

第五讲 函数逼近与计算

一、函数逼近的基本概念

拟合与逼近

- 用简单函数近似代替较复杂函数的函数的问题.
 - 插值就是近似代替的方法之一, 插值的近似标准是在插值点处误差为零.
 - 在实际应用中, 有时不要求具体某些点误差为零, 而要求考虑整体的误差限制, 这就引出了拟合和逼近的概念.

什么是函数逼近

- 对函数类 A 中给定的函数 $f(x)$, 记作 $f(x) \in A$, 要求在另一类简单的便于计算的函数类 B 中求函数 $p(x) \in B$, 使 $p(x)$ 与 $f(x)$ 的误差在某种意义下最小.
 - 函数类 A 通常是区间 $[a, b]$ 上的连续函数, 记作 $C[a, b]$, 称为函数逼近空间;
 - 而函数 B 通常为 n 次多项式, 有理函数或分段低次多项式等.

常用的度量标准:

一致(均匀)逼近:

$$\|f(x) - p(x)\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - p(x)| \quad (1.2)$$

均方(平方)逼近:

$$\|f(x) - p(x)\|_2 = \sqrt{\int_a^b [f(x) - p(x)]^2 dx} \quad (1.3)$$

我们主要讨论在这些度量标准下,用代数多项式 $p(x)$ 逼近 $f(x) \in C[a, b]$.

数学上常把在各种集合中引入某一些不同的确定关系称为集合以某种空间结构赋予，并将这样的集合称为空间。

例1、按向量的加法和数乘构成实数域 R 上的线性空间--- R^n

例2、对次数不超过 n 的实系数多项式，按加法和数乘构成数域上的多项式线性空间---- H_n

例3、所有定义在 $[a,b]$ 集合上的连续函数全体，按函数的加法和数乘构成连续函数空间---- $C[a,b]$

函数逼近的基本概念

1) 线性无关

设集合 S 是数域 P 上的线性空间,元素 $x_1, x_2, \dots, x_n \in S$,如果存在不全为零的数 $a_1, a_2, \dots, a_n \in P$,使得

$$a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n = 0,$$

则称 x_1, x_2, \dots, x_n 线性相关.

定义 8 若 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$, 在 $[a, b]$ 上连续, 如果 $a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) + \dots + a_{n-1} \varphi_{n-1}(x) = 0$ 当且仅当 $a_0 = a_1 = \dots = a_{n-1} = 0$ 时才成立, 则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$, 在 $[a, b]$ 上是**线性无关的**。

例如 $1, x, \dots, x^n, \dots$ 就是在 $[a, b]$ 上线性无关的.

若 $\varphi_0(x), \dots, \varphi_{n-1}(x)$ 是 $C[a, b]$ 中的线性无关函数, 且 a_0, a_1, \dots, a_{n-1} 是任意实数, 则

$$\Phi = \{a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_{n-1}\varphi_{n-1}(x) \mid \forall a_0, a_1, \dots, a_{n-1}\}$$

是 $C[a, b]$ 中的一个子集, 记作

$$\Phi = \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}\}$$

例如, 一切不超过 n 次的多项式全体构成的集合

记为:
$$H_n = \text{span}\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$$

2)范数的定义

设 S 为线性空间, $x \in S$,若存在唯一实数 $\|\cdot\|$ 满足条件:

(1) $\|x\| \geq 0$; 当且仅当 $x=0$ 时, $\|x\|=0$; (正定性)

(2) $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \alpha \in \mathbf{R}$; (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 .

1.3 连续函数空间 $C[a, b]$

区间 $[a, b]$ 上的所有实连续函数组成一个空间, 记作 $C[a, b]$, $f \in C[a, b]$ 的范数 $\|f\|$ 满足三个性质:

1) $\|f\| \geq 0 \Leftrightarrow f = 0$ 时 $\|f\| = 0$; (非负性)

2) $\|\alpha f\| = |\alpha| \|f\|$ 对任意 $f \in C[a, b]$ 成立, $\alpha \in R$
(齐次性)

3) 对任意 $f, g \in C[a, b]$, 有

$$\|f + g\| \leq \|f\| + \|g\| \quad (\text{三角不等式})$$

3)几种常用范数

在 \mathbb{R}^n 上的向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, 三种常用范数为称为:

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|,$$

称为 ∞ -范数或最大范数

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|,$$

称为 1-范数

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

称为 2-范数

类似的对连续函数空间 $C[a, b]$, 若 $f \in C[a, b]$
可定义以下三种常用函数的范数

$$\|f\|_{\infty} = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|,$$

称为 ∞ -范数

$$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx,$$

称为1-范数

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

称为2-范数

柯西—施瓦茨不等式

设 X 为一个内积空间,对 $\forall u, v \in X$ 有

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

称为柯西—施瓦茨不等式.

- 魏尔斯特拉斯定理

设 $f(x) \in C[a, b]$, 则对任何 $\varepsilon > 0$, 总存在一个代数多项式 $p(x)$, 使

$$\|f(x) - p(x)\|_{\infty} < \varepsilon$$

在 $[a, b]$ 上一致成立。

- **定理**: 设 X 为一个内积空间, $u_1, u_2, \dots, u_n \in X$, 矩阵

$$G = \begin{pmatrix} (u_1, u_1) & (u_2, u_1) & \cdots & (u_n, u_1) \\ (u_1, u_2) & (u_2, u_2) & \cdots & (u_n, u_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (u_1, u_n) & (u_2, u_n) & \cdots & (u_n, u_n) \end{pmatrix}$$

称为格拉姆矩阵, 则 G 非奇异的充分必要条件是 u_1, u_2, \dots, u_n **线性无关**。

函数的内积

记区间 $[a, b]$ 上所有连续函数的全体为 $C[a, b]$,
可以证明 $C[a, b]$ 是一个线性空间, 把所有次数不超过 n 的多项式全体记为 P_n , 则 P_n 是 $C[a, b]$ 的子空间.

若 $f(x), g(x) \in C[a, b]$,

则称 $\int_a^b f(x)g(x)dx$ 为 $f(x)$ 与 $g(x)$ 的**内积**, 记为 (f, g) ,

满足

$$(1) (f, g) = (g, f)$$

$$(2) (cf, g) = c(f, g);$$

$$(3) (f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g);$$

若 $(f, g) = 0$, 称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 正交, 记为 $f \perp g$.

利用内积可以定义函数的平方模

$$\|f\|_2 = \sqrt{(f, f)} = \sqrt{\int_a^b f^2(x) dx}$$

函数的平方模满足

$$(1) \|f\|_2 \geq 0, \text{ 而且 } \|f\|_2 = 0 \Leftrightarrow f(x) = 0;$$

$$(2) \|cf\|_2 = |c| \|f\|_2;$$

$$(3) \|f+g\|_2 \leq \|f\|_2 + \|g\|_2$$

$$(4) |(f, g)| \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

权函数

考虑到 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上各点的函数值比重不同,
常引进加权形式的定义

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

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) dx}$$

这里函数 $\rho(x)$ 是非负连续函数, 称为 $[a, b]$ 上的**权函数**.

它的物理意义可以解释为**密度函数**.

定义2 区间 (a,b) 上的非负函数 $\rho(x)$ 为权函数是指满足下列条件:

1) $\int_a^b |x|^n \rho(x) dx, (n = 0, 1, \dots)$ 存在;

2) 对非负的连续函数 $g(x)$, 若

$\int_a^b g(x) \rho(x) dx = 0$ 则在 (a,b) 上 $g(x) \equiv 0$.

权函数 $\rho(x)$ 在物理上往往表示密度函数, 相应的 $\int_a^b \rho(x) dx$ 表示总质量. $\rho(x)$ 等于常数表示质量分布均匀.

二、正交多项式

1) 正交的定义

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

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx = 0, \quad (1)$$

则称 $f(x)$ 与 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上带权**正交**.

若函数族 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x), \dots$ 满足关系

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

则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交函数族；

若 $A_k \equiv 1$, 则称之为标准正交函数族。

设 $\varphi_n(x)$ 是 $[a, b]$ 上最高次项系数 $a_n \neq 0$ 的 n 次多项式, $\rho(x)$ 为 $[a, b]$ 上的权函数, 如果多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 满足关系式(2), 则称多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 为在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交, 称 $\varphi_n(x)$ 为 $[a, b]$ 上带权的 **n 次正交多项式**.

例如、三角函数系：1, $\cos x$, $\sin x$, $\cos 2x$, $\sin 2x$, ... 是区间 $[-\pi, \pi]$ 上的正交函数系，因为

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \sin jx dx = 0, \quad (j \neq k)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cos jx dx = 0, \quad (j \neq k)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \cos jx dx = 0,$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin kx = \int_{-\pi}^{\pi} \cos kx = 0,$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin^2 kx = \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 kx = \pi > 0,$$

实际上，这就是付里叶(Fourier)逼近的基函数.

定理 设 $g_n(x)$ 是在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的首项系数为 **1** 的 n 次正交多项式 ($n \geq 1$)，则 $g_n(x)$ 的 n 个根都是单实根，并且分布在开区间 (a,b) 上。

证明 设 α 为 $g_n(x)$ 的任一根，首先证明它是单根。当 $n=1$ 时这是显然的。当 $n \geq 2$ 时，若 α 是重实根或复数根，则有

$$g_n(x) = (x - \alpha)(x - \bar{\alpha})p_{n-2}(x)$$

其中 $\bar{\alpha}$ 是 α 的共轭复数， $p_{n-2}(x)$ 是次数不超过 $n-2$ 的非零多项式。从而有

$$\begin{aligned}
 (g_n, p_{n-2}) &= \int_a^b \rho(x)(x-\alpha)(x-\bar{\alpha})p_{n-2}^2(x)dx \\
 &= \int_a^b \rho(x)|x-\alpha|^2 p_{n-2}^2(x)dx = (\varphi, \varphi) > 0
 \end{aligned}$$

其中 $\varphi(x) = |x-\alpha| p_{n-2}(x)$ ，这与正交性 (g_n, p_{n-2}) 相矛盾。

然后证明 $\alpha \in (a, b)$ 。因为 $g_n(x)$ 可以写成

$$g_n(x) = (x - \alpha)p_{n-1}(x)$$

其中 $p_{n-1}(x)$ 是次数不超过 $n-1$ 的非零多项式，所以由正交性得知

$$(g_n, p_{n-1}) = \int_a^b \rho(x)(x - \alpha)p_{n-1}^2(x)dx = 0$$

这表明线性函数 $x - \alpha$ 在区间 $[a, b]$ 上变号，从而 $\alpha \in (a, b)$ 。

2) 如何构造正交多项式

- 只要给定区间 $[a, b]$ 及权函数, 均可由一组线性无关的幂函数 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$, 利用逐个正交化手法构造出正交多项式序列

$$\phi_0(x) = 1, \dots, \phi_n(x) = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(x^n, \phi_j(x))}{(\phi_j(x), \phi_j(x))} \phi_j(x) \quad (n = 1, 2, \dots).$$

如此得到的正交多项式有如下性质:

- (1) $\phi_n(x)$ 是具有最高次项系数为1的n次多项式
- (2) 任何n次多项式 $P_n(x) \in H_n$ 均可表示为

$$\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_n(x)$$

的线性组合

(3) 当 $k \neq j$ 时, 与任一次数小于 k 的多项式正交.

$$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x) \\ (\varphi_j(x), \varphi_k(x)) = 0$$

(4) 成立递推关系

$$\phi_{n+1}(x) = (x - \alpha_n)\phi_n(x) - \beta_n\phi_{n-1}(x) \quad (n = 0, 1, \dots)$$

$$\text{其中 } \varphi_0(x) = 1, \quad \varphi_{-1}(x) = 0,$$

$$\alpha_n = (x\varphi_n(x), \varphi_n(x)) / (\varphi_n(x), \varphi_n(x)),$$

$$\beta_n = (\varphi_n(x), \varphi_{n-1}(x)) / (\varphi_{n-1}(x), \varphi_{n-1}(x)) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

$$\text{并且 } (x\varphi_n(x), \varphi_n(x)) = \int_a^b x\varphi_n^2(x)\rho(x)dx.$$

(5) 设 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 是在 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式序列, 则 $\varphi_n(x)$ ($n \geq 1$) 的 n 个根都是在区间 (a, b) 内的单重实根.

例题：利用Gram-schmidt 方法构造 $[0,1]$ 上带权 $\rho(x) = \ln \frac{1}{x}$ 的前3个正交多项式 $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2$

解：利用正交化公式来求

$$\because \rho(x) = \ln \frac{1}{x} = -\ln x$$

$$\varphi_0(x) = 1 \quad \varphi_1(x) = x - \frac{(x, \varphi_0)}{(\varphi_0, \varphi_0)} \varphi_0$$

$$\varphi_2(x) = x^2 - \frac{(x^2, \varphi_0)}{(\varphi_0, \varphi_0)} \varphi_0 - \frac{(x^2, \varphi_1)}{(\varphi_1, \varphi_1)} \varphi_1(x)$$

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \int_0^1 \ln \frac{1}{x} dx = -\int_0^1 \ln x dx = 1$$

$$(x, \varphi_0) = -\int_0^1 x \ln x dx = \frac{1}{4}$$

$$(x^2, \varphi_0) = -\int_0^1 x^2 \ln x dx = \frac{1}{9}$$

于是 $\varphi_1(x) = x - \frac{1}{4}$

$$(\varphi_1, \varphi_1) = \int_0^1 (-\ln x) \left(x - \frac{1}{4}\right)^2 dx = -\int_0^1 (\ln x) \left(x^2 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{16}\right) dx = \frac{7}{144}$$

$$(x^2, \varphi_1) = \int_0^1 (-\ln x) x^2 \left(x - \frac{1}{4}\right) dx = \frac{5}{144}$$

于是

$$\varphi_2(x) = x^2 - \frac{1}{9} - \frac{5}{7} \left(x - \frac{1}{4}\right) = x^2 - \frac{5}{7}x + \frac{17}{252}$$

3) 几种常用的正交多项式

- 勒让德多项式

当区间 $[-1,1]$,权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 时,由 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$ 正交化得到的多项式就称为勒让德多项式,并用 $P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x), \dots$ 表示. 其简单的表达式为

$$p_0(x) = 1, \quad P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \{ (x^2 - 1)^n \} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

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

- 最高项系数为1的勒让德多项式为

$$P_n(x) \text{ 首项系数为: } \frac{1}{2^n n!} (2n)(2n-1) \cdots (n+1)$$

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

勒让德多项式的性质

(1)正交性

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

(2)奇偶性

$$p_n(-x) = (-1)^n p_n(x)$$

(3)递推关系

$$(n+1)p_{n+1}(x) = (2n+1)xp_n(x) - np_{n-1}(x), \quad n = (1, 2, \dots)$$

且有以下常用公式

$$p_0(x) = 1$$

$$p_1(x) = x$$

$$p_2(x) = (3x^2 - 1) / 2$$

$$p_3(x) = (5x^3 - 3x) / 2$$

$$p_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + x) / 8$$

$$p_5(x) = (63x^5 - 70x^3 + 15x) / 8$$

$$p_6(x) = (231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5) / 16$$

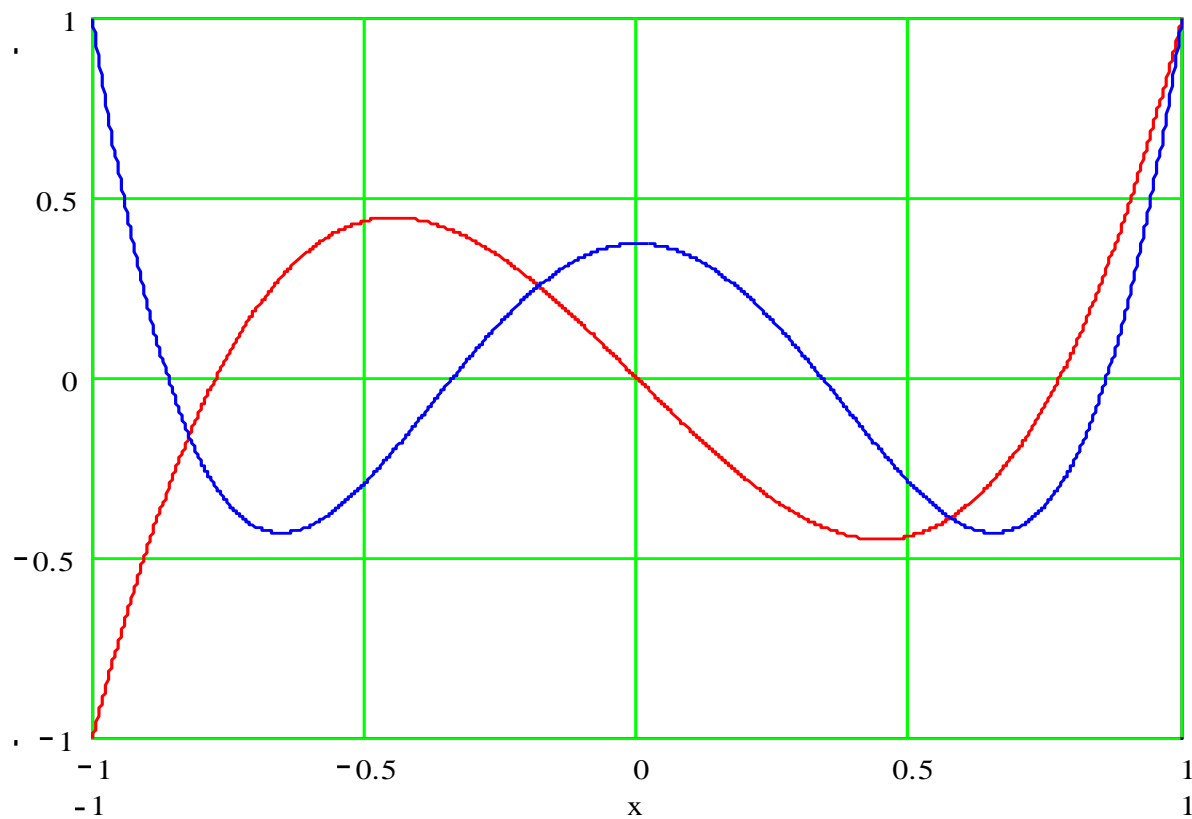
...

(4) $p_n(x)$ 在区间 $[-1,1]$ 内有n个不同的实零点。

■ $P_n(x)$ 在区间 $[-1,1]$ 上有 n 个零点

$P_3(x)$

$P_4(x)$



切比雪夫多项式

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

时,由序列 $\{1,x,\dots,x^n,\dots\}$ 正交化得到的多项式就是切比雪夫多项式,它可表示为

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

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

切比雪夫多项式的性质

(1)递推关系

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

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

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

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

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

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

...

(2) 切比雪夫多项式 $\{T_k(x)\}$ 在区间 $[-1, 1]$ 上带权

正交且 $\rho(x) = 1 / \sqrt{1 - x^2}$

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

(3) $T_{2k}(x)$ 只含 x 的偶次幂, $T_{2k+1}(x)$ 只含 x 的奇次幂.

(4) $T_n(x)$ 在区间 $[-1, 1]$ 上有 n 个零点

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

若将 x^n 用 $T_0(x), T_1(x), \dots, T_n(x)$ 的线性组合表示,则其公式为

$$x^n = 2^{1-n} \sum_{k=0}^{\left[\frac{n}{2} \right]} \binom{n}{k} T_{n-2k}(x).$$

三、最佳逼近

- 最佳一致逼近多项式：
 - 讨论 $f \in C[a, b]$, 在 $H_n = \text{span}\{1, x, \dots, x_n\}$ 中求多项式 $P_n^*(x)$, 使其误差

$$\|f - P_n^*\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x) - P_n^*(x)| = \min_{P_n \in H_n} \|f - P_n\|$$

这就是通常所指的最佳一致逼近或切比雪夫逼近问题.

• 最佳平方逼近及其算法

- 考虑在区间 $[a,b]$ 上一般的最佳平方逼近问题时对 $f(x) \in C[a,b]$ 及 $C[a,b]$ 中的一个子集 $\varphi \subset C[a,b]$

$$\varphi = \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$$

若存在 $S^*(x) \in \varphi$ 使下式成立

$$\|f(x) - S^*(x)\|_2^2 = \min_{S(x) \in \varphi} \|f(x) - S(x)\|_2^2 = \min_{S(x) \in \varphi} \int_a^b \rho(x) [f(x) - S(x)]^2 dx$$

则称 $S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在子集 $\varphi \subset C[a,b]$ 中的**最佳平方逼近函数**.

其中: $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$

称为最佳平方逼近的基函数

为了求 $S^*(x)$, 该问题等价于求多元函数

$$I(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \int_a^b \rho(x) \left[\sum_{i=0}^n a_i \varphi_i(x) - f(x) \right]^2 dx$$

的最小值. 由于 $I(a_0, a_1, \cdots, a_n)$ 是关于 a_0, a_1, \cdots, a_n 的二次函数,

利用多元函数求极值的必要条件

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 0, 1, \cdots, n),$$

即

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2 \int_a^b \rho(x) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) - f(x) \right] \varphi_k(x) dx = 0$$
$$(k = 0, 1, \dots, n),$$

于是有

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

是关于 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ 的线性方程组, 称为**法方程**,

即:

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

由于 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$

线性无关，故系数矩阵的行列式非奇异，即

$$\det G(\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n) \neq 0$$

于是方程组(1)有唯一解

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

从而有

$$S^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + \cdots + a_n^* \varphi_n(x).$$

以下证明 $S^*(x)$ 必定满足最佳平方逼近的定义
即

$$\|f(x) - S^*(x)\|_2^2 = \min_{S(x) \in \varphi} \|f(x) - S(x)\|_2^2 = \min_{S(x) \in \varphi} \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx$$

但我们只需证明 对任意的 $S(x) \in \varphi$ 有

$$\int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]^2 dx \leq \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx$$

$$D = \int_a^b \rho(x)[f(x) - S(x)]^2 dx - \int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]^2 dx$$

$$= \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)]^2 dx +$$

$$2 \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)][f(x) - S^*(x)] dx$$

$$\begin{aligned}
& \int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)]\varphi_k(x)dx \\
&= \int_a^b \rho(x)f(x)\varphi_k(x)dx - \int_a^b \rho(x)S^*(x)\varphi_k(x)dx \\
&= (f, \varphi_k(x)) - \left(\sum_{j=0}^n \alpha_j^* \varphi_j(x), \varphi_k(x)\right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

所以: $\int_a^b \rho(x)[f(x) - S^*(x)] \cdot \sum_k (a_k^* - a_k) \varphi_k(x) dx = 0$

即上式第二项积分为零。于是可得

$$D = \int_a^b \rho(x)[S(x) - S^*(x)]^2 dx \geq 0$$

即得 $S^*(x)$ 必定是所求函数的最佳平方多项式。

若取 $\varphi_k(x) = x^k, \rho(x) \equiv 1, f(x) \in C[0,1],$

则要在 H_n 中求 n 次最佳平方逼近多项式

$$S^*(x) = a_0^* + a_1^* x + \cdots + a_n^* x^n.$$

此时

$$(\varphi_j(x), \varphi_k(x)) = \int_0^1 x^{k+j} dx = \frac{1}{k+j+1}$$

$$(f(x), \varphi_k(x)) = \int_0^1 f(x) x^k dx \equiv d_k$$

即

$$(\varphi_j(x), \varphi_k(x)) = \int_0^1 x^{k+j} dx = \frac{1}{k+j+1},$$

$$(f(x), \varphi_k(x)) = \int_0^1 f(x)x^k dx \equiv d_k.$$

若用 H 表示 $G_{n \times n} = G(\varphi_j, \varphi_k)_{n \times n}$ 对应的矩阵,即

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/(n+1) \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1/(n+1) & 1/(n+2) & \cdots & 1/(2n+1) \end{pmatrix}$$

则称 H 为希尔伯特(*Hilbert*)矩阵,若记向量

$$\begin{aligned} a &= (a_0, a_1, \dots, a_n)^T \\ d &= (d_0, d_1, \dots, d_n)_T \end{aligned} \quad \text{则}$$

$Ha = d$ 的解 $a_k = a_k^* (k = 1, 2, \dots, n)$ 即为所求

最佳平方多项式 $S(x) = \sum_{k=1}^n a_k x^k$ 的系数。

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

解 根据(3.17)中 d 的定义

$$d_0 = (f, 1) = \int_0^1 \sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{2} \ln(1+\sqrt{2}) + \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 1.147$$

$$d_1 = (f, x) = \int_0^1 x\sqrt{1+x^2} dx = \frac{1}{3}(1+x^2)\frac{3}{2}\bigg|_0^1 = \frac{2\sqrt{2}-1}{3} \approx 0.609$$

解方程组

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

得到

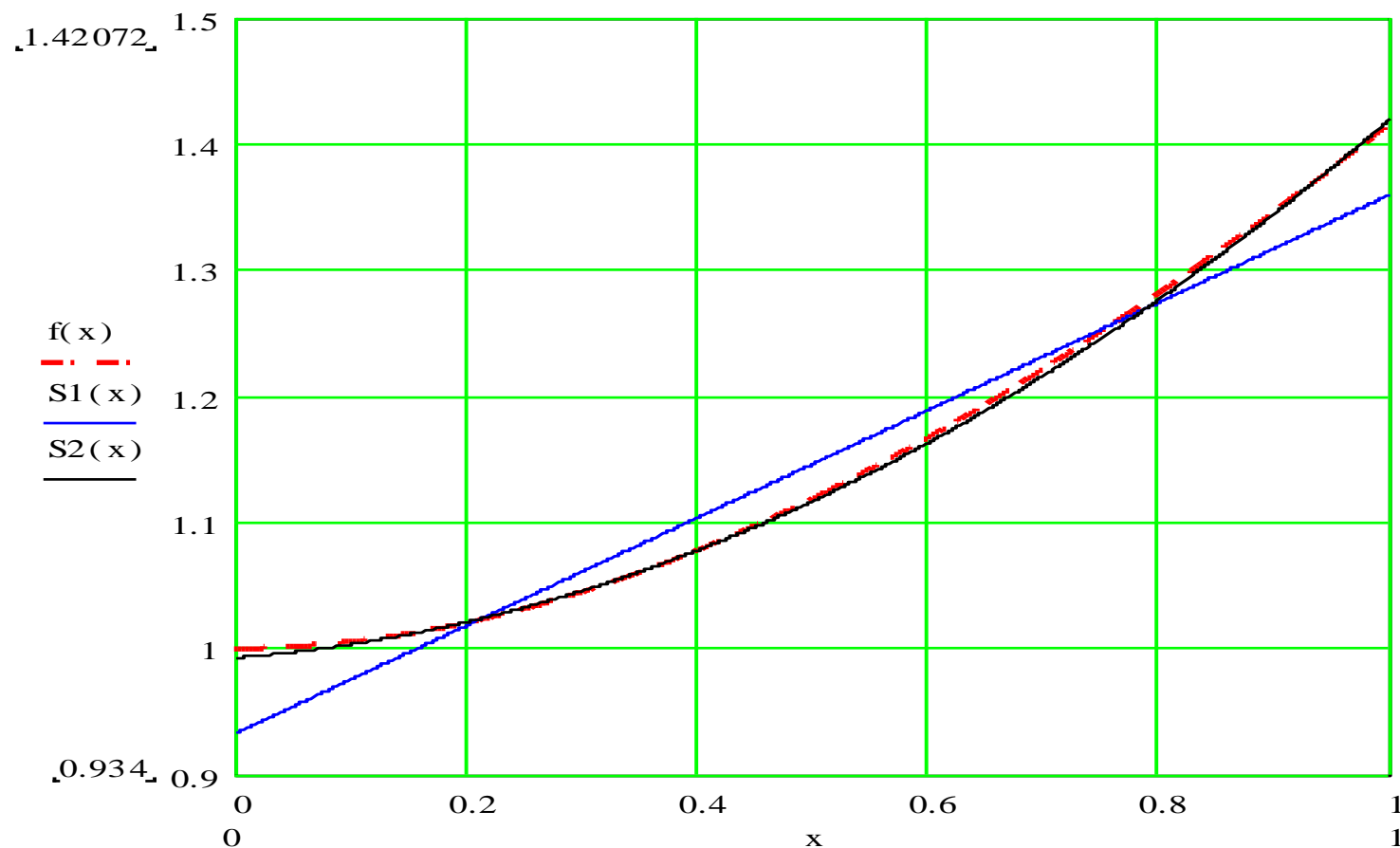
$$a_0 = 0.934, \quad a_1 = 0.426, \quad S^*(x) = 0.934 + 0.426x$$

平方误差

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

$$f(x) = \sqrt{1+x^2} \quad S_1(x) = 0.934 + 0.426x$$

$$S_2(x) = 0.994 + 0.070x + 0.357x^2 \quad (\text{二次最佳平方逼近})$$



分析:

- 若用 $\{1, x, \dots, x^n\}$ 做基求最佳平方多项式, 计算简单
- 但当 n 较大时, 系数矩阵 H 是病态的, 因此直接求解法方程是相当困难的
- 故通常是采用正交多项式做基底构造最佳平方多项式。

用正交函数族作最佳平方逼近

设 $f(x) \in C[a, b]$, $\varphi = \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)\}$,
 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)$

若函数组 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)$ 满足条件

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \int_a^b \rho(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) dx = \begin{cases} 0, & j \neq k; \\ A_k > 0, & j = k; \end{cases}$$

则 $(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = 0, i \neq j$, 而 $(\varphi_j(x), \varphi_j(x)) > 0$,
故法方程组

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

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f, \varphi_0) \\ (f, \varphi_1) \\ \vdots \\ (f, \varphi_n) \end{pmatrix}$$

为非奇异对角阵,且法方程的解为

$$a_k^* = (f(x), \varphi_k(x)) / (\varphi_k(x), \varphi_k(x)) \quad (k = 0, 1, \cdots, n) \quad (2)$$

于是 $f(x) \in C[a, b]$ 在 φ 中的最佳平方逼近函数为

$$S^*(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(f(x), \varphi_k(x))}{\|\varphi_k(x)\|_2^2} \varphi_k(x) \quad (3)$$

解决了稳定性问题,同时计算更加简便.

下面考虑函数 $f(x) \in C[-1,1]$,按勒让得多项式 $\{P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)\}$ 展开,

$$S_n^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + \cdots a_n^* p_n(x)$$

其中

$$a_k^* = \frac{(f(x), P_k(x))}{(P_k(x), P_k(x))} = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_k(x) dx.$$

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

解: $P_0(x)=1$, $P_1(x)=x$, $P_2(x)=(3x^2-1)/2$, $P_3(x)=(5x^3-3x)/2$

$$S(x)=a_0P_0(x)+a_1P_1(x)+\dots+a_3P_3(x)$$

$$\text{其中, } a_k=(f,P_k)/(P_k,P_k) \quad \because (P_k,P_k)=\int_{-1}^1 P_k(x) \cdot P_k(x)dx = \frac{2}{2k+1}$$

$$(f,P_0)=\int_{-1}^1 e^x \cdot 1dx = 2.3504 \quad (f,P_1)=\int_{-1}^1 e^x \cdot xdx = 0.7358$$

$$(f,P_2)=\int_{-1}^1 e^x \cdot \{(3x^2-1)/2\}dx = 0.1431$$

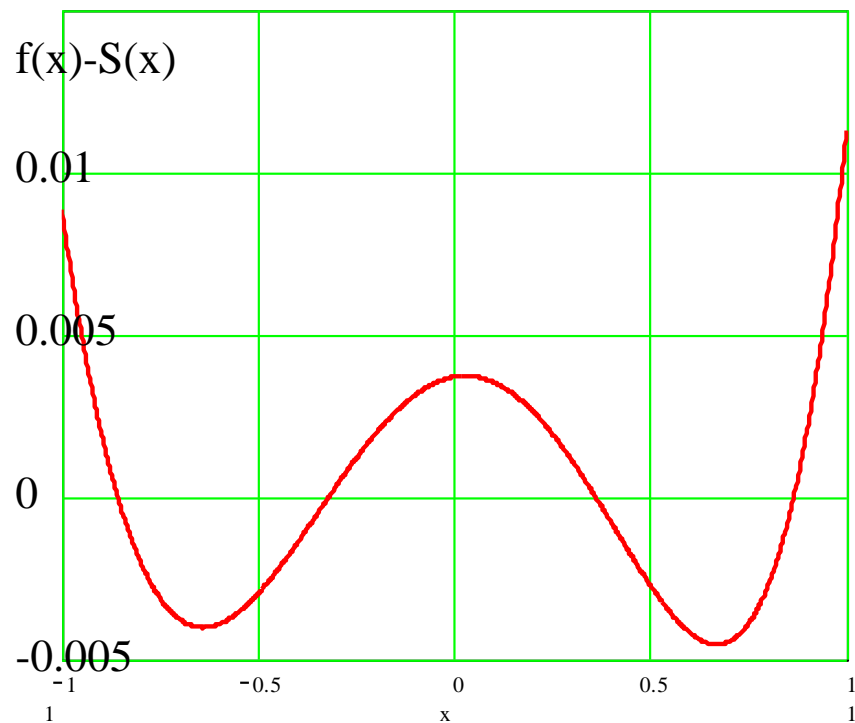
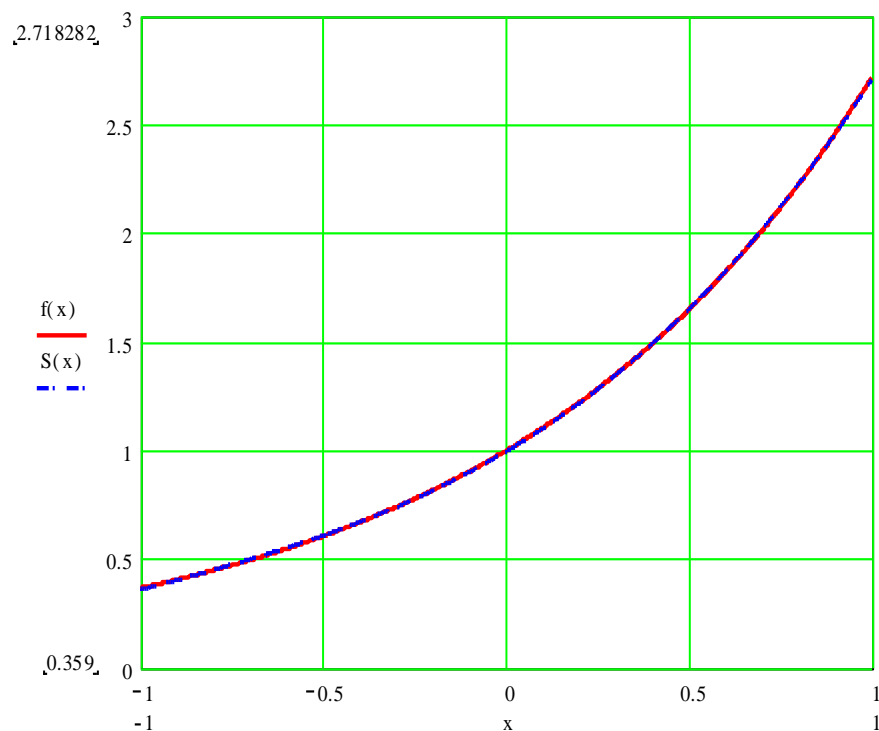
$$(f,P_3)=\int_{-1}^1 e^x \cdot \{(5x^3-3x)/2\}dx = 0.02013$$

$$\therefore a_0=1.1752, a_1=1.1036, a_2=0.3578, a_3=0.07046$$

$a_0=1.1752, a_1=1.1036, a_2=0.3578, a_3=0.07046$

代入 $S(x)$,得:

- $$S(x)=1.1752P_0(x)+1.1036P_1(x)+0.3578P_2(x)+0.07046P_3(x)$$
$$= 0.1761x^3+0.5367x^2+0.9979x+0.9963$$



区间的变化: 以上正交多项式定义在 $[-1,1]$, 可直接用于求 $[-1,1]$ 上 $f(x)$ 的最佳平方逼近.

■ 若对 $[a,b]$ 区间上的 $f(x)$, 怎样求正交逼近 $S(x)$?

Step1. 令 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$, 将 $f(x)$ 化为 t 的函数 $g(t)$

$$f(x) = f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right) = g(t), \quad x \in [a,b] \text{ 时}, \quad t \in [-1,1]$$

则 $g(t)$ 定义在 $[-1,1]$ 上.

Step2. 求 $g(t)$ 的正交最佳平方逼近 $G(t)$.

Step3. 回代, 得 $S(x) = G\left(\frac{2}{b-a}\left(x - \frac{b+a}{2}\right)\right)$

例2. 以Legendre多项式为基,求 $f(x)=e^x$ 在 $[-2,0]$ 上的三次最佳平方逼近.

• $a=-2, b=0$ 令 $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2} = t-1$, 则 $t=x+1$

$$g(t)=f(x)=f(t-1)=e^{t-1}, \quad g(t) \text{ 定义在 } [-1,1] \text{ 上}$$

仿例1, 可求得 $g(t)$ 的最佳平方逼近 $G(t)$

$$G(t)=0.06480t^3+0.1975t^2+0.3671t+0.3665$$

$$= 0.06480(x+1)^3+0.1975(x+1)^2+0.3671(x+1)+0.3665$$

$$=S(x)$$

四、数据拟合的最小二乘法

问题的提出：

- 函数的最佳平方逼近：要求函数是连续的
- 实际问题：函数只在一组离散点上给定
 - 数据的曲线拟合
 - 首先要确定所找拟合曲线的形式
 - 与所研究问题规律及所得观测数据有关；
 - 通常要从问题的运动规律及给定数据描图，确定函数的形式
 - 通过实际计算得到较好的结果
 - 这类方法就称为曲线拟合的最小二乘法

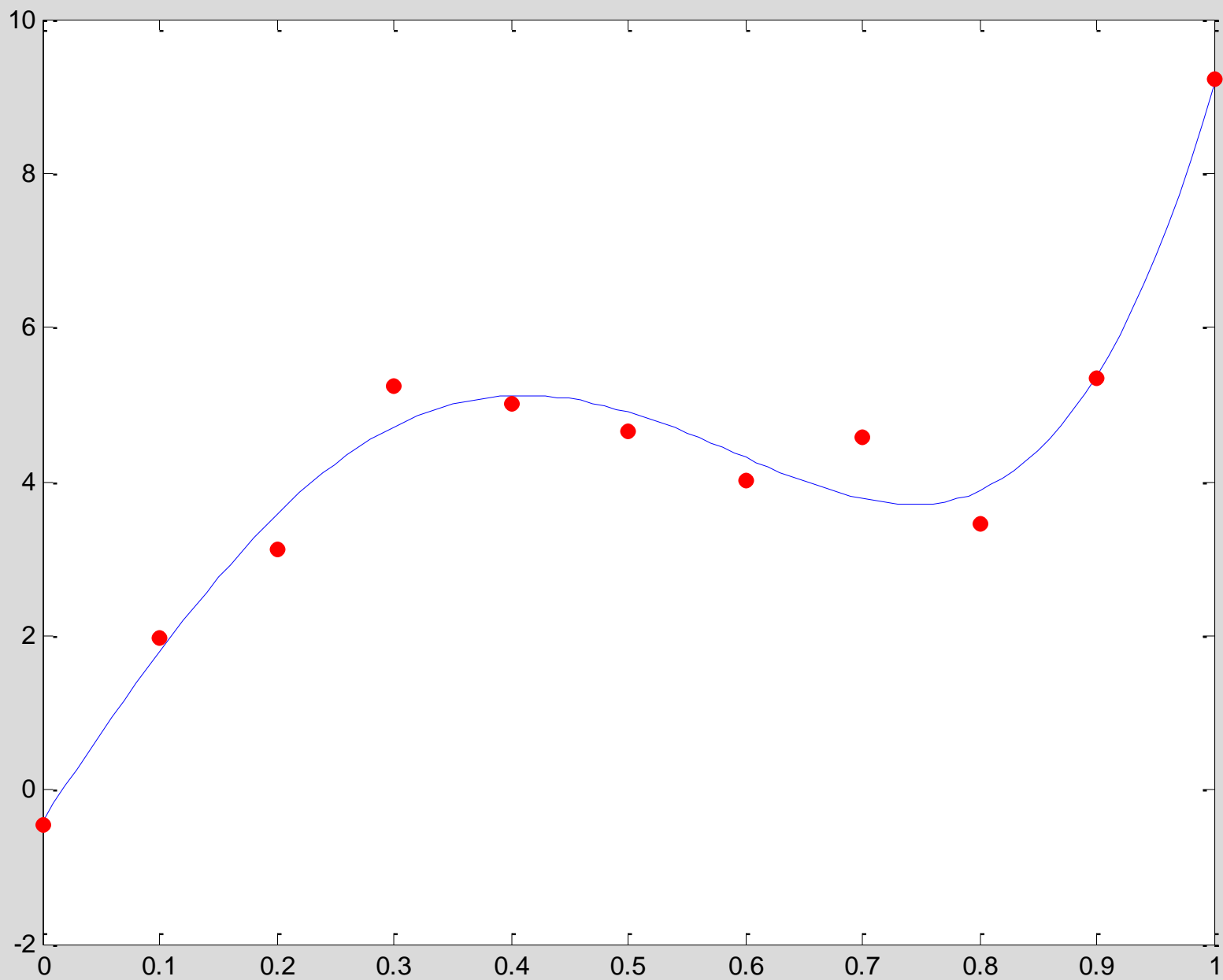
数据拟合的最小二乘法

问题的提出：在数据点上通过平方误差度量拟合的余项，并找出模型的参数使得该误差最小

利用Matlab中的库函数进行拟和的数值例子： 

用4次多项式拟和以下数据

```
x0=0:0.1:1;  
y0=[-.447,1.978,3.11,5.25,5.02,4.66,4.01,4.58,3.45,5.35,  
    9.22];  
n=4;  
p=polyfit(x0,y0,n)  
xx=0:0.01:1;  
yy=polyval(p,xx);  
plot(xx,yy, '-b',x0,y0, '.r',  
      'MarkerSize',20)
```



实验分析

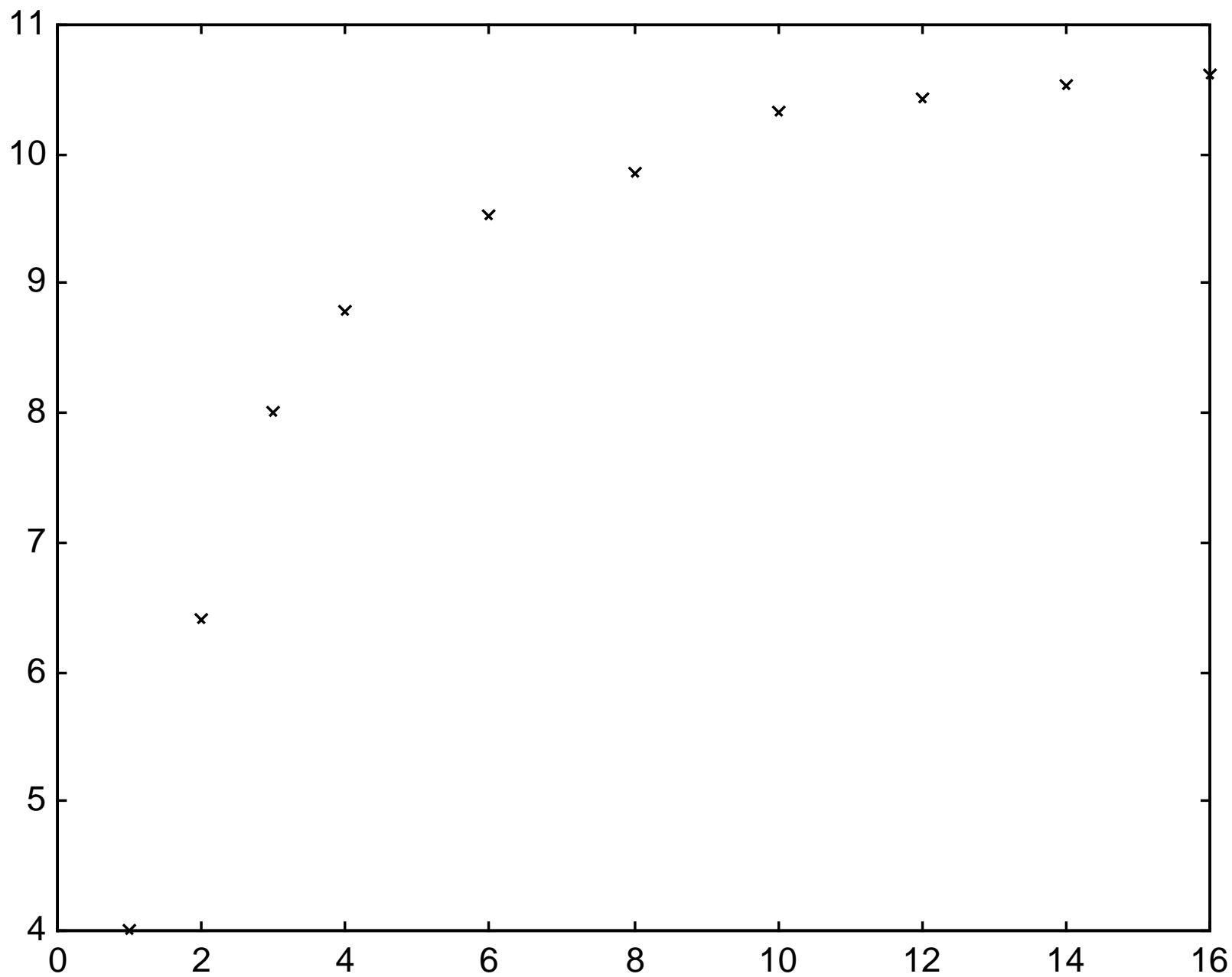
- 数据拟合方法
 - 对拟合函数不要求它通过所给的数据点
 - 所处理的数据量大且不能保证每一个数据没有误差
 - 要求一个函数严格通过每一个数据点是不合理的
 - 数据拟合方法求拟合函数
- 数据插值方法
 - 插值方法求插值函数
 - 插值函数则必须通过每一个数据点.

例：在某化学反应中，测得生成物的质量浓度 y (10^{-3} g/cm^3) 与时间 t (min) 的关系如表所示

t	1	2	3	4	6	8	10	12	14	16
y	4.00	6.41	8.01	8.79	9.53	9.86	10.33	10.42	10.53	10.61

- 显然，连续函数关系 $y(t)$ 是客观存在的。
- 通过表中的数据不可能确切地得到这种关系。
- 由于仪器测量中所带的误差的影响，测量数据难免有误差。
- 寻求合理的近似表达式，以反映数据变化的规律

$$y = \varphi(t)$$



拟合方法

数据拟合需要解决两个问题：

- 第一，选择什么类型的函数作为拟合函数（数学模型）；
- 第二，对于选定的拟合函数，如何确定拟合函数中的参数。

拟合方法分析

- 数学模型应建立在合理假设的基础上：选择某种类型的拟合函数使之符合数据变化的趋势（总体的变化规律）
- 拟合函数的选择：线性函数、多项式函数、指数函数、三角函数或其它函数，
- 根据数据分布趋势作出选择：将例1的数据表写成一般形式

t	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}
y	y_1	y_2	y_3	y_4	y_5	y_6	y_7	y_8	y_9	y_{10}

线性拟合（线性模型）

- 假设拟合函数是线性函数 $y = a + bx$ ，其图形是一条平面上的直线
- 确定函数中系数 a 和 b 各等于多少？
 - 以 a 和 b 作为待定系数，确定平面直线使得表中数据点尽可能地靠近该直线
 - 一般数据点将不会全落在该直线上，如果第 k 个点的坐标不满足直线方程，有一个绝对值为 $|a + bx_k - y_k|$ 的差异（残差）。
 - 全部点处的总误差：
$$\sum_{k=1}^{10} |a + bx_k - y_k|$$
 - 选取 a 和 b ，使得这个函数取极小值

实际为了操作上的方便，常常是求 a 和 b 使得函数

$$F(a, b) = \sum_{k=1}^{10} (a + bx_k - y_k)^2$$

达到极小。为了求该函数的极小值点，令

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial b} = 0$$

得

$$\sum_{k=1}^{10} 2(a + bx_k - y_k) = 0$$

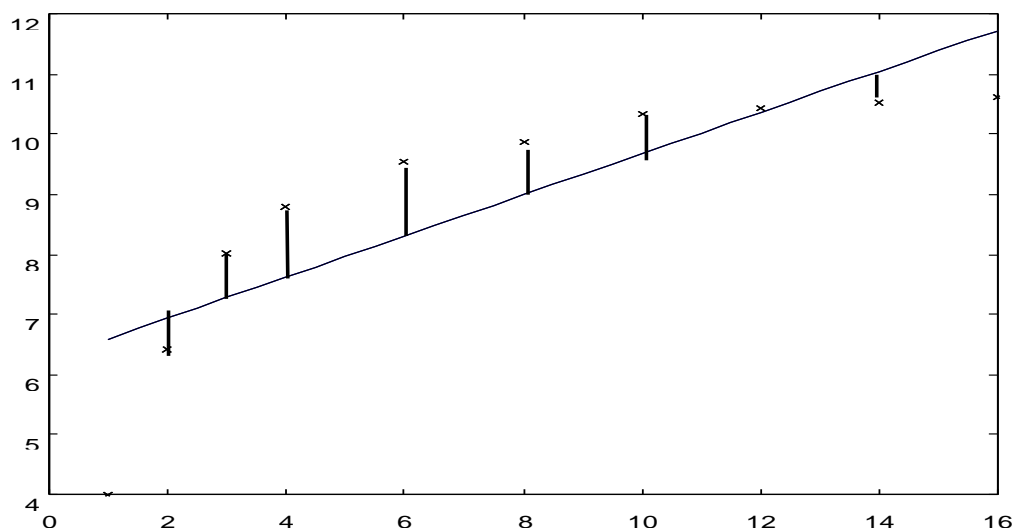
$$\sum_{k=1}^{10} 2(a + bx_k - y_k)x_k = 0$$

$$\begin{cases} 10a + \sum_{k=1}^{10} x_k b = \sum_{k=1}^{10} y_k \\ \sum_{k=1}^{10} x_k a + \sum_{k=1}^{10} x_k^2 b = \sum_{k=1}^{10} x_k y_k \end{cases}$$

这是关于未知数 a 和 b 的线性方程组：法方程

$$\begin{cases} \mathbf{10}a + \sum_{k=1}^{10} x_k b = \sum_{k=1}^{10} y_k \\ \sum_{k=1}^{10} x_k a + \sum_{k=1}^{10} x_k^2 b = \sum_{k=1}^{10} x_k y_k \end{cases}$$

求解这个二元线性方程组得待定系数 a 和 b ，从而得线性拟合函数 $y = a + b x$ 。线性拟合的结果：



二次函数拟合（二次多项式模型）

- 假设拟合函数是二次多项式函数，图形是一条平面上的抛物线
- 确定函数

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

中系数 a_0 、 a_1 和 a_2 各等于多少？

- 几何考虑：以 a_0 、 a_1 和 a_2 为待定系数
- 确定二次曲线使表中数据点尽可能地靠近该曲线。
- 一般数据点不会全落在该曲线上，如果第 k 个点不在曲线上，则它的坐标不满足曲线方程，有一个误差（残差）

全部点处的总误差用残差平方和表示：

$$F(a_0, a_1, a_2) = \sum_{k=1}^{10} [(a_0 + a_1 x_k + a_2 x_k^2) - y_k]^2$$

这是关于 a_0 、 a_1 和 a_2 的一个三元函数，选取 a_0 、 a_1 和 a_2 ，使得这个函数取极小值，令

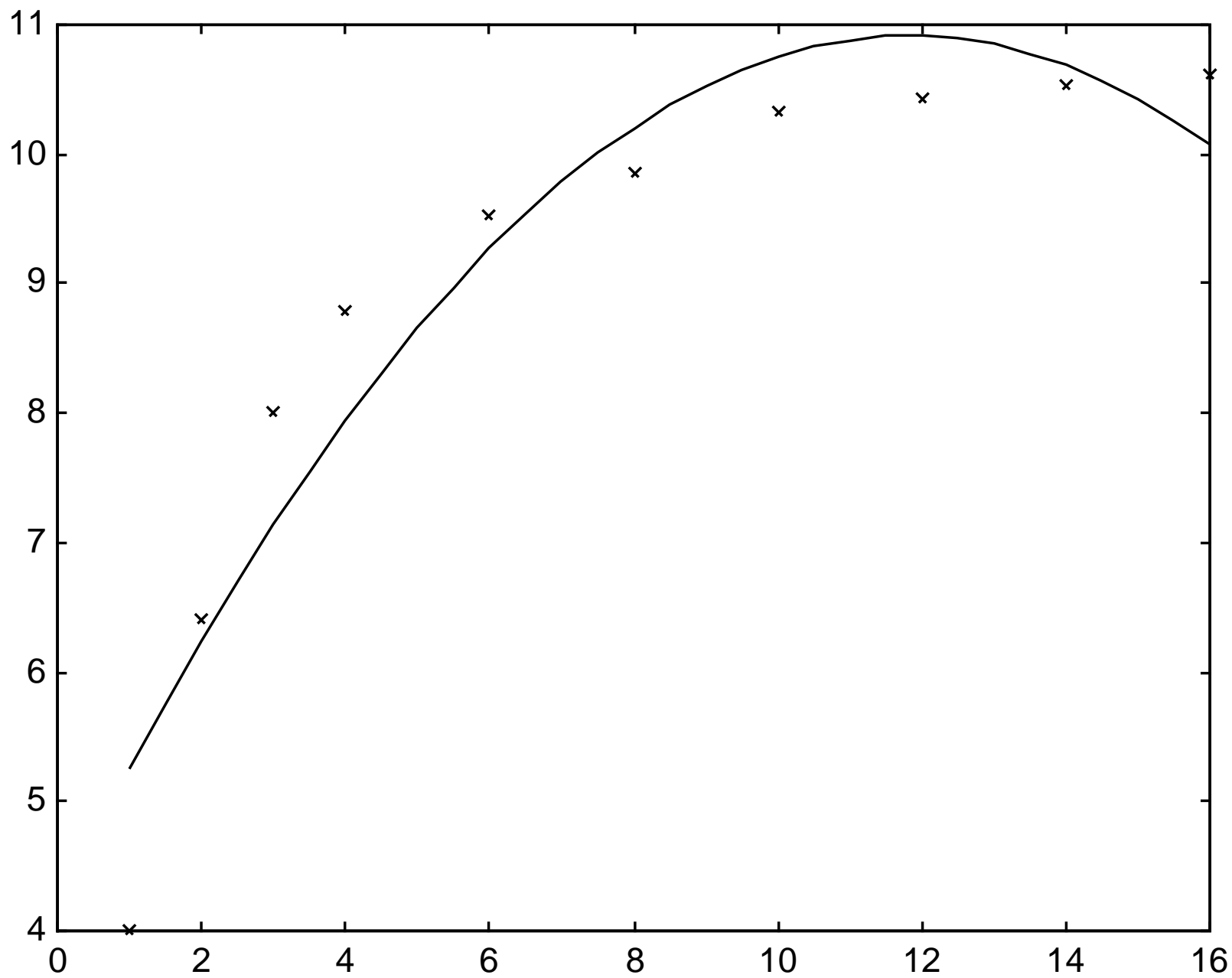
$$\frac{\partial F}{\partial a_0} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial a_1} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial a_2} = 0$$

$$\text{即} \begin{cases} \sum_{k=1}^{10} 2[(a_0 + a_1 x_k + a_2 x_k^2) - y_k] = 0 \\ \sum_{k=1}^{10} 2[(a_0 + a_1 x_k + a_2 x_k^2) - y_k] x_k = 0 \\ \sum_{k=1}^{10} 2[(a_0 + a_1 x_k + a_2 x_k^2) - y_k] x_k^2 = 0 \end{cases}$$

求解这一方程组可得二次拟合函数中的三个待定系数



一般曲线拟合的最小二乘法

➤ $f(x)$ 在一组离散点集 $\{x_i\}$ 上给定: $y_i = f(x_i)$, $i=0,1,\dots,m$

➤ 科学实验中常见的实验数据 $\{(x_i, y_i), i=0,1,\dots,m\}$

➤ 要求函数 $y = S^*(x)$ 与所给数据 $\{(x_i, y_i), i=0,1,\dots,m\}$ 拟合

➤ 若记误差 $\delta_i = S^*(x) - y_i$, $i=0,1,\dots,m$, $\delta = (\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_m)^T$, 设

$$\varphi = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\}$$

是 $C[a,b]$ 上线性无关函数族, 在

$$\varphi = \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\}$$

中找一函数 $S^*(x)$ 使误差平方和

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

找一函数 $S^*(x)$ 使误差平方和

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \delta_i^2 = \sum_{i=0}^m [S^*(x_i) - y_i]^2 = \min_{S(x) \in \Phi} \sum_{i=0}^m [S(x_i) - y_i]^2, \quad (1)$$

这里

$$S(x) = a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) + \cdots + a_n \varphi_n(x) \quad n < m. \quad (2)$$

这就是一般的最小二乘逼近,用几何语言说,称为曲线拟合的最小二乘法.

用最小二乘法求拟合曲线的问题,就是在形如(2)的 $S(x)$ 中求一函数 $y = S^*(x)$

使加权平方和 $\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) [S^*(x_i) - y_i]^2$

取得最小。

其中: $\omega(x_i)$ 可以看成数据点 (x_i, y_i) 的频数.

它转化为求多元函数

$$I(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_i) - f(x_i) \right]^2$$

的极小点 $a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*$ 问题.

由求多元函数极值的必要条件来求解

求极值的必要条件

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0 \quad k = 0, 1, \dots, n$$

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

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

$$\text{即: } \sum_{j=0}^n \left[\sum_{i=0}^m \omega(x_i) \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i) \right] a_j = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) y_i \varphi_k(x_i) \\ (k=0, 1, \dots, n) \quad (*)$$

是 a_0, a_1, \dots, a_n 的线性方程组, 称为**法方程**.

若记

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

上式可改为

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j \equiv d_k \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3)$$

法方程可写成矩阵形式 $Ga = d$

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

且成立下式

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

即 $S^*(x)$ 必为所求的最小二乘解。

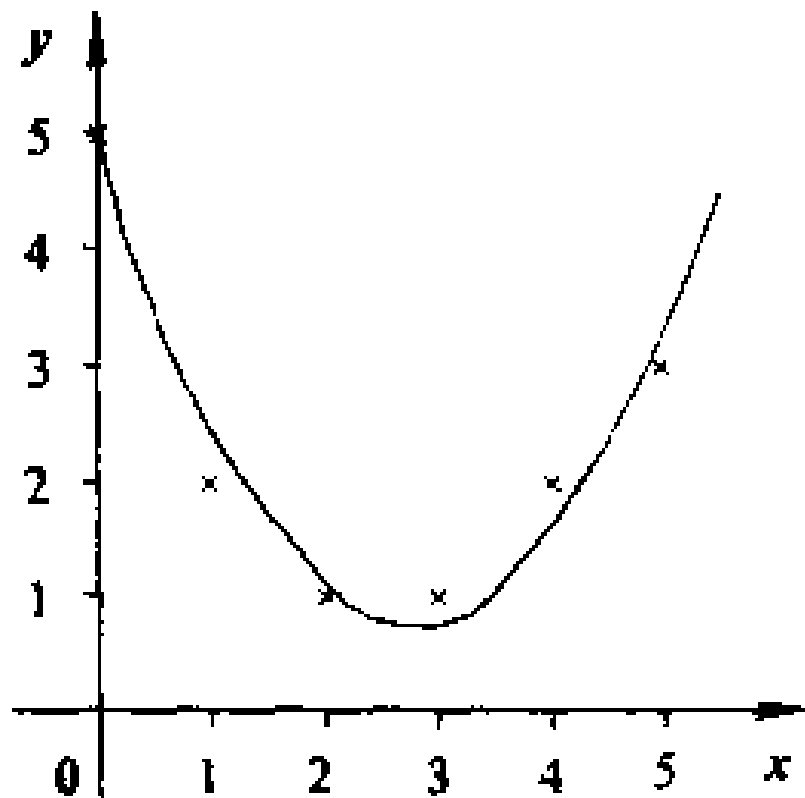
例：已知一组观测数据如表所示，试用最小二乘法求一个多项式拟合这组数据。

x	0	1	2	3	4	5
y	5	3	1	1	2	3

解：作散点图如下：

从右图可以看出这些点接近一条抛物线，因此设所求公式为

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$



由最小二乘法得如下式子：

$$\varphi(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^6 (y_i - (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2))^2$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^6 (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^6 x_i (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial a_2} = -2 \sum_{i=1}^6 x_i^2 (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2) \end{cases}$$

整理并代入表中的数据得：

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^6 y_i - \sum_{i=1}^6 a_0 - \left(\sum_{i=1}^6 x_i\right) a_1 - \left(\sum_{i=1}^6 x_i^2\right) a_2 = 0 \\ \sum_{i=1}^6 x_i y_i - \sum_{i=1}^6 x_i a_0 - \left(\sum_{i=1}^6 x_i^2\right) a_1 - \left(\sum_{i=1}^6 x_i^3\right) a_2 = 0 \\ \sum_{i=1}^6 x_i^2 y_i - \sum_{i=1}^6 x_i^2 a_0 - \left(\sum_{i=1}^6 x_i^3\right) a_1 - \left(\sum_{i=1}^6 x_i^4\right) a_2 = 0 \end{cases}$$

代入数据

$$\begin{cases} 6c_0 + 15c_1 + 55c_2 = 14 \\ 15c_0 + 55c_1 + 225c_2 = 30 \\ 55c_0 + 225c_1 + 979c_2 = 122 \end{cases}$$

解之可得：

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

故所求多项式为：

$$P(x) = 4.7143 - 2.7857x + 0.5000x^2$$

解题步骤:

1. 在坐标系中画出数据点.

2. 由数据点的分布, 取基函数系

$$\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)\}$$

{ 多项式
指数函数
三角函数

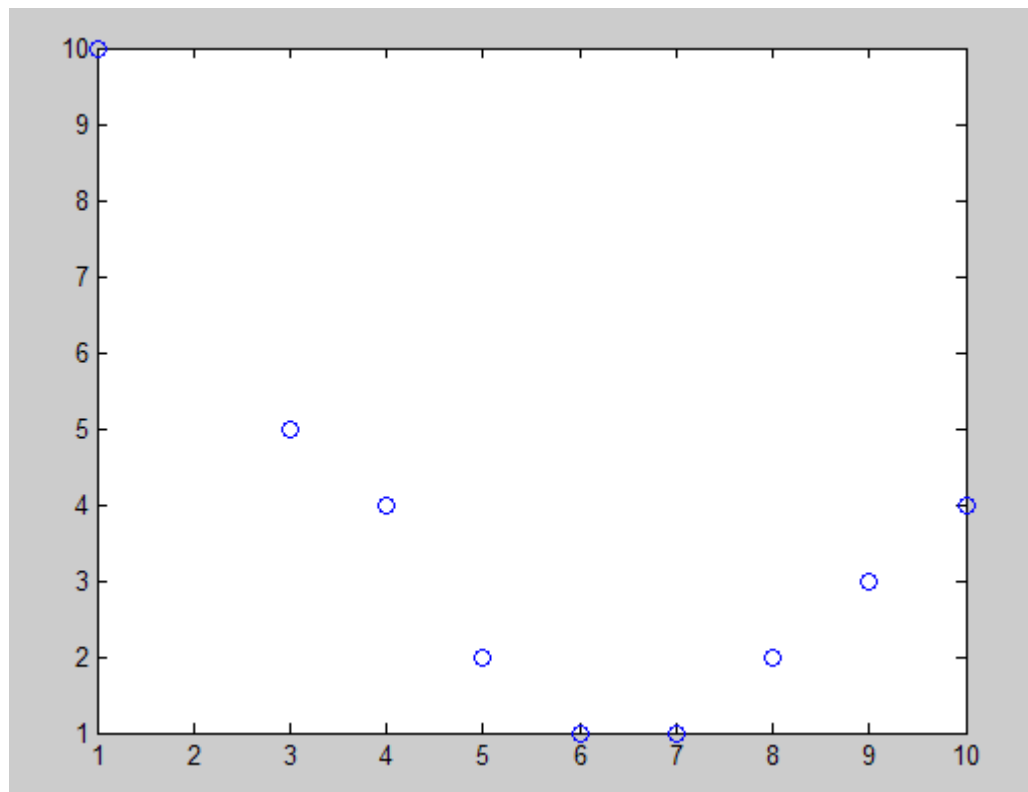
3. 构成法方程并求解.

例2 设从某一实验中测得如下一组数据

例2数据表

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x_i	1	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	10	5	4	2	1	1	2	3	4

求一代数多项式曲线，使其最好地拟合这组给定的数据。



例2 数据描点图

解： 从所给的数据点可以看出, 这些点大致在一条抛物线上. 故设拟合曲线方程为

$$f(x) = a + bx + cx^2$$

即取 $m = 2, \varphi_0 = 1, \varphi_1 = x, \varphi_2 = x^2$. 相应的法方程组为

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_0, \varphi_2) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_2) \\ (\varphi_2, \varphi_0) & (\varphi_2, \varphi_1) & (\varphi_2, \varphi_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (y, \varphi_0) \\ (y, \varphi_1) \\ (y, \varphi_2) \end{bmatrix}$$

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=1}^9 1 \times 1 = 9 \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=1}^9 x_i^2 = 381$$

$$(\varphi_2, \varphi_2) = \sum_{i=1}^9 x_i^4 = 25317$$

$$(\varphi_1, \varphi_0) = (\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=1}^9 x_i = 53$$

$$(\varphi_2, \varphi_0) = (\varphi_0, \varphi_2) = \sum_{i=1}^9 x_i^2 = 381$$

$$(\varphi_1, \varphi_2) = (\varphi_2, \varphi_1) = \sum_{i=1}^9 x_i^3 = 3017$$

$$(y, \varphi_0) = \sum_{i=1}^9 y_i \times 1 = 32 \quad (y, \varphi_1) = \sum_{i=1}^9 y_i x_i = 147$$

$$(y, \varphi_2) = \sum_{i=1}^9 y_i x_i^2 = 1025$$

这样就得到法方程组：

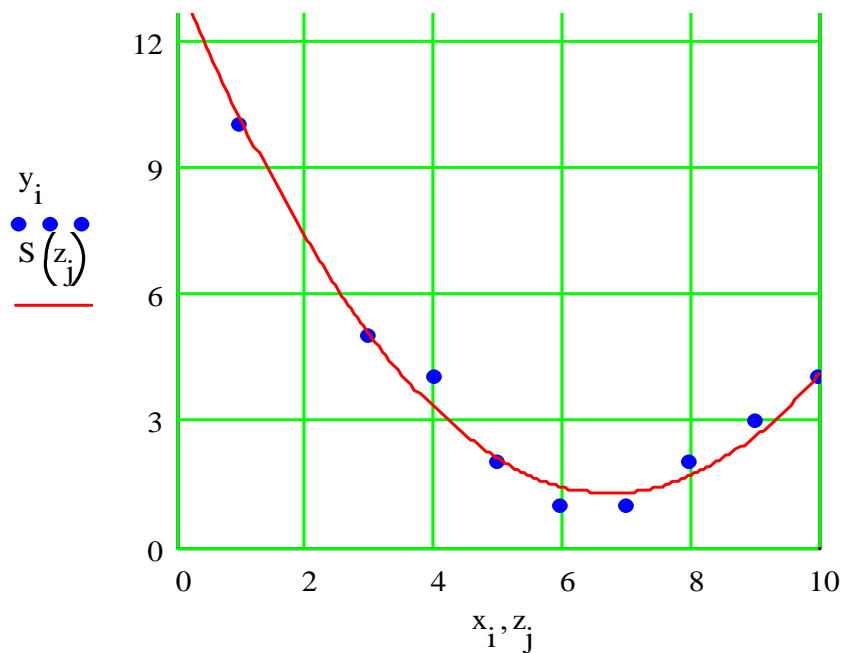
$$\begin{bmatrix} 9 & 53 & 381 \\ 53 & 381 & 3017 \\ 381 & 3017 & 25317 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32 \\ 147 \\ 1025 \end{bmatrix}$$

解法方程组得：

$$a = 13.4609, \quad b = -3.60585, \quad c = 0.267616$$

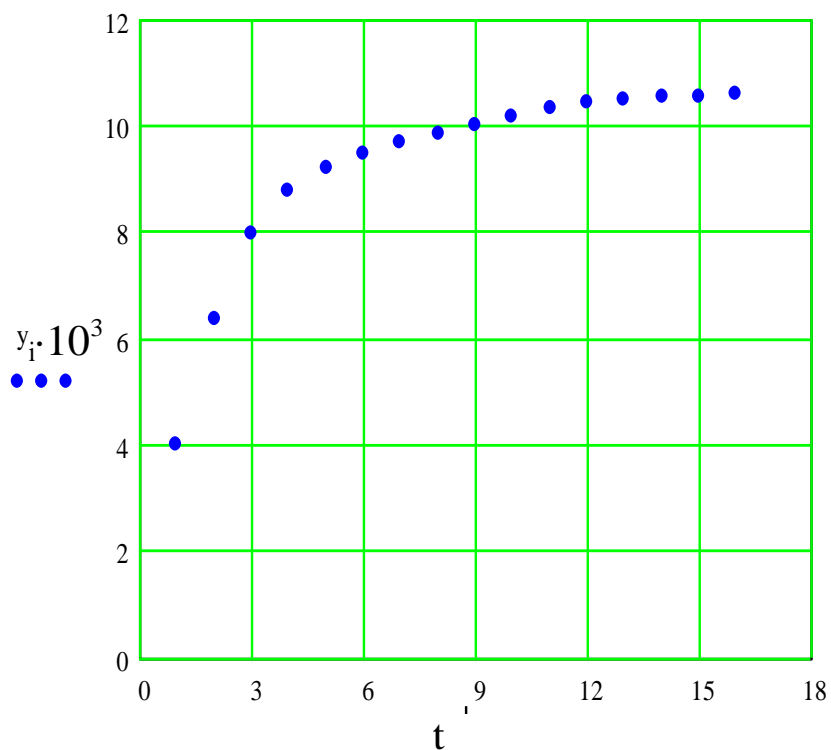
因而所求拟合多项式为

$$f(x) = 13.4609 - 3.60585x + 0.267616x^2$$



例：求生成物浓度 y 与时间 t 的拟合曲线.

时间 t	1	2	16
浓度 y	4.00×10^{-3}	6.40×10^{-3}	10.60×10^{-3}



由意义, y 有渐近线

$\therefore y$ 为双曲线或指数函数

1. $1/y = a + b/t$

2. $y = a \cdot e^{b/t}$

由模型**1**, $1/y = a + b / t$

令 $Y=1/y$, $x=1/t$, 则 $Y=a+bx$

转化数据:

$x=1/t$	1/1	1/2	1/16
$Y=1/y$	250	156.25	94.34

选基函数 $\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x$

$$\text{令 } \mathbf{S}_1(\mathbf{x}) = a\varphi_0(x) + b\varphi_1(x)$$

计算:

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{16} 1 \cdot 1 = 16 \quad (\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{16} 1 \cdot x_i = 3.38073$$

$$(\varphi_1, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{16} x_i \cdot 1 = 3.38073 \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{16} x_i \cdot x_i = 1.58435$$

$$(Y, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{16} Y_i \cdot 1 = 1832.9 \quad (Y, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{16} Y_i \cdot x_i = 528.86$$

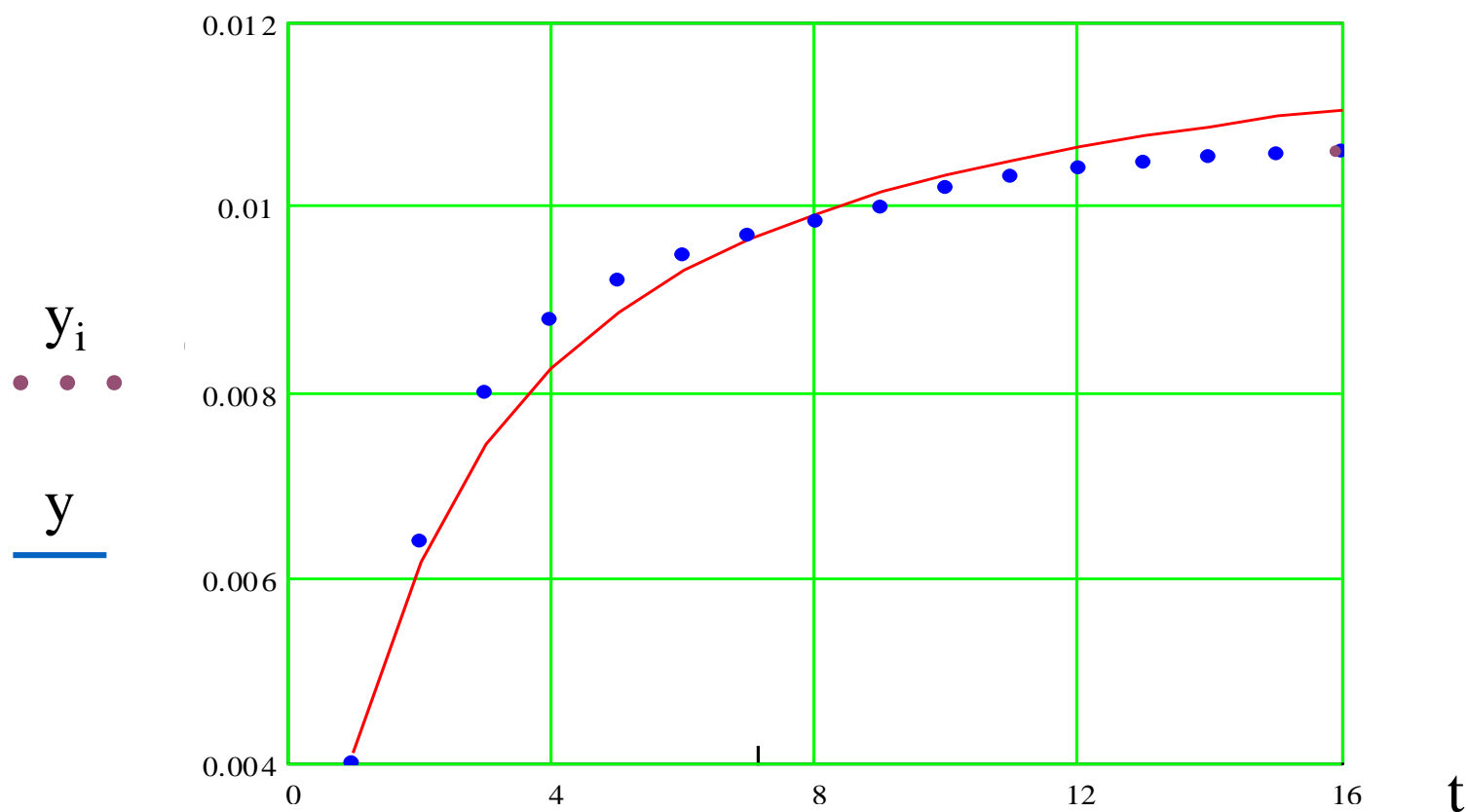
解法方程组:
$$\begin{pmatrix} 16 & 3.38073 \\ 3.38073 & 1.58435 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1832.9 \\ 528.86 \end{pmatrix}$$

得: $a=80.1745, \quad b=162.722$

$$S_1(x)=80.1745+162.722x$$

$$\therefore \frac{1}{y} = 80.1745 + 162.722 \frac{1}{t}$$

$$\therefore y = \frac{t}{80.1745t + 162.722}$$



均方误差:
$$\delta_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^{16} (y_i - y(t_i))^2} = 1.25 \times 10^{-3}$$

由模型2, $y=a \cdot e^{b/t}$

$$\text{即 } \ln y = \ln a + b/t$$

令 $Y=\ln y$, $x=1/t$, $A=\ln a$, 则 $Y=A+bx$,

转化数据:

$x=1/t$	1/1	1/2	1/16
$Y=\ln y$	-5.5215	-5.0515	-4.547

选基函数: $\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x$

$$\text{令 } \mathbf{S}_2(\mathbf{x}) = A\varphi_0(x) + b\varphi_1(x)$$

计算:

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{16} 1 \cdot 1 = 16 \quad (\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{16} 1 \cdot x_i = 3.38073$$

$$(\varphi_1, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{16} x_i \cdot 1 = 3.38073 \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{16} x_i \cdot x_i = 1.58435$$

$$(Y, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{16} Y_i \cdot 1 = -75.264 \quad (Y, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{16} Y_i \cdot x_i = -16.822$$

解法方程组:
$$\begin{pmatrix} 16 & 3.38073 \\ 3.38073 & 1.58435 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -75.264 \\ -16.822 \end{pmatrix}$$

得: $A = -4.4807, \quad b = -1.0567$

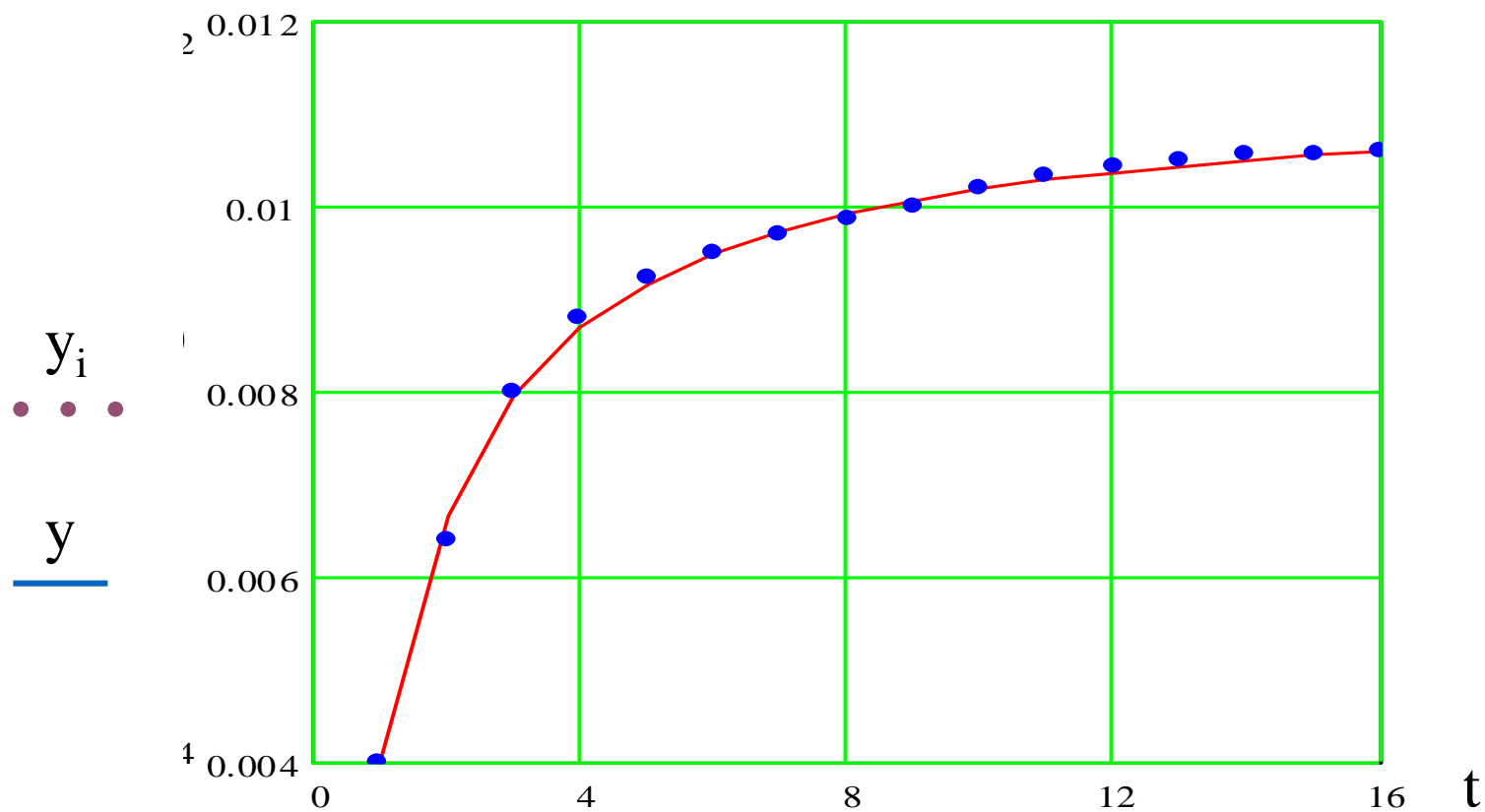
$$\therefore a = e^A = e^{-4.4807} = 1.1325 \times 10^{-2}$$

$$S_2(x) = -4.4807 - 1.0567x$$

即:

$$\ln y = -4.4807 - 1.0567 \cdot \frac{1}{t} = \ln \left(1.1325 \times 10^{-2} \cdot e^{-1.0567 \cdot \frac{1}{t}} \right)$$

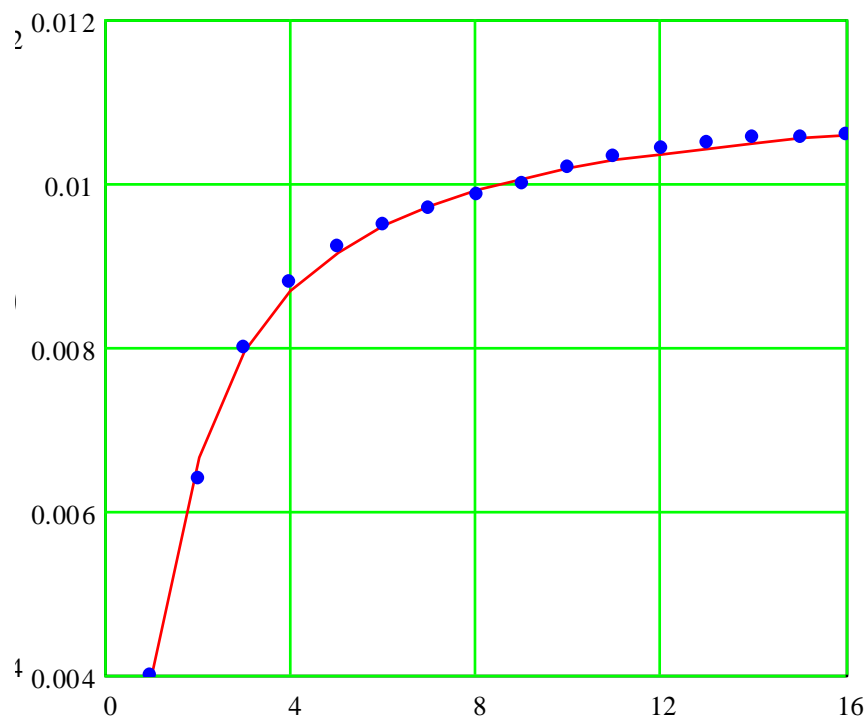
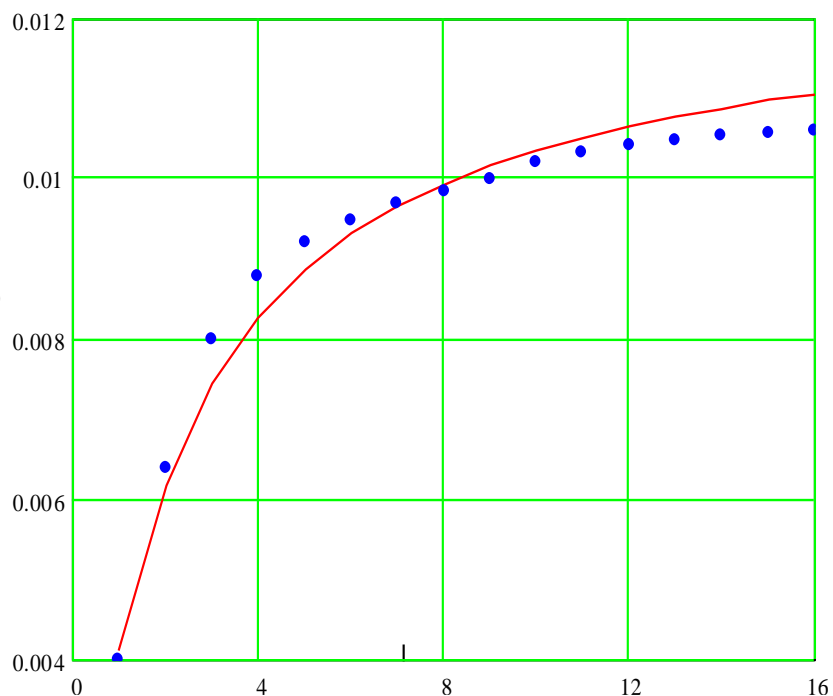
$$\therefore y = 1.1325 \times 10^{-2} \cdot e^{-1.0567 \cdot \frac{1}{t}}$$



均方误差: $\delta_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{16} (y_i - y(t_i))^2} = 0.341 \times 10^{-3}$

模型2的误差只有模型1的30%左右，
因此模型2 较好。

需要通过数值实验选取模型。



数据模型综述

- 最小二乘法进行数据拟合非常有用，非常常用
- 数据拟合中，基函数的选择非常重要
- 直接用多项式模型进行拟合会出现病态系统——效果较差
- 数据模型的选取往往依据数据源基础的物理原理和经验因素
- 非线性模型：解非线性最小二乘问题或者通过非线性模型线性化解线性最小二乘问题

第三章 习题

P77. 第17题

第20题（Chebyshev多项式展开不做）、第 22 题），

P78. 第24题（0,0）点不做。