第3章　最佳逼近和最小二乘法

3.1　问题的提出

3.2　内积空间中的最佳逼近

3.3　函数的最佳平方逼近

3.4　勒让德多项式和切比雪夫多项式

3.5　曲线(数据)拟合的最小二乘法

3.6　$C[a,b]$中最佳一致逼近

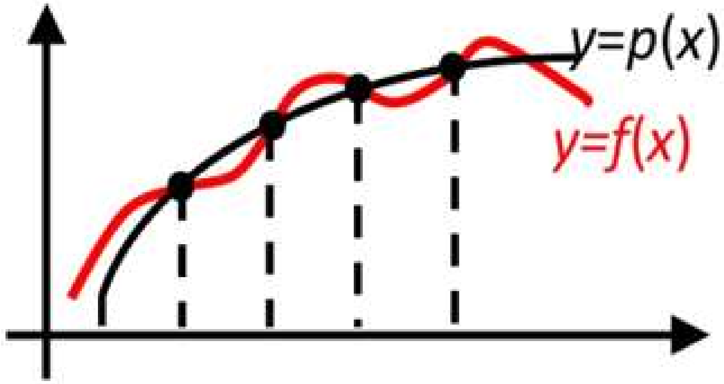
3.1 问题的提出

通过一组数据(x_j, y_j) $(j=0,1,\cdots,n)$，寻找变量x, y之间函数关系的近似表达式．由此计算不在数表中的点x^*处的函数值．

解决方案

1) 插值法（插值函数过已知点）

x	x_0	x_1	x_2	……	x_n
y	y_0	y_1	y_2	……	y_n

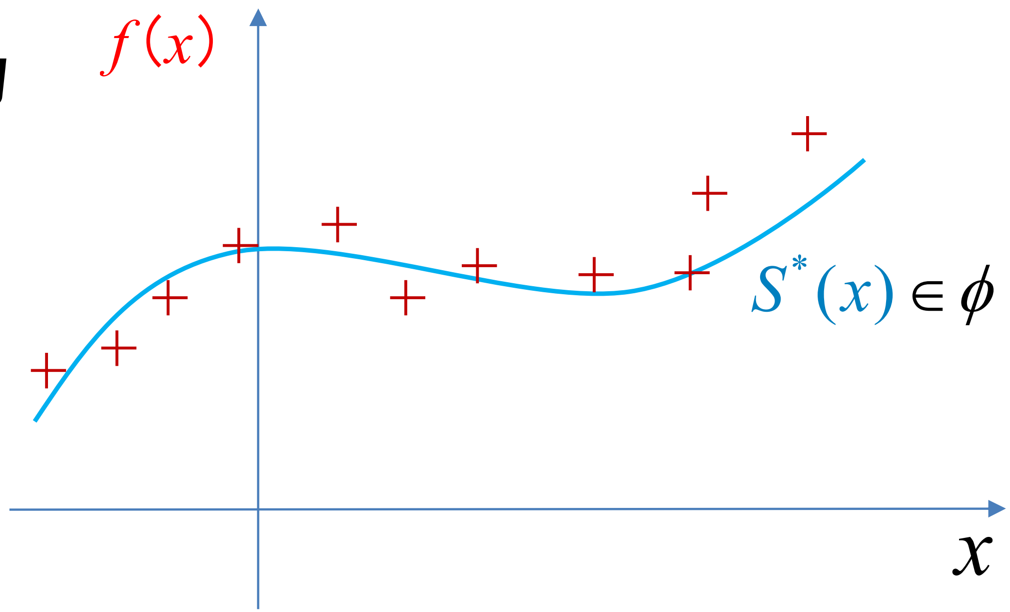


2) 最佳逼近（即整体误差最小）

对于函数 $f(x)$，要求在一个简单的函数类 ϕ 中，寻找一个函数 $S^*(x)\in\phi$，使得 $S^*(x)$ 近似 $f(x)$ 时，整体误差在某种度量下达到最小. 比如

$$f(x)\approx S^*(x) \text{ 时，要求 } \|f(x)-S^*(x)\| = \min_{s(x)\in\phi}\|f(x)-S(x)\|$$

求 $S^*(x)$ 的这类问题称为**最佳逼近问题**，$S^*(x)$ 称为 $f(x)$ 的**最佳逼近函数**.



若$f(x)$为连续变量的函数，称$S^*(x)$为函数逼近;

由$f(x)$的离散数据表求出的$S^*(x)$称为数据拟合.

注：简单函数类ϕ通常取多项式，有理函数，或分段低次多项式等.

常用的误差度量标准有

$$2-\text{范数，}\ \|f(x)-S(x)\|_2=\sqrt{\int_a^b |f(x)-s(x)|^2\,\mathrm{d}x}$$

最佳逼近称为最佳平方逼近或均方逼近;

$$\infty-\text{范数，}\ \|f(x)-S(x)\|_\infty=\max_{x\in I}|f(x)-s(x)|$$

最佳逼近称为最佳一致逼近或均匀逼近.

3.2 内积空间中的最佳逼近

一、问题描述

设 U 是内积空间，$x_1,x_2,\cdots,x_n$ 是 U 中 n 个线性

无关的元素，$M \overset{\Delta}{=} \mathrm{span}\{x_1,x_2,\cdots,x_n\} = \{\sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i, \forall \alpha_i \in k\}$.

完备线性子空间

对于 $\forall x \in U$，若存在 M 中的元素 $x^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i$

$$\text{s.t.} \quad \|x - x^*\| = \min_{y \in M}\|x - y\| \le \left\|x - \sum_{i=1}^{n}\alpha_i x_i\right\|$$

则称 x^*是 x 在 M 中的“最佳逼近”元，M 为 U 的逼近子空间。 注：这里$\|\cdot\|$是由内积诱导的范数.

定理1（正交投影定理）

设$\boldsymbol{M}$是内积空间$\boldsymbol{U}$中的完备的线性子空间，则$\forall x \in U$，x在$\boldsymbol{M}$中存在唯一的正交投影x^*，即$x^* \in M$，$x - x^* \in M^{\perp}$，

$$\text{s.t.} \quad \left\| x - x^* \right\| = \min_{y \in M} \left\| x - y \right\|$$

定理说明，内积空间中任何元素$\boldsymbol{x}$在完备的线性子空间$\boldsymbol{M}$中存在唯一的正交投影$\boldsymbol{x}^*$，而这个投影$\boldsymbol{x}^*$就是$\boldsymbol{x}$在$\boldsymbol{M}$中的最佳逼近元.

求最佳逼近元 $\Leftrightarrow$ 求正交投影

二、求最佳逼近元的方法

在内积空间U中，取n维线性子空间$M=\mathrm{span}\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$，

由投影定理可知，对于$\forall x\in U$，x在M中的最佳逼近元

$x^*=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i\in M$，$x-x^*\in M^{\perp}$. 即

$$(x-x^*,x^*)=0 \Leftrightarrow (x-x^*,x_j)=0 \quad (j=1,2,\cdots,n)$$

等价于求组合系数α_i^* $\Leftrightarrow (x-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i,x_j)=0 \quad (j=1,2,\cdots,n)$

$$\Leftrightarrow (x,x_j)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^*(x_i,x_j)=0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n}(x_i,x_j)\cdot\alpha_i^*=(x,x_j) \quad (j=1,2,\cdots,n)$$

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i,x_j)\cdot\alpha_i^* = (x,x_j) \quad (j=1,2,\cdots,n)$$

写成矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} (x_1,x_1) & (x_2,x_1) & \cdots & (x_n,x_1) \\ (x_1,x_2) & (x_2,x_2) & \cdots & (x_n,x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_1,x_n) & (x_2,x_n) & \cdots & (x_n,x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x,x_1) \\ (x,x_2) \\ \vdots \\ (x,x_n) \end{bmatrix}$$

法方程

（或正规方程）

记作 $A\alpha^* = b$

$x_1,x_2,\cdots,x_n$ 线性无关

$A=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 可逆 $\Rightarrow$ 存在唯一解 $\alpha^* = A^{-1}b$,

最佳逼近元 $x^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i^* x_i$

$$\begin{bmatrix} (x_1,x_1) & (x_2,x_1) & \cdots & (x_n,x_1) \\ (x_1,x_2) & (x_2,x_2) & \cdots & (x_n,x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_1,x_n) & (x_2,x_n) & \cdots & (x_n,x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x,x_1) \\ (x,x_2) \\ \vdots \\ (x,x_n) \end{bmatrix}$$

特别的

① 如果$x_1,x_2,\cdots,x_n$正交 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{A}$是对角矩阵， $\alpha_i^* = \dfrac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)}{(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_i)}$；

② 如果$x_1,x_2,\cdots,x_n$规范正交 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{A}$是单位矩阵， $\alpha_i^* = (\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i)$

最佳逼近元 $x^* = \sum_{i=1}^{n} (x,x_i)\, x_i$（广义 Fourier 展开的部分和）

综上：

（1）求最佳逼近问题$\Leftrightarrow$解线性方程组$A\alpha=b$。

（2）矩阵A和b取决于内积空间中内积的定义，以及线性子空间（即基）的选取。

（3）若$x_1,x_2,\cdots,x_n$线性无关，解得$\alpha=A^{-1}b$。但解此方程组通常计算量很大，且会使$Ax=b$为病态的（即自变量有很小的扰动时，其解的变化具大）。

（4）若$x_1,x_2,\cdots,x_n$规范正交，解得$\alpha=b$。此方法计算简单，但要先将线性无关组规范正交化，有时计算量也会很大。

注：通常选出正交基即可

三、最佳逼近的误差估计

当$x \approx x^*$时，误差$\delta = x - x^*$.

绝对误差$\|\delta\|$的大小可表示逼近的程度.

$\|\delta\|$的计算取决于该内积空间中范数(即内积)的定义.

根据商高定理，

$$\because\ x = x^* + (x - x^*), x^* \in M,\ \ x - x^* \in M^{\perp},$$

$$\therefore\ \|x\|^2 = \|x^*\|^2 + \left\|x - x^*\right\|^2$$

误差的平方

$$\|\delta\|^2 = \|x - x^*\|^2 = \|x\|^2 - \|x^*\|^2$$

或

$$\|\delta\|^2 = \|x - x^*\|^2 = (x - x^*, x - x^*)$$

$$= (x - x^*, x) - (x - x^*, x^*)$$

$$= (x - x^*, x)$$

$$= (x, x) - (x^*, x)$$

$$= (x, x) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* (x_i, x)$$

均方误差

$$\|\delta\| = \sqrt{\|x\|^2 - \|x^*\|^2}$$

或

$$\|\delta\| = \sqrt{(x, x) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^* (x_i, x)}$$

>>函数构成的空间中度量“最佳”的常用标准：

（1）2--范数：$\|f(x)-s(x)\|_2 \triangleq \|\delta\|_2 = \left(\int_a^b [\delta(x)]^2 dx\right)^{\frac{1}{2}} = \min$，

称为最佳平方逼近或均方逼近；

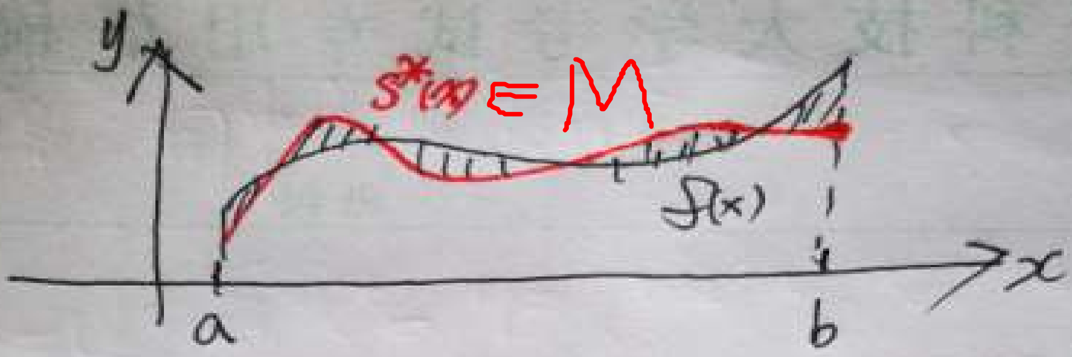
(2) ∞— 范数：$\|f(x)-s(x)\|_\infty = \|\delta\|_\infty = \max_{x\in[a,b]} |\delta(x)| = \min$，

称为最佳一致逼近或均匀逼近.

>>n 维向量空间 R^n 中度量“最佳”的常用标准：

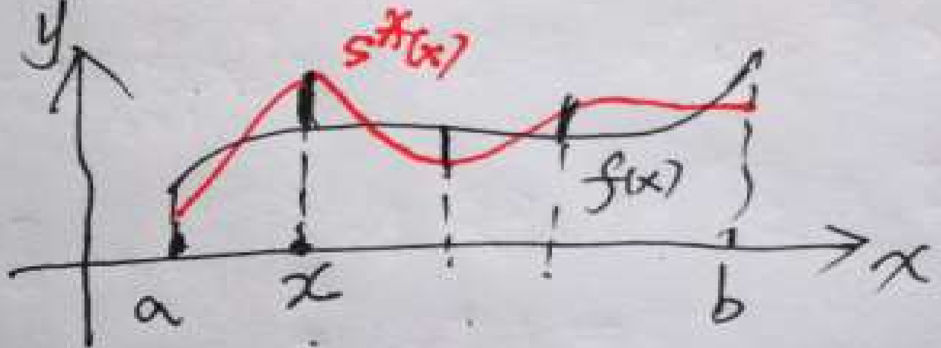
取 2-范数，当 $\|x-x^*\|_2 \triangleq \|\delta\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left[x_i - x_i^*\right]^2} = \min$

称为最小二乘拟合.



最佳平方逼近：$\|f(x)-S^*(x)\|_2=\min$

即面积的均方最小。



最佳一致逼近：$\|f(x)-S^*(x)\|_\infty=\min$

即绝对值的最大值最小。

$$\max_{x\in[a,b]}|f(x)-S^*(x)|$$

3.3 函数的最佳平方逼近

定义（权函数）设函数 $p(x)$满足：

（1） $p(x) \geq 0,\ x \in [a,b];$

(2) $\int_a^b x^j p(x)\mathrm{d}x < \infty (j = 0,1,2,\cdots);$

(3) 对于任意的非负连续函数$h(x)$，若

$$\int_a^b h(x)p(x)\mathrm{d}x = 0 \Rightarrow h(x) = 0$$

称$p(x)$为区间$[a,b]$上的一个权函数.

通常：在实值连续函数空间 $C[a,b]$ 中定义带权内积

$$(f,g) = \int_a^b p(x)f(x)g(x)\mathrm{d}x，\quad 故 \|f\|_2 = \left(\int_a^b p(x)f^2(x)\mathrm{d}x\right)^{\frac{1}{2}}$$

定义1　对于$\forall f(x)\in C[a,b]$，在选取的逼近子空间

$$M=\text{span}\{\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}\text{中，求}S^*(x)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^*\varphi_i(x)\in M,$$

$$\text{s. t.}\quad \left\|f(x)-S^*(x)\right\|_2=\min_{S(x)\in M}\left\|f(x)-S(x)\right\|_2$$

$$\text{即}\int_a^b p(x)[f(x)-S^*(x)]^2dx=\min_{S(x)\in M}\int_a^b p(x)[f(x)-S(x)]^2dx$$

其中$S(x)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\varphi_i(x)\in M$，称$S^*(x)$为$f(x)$在$M$中带权函数$p(x)$的最佳平方逼近.

特别地：若线性子空间$M=\text{span}\left\{1,x,x^2,\cdots,x^n\right\}$，

则称$s^*(x)$为$f(x)$在M中的n次最佳平方逼近多项式.

最佳逼近元 $S^*(x)$ 的解法

由投影定理知$S^*(x)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^*\varphi_i(x)$存在且唯一，系数$\alpha_i^*$满足法方程

解法方程
$$\begin{bmatrix} (\varphi_1,\varphi_1) & (\varphi_2,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_1) \\ (\varphi_1,\varphi_2) & (\varphi_2,\varphi_2) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_1,\varphi_n) & (\varphi_2,\varphi_n) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \\ \vdots \\ \alpha_n^* \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} (f,\varphi_1) \\ (f,\varphi_2) \\ \vdots \\ (f,\varphi_n) \end{bmatrix}$$

其中$(\varphi_i,\varphi_j)=\int_a^b p(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)dx$, $(f,\varphi_j)=\int_a^b p(x)f(x)\varphi_j(x)dx$

故$S^*(x)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^*\varphi_i(x)$为所要求的最佳逼近元。

均方误差 $\|\delta\|_2=\|f-s^*\|_2=\sqrt{(f,f)-\sum_{i=0}^{n}a_i^*(f,\varphi_i)}$

例1 求区间$[-1, 1]$上函数$f(x)=|x|$在$M=\text{span}\{1, x^2, x^4\}$中的最佳平方逼近多项式及均方误差。

解 记$\varphi_0=1,\ \varphi_1=x^2,\ \varphi_2=x^4$， $p(x)=1$

计算得 $(\varphi_0,\varphi_0)=2,\quad (\varphi_0,\varphi_1)=2/3,\quad (\varphi_0,\varphi_2)=2/5$，

$(\varphi_1,\varphi_1)=2/5,\quad (\varphi_1,\varphi_2)=2/7,\quad (\varphi_2,\varphi_2)=2/9,$

$(f,\varphi_0)=1,\quad (f,\varphi_1)=1/2,\quad (f,\varphi_2)=1/3.$

故法方程为$\begin{bmatrix} 2 & 2/3 & 2/5 \\ 2/3 & 2/5 & 2/7 \\ 2/5 & 2/7 & 2/9 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1/3 \end{bmatrix}$

解得

$$\alpha_0^* = \frac{15}{128} \approx 0.1171875,\quad \alpha_1^* = \frac{105}{64} \approx 1.640625,\quad \alpha_2^* = -\frac{105}{128} \approx -0.8203125$$

$\therefore \quad f(x) = |x|$在$M$中的最佳平方逼近多项式为

$$s^*(x) = 0.1171875 + 1.640625x^2 - 0.8203125x^4$$

误差 $\|\delta\|_2 = \sqrt{(f,f) - \sum_{i=0}^{2} a_i^*(f,\varphi_i)} \approx 0.05119$。

例 2 求[0,1]上函数$f(x)=e^x$的一次最佳平方逼近多项式.

分析： 内积$(x,y)=\int_a^b x(t)y(t)\mathrm{d}t$，用2-范数度量

一次多项式，取$M=\mathrm{span}\{1,x\}$.

解 方法一：

记$\varphi_0=1,\ \varphi_1=x,$ 则 $(\varphi_i,\varphi_j)=\int_0^1 x^i x^j dx=\dfrac{1}{i+j+1}\ (i,j=0,1),$

$$(f,\varphi_0)=\int_0^1 e^x dx=e-1,\quad (f,\varphi_1)=\int_0^1 xe^x dx=1,$$

故法方程为$\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_0\\ \alpha_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}e-1\\ 1\end{bmatrix}\Rightarrow S^*(x)=0.8731+1.6903x$

问题：若求函数$f(x)=e^x$在$[0,1]$上的n次最佳平方逼近多项式，

且取逼近空间为 $M=\mathrm{span}\{1,x,x^2,\cdots,x^n\}$，

则，法方程的系数矩阵为

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

----- **Hilbert**矩阵

当n较大时其条件数很大，

用数值方法求解 $Hx=b$ 是不稳定的，病态方程组

通常，选取子空间$M=\operatorname{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)\}$中的基

$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$是正交的，则法方程稳定、易求解.

正交函数系： 若函数序列$\{\varphi_i(x),x\in[a,b]\}_{i=0}^{\infty}$满足

$$\left(\varphi_j,\varphi_k\right)=\int_a^b\rho(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x)dx=\begin{cases}0, & j\neq k\\ A_k\neq 0, & j=k\end{cases}\quad (j,k=0,1,2,\cdots)$$

则称其为在$[a,b]$上带权$\rho(x)$的正交系.

例如，$1,\cos x,\sin x,\cos 2x,\sin 2x,\cdots,\cos kx,\sin kx,\cdots$

是定义在$[-\pi,\pi]$上权$\rho(x)=1$的正交函数系.

若$\varphi_i(x)$是多项式，则$\{\varphi_i(x),x\in[a,b]\}_{i=0}^{n}$为一组正交多项式.

格莱姆-斯密特规范正交化原理（Gram—Schmidt）

设$\{x_1,x_2,\cdots,x_n,\cdots\}$是内积空间 $\boldsymbol{U}$ 中的任一线性无关元素组，则通过 **Schmidt** 正交化方法可以构造一组规范正交系.

构造方法如下：

$$y_1 = x_1 \ \Rightarrow \ e_1 = \frac{y_1}{\|y_1\|}$$

$$y_2 = x_2 - (x_2, e_1)e_1 \ \Rightarrow \ e_2 = \frac{y_2}{\|y_2\|}$$

$$y_3 = x_3 - (x_3, e_1)e_1 - (x_3, e_2)e_2 \Rightarrow \ e_3 = \frac{y_3}{\|y_3\|}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$y_n = x_n - \sum_{i=1}^{n-1}(x_n, e_i)e_i \Rightarrow \ e_n = \frac{y_n}{\|y_n\|}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

由此得到$\{e_1, e_2, \cdots, e_n, \cdots\}$为 $\boldsymbol{U}$ 中的一个规范正交系.

例如：将 $x_1 = 1$, $x_2 = x$ 按内积$(x, y) = \int_0^1 x(t)y(t)\mathrm{d}t$ 规范正交化

$$y_1 = 1 \Rightarrow \ e_1 = \frac{y_1}{\|y_1\|} = \frac{1}{\sqrt{\int_0^1 1\mathrm{d}t}} = 1$$

$$y_2 = x - (x, 1)\cdot 1 = x - \frac{1}{2} \ \Rightarrow e_1 = \frac{y_2}{\|y_2\|} = \sqrt{3}(2x-1).$$

例 2 求[0,1]上函数$f(x)=e^x$的一次最佳平方逼近多项式。

解 方法二： 将$\{\varphi_1,\varphi_2\}=\{1,x\}$规范正交化

得$\{e_1,e_2\}=\left\{1,\sqrt{3}(2x-1)\right\}$

则法方程为$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(f,e_1)\\ (f,e_2)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}e-1\\ \sqrt{3}(3-e)\end{bmatrix}$

$$\Rightarrow S^*(x)=\alpha_1 e_1+\alpha_2 e_2=(e-1)e_1+\sqrt{3}(3-e)e_2$$

$$=0.8731+1.6903x$$

练习 将 $x_0=1,\ x_1=t,\cdots,\ x_n=t^n,\cdots$

按内积$(x,y)=\int_{-1}^{1}x(t)y(t)\mathrm{d}t$ 规范正交化，写出前三项.

解 $$e_0=\frac{x_0}{\|x_0\|}=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$y_1=x_1-(x_1,e_0)e_0=t\Rightarrow e_1=\frac{y_1}{\|y_1\|}=\sqrt{\frac{3}{2}}t$$

依次求出

$$e_2=\sqrt{\frac{5}{2}}\cdot\frac{1}{2}(3t^2-1),\quad\cdots,\quad e_n=\sqrt{\frac{2n+1}{2}}\cdot P_n(t)\quad(n=1,2,\cdots)$$

其中 $P_n(t)=\frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n}[(t^2-1)^n]$ 称为 $\boldsymbol{n}$ 阶的 Legendre 多项式,

而$\{e_n(t)\}$是 C[-1, 1]中的规范正交系.

Legendre 多项式$\{P_n(t)\}$的前六项为

$$P_0(t) = 1$$

$$P_1(t) = t$$

$$P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2 - 1)$$

$$P_3(t) = \frac{1}{2}(5t^3 - 3t)$$

$$P_4(t) = \frac{1}{8}(35t^4 - 30t^2 + 3)$$

$$P_5(t) = \frac{1}{8}(63t^5 - 70t^3 + 15t)$$