《数值分析》

函数逼近

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

https://faculty.ustc.edu.cn/yxu

向量范数

向量范数定义

映射: $\|\cdot\|: R^n \to [0, +\infty)$ 满足:

- **①** 非负性: $\forall x \in R^n$, $||x|| \ge 0$, $x = 0 \Leftrightarrow ||x|| = 0$.
- ② 齐次性: $\forall x \in R^n$, $a \in R$, ||ax|| = |a|||x||
- **③** 三角不等式: $\forall x, y \in R^n$, $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$

称该映射为向量的一种范数.

常见向量范数

1
$$5$$
 1 5 **1**

②
$$2范数: ||x||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$$

③ ∞范数:
$$||x||_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\}$$



范数的等价性

设 $R_1(x)$ 和 $R_2(x)$ 为任意两种范数,则存在与x无关的正常数 C_1 和 C_2 ,使得

$$C_1R_2(x) \le R_1(x) \le C_2R_2(x), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

常用范数的等价关系

$$||x||_2 \le ||x||_1 \le \sqrt{n} ||x||_2$$

 $||x||_{\infty} \le ||x||_2 \le \sqrt{n} ||x||_{\infty}$
 $||x||_{\infty} \le ||x||_1 \le n ||x||_{\infty}$

离散内积

定义:函数f,g的关于离散点列 $\{x_i\}_{i=0}^n$ 的离散内积为:

$$(f,g)_h = \sum_{i=0}^n f(x_i)g(x_i)$$

离散范数

定义:函数f 的离散范数为

$$||f||_h = \sqrt{(f,f)_h}$$

该种内积,范数的定义与向量的2范数一致。

还可以定义函数的离散范数为:

$$||f||_h = \max_{1 \le i \le n} \{f(x_i)\}, \quad ||f||_h = \sum_{i=1}^n |f(x_i)|$$

曲线拟合

- 给出一组离散点,确定一个函数逼近原函数
- 离散数据通常是由观察或者测试得到的,不可避免会有误差
- 需要一种新的逼近原函数的手段:
 - 不要求过所有的点 (可以消除误差影响)
 - ② 尽可能表现数据的趋势,靠近这些点
- 需要在给定函数空间 Φ 上找到函数 ϕ ,使得 ϕ 到f的距离最小。函数 $\phi(x)$ 称为f(x)在空间 Φ 上的拟合曲线。
- 曲线拟合在实际中有广泛的应用,特别是在实验、统计等方面。
 - 根据实验或观察得到数据,将数据在平面上标出,然后确定 拟合曲线的类型
 - ② 拟合曲线的类型已知,需要确定曲线的具体参数

曲线拟合的最小二乘问题

定义

f(x)为定义在区间[a,b]上的函数, $\{x_i\}_{i=0}^m$ 为区间上m+1个互不相同的点, Φ 为给定的某一函数类。求 Φ 上的函数 $\phi(x)$ 满足f(x)和 $\phi(x)$ 在给定的m+1点上的距离最小,如果这种距离取为2-范数的话,称为最小二乘问题。即:求 $\phi(x)\in\Phi$,使得

$$R_2 = \sqrt{\sum_{i=0}^{m} (\phi(x_i) - f(x_i))^2}$$

最小。

最小二乘问题的求解

设
$$\Phi = \operatorname{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots \varphi_n\},$$

$$\phi(x) = a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) \cdots + a_n \varphi_n(x)$$

则最小二乘问题为

$$||f(x)-(a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)\cdots+a_n\varphi_n(x))||_h$$

关于系数 $\{a_0, a_1, \cdots, a_n\}$ 最小。

最小二乘问题的求解

$$||f(x) - (a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) \cdots + a_n\varphi_n(x))||_h^2$$

$$= ||f||_h^2 - 2(f, a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) \cdots + a_n\varphi_n(x))_h$$

$$+ ||a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) \cdots + a_n\varphi_n(x)||_h^2$$

$$= ||f||_h^2 - 2\sum_{k=0}^n a_k(f, \varphi_k)_h + \sum_{i,k=0}^n a_i a_k(\varphi_i, \varphi_k)_h$$

$$= Q(a_0, a_1, \dots, a_n)$$

由于它关于系数 $\{a_0, a_1, \cdots, a_n\}$ 最小,因此有

$$\frac{\partial Q}{\partial a_i} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n$$
i.e.
$$\sum_{k=0}^n a_k (\varphi_i, \varphi_k)_h = (f, \varphi_i)_h, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

最小二乘问题的求解

写成矩阵形式有:

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0)_h & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n)_h \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0)_h & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n)_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f, \varphi_0)_h \\ \vdots \\ (f, \varphi_n)_h \end{pmatrix}$$

称为拟合曲线的法方程。由 $\{arphi_0,arphi_1,\cdots,arphi_n\}$ 的线性无关性,知道该方程存在唯一解。

注

法方程的系数矩阵是病态的,即在实际求解中,舍入误差会引起 解的较大误差,因此在计算机上可用双精度计算。

线性拟合

取 ϕ 为线性多项式空间,函数空间的基为 $\{1,x\}$,拟合曲线为y=a+bx,则法方程为

$$\left(\begin{array}{cc} (1,1)_h & (1,x)_h \\ (x,1)_h & (x,x)_h \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} a \\ b \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} (f,1)_h \\ (f,x)_h \end{array}\right)$$

二次拟合

取 Φ 为二次多项式空间,函数空间的基为 $\{1, x, x^2\}$,拟合曲线为 $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$,则法方程为

$$\begin{pmatrix} (1,1)_h & (1,x)_h & (1,x^2)_h \\ (x,1)_h & (x,x)_h & (x,x^2)_h \\ (x^2,1)_h & (x^2,x)_h & (x^2,x^2)_h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,1)_h \\ (f,x)_h \\ (f,x^2)_h \end{pmatrix}$$

形如aebx拟合

取函数空间 $\Phi = \{ae^{bx}, a, b \in R\}$,该函数空间并不构成线性空间,不易得到平方误差极小意义下的拟合曲线 $y = ae^{bx}$ 。但由

$$\ln y = \ln a + bx$$

可以先做 $y^* = a^* + bx$,由此得到

$$y=e^{y^*}$$

则法方程为

$$\left(\begin{array}{cc} (1,1)_h & (1,x)_h \\ (x,1)_h & (x,x)_h \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} a^* \\ b \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} (f,1)_h \\ (f,x)_h \end{array}\right)$$

求如下数据的最小二乘拟合曲线

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10 29
Уi	2	3	5	7	11	13	17	19	23	29

• 线性拟合

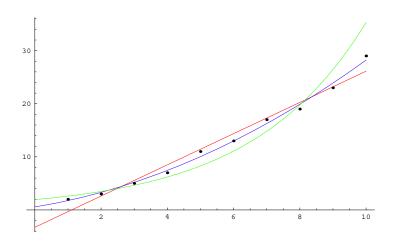
$$y = -3.26667 + 2.93939x$$

• 二次拟合

$$y = 0.566667 + 1.02273x + 0.174242x^2$$

• aebx 拟合

$$y^* = 0.664723 + 0.289876x$$



矛盾方程组

给定数据序列 (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \cdots, m$,作拟合直 线p(x) = a + bx。如果要求直线p(x)通过这些点,则有

$$p(x_i) = a + bx_i = y_i, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

写成矩阵形式有

$$\left(\begin{array}{cc} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} a \\ b \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{array}\right)$$

若秩 $(A,b) \neq A$,则方程组Ax = b无解,该方程组被称为矛盾方程组。

矛盾方程组的求解

求解一个矛盾方程组

$$\begin{array}{cccc}
A & x & = & b \\
m \times n & n \times 1 & & m \times 1
\end{array}$$

m > n, 计算的是在均方误差 $||Ax - b||_h$ 极小意义下的解,也就是最小二乘问题。

定理

- ① $A \rightarrow m \times n$ 矩阵, $b \rightarrow m \times 1$ 列向量, $A^T A = A^T b$ 成为方程A = b的法方程,法方程恒有解。

曲线拟合与矛盾方程组的求解

对离散数据 (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \cdots, m$ 作n次多项式曲线拟合,即求解

$$Q(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i + \dots + a_n x_i^n - y_i)^2$$

的极小问题与求解矛盾方程组 $Alpha = \mathbf{y}$ 是等价的,其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

函数逼近

- 函数逼近是与函数插值理论同时发展起来的。其经典问题为:已知区间[a,b]上的连续函数f,对某一固定整数n,找一个次数至多是n次的多项式,p,使其与f的偏差最小。这里的偏差可以有不同的定义,如最大值或平方积分。
- 一般的函数逼近问题是:给定一个赋范函数空间E以及它的一个子空间G。若 $f \in E$,计算 $p \in G$ 使得 $\|f p\|$ 最小。同样这里的 $\|\cdot\|$ 定义也可以有多种选择。所得到的p称为f的在 $\|\cdot\|$ 意义下的最佳逼近
- 函数逼近中比较成熟的理论是单变量函数的最小二乘理论和Tchebyshev理论

最佳逼近的存在性和唯一性

Theorem

若G是E的一个有限维子空间,则E的每一个元素在G中至少有一个最佳逼近。

证明:给定 $f \in E$,则f在G中最佳逼近的候选者g必定在下述集合中:

$$K = \{g \in G : \|g - f\| \leqslant \|f\|\}$$

K为有界闭集,而G是有限维的,因此K是紧集。而泛函 $g \mapsto \|f - g\|$ 是连续的,因此根据紧集上的连续实值函数能达到下确界得证定理。

内积空间中的逼近理论

Theorem

设G是内积空间E的子空间。对 $f \in E, g \in G$,下列性质等价:

- ① g是G中f的一个最佳逼近
- \circ $f-g\perp G$

证明: $若f - g \perp G$, 对任一 $h \in G$,

$$||f - h||^2 = ||(f - g) + (g - h)||^2 = ||f - g||^2 + ||g - h||^2 \ge ||f - g||^2$$

反之,设g是f的一个最佳逼近。再设 $h \in G$, $\lambda > 0$,

$$0 \leqslant ||f - g + \lambda h||^2 - ||f - g||^2$$
$$= \lambda \{2\langle f - g, h \rangle + \lambda ||h||^2\}$$

令 $\lambda \to 0+$, 得到 $\langle f-g,h \rangle \geqslant 0$. 类似地, $\langle f-g,-h \rangle \geqslant 0$ 。所以 $\langle f-g,h \rangle = 0$,即 $f-g \perp G$.



最佳逼近元是唯一的

Theorem

设G是内积空间E的子空间,则 $f \in E$ 在G中的最佳逼近元是唯一的。

证明: $\Xi g_1 \pi g_2$ 同时是 $f \in G$ 中的最佳逼近元,而且 $g_1 \neq g_2$,则 $\|g_1 - g_2\| > 0$ 以及 $f - g_1 \perp g_2$.

$$||f-g_2||^2 = ||(f-g_1)+(g_1-g_2)||^2 = ||f-g_1||^2 + ||g_1-g_2||^2 > ||f-g_1||^2$$

这与g2也为最佳逼近矛盾。

计算方法

• 设 $\{u_1, \ldots, u_n\}$ 是子空间G的一组基,为了计算f在G中的最佳逼近u,待定 $u = \sum_{j=1}^n c_j u_j$. $u - f \perp G$ 等价于 $\langle u - f, u_i \rangle = 0$, $i = 1, \ldots, n$. 由此得到方程组

$$\sum_{j=1}^{n} c_{j} \langle u_{j}, u_{i} \rangle = \langle f, u_{i} \rangle$$

这是一个含有n个未知数,n个线性方程的方程组。其系数矩阵 $G = (\langle u_i, u_j \rangle)$ 称为Gram矩阵。

Theorem

Gram矩阵为对称正定阵。

计算函数 $f(x) = \sin x$ 在空间 $\operatorname{span}(x, x^3, x^5)$ 中的最佳逼近。所用范数为

$$||f|| = \left(\int_{-1}^{1} f^{2}(x) dx\right)^{1/2}$$

解: 令 $g_1(x) = x$, $g_2(x) = x^3$, $g_3(x) = x^5$. 待定最佳逼近元为 $g(x) = c_1x + c_2x^3 + c_3x^5$, 则由 $\langle g - f, g_i \rangle = 0$ 得到如下方程组:

$$c_1\langle g_1,g_i\rangle+c_2\langle g_2,g_i\rangle+c_3\langle g_3,g_i\rangle=\langle f,g_i\rangle, i=1,2,3$$

即

$$\left(\begin{array}{ccc} 1/3 & 1/5 & 1/7 \\ 1/5 & 1/7 & 1/9 \\ 1/7 & 1/9 & 1/11 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \sin 1 - \cos 1 \\ -3 \sin 1 + 5 \cos 1 \\ 65 \sin 1 - 101 \cos 1 \end{array} \right)$$

系数矩阵为Hilbert矩阵,一个著名的病态矩阵。



标准正交基

根据幂基计算最佳逼近元,计算过程的稳定性不好。而下面的定理说明标准正交基的优势

Theorem

设G的标准正交基为 $\{g_1,g_2,\ldots,g_n\}$, $f\in E$. 则 $g=\sum_{i=1}^n c_ig_i$ 为f在E中最佳逼近当且仅当 $c_i=\langle f,g_i\rangle$.

证明: $g = \sum_{i=1}^{n} c_i g_i$ 为f在E中最佳逼近 $\iff f - g \perp G \iff f - g \perp g_i, i = 1, 2, ..., n.$

$$\left\langle f - \sum_{i=1}^{n} c_i g_i, g_j \right\rangle = \left\langle f, g_j \right\rangle - \sum_{i=1}^{n} c_i \left\langle g_i, g_j \right\rangle$$

= $\left\langle f, g_j \right\rangle - c_j = 0$

标准正交基(续)

- 可以应用Gram-Schmidt过程把一般的基转化为标准正交基
- 前例中 $\{x, x^3, x^5\}$ 的转化结果为 $\{x/\sqrt{2/3}, (5x^3-3x)/(2\sqrt{2/7}), (63x^5-70x^3+15x)/(8\sqrt{2/11})\}$
- 如果内积定义满足 $\langle fg,h\rangle = \langle f,gh\rangle$,从单项式函数 $1,x,\ldots$ 出发,应用Gram-Schimidt过程的结果称为正交多项式
- 常用的内积

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx$$

满足上述要求

正交多项式

Theorem

如下定义的多项式序列是正交的:

$$p_n(x) = (x - a_n)p_{n-1}(x) - b_n p_{n-2}(x), \quad n \geqslant 2$$

其中 $p_0(x) = 1$, $p_1(x) = x - a_1$,

$$a_{n} = \frac{\langle x p_{n-1}(x), p_{n-1}(x) \rangle}{\langle p_{n-1}(x), p_{n-1}(x) \rangle}$$
$$b_{n} = \frac{\langle x p_{n-1}(x), p_{n-2}(x) \rangle}{\langle p_{n-2}(x), p_{n-2}(x) \rangle}$$

所用的内积满足 $\langle fg, h \rangle = \langle f, gh \rangle$

证明:由归纳定义可知每个pn都是首一n次多项式,因此an和bn的定义中分母不为零。

下面对n归纳证明: $\langle p_n, p_i \rangle = 0$, $i = 0, 1, \ldots, n-1$. n = 0没有需要证明的。n = 1时由 a_1 的定义可以验证成立. 设n - 1时成立, $n \geqslant 2$. 那么可以直接验证

$$\langle p_n,p_{n-1}\rangle=\langle p_n,p_{n-2}\rangle=0$$

对i = 0, 1, ..., n - 3,

$$\begin{aligned} \langle p_n, p_i \rangle &= \langle x p_{n-1}, p_i \rangle - a_n \langle p_{n-1}, p_i \rangle - b_n \langle p_{n-2}, p_i \rangle \\ &= \langle p_{n-1}, x p_i \rangle \\ &= \begin{cases} \langle p_{n-1}, p_{i+1} + a_{i+1} p_i + b_{i+1} p_{i-1} \rangle = 0 & i \geqslant 1 \\ \langle p_{n-1}, p_1 + a_1 p_0 \rangle = 0 & i = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Legendre多项式

• 当内积定义为

$$\int_{-1}^{1} f(x)g(x)dx$$

时生成的正交多项式称为Legendre多项式

• 前几个多项式为

$$p_0(x) = 1$$

$$p_1(x) = x$$

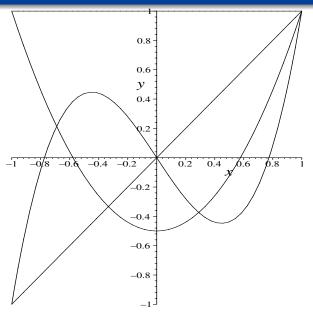
$$p_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$$

$$p_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x$$

$$p_4(x) = x^4 - \frac{6}{7}x^2 + \frac{3}{35}$$

$$p_5(x) = x^5 - \frac{10}{9}x^3 + \frac{5}{21}x$$

Legendre多项式



Tchebyshev多项式与Jacobian多项式

• 应用内积

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

时对应的正交多项式为Tchebyshev多项式

• 应用内积

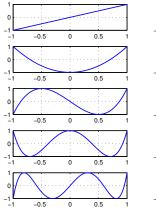
$$\langle f,g\rangle = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}dx$$

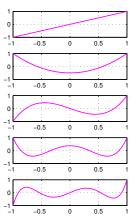
时对应的正交多项式为Jacobian多项式

Tchebyshev多项式与Legendre多项式



Legendre





计算方法

• 给定 $u = \sum_{k=0}^{n} c_k p_k$, 其中 p_i 为某一正交多项式,那么可以应用下述算法计算u(x)的值:

$$d_{n+2} \leftarrow 0$$
; $d_{n+1} \leftarrow 0$ for $k=n$ to 0 step -1 do $d_k \leftarrow c_k + (x-a_{k+1})d_{k+1} - b_{k+2}d_{k+2}$ end do

• 有效性验证:

$$u(x) = \sum_{k=0}^{n} [d_k - (x - a_{k+1})d_{k+1} + b_{k+2}d_{k+2}]p_k(x)$$

$$= d_0p_0(x) + d_1[p_1(x) - (x - a_1)p_0(x)]$$

$$+ \sum_{k=2}^{n} d_k[p_k(x) - (x - a_k)p_{k-1}(x) + b_kp_{k-2}(x)]$$

$$= d_0$$

极值性质

Theorem

前面定义的正交多项式pn是所有的首一n次多项式中范数最小的。

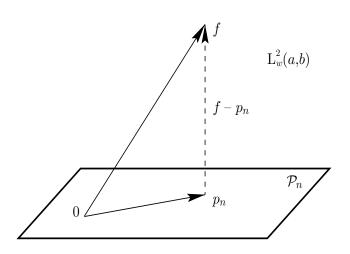
证明:任意首一n次多项式可以写作 $q=p_n-\sum\limits_{i=0}^{n-1}c_ip_i$. $\|q\|$ 具有最小范数相当于在 Π_{n-1} 空间中寻找 p_n 的最佳逼近。因此应当有 $q\perp\Pi_{n-1}$,从而需选取 $c_i=0$.

正交投影

• 给定空间G的一组标准正交基 $[u_1, ..., u_n]$,定义正交投影算子:

$$P_n f = \sum_{i=1}^n \langle f, u_i \rangle u_i$$

- 算子Pn具有如下性质:
 - Pn为E到G的线性映射
 - ② $P_n^2 = P_n$, 因此称为投影算子
 - \bullet $f P_n f \perp G$
 - Pnf是f在G中的最佳逼近
 - **⑤** 每个 P_n 都是自伴的,即 $\langle P_n f, g \rangle = \langle f, P_n g \rangle$



最佳逼近

- 考虑定义在给定拓扑空间X上的全体实值连续函数形成的空间C(X),这里X为紧的Hausdorff空间
- 定义范数为

$$||f|| = \max_{x \in X} |f(x)|$$

则C(X)成为一个赋范空间(从而是Banach空间)

• C(X)中的最佳逼近问题为:给定 $f \in C(X)$ 以及C(X)的一个有限维子空间G,计算 $g \in G$ 使得

$$||f-g|| = \operatorname{dist}(f,G) := \inf_{\bar{g} \in G} ||f-\bar{g}||$$

• 由上节"最佳逼近存在性定理"可知g是存在的



例:用 Π_1 中元素在区问[a,b]上最佳逼近 $f(x) \in C^2[a,b]$

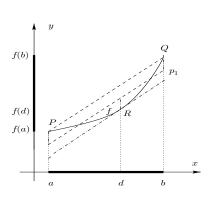
• 线性函数为了成为最佳 逼近存在3个极大偏差的 点,它们是a, b以及其间 的一点d, 记极大偏差 为 δ , 最佳逼近为p(x), 则 应有

$$p(a) - f(a) = \delta$$

$$p(d) - f(d) = -\delta$$

$$p(b) - f(b) = \delta$$

$$p'(d) - f'(d) = 0$$



则应有

• 用 Π_1 中元素在区间 $[0,\pi/2]$ 上最佳逼近 $f(x) = \cos x$ 如左所示线性函数为了成为最佳逼近,还需要向下移动一些,从而减小极大偏差。此外,其斜率还可以调整。为了成为最佳逼近,存在3个极大偏差的点,它

$$g(0) - f(0) = \delta$$

$$g(\xi) - f(\xi) = -\delta$$

$$g(\pi/2) - f(\pi/2) = \delta$$

$$g'(\xi) - f'(\xi) = 0$$

们是 $0, \pi/2$ 以及其间的一点 ξ , 记极大偏差为 δ , 最佳逼近为g(x),

