一个实际的曲线拟合问题，一般先按观测值在坐标平面上描出散点图，观察散点的分布同哪类曲线图形接近，然后选用相接近的曲线拟合方程。
- ▶ 通过适当的变量转换化为线性拟合问题，按线性拟合解出后再还原为原变量所表示的曲线拟合方程。
- ▶ 下表列举了几类经适当变换后化为线性拟合求解的曲线拟合方程及变换关系。

# (3)可化为线性拟合的非线性拟合



► 曲线拟合方程

变换关系

变换后线性拟合方程

|                               |  |  |
|-------------------------------|--|--|
| $y = ae^{bx}$                 | $\bar{y} = \ln y$                              | $\bar{y} = \bar{a} + bx (\bar{a} = \ln a)$ |
| $y = ax^\mu + c$              | $\bar{x} = x^\mu$                              | $y = a\bar{x} + c$                         |
| $y = \frac{x}{ax + b}$        | $\bar{y} = \frac{1}{y}, \bar{x} = \frac{1}{x}$ | $\bar{y} = a + b\bar{x}$                   |
| $y = \frac{1}{ax + b}$        | $\bar{y} = \frac{1}{y}$                        | $\bar{y} = b + ax$                         |
| $y = \frac{1}{ax^2 + bx + c}$ | $\bar{y} = \frac{1}{y}$                        | $\bar{y} = ax^2 + bx + c$                  |
| $y = \frac{x}{ax^2 + bx + c}$ | $\bar{y} = \frac{x}{y}$                        | $\bar{y} = ax^2 + bx + c$                  |

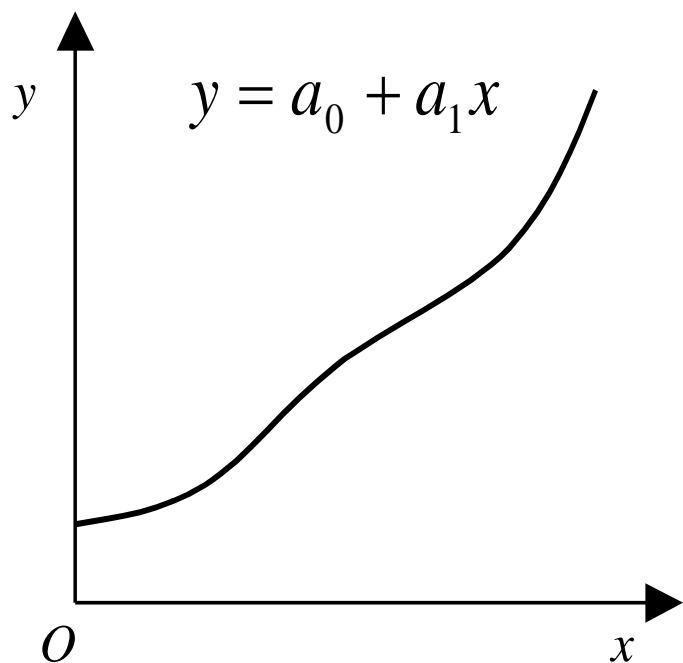
### (3) 可化为线性拟合的非线性拟合



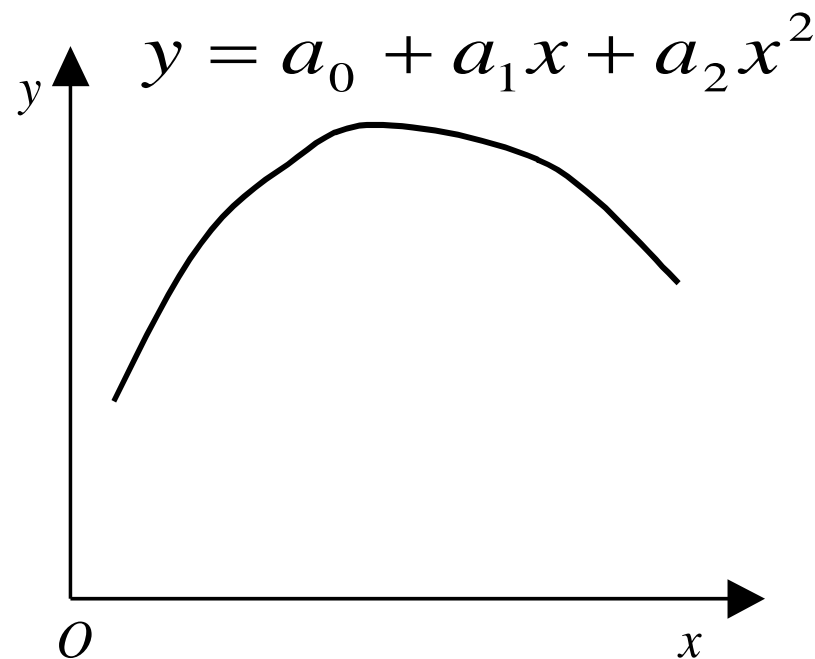
► 几种常见的数据拟合情况

► 图(a)表示数据接近于直线，故宜采用线性函数拟合

► 图(b)数据分布接近于抛物线，宜采用二次多项式拟合



(a)



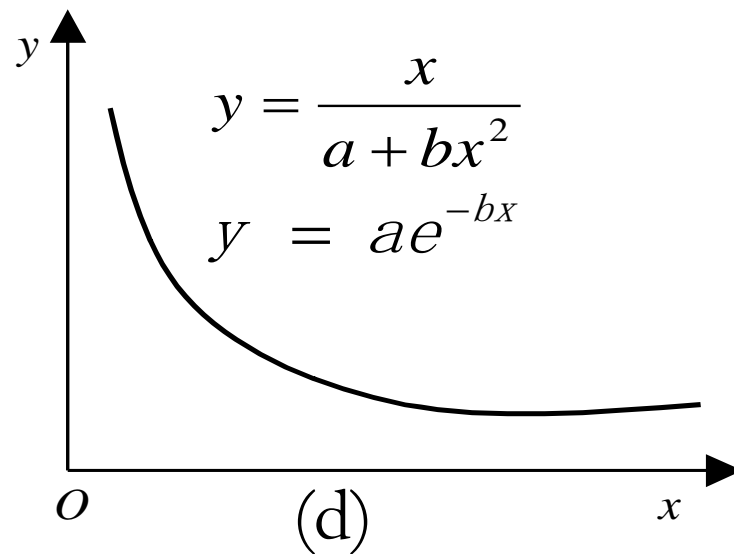
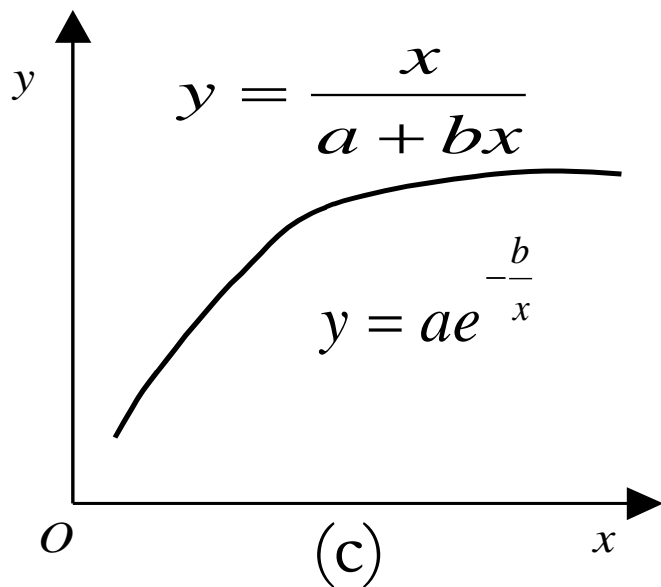
(b)

### (3)可化为线性拟合的非线性拟合



►图(c)的数据分布特点是开始曲线上升较快，随后逐渐变慢，宜采用双曲线型函数或指数型函数

►图(d)的数据分布特点是开始曲线下降快，随后变慢，宜采用不同的双曲型函数或指数型函数





### (3) 可化为线性拟合的非线性拟合

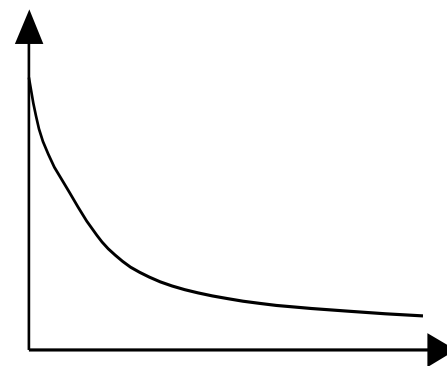
► 例. 设某实验数据如下:

| $i$   | 1   | 2   | 3   | 4   | 5   | 6   |
|-------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $x_i$ | 0   | 0.5 | 1   | 1.5 | 2   | 2.5 |
| $y_i$ | 2.0 | 1.0 | 0.9 | 0.6 | 0.4 | 0.3 |

用最小二乘法求拟合曲线

► 解: 将已给数据点描在坐标系中如下图所示, 可以看出这些点接近指数曲线, 因而可取指数函数

$y = ae^{-bx}$  作为拟合函数。





### (3) 可化为线性拟合的非线性拟合

▶ 对函数  $y = ae^{-bx}$  两边取对数得  $\ln y = \ln a - bx$

▶ 令  $a_0 = \ln a, a_1 = -b$  ,

则可得到线性模型  $\bar{y} = a_0 + a_1 x$

▶ 利用最小二乘法, 可得最小二乘拟合的法方程组为:

$$\begin{cases} 6a_0 + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i = \sum_{i=1}^6 \ln y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^6 x_i + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i^2 = \sum_{i=1}^6 x_i \ln y_i \end{cases}$$

▶ 其中

$$\sum_{i=1}^6 x_i = 7.5 \quad \sum_{i=1}^6 x_i^2 = 13.75 \quad \sum_{i=1}^6 \ln y_i = -2.043302 \quad \sum_{i=1}^6 x_i \ln y_i = -5.714112$$

### (3) 可化为线性拟合的非线性拟合



▶ 将以上数据带入法方程组，得

$$\begin{cases} 6a_0 + 7.5a_1 = -2.043302 \\ 7.5a_0 + 13.75a_1 = -5.714112 \end{cases}$$

▶ 解得  $a_0 = 0.562302$ ,  $a_1 = -0.772282$

▶ 由  $a_0 = \ln a$ , 得  $a = e^{a_0} = e^{0.562302} = 1.754708$ ,

▶ 由  $a_1 = -b$ , 得  $b = -a_1 = 0.772282$

▶ 于是，得到拟合指数函数为

$$y = 1.754708e^{-0.772282x}$$