函数逼近与计算

函数逼近

拟合与逼近

拟合与逼近都是用简单函数**近似替代**较复杂函数的问题，其中插值近似标准是在插值点处误差为 0，而实际应用中有时候不要求具体某些点误差为 0，而要求整体的误差限制，这就引出了拟合和逼近的概念

函数逼近：对于函数类 A 中给定的函数 $f(x)$，记作 $f(x) \in A$，要求在另一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。其中 A 通常是区间 $[a,b]$ 上的连续函数，记为 $C[a,b]$，而 B 通常为 n 次多项式，有理函数或分段低次多项式

度量标准

一致（均匀）逼近

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

均方（平方）逼近

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

主要考虑在上述度量标准下使用代数多项式 $p(x)$ 逼近 $f(x) \in C[a,b]$

基本概念

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：$C[a,b]$

线性无关

线性无关：设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_{n-1}(x) \in C[a,b]$，若

$$a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_{n-1}\varphi_{n-1}(x) = 0 \iff a_0 = a_1 = \cdots = a_{n-1} = 0$$

则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_{n-1}(x)$ 在 $[a,b]$ 上是线性无关的，而

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

是 $C[a,b]$ 的一个子集，记为

$$\Phi = \operatorname{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_{n-1}\}$$

如不超过 n 次的多项式全体的集合即为

$$H_n = \operatorname{span}\left\{1, x, x^2, \cdots x^n\right\}$$

范数

$f \in C[a,b]$ 的范数 $\|f\|$ 满足

- 非负性：$\|f\| \geqslant 0$，且 $\|f\| = 0 \iff f = 0$
- 齐次性：$\|af\| = |a| \cdot \|f\|$ 对任意 $f \in C[a,b], a \in \mathbb{R}$ 成立
- 三角不等式：对任意 $f, g \in C[a,b]$，有 $\|f+g\| \leqslant \|f\| + \|g\|$

连续函数空间上三种常用范数：

- ∞ 范数：$\|f\|_\infty = \max_{a \leqslant x \leqslant b} |f(x)|$
- 1 范数：$\|f\|_1 = \int_a^b |f(x)| dx$
- 2 范数：$\|f\|_2 = \left(\int_a^b f^2(x) dx\right)^{\frac{1}{2}}$

函数内积

若 $f(x), g(x) \in C[a,b]$，则称 $\int_a^b f(x)g(x)dx$ 为 $f(x), g(x)$ 的内积，记为 (f,g)

内积满足

- $(f,g) = (g,f)$
- $(cf,g) = c(f,g)$
- $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$

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

> 柯西-施瓦茨不等式
>
> 设 X 为一个内积空间，对 $\forall u, v \in X$ 有
>
> $$|(u,v)|^2 \leqslant (u,u)(v,v)$$
>
> 维尔斯特拉斯定理

> 设 $f(x) \in C[a,b]$，则对任意 $\varepsilon > 0$，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

利用内积可定义函数的平方模（即 2 范数）

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

权函数

考虑 $f(x)$ 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

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

这里的函数 $\rho(x)$ 是非负连续函数，称为 $[a,b]$ 上的权函数

权函数需满足

- $\int_a^b |x|^n \rho(x)dx, (n = 0, 1, \dots)$ 存在
- 对非负的连续函数 $g(x)$，$\int_a^b g(x)\rho(x)dx = 0 \iff g(x) = 0$

权函数在物理上往往表示密度函数

正交多项式

正交

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

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

则称 $f(x), g(x)$ 在 $[a,b]$ 上带权正交

若函数族 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x), \cdots$ 满足

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

则称 $\{\varphi_k(x)\}$ 是 $[a,b]$ 上带权正交函数族，若 $A_k\equiv 1$ 则称为标准正交函数族

设 $\varphi_n(x)$ 是 $[a,b]$ 上最高次项系数 $a_n\neq 0$ 的 n 次多项式，$\rho(x)$ 为权函数，若多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 满足上述关系式，则称多项式序列 $\{\varphi_n(x)\}_0^\infty$ 在 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 正交，称 $\varphi_n(x)$ 为 $[a,b]$ 上 n 次**正交多项式**

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

构造正交多项式

给定区间 $[a,b]$ 和权函数 $\rho(x)$ 之后，可从一组线性无关的基 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n,\ldots\}$ 利用逐个正交化的手法构造出正交多项式

$$
\begin{aligned}
\phi_0(x)&=1\\
\phi_n(x)&=x^n-\sum_{j=0}^{n-1}\frac{(x^n,\phi_j(x))}{(\phi_j(x),\phi_j(x))}\phi_j(x)
\end{aligned}
$$

如此构造出的正交多项式序列有如下性质

- $\phi_n(x)$ 是最高项系数为 1 的 n 次正交多项式
- 任何 n 次多项式 $P_n(x)\in H_n$ 可表示为 $\phi_1,\phi_2,\ldots,\phi_n$ 的线性组合
- 当 $k\neq j$ 时有 $(\phi_j,\phi_k)=0$，且 ϕ_k 与任意次数小于 k 的多项式正交
- 有递推关系

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

  且

  $$
  \begin{aligned}
  \phi_0(x)&=1,\phi_{-1}(x)=0\\
  \alpha_n&=\frac{(x\phi_n(x),\phi_n(x))}{(\phi_n(x),\phi_n(x))}\quad(n=0,1,\ldots)\\
  \beta_n&=\frac{(\phi_n(x),\phi_n(x))}{(\phi_{n-1}(x),\phi_{n-1}(x))}\quad(n=1,2,\ldots)
  \end{aligned}
  $$

常用正交多项式

Legendre 多项式

区间取 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x)=1$，由 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n,\ldots\}$ 正交化得到的多项式，记为

$$P_0(x),P_1(x),\ldots,P_n(x),\ldots$$

其简单表达式为

$$P_0(x)=1,\quad P_n(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left\{\left(x^2-1\right)^n\right\}\qquad (n=1,2,\cdots)$$

求导后

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

易得其首项系数为

$$\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$$

故首项系数为 1 的 Legendre 多项式为

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

Legendre 多项式有正交性

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

其奇偶性为

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

且有递推关系

$$(n+1)P_{n+1}(x)=(2n+1)xP_n(x)-nP_{n-1}(x)\quad n=(1,2\cdots)$$

常用公式为

$$\begin{aligned}
&P_0(x)=1\\
&P_1(x)=x\\
&P_2(x)=\left(3x^2-1\right)/2\\
&P_3(x)=\left(5x^3-3x\right)/2\\
&P_4(x)=\left(35x^4-30x^2+x\right)/2\\
&P_5(x)=\left(63x^5-70x^3+15x\right)/8\\
&P_6(x)=\left(231x^6-315x^4+105x^2-5\right)/16
\end{aligned}$$

$P_n(x)$ 在 $[-1,1]$ 上有 n 个零点

Chebyshev 多项式

区间为 $[-1,1]$，权函数为 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，由序列 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n,\ldots\}$ 正交化得到的多项式，可表示为

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

若令 $x=\cos\theta$，则

$$T_n(x)=\cos n\theta\quad 0\leqslant\theta\leqslant\pi$$

Chebyshev 多项式有递推关系

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

且常用公式为

$$\begin{aligned}
&T_0(x)=1\\
&T_1(x)=x\\
&T_2(x)=2x^2-1\\
&T_3(x)=4x^3-3x\\
&T_4(x)=8x^4-8x^2+1\\
&T_5(x)=16x^5-20x^3+5x\\
&T_6(x)=32x^6-48x^4+18x^2-1
\end{aligned}$$

其最高项系数为 2^{n-1}

有正交性

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

且 $T_{2k}(x)$ 只含偶次幂，$T_{2k+1}(x)$ 只含奇次幂。同样的，T_n 在 $[-1,1]$ 上有 n 个零点

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

可使用 Chebyshev 多项式线性表示 x^n

$$x^n=2^{1-n}\sum_{k=0}^{\frac{n}{2}}\binom{n}{k}T_{n-2k}(x)$$

最佳逼近

最佳一致逼近问题：讨论 $f \in C[a,b]$，在 $H_n = span\{1, x, \ldots, x^n\}$ 中求多项式 $P^*(x)$ 使

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

最佳平方逼近

考虑 $f \in C[a,b]$，以及 $C[a,b]$ 的子集 $\varphi \subset C[a,b]$

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

若存在 $S^*(x) \in \varphi$ 使得

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

则称 $S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在子集 φ 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

求 $S^*(x)$ 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，利用多元函数求极值的必要条件

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

则

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

于是有

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

这是关于 $a_1, a_2, \ldots, a_n$ 的线性方程组，称为**法方程**

由于 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)$ 线性无关，其系数矩阵行列式非异，故有唯一解，即可求出 $S^*(x)$

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

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

此时法方程的系数矩阵即为 Hilbert 矩阵

用正交函数族做最佳平方逼近

直接用 $\{1, x, \ldots, x^n\}$ 做基，其系数矩阵是病态的，求解法方程困难，故通常采用正交多项式做基底构造最佳平方多项式

考虑最佳平方逼近时基函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)$ ，若其满足

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

则 $(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = 0, i \neq j$ 而 $(\varphi_j(x), \varphi_j(x)) > 0$ 。故法方程系数矩阵为对角阵，解为

$$a_k^* = \frac{(f(x), \varphi_k(x))}{(\varphi_k(x), \varphi_k(x))}$$

最佳平方逼近函数为

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

若函数按 Legendre 多项式 $\{P_0(x), P_1(x), \ldots, P_n(x)\}$ 展开

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

则其中的系数

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

当求区间 $[a, b]$ 上的 $f(x)$ 的最佳平方逼近时

首先令 $x = \frac{b-a}{2} t + \frac{b+a}{2}$ ，将函数化为 $f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{b+a}{2}\right) = g(t)$ ，其中 $t \in [-1, 1]$

然后求 $g(t)$ 的最佳平方逼近 $G(t)$

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

数据拟合的最小二乘法

最小二乘法

函数的最佳平方逼近需要函数是连续的，而实际情况中一般函数只在一组离散点上给定，数据的曲线拟合需要根据问题确定拟合曲线形式，通过实际计算得到较好的结果，这样的方法称为**曲线拟合的最小二乘法**

在给定点上通过平方误差度量拟合的余项，并确定参数使得该误差最小

需要解决两个问题

- 选择什么类型的函数作为拟合函数
- 如何确定拟合函数中的参数

线性拟合时，假定拟合函数为

$$y=a+bx$$

则以 a,b 为待定系数，计算残差和

$$\sum_{k=1}^{n}|a+bx_k-y_k|$$

使其取最小值，求出 a,b ，实际上为了方便，常常是求下列函数的最小值

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

只需令

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

类似最佳平方逼近，得到法方程

$$\begin{cases} na+\sum_{k=1}^{n}x_kb=\sum_{k=1}^{n}y_k \\ \sum_{k=1}^{n}x_ka+\sum_{k=1}^{n}x_k^2b=\sum_{k=1}^{n}x_ky_k \end{cases}$$

一般曲线拟合的最小二乘法

对于一般曲线的最小二乘法，设 $f(x)$ 在一组离散点集 $\{x_i\}$ 上给定

$$y_i = f(x_i), i = 0, 1, \ldots, m$$

求函数 $S^*(x)$ 与所给数据拟合，记误差 $\delta_i = S^*(x_i) - y_i, \delta = \{\delta_1, \delta_2, \ldots, \delta_m\}^T$ ，设

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

是 $C[a, b]$ 上的线性无关函数族，在

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

中找函数 $S^*(x)$ 使得

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

即一般曲线拟合的最小二乘法，此处

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

求 $S^*(x)$ 使得

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega\left(x_i\right)\left[S^*\left(X_i\right) - y_i\right]^2$$

最小，这里的权函数 $w(x_i)$ 可以看作点 (x_i, y_i) 的频数，可将其转化为求多元函数的极小值问题，得到法方程

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

记

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

$$\left(f, \varphi_k\right) = \sum_{i=0}^{m} \omega\left(x_i\right) f\left(x_i\right) \varphi_k\left(x_i\right) \equiv d_k$$

则法方程为

$$\sum_{j=0}^{n}\left(\varphi_k, \varphi_j\right) a_j \equiv d_k$$

由于函数族线性无关，法方程系数矩阵非异，有唯一解，可求出 $S^*(x)$

若函数非线性化，函数图像有渐近线，如

- $\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x}$
- $y = a \cdot e^{b/x}$

则可将其线性化

如令 $Y = \frac{1}{y}, X = \frac{1}{x}$ ，则

$$\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x} \iff Y = a + bX$$

或是令 $Y = \ln y, X = \frac{1}{x}, A = \ln a$ ，则

$$y = a \cdot e^{\frac{b}{x}} \iff Y = A + bX$$

实际中需要根据均方误差选取合适的模型