复习:

连续函数最佳平方逼近问题的一般提法

在内积空间$C[a,b]$中，设$f(x)\in C[a,b]$,但$f(x)\notin H\subset C[a,b]$,

在H中寻找一个元素$s(x)=\sum_{j=0}^{n} c_j\varphi_j(x)\in H$

使得

$$\|f-s\|_2^2=\min_{\varphi\in H}\|f-\varphi\|_2^2$$

若$s(x)$存在,则称其为$f(x)$在$[a,b]$上的最佳平方逼近函数。

第三节 离散数据的最小二乘拟合

一、最小二乘曲线拟合问题的一般提法

给定$m+1$个数据点 $x_i = x_0, x_1, \cdots, x_m$,

$$f(x_i) = f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_m),$$

及权系数$\omega_0, \omega_1, ..., \omega_m$, 并已知函数模型$s(x,c)$。

用给定的数据点，按给定的函数模型，构造拟合函数$s(x)$逼近未知函数$f(x)$, 使

$$\sum_{i=0}^{m} \omega_i (f(x_i) - s(x_i))^2 = \min \qquad (1)$$

称为最小二乘曲线拟合(离散数据的最佳平方逼近)。

使拟合误差的平方和最小——最小二乘原理

两种拟合问题

1. 线性最小二乘曲线拟合

如：取$s(x,c)=c_n x^n+c_{n-1}x^{n-1}+\cdots+c_1 x+c_0$

$s(x,c)$是关于系数$c=(c_0,c_1,\cdots,c_{n-1},c_n)^T$的线性函数。这是多项式拟合。

若取$s(x,c)=c_n e^{-x^n}+\cdots+c_2 e^{-x^2}+c_1 e^{-x}+c_0$,

这也是关于系数的线性拟合。

2. 非线性最小二乘曲线拟合

$s(x,c)$是关于系数$c=(c_0,c_1,\cdots,c_{n-1},c_n)^T$的非线性函数。

如：$s(x,c)=c_0 x+c_1 e^{-c_2 x}$

复习：

连续函数最佳平方逼近问题的一般提法

在内积空间$C[a,b]$中，设$f(x)\in C[a,b]$, 但$f(x)\notin H\subset C[a,b]$,

在H中寻找一个元素$s(x)=\sum_{j=0}^{n}c_j\varphi_j(x)\in H$

使得

$$\|f-s\|_2^2=\min_{\varphi\in H}\|f-\varphi\|_2^2$$

若$s(x)$存在, 则称其为$f(x)$在$[a,b]$上的**最佳平方逼近函数**。

离散数据的最佳平方逼近问题的一般提法

在内积空间$C[a,b]$中，设$f(x)\in C[a,b]$,但$f(x)\notin H\subset C[a,b]$,

在H中寻找一个元素$s(x)=\sum_{j=0}^{n}c_j\varphi_j(x)\in H$

使得 $\|f-s\|_2^2=\min$ 即 $\sum_{i=0}^{m}\omega_i(f(x_i)-s(x_i))^2=\min$

若$s(x)$存在,则称其为$f(x)$在$[a,b]$上的最佳平方逼近函数（最小二乘拟合曲线）。

连续函数内积空间

在$C[a,b]$中，定义带权$\rho(x)$内积

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

及内积范数 $\|f\|_2=\sqrt{\left(f(x),f(x)\right)}=\left(\int_a^b \rho(x)\left(f(x)\right)^2 dx\right)^{\frac{1}{2}}$

离散内积空间

在$C[a,b]$中，定义带权$\omega_i(i=0,1,...,m)$的内积

$$\left(f(x),\varphi(x)\right)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i f(x_i)\varphi(x_i)=Y^TW\Phi=(Y,\Phi)$$

其中 $W=diag(\omega_0,\omega_1,...,\omega_m)$

$$Y=(f(x_0),f(x_1),...,f(x_m))^T$$

$$\Phi=(\varphi(x_0),\varphi(x_1),...,\varphi(x_m))^T$$

二、线性最小二乘曲线拟合问题的法方程

求$s(x)\in\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),...,\varphi_n(x)\}$

其中$\varphi_0(x),\varphi_1(x),...,\varphi_n(x)$线性无关。$s(x)=\sum_{i=0}^{n}c_i\varphi_i(x)$

由$(f-s,\varphi_k)=(f-\sum_{i=0}^{n}c_j\varphi_j,\varphi_k)=0(k=0,1,\ldots,n)$

得法方程

$$\begin{cases}(\varphi_0,\varphi_0)c_0+(\varphi_1,\varphi_0)c_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_0)c_n=(f,\varphi_0)\\(\varphi_0,\varphi_1)c_0+(\varphi_1,\varphi_1)c_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_1)c_n=(f,\varphi_1)\\\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\(\varphi_0,\varphi_n)c_0+(\varphi_1,\varphi_n)c_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_n)c_n=(f,\varphi_n)\end{cases}$$

若记向量$C=(c_0,c_1,\ldots c_n)^T\in R^{n+1}$

用矩阵形式表示为 $GC=F$,称 $GC=F$ 为法方程

由函数$\varphi_j(x)$和点集$\{x_0,x_1,\ldots x_m\}$定义一个向量

$$\Phi_j=\begin{pmatrix}\varphi_j(x_0)\\ \varphi_j(x_1)\\ \vdots\\ \varphi_j(x_m)\end{pmatrix}\in R^{m+1},j=0,1,\ldots,n \qquad Y=\begin{pmatrix}f(x_0)\\ f(x_1)\\ \vdots\\ f(x_m)\end{pmatrix}$$

连续函数拟合的法方程

$$\begin{cases}(\varphi_0,\varphi_0)c_0+(\varphi_1,\varphi_0)c_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_0)c_n=(f,\varphi_0)\\(\varphi_0,\varphi_1)c_0+(\varphi_1,\varphi_1)c_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_1)c_n=(f,\varphi_1)\\\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\(\varphi_0,\varphi_n)c_0+(\varphi_1,\varphi_n)c_1+\cdots+(\varphi_n,\varphi_n)c_n=(f,\varphi_n)\end{cases}$$

离散数据拟合的法方程可改写为

$$\begin{cases}(\Phi_0,\Phi_0)c_0+(\Phi_1,\Phi_0)c_1+\cdots+(\Phi_n,\Phi_0)c_n=(Y,\Phi_0)\\(\Phi_0,\Phi_1)c_0+(\Phi_1,\Phi_1)c_1+\cdots+(\Phi_n,\Phi_1)c_n=(Y,\Phi_1)\\\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\(\Phi_0,\Phi_n)c_0+(\Phi_1,\Phi_n)c_1+\cdots+(\Phi_n,\Phi_n)c_n=(Y,\Phi_n)\end{cases}$$

法方程可改写为

$$\begin{cases}(\Phi_0,\Phi_0)c_0+(\Phi_1,\Phi_0)c_1+\cdots+(\Phi_n,\Phi_0)c_n=(Y,\Phi_0)\\(\Phi_0,\Phi_1)c_0+(\Phi_1,\Phi_1)c_1+\cdots+(\Phi_n,\Phi_1)c_n=(Y,\Phi_1)\\\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\(\Phi_0,\Phi_n)c_0+(\Phi_1,\Phi_n)c_1+\cdots+(\Phi_n,\Phi_n)c_n=(Y,\Phi_n)\end{cases}$$

法方程 $GC=F$

$$\text{其中}G=\begin{bmatrix}(\Phi_0,\Phi_0) & (\Phi_1,\Phi_0) & (\Phi_n,\Phi_0)\\(\Phi_0,\Phi_1) & (\Phi_1,\Phi_1) & (\Phi_n,\Phi_1)\\ & & \\(\Phi_0,\Phi_n) & (\Phi_1,\Phi_n) & (\Phi_n,\Phi_n)\end{bmatrix}$$

$$F=\left((Y,\Phi_0)\quad(Y,\Phi_1)\quad\cdots\quad(Y,\Phi_n)\right)^T$$

结论：若$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$在点集$\{x_i\}_{i=0}^{m}$上线性无关，且$n<m$，因此$\Phi_0,\Phi_1,\ldots,\Phi_n$是$R^{m+1}$中线性无关的向量组。

例：取$\varphi_0(x)=1$，$\varphi_1(x)=x,\cdots,\varphi_n(x)=x^n$，

$x_0,x_1,\ldots x_n$为$n+1$个互异点

$$\Phi_j=\begin{pmatrix}\varphi_j(x_0)\\ \varphi_j(x_1)\\ \vdots\\ \varphi_j(x_n)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_0^j\\ x_1^j\\ \vdots\\ x_n^j\end{pmatrix}\in R^{n+1},\ j=0,1,\ldots,n$$

设 $A=[\Phi_0,\Phi_1,\ldots,\Phi_n]$

$$\det(A)=\begin{vmatrix}1 & x_0 & \cdots & x_0^n\\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n\end{vmatrix}=\prod_{0\le j<i\le n}^{n}(x_i-x_j)\neq 0$$

所以$\Phi_0,\Phi_1,\ldots,\Phi_n$是$R^{n+1}$中线性无关的向量组.

法方程的另一种形式

记 $A=(\Phi_0,\Phi_1,\ldots,\Phi_n)$,

由矩阵乘法可知 $G=A^TWA$, $F=A^TWY$

法方程就变成 $A^TWAC=A^TWY$

当$W=I$时,法方程为 $A^TAC=A^TY$

$$A^TA=\begin{bmatrix}\Phi_0^T\\ \Phi_1^T\\ \vdots\\ \Phi_n^T\end{bmatrix}\left[\Phi_0,\Phi_1,\ldots,\Phi_n\right]=\begin{bmatrix}\Phi_0^T\Phi_0 & \cdots & \Phi_0^T\Phi_n\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \Phi_n^T\Phi_0 & \cdots & \Phi_n^T\Phi_n\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}(\Phi_0,\Phi_0) & \cdots & (\Phi_0,\Phi_n)\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ (\Phi_n,\Phi_0) & \cdots & (\Phi_n,\Phi_n)\end{bmatrix}=G$$

注：

（1）由于A是列满秩矩阵，所以A^TA是$(n+1)\times(n+1)$的对称正定阵，可用Cholesky分解法求解法方程

$$A^TAC = A^TY$$

证：$\forall x \neq 0, x^TA^TAx = (Ax, Ax) > 0$

$\therefore$法方程 $GC = F$（或$A^TAC = A^TY$）存在唯一解.

法方程$GC = F$（$A^TAC = A^TY$）的解

$\Leftrightarrow$矛盾方程组$AC = Y$的最小二乘解。

称A为回归矩阵，在$Matlab$中可用左除法求解

$$C = A \backslash Y$$

（2）且有 $$cond_2(A^TA)=(cond_2(A))^2$$

因此，法方程常常表现出是病态方程组。

（3）取基函数为$\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x,...,\varphi_n(x)=x^n$,

则 $$A=\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \cdots & x_m^n \end{bmatrix}$$

实际计算中要计算x_0^n，x_1^n，. . . ，$x_m^n,\sum_{i=1}^{m}x_i^k,(k=0,1,...,2n)$

当数据点数值很大时，可能会在计算中溢出。

三、法方程的求解

求解法方程$A^T AC = A^T Y$或$GC = F$(取$W = I$)

1. 确定$n+1$个线性无关函数$\left\{\varphi_j(x)\right\}_{j=0}^{n}$的具体形式

常用的代数多项式拟合是取

$$\varphi_j(x) = x^j \quad (j = 0,1,\cdots,n)$$

最佳平方逼近函数的形式是

$$s(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots + c_n x^n$$

由法方程求出$c_j \quad (j = 0,1,\cdots,n)$

s(x)又称为最小二乘拟合函数

2. 构造法方程

用基函数$1, x, x^2, \cdots, x^n$

回归矩阵 $A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \cdots & x_m^n \end{bmatrix}$

$$Y = (y_0, y_1, \cdots, y_m)^T$$

得到法方程 $A^T AC = A^T Y$

3. 法方程的求解

$A^T A$是对称正定阵，用Cholesky分解：$A^T A = LL^T$。

$$\begin{cases} LZ = A^T Y & \text{求}Z \\ L^T C = Z & \text{求}C \end{cases}$$

例 给出数据点

i =	0	1	2	3	4
x_i =	0.0	0.25	0.5	0.75	1.0
y_i =	1.0	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183
w_i =	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

试用$1, x, x^2$构造二次最佳平方逼近多项式。

解： 设$s(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2$

$$\varphi_0(x) = 1, \quad \varphi_1(x) = x, \quad \varphi_2(x) = x^2$$

$$\Phi_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \Phi_1 = \begin{bmatrix} 0.0 \\ 0.25 \\ 0.5 \\ 0.75 \\ 1.0 \end{bmatrix}, \quad \Phi_2 = \begin{bmatrix} 0.0^2 \\ 0.25^2 \\ 0.5^2 \\ 0.75^2 \\ 1.0^2 \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 1.2840 \\ 1.6487 \\ 2.1170 \\ 2.7183 \end{bmatrix}$$

$$G=\begin{bmatrix}(\Phi_0,\Phi_0) & (\Phi_0,\Phi_1) & (\Phi_0,\Phi_2)\\ (\Phi_1,\Phi_0) & (\Phi_1,\Phi_1) & (\Phi_1,\Phi_2)\\ (\Phi_2,\Phi_0) & (\Phi_2,\Phi_1) & (\Phi_2,\Phi_2)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5 & 2.5 & 1.875\\ 2.5 & 1.875 & 1.5625\\ 1.875 & 1.5625 & 1.3825\end{bmatrix}$$

$$F=\big((Y,\Phi_0),(Y,\Phi_1),(Y,\Phi_2)\big)^T$$

$$=(8.7680,5.4514,4.4015)^T$$

解法方程 $GC=F$

解出 $c_0=1.0052,\quad c_1=0.8641,\quad c_2=0.8437$

于是得到二次最佳平方逼近多项式

$$s(x)=1.0052+0.8641x+0.8437x^2$$

四、由正交函数组构造最佳平方逼近多项式

1. 原理：若函数组$\varphi_0(x),\varphi_1(x),,\ldots,\varphi_n(x)$是关于点集$\{x_0,x_1,\ldots x_m\}$和带权$w_0,w_1,\ldots,w_m$的正交函数组，

即 $(\varphi_k(x),\varphi_j(x))=\left(\Phi_k,\Phi_j\right)=\begin{cases}=0 & j\neq k\\ \neq 0 & j=k\end{cases}$

则法方程 $GC=F$

其中 $G=\begin{bmatrix}(\Phi_0,\Phi_0) & & \\ & (\Phi_1,\Phi_1) & \\ & & \ddots & \\ & & & (\Phi_n,\Phi_n)\end{bmatrix}$

$$F=\left((Y,\Phi_0)\quad (Y,\Phi_1)\quad \cdots \quad (Y,\Phi_n)\right)^T$$

则法方程 $GC = F$

其中 $$G = \begin{bmatrix} (\Phi_0,\Phi_0) & & & \\ & (\Phi_1,\Phi_1) & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\Phi_n,\Phi_n) \end{bmatrix}$$

$$F = \left((Y,\Phi_0) \quad (Y,\Phi_1) \quad \cdots \quad (Y,\Phi_n)\right)^T$$

$$c_j = \frac{(Y,\Phi_j)}{(\Phi_j,\Phi_j)} = \frac{\sum_{i=0}^{m} w_i f(x_i)\varphi_j(x_i)}{\sum_{i=0}^{m} w_i \varphi^2{}_j(x_i)} \quad (j = 0,1,2,\cdots,n)$$

最佳平方逼近多项式为 $s(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j(x)$

2.构造关于点集的正交函数组(Chap2)

由$1, x, x^2, \cdots, x^n$构造关于点集$\{x_i\}_{i=0}^m$的首1正交多项式

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_{k+1}(x) = (x - a_{k+1})\varphi_k(x) - \beta_k \varphi_{k-1}(x) \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots) \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} \alpha_k = \dfrac{(x\varphi_k(x), \varphi_k(x))}{(\varphi_k(x), \varphi_k(x))} \qquad (k = 0, 1, 2, \cdots) \\ \beta_0 = 0, \beta_k = \dfrac{(\varphi_k(x), \varphi_k(x))}{(\varphi_{k-1}(x), \varphi_{k-1}(x))} \qquad (k = 1, 2, \cdots) \end{cases}$$

式中内积定义为

$$\left(\varphi_k(x), \varphi_j(x)\right) = \left(\Phi_k, \Phi_j\right) = \sum_{i=0}^{m} w_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i)$$

$$\left(x\varphi_k(x), \varphi_k(x)\right) = \sum_{i=0}^{m} w_i x_i \varphi_k^2(x_i)$$

例 给出数据点

i =	0	1	2	3	4
$x_i =$	0.0	0.25	0.5	0.75	1.0
$y_i =$	1.0	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183
$w_i =$	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

用关于点集的正交函数组构造二次最佳平方逼近多项式。

解:（1）先构造关于点集$\{0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0\}$和权$w_i = 1$,

的正交函数组$\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x)\}$.

$$\varphi_0(x) = 1, \qquad \varphi_1(x) = (x - \alpha_1)\varphi_0(x)$$

$$\alpha_1 = \frac{(x\varphi_0(x), \varphi_0(x))}{(\varphi_0(x), \varphi_0(x))}$$

$$\Phi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \Phi_{00} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.25 \\ 0.5 \\ 0.75 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 = \frac{(x\varphi_0(x), \varphi_0(x))}{(\varphi_0(x), \varphi_0(x))} = \frac{(\Phi_{00}, \Phi_0)}{(\Phi_0, \Phi_0)} = \frac{2.5}{5} = \frac{1}{2}$$

$$\varphi_1(x) = x - \frac{1}{2}$$

$$\varphi_2(x) = (x - \alpha_2)\varphi_1(x) - \beta_1\varphi_0(x)$$

$$\alpha_2 = \frac{(x\varphi_1(x), \varphi_1(x))}{(\varphi_1(x), \varphi_1(x))}, \beta_1 = \frac{(\varphi_1(x), \varphi_1(x))}{(\varphi_0(x), \varphi_0(x))}$$

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} -0.5, & -0.25, & 0, & 0.25, & 0.5 \end{pmatrix}^T$$

$$\Phi_{11} = \begin{pmatrix} 0, & -0.0625, & 0, & 0.1875, & 0.5 \end{pmatrix}^T$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2}, \qquad \beta_1 = \frac{1}{8}$$

$$\varphi_2(x) = (x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}$$

$$\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x-\frac{1}{2},\varphi_2(x)=(x-\frac{1}{2})^2-\frac{1}{8}$$

$$Y=(1.0,1.2840,1.6487,2.1170,2.7183)^T$$

$$\Phi_0=\begin{bmatrix}1\\1\\1\\1\\1\end{bmatrix},\quad \Phi_1=\begin{bmatrix}-0.5\\-0.25\\0.0\\0.25\\0.5\end{bmatrix},\quad \Phi_2=\begin{bmatrix}0.125\\-0.0625\\-0.125\\-0.0625\\0.125\end{bmatrix},\quad Y=\begin{bmatrix}1.0\\1.2840\\1.6487\\2.1170\\2.7183\end{bmatrix}$$

$$c_0=(Y,\Phi_0)/(\Phi_0,\Phi_0)=\sum_{i=0}^{4}y_i\times 1\Big/\sum_{i=0}^{4}1=8.768/5=1.7536$$

$$c_1=(Y,\Phi_1)/(\Phi_1,\Phi_1)=\sum_{i=0}^{4}y_i\times(x_i-\frac{1}{2})\Big/\sum_{i=0}^{4}(x_i-\frac{1}{2})^2=1.7078$$

$$c_2=(Y,\Phi_2)/(\Phi_2,\Phi_2)=\sum_{i=0}^{4}y_i\times((x_i-\frac{1}{2})^2-\frac{1}{8})\Big/\sum_{i=0}^{4}((x_i-\frac{1}{2})^2-\frac{1}{8})^2$$

$$=0.8437$$

得到二次最佳平方逼近多项式为

$$s(x)=1.7536+1.7078(x-\frac{1}{2})+0.8437((x-\frac{1}{2})^2-\frac{1}{8})$$

最佳平方逼近存在唯一。

3.误差估计

由最佳平方逼近的误差估计式

$$\|\delta\|^2 = \|f-s\|^2 = (f-s, f-s) = (f,f) - (s,f)$$

$$= (f,f) - (\sum_{j=0}^{n} c_j \varphi_j, f) = (f,f) - \sum_{j=0}^{n} c_j (\varphi_j, f)$$

对离散数据的最佳平方逼近误差

$$\|\delta\|^2 = (Y,Y) - (\sum_{j=0}^{n} c_j \Phi_j, Y) = \|Y\|^2 - \sum_{j=0}^{n} c_j (\Phi_j, Y)$$

其中 $Y = (f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_m))^T$

如果用正交函数组构造最佳平方逼近元，则

$$c_j = (Y,\Phi_j) \big/ (\Phi_j,\Phi_j), \quad (Y,\Phi_j) = c_j \left\|\Phi_j\right\|^2$$

因此有 $\|\delta\|^2 = \|Y\|^2 - \sum_{j=0}^{n} c_j^2 \left\|\Phi_j\right\|^2$

误差递推关系

第一步，用$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_{n-1}(x)$作逼近，误差

$$\|\delta_{n-1}\|^2=\|Y\|^2-\sum_{j=0}^{n-1}c_j^2\left\|\Phi_j\right\|^2$$

第二步，用$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_{n-1}(x)$，$\varphi_n(x)$作逼近，误差

$$\|\delta_n\|^2=\|Y\|^2-\sum_{j=0}^{n}c_j^2\left\|\Phi_j\right\|^2$$

$$=\|Y\|^2-\sum_{j=0}^{n-1}c_j^2\left\|\Phi_j\right\|^2-c_n{}^2\|\Phi_n\|^2$$

即有 $\|\delta_n\|^2=\|\delta_{n-1}\|^2-c_n{}^2\|\Phi_n\|^2<\|\delta_{n-1}\|^2$

最佳平方逼近的误差，随着选择的拟合基函数个数增加而减少

第四节 非线性最小二乘曲线拟合

例1： 已知数据表$x_i = x_0, x_1, \cdots, x_m,$

$$y_i = y_0, y_1, \cdots, y_m,$$

用公式$s(x)=a+bx^3$拟合所给数据。

解： $\varphi_0(x) = 1,\ \ \varphi_1(x) = x^3, s(x)=a\varphi_0(x) + b\varphi_1(x)$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0^3 \\ 1 & x_1^3 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m^3 \end{bmatrix}, \qquad Y = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \qquad A^T A \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = A^T Y$$

例2：已知数据表 $x_i = x_0, x_1, \cdots, x_m,$

$$y_i = y_0, y_1, \cdots, y_m,$$

用公式 $s(x)=\dfrac{1}{a+bx^3}$ 拟合所给数据。

解：令 $$f(x) = \frac{1}{s(x)} = a + bx^3$$

$$\varphi_0(x) = 1,\quad \varphi_1(x) = x^3,\ f(x)=a\varphi_0(x) + b\varphi_1(x)$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0^3 \\ 1 & x_1^3 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m^3 \end{bmatrix},\qquad F = \begin{bmatrix} 1/y_0 \\ 1/y_1 \\ \vdots \\ 1/y_m \end{bmatrix},\qquad A^T A \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = A^T F$$

例3：已知数据表$x_i = x_0, x_1, \cdots, x_m$,

$$y_i = y_0, y_1, \cdots, y_m,$$

用公式$s(x)=ae^{bx}$拟合所给数据。

解：令 $f(x) = \ln s(x) = \ln a + bx$

$$\varphi_0(x) = 1,\quad \varphi_1(x) = x\ ,\ f(x)=\ln a\varphi_0(x) + b\varphi_1(x)$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix},\quad F = \begin{bmatrix} \ln y_0 \\ \ln y_1 \\ \vdots \\ \ln y_m \end{bmatrix},\quad A^T A \begin{bmatrix} \ln a \\ b \end{bmatrix} = A^T F$$

例4： 已知数据表$x_i = x_0, x_1, \cdots, x_m$,

$$y_i = y_0, y_1, \cdots, y_m,$$

用公式$s(x)=a+\dfrac{b}{x}$拟合所给数据。

解： $\varphi_0(x)=1,\ \ \varphi_1(x)=\dfrac{1}{x}, s(x)=a\varphi_0(x)+b\varphi_1(x)$

$$A=\begin{bmatrix} 1 & 1/x_0 \\ 1 & 1/x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 1/x_m \end{bmatrix},\qquad Y=\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix},\qquad A^T A\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}=A^T Y$$