# Chapter 6. 数据的最小二乘拟合

数据 $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^{m}$ 的最小二乘拟合问题：

找 $\varphi(x)=y$， $\tilde{\varphi}(x)\in$ 一类函数.

s.t. $\sum_{i=1}^{m}(\tilde{\varphi}(x)-y_i)^2=\min_{\varphi(x)\in H_n}\sum_{i=1}^{m}(\varphi(x_i)-y_i)^2$.

## §6.1 线性（最小二乘拟合）

线性无关函数系 $\{\varphi_j(x)\}_{j=0}^{n}$ 称为"基"

"残量平方和"

$\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)$.

确定 $\{a_n\}$. s.t. $\boxed{E_2(a_0\cdots a_n)=\sum_{i=1}^{m}(\varphi(x_i)-y_i)^2}$ 最小

由此确定的 $\tilde{\varphi}(x)=\tilde{a}_0\varphi_0(x)+\cdots+\tilde{a}_n\varphi_n(x)$ 叫 (线性)最小二乘拟合

上述亦可加权： $E_2=\sum_{i=0}^{n}W(x_i)(\varphi(x_i)-y_i)^2$

求法. e.g. 要使 $E_2$ 最小. 即找 $E_2$ 极小值即可.

$$\frac{\partial E_2}{\partial x_k}=0,\quad k=0,1,2,\cdots n.$$

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{n}\left(\sum_{i=1}^{m}\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\right)a_j=\sum_{i=1}^{m}y_i\varphi_k(x_i),\quad k=0,\cdots n.$$

$\boxed{\varphi_0\sim\varphi_n}$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0)&\cdots&(\varphi_0,\varphi_n)\\ \vdots&&\vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0)&\cdots&(\varphi_n,\varphi_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(y,\varphi_0)\\ \vdots\\ (y,\varphi_n)\end{pmatrix}\qquad Ga=b\quad \text{法方程组}.}$$

与最佳平方逼近一致

* $\varphi_k(x)$ 有 $n$ 个

$(x_k,y_k)$ 有 $m$ 个

$(x_1,y_1)\cdots(x_m,y_m)$

其中 $\varphi_k = \begin{pmatrix} \varphi_k(x_1) \\ \vdots \\ \varphi_k(x_m) \end{pmatrix}$ , $(\varphi_i,\varphi_j) = \varphi_i^T \cdot \varphi_j$ ...

二乘法唯一性、存在性 . Page. 191.

## §6.2. Chebyshev 多项式在数据拟合中的作用.

Hilbert 矩阵

背景: 取 $1, x, \cdots x^n$ 作为基时, 若 $m$ 较大, 会使法方程组极度病态.

Chebyshev 多项式: $T_k(t) = \cos(k \arccos t)$, $k \geq 0$.

具有较好的效果.(作为基).

$T_0(t) = 1$

$T_1(t) = t$

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

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

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

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

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

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

* Chebyshev 是 $[-1,1]$ 中的函数, 故在对 $[a,b]$ 作拟合时需要 $x, t$ 变换

Chebyshev 级数下的最佳平方逼近

$$\boxed{t(x) = \frac{2x-(a+b)}{b-a}, \quad x \in [a,b].}$$

就有: $T_k\left(\frac{2x-(a+b)}{b-a}\right) = \tilde{T}_k(x) = \varphi_k(x)$ 作为基

~~选取数据时若 $a = x_1$, $b = x_m$. 则代入得~~

为方便书写, 记 $t(x_i) = t_i$

$$T_j = [T_j(t_1) \cdots T_j(t_m)]^T$$

$T_j = \tilde{T}_j$ $\qquad T_j(t_i) = T_j(t(x_i))$

不同 $\qquad = \tilde{T}_j(x)$

步骤 ① $t_i = t(x_i) = \dfrac{2x_i - (a+b)}{b-a}$

② $T_0 \cdots T_n$ , $T_0(t_1), T_0(t_2) \cdots T_0(t_m)$

$T_1(t_1), T_1(t_2) \cdots T_1(t_m)$

$\vdots$

$T_n(t_1), T_n(t_2) \cdots T_n(t_m)$

③ $(\varphi_n, \varphi_n)$ : $(T_i, T_j)$ & $(y, T_i)$

④ $Gc = b$

⑤ $\varphi(x) = c_0 T_0 + \cdots + c_m T_m$.

## §6.3. 离散的 Fourier 变换.

若 $\varphi_k(x)$ 正交. 则 $G$ 就是对角矩阵. 易于计算.

假设 $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{2m-1}$ 中 $\boxed{x_i \text{ 是 } [-\pi,\pi] \text{ 中等距点}}$ : $x_i = \pi + \frac{i}{m}\pi$.

取基. $\varphi_0(x), \varphi_1(x) \cdots \varphi_{2n-1}(x)$ : $\varphi_0(x) = \frac{1}{2}$

$\varphi_k(x) = \cos kx$ , $k = 1, 2, \cdots n$

$\varphi_{k+n}(x) = \sin kx$ , $k = 1, 2, \cdots, n-1$.

是直交系

$$\Rightarrow \boxed{\varphi(x) = \frac{1}{2} a_0 + a_n \cos nx + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)}$$

其中 $a_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j \underline{\cos kx_j}$ $\quad k = 0, 1, \cdots n$

$b_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j \underline{\sin kx_j}$ $\quad k = 1, 2, \cdots n-1$