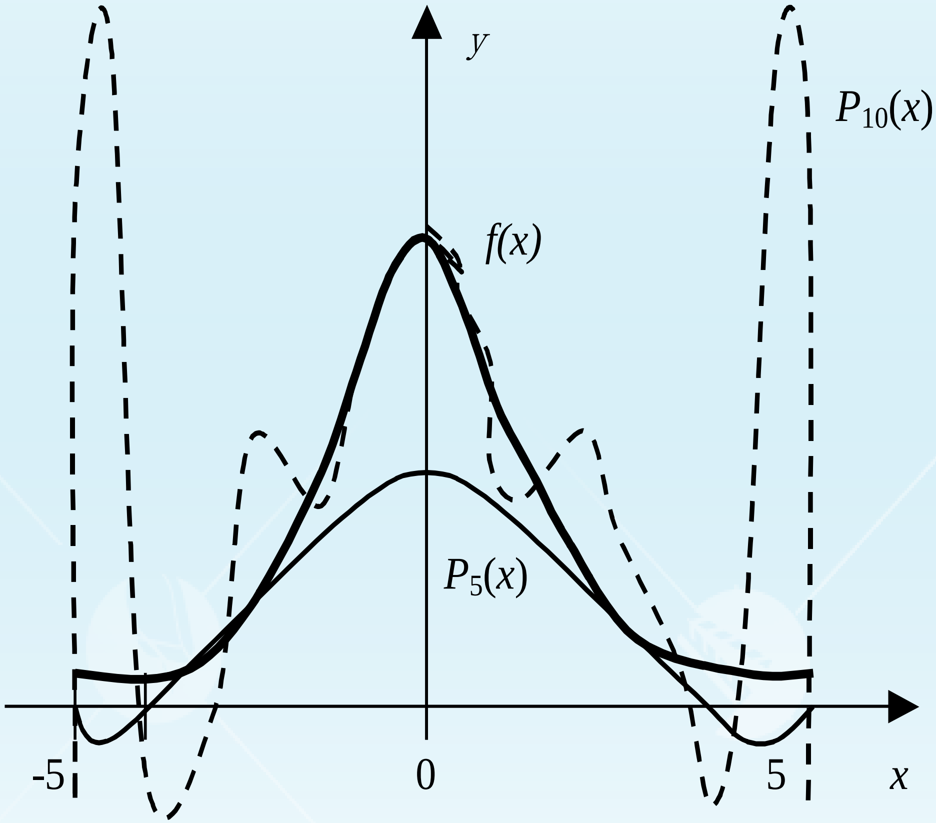
江南大学

第六章 函数逼近

插值法的缺点

已知离散点$(x_i, y_i)(i=1,2,\cdots,n)$。求一个简单易算的近似函数$\varphi(x)\approx f(x)$

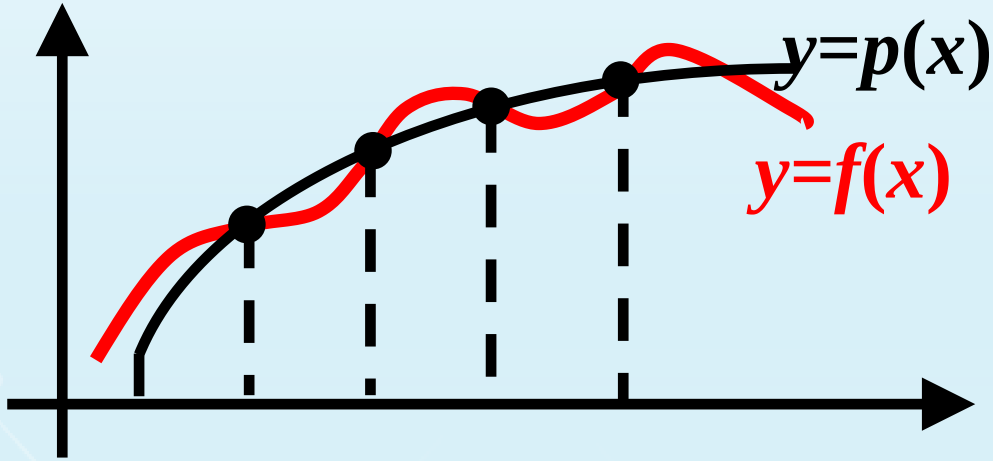
但是 ①n很大



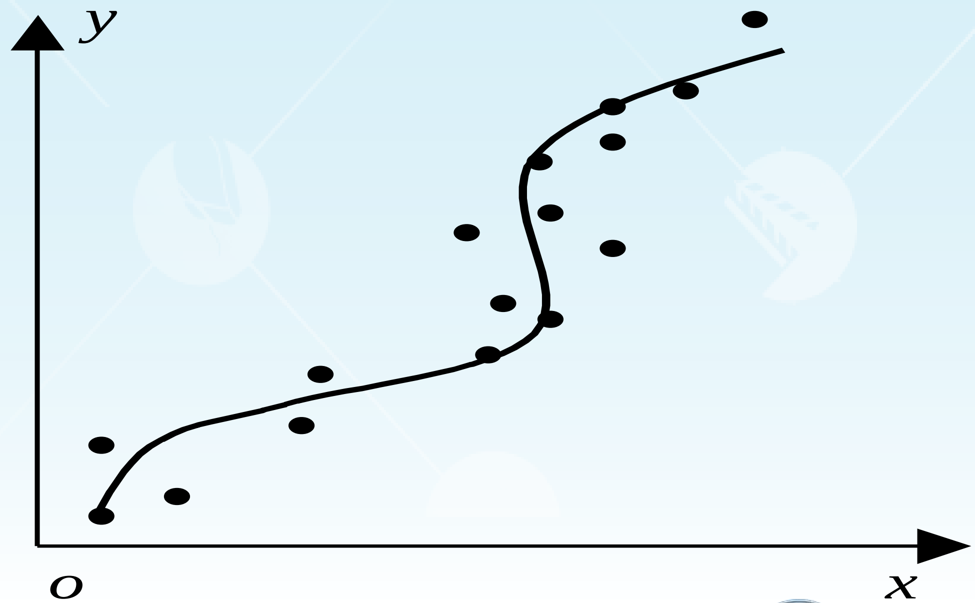
②y_i本身是测量值，不准确，即$y_i \neq f(x_i)$

插值和拟合几何解释

函数插值示意图



曲线拟合示意图



曲线拟合定义

曲线拟合函数 $\varphi(x)$ 不要求严格地通过所有数据点 (x_i, y_i) ，也就是说拟合函数 $\varphi(x)$ 在 x_i 处的**残差**(亦称**偏差**)

$$\delta_i = y_i - \varphi(x_i), i = 0, 1, 2, \cdots, n$$

（3）残差平方和达到最小 $\min\{\sum_i \delta_i^2\}$

按照准则（3）求得近似函数的方法称为**最佳平方逼近，也称为曲线拟合（或数据拟合）的最小二乘法**

向量和连续函数的范数

- 常见向量范数 $X \in R^n$
  - 2-范数$||X||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$
  - 1-范数$||X||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$
  - ∞范数$||X||_\infty = max_{1 \le i \le n}|x_i|$

- 连续函数范数$f \in C[a,b]$　　$||f||_\infty = max_{x\in[a,b]}|f(x)|$

注：范数定义空间X距离的概念

$$d(u,v) = ||u-v||, \forall u,v \in X$$

江南大学

内积空间

定义 2.6.2： 设 X 是数域 K（R 或 C）上的线性空间，在 $X\times X$ 到数域 K 上建立一个映射，即 $\forall u,v\in X$，有 K 中一个数值与之对应，记为 (u,v)，且满足：$\forall u,v,w\in X$ 及 $a\in K$

（1）$(u+v,w)=(u,w)+(v,w)$；

（2）$(au,v)=a(u,v)$；

（3）$(u,v)=\overline{(v,u)}$，其中 $\overline{(v,u)}$ 是 (v,u) 的共轭复数；

（4）$(u,u)\geq 0$，且 $(u,u)=0\Leftrightarrow u=\theta$

则称 (u,v) 称为 u 与 v 的内积。定义了内积的线性空间，称为内积空间。

内积空间可定义范数 $||u|| = \sqrt{(u,u)}$

又可以定义角度 $\cos(\widehat{u,v}) = \dfrac{(u,v)}{||u||*||v||}$

注：内积为零等价于两向量正交（垂直）

江南大学

向量空间内积（离散内积）

例 2.6.6： ：设 $x, y \in R^n$（或 $\in C^n$），记 $x=(x_1, x_1, \cdots, x_n)^T$， $y=(y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$，给定一组实数 $w_i > 0$（$i=1,2,\cdots,n$），定义

$$(x,y)=\sum_{i=1}^{n} w_i x_i \overline{y_i} \qquad (2.6.4)$$

此内积也称为 R^n（或 C^n）上的权系数为 $\{w_i\}$ 的加权内积，

它的范数为$||x|| = \sqrt{(x,x)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} w_i x_i \overline{x_i}}$

连续函数内积

定义 2.6.3：设$[a,b]$是有限或无限区间。如果$\rho(x)\in C[a,b]$且满足：

（1） $\forall x\in[a,b]$，$\rho(x)\geq 0$；

（2） $\int_a^b x^k\rho(x)dx$ 存在且为有限值（$k=0,1,2,\cdots$）；

（3） 若对$[a,b]$上的非负连续函数$g(x)$，有$\int_a^b \rho(x)g(x)dx=0$，则$g(x)=0$。

则称$\rho(x)$为区间$[a,b]$上的一个权函数。

例 2.6.7：设$\rho(x)$是$[a,b]$上给定的权函数，$\forall f,g\in C[a,b]$，定义：

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

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

此为连续函数空间$C[a,b]$上的权函数为$\rho(x)$的2-范数。

第六章 函数逼近

第一节 数据拟合的最小二乘法

6.1.3线性最小二乘法的一般形式

将（6.1.1）改为使得

$$\sum_{i=1}^{n}\omega_i\delta_i^2=\sum_{i=1}^{n}\omega_i\left[y_i-\varphi(x_i,\theta)\right]^2$$

最小，其中 $\omega_i>0$（$i=1,2,\cdots,n$）为**加权系数**，反映该点的重要程度。

一般地，设给定数据组 (x_i,y_i)（$i=1,2,\cdots,n$），$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_m(x)$ 为已知的一组 $[a,b]$ 上线性无关的函数组，选取近似函数为 $\varphi(x)\in H=span\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_m(x)\}$，则

$$\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_m\varphi_m(x) \qquad (6.1.5)$$

直线拟合取 $\varphi_0(x)=1,\ \varphi_1(x)=x$

m次多项式拟合取

$$\varphi_0(x)=1,\ \varphi_1(x)=x,\ \varphi_2(x)=x^2,\cdots,\varphi_m(x)=x^m$$

线性最小二乘法的一般形式

使得

$$S(a_0,a_1,\cdots,a_m)=\sum_{i=1}^{n}\omega_i\delta_i^2=\sum_{i=1}^{n}\omega_i\left[y_i-\varphi(x_i)\right]^2=\min_{\Phi\in H}\left\{\sum_{i=1}^{n}\omega_i\left[y_i-\Phi(x_i)\right]^2\right\} \quad (6.1.6)$$

注：残差的平方和最小的原问题转化为求多元函数的 $S(a_0,a_1,\cdots,a_m)$ 的极小值问题

由多元函数极值必要条件，得 $\frac{\partial S}{\partial a_j}=0$，即

$$\sum_{i=1}^{n}\omega_i\left[y_i-\varphi(x_i)\right]\varphi_j(x_i)=0 \quad (j=0,1,\cdots,m)$$

即正则方程组为

$$\sum_{k=0}^{m}\boxed{a_k}\left[\sum_{i=1}^{n}\omega_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)\right]=\sum_{i=1}^{n}\omega_i y_i\varphi_j(x_i) \quad (j=0,1,\cdots,m) \quad (6.1.7)$$

线性最小二乘法的一般形式

(6.1.7) 等价于 $\sum_{k=0}^{m} \boxed{a_k}(\varphi_k,\varphi_j)=(y,\varphi_j)$

正则方程组(6.1.7)矩阵形式可写成

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_m) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_m) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ (\varphi_m,\varphi_0) & (\varphi_m,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_m,\varphi_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (y,\varphi_0) \\ (y,\varphi_1) \\ \vdots \\ (y,\varphi_m) \end{bmatrix} \quad (6.1.8)$$

定理 6.1.1 正则方程组(6.1.8)存在唯一解 $(a_0,a_1,\cdots,a_m)$，且相应的函数

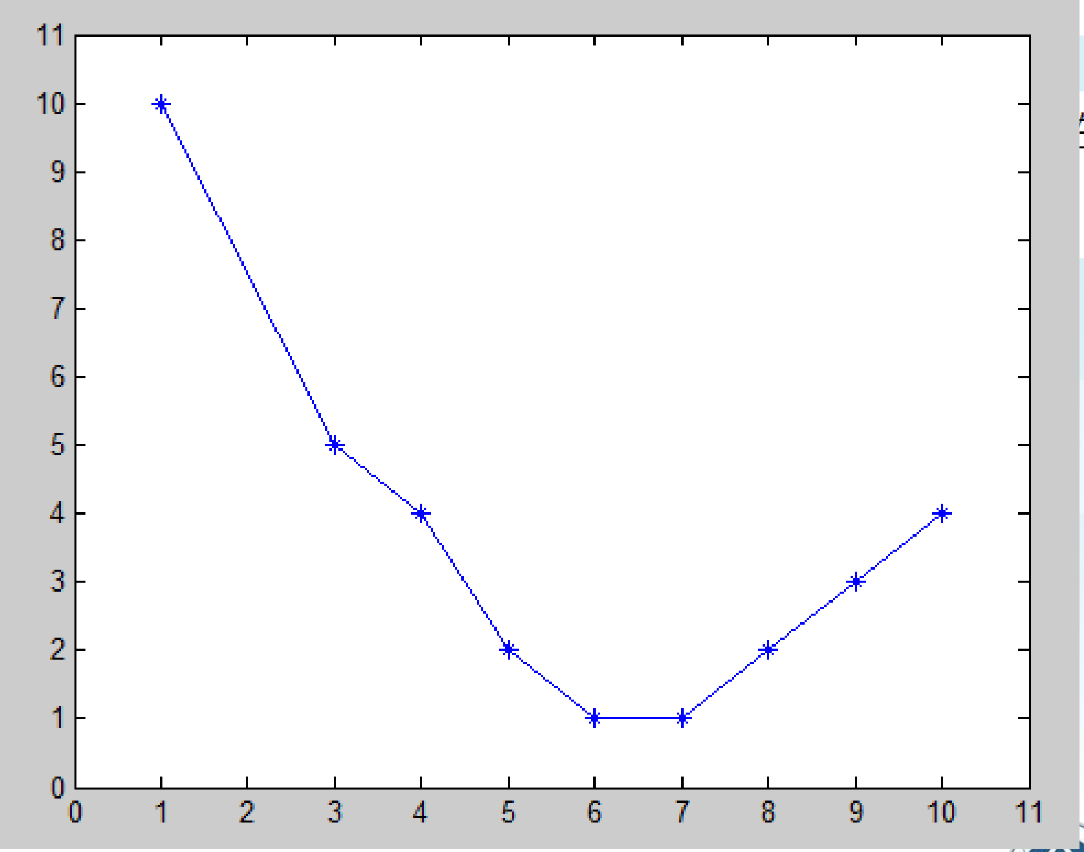
$$\varphi(x)=\sum_{k=0}^{m} a_k\varphi_k(x)$$

满足关系式(6.1.6)，即它是数据组 (x_i,y_i) ($i=1,2,\cdots,n$) 的最小二乘解。

6.1.1多项式拟合

例 6.1.1： 求数据表的最小二乘二次拟合多项式。

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



解： 根据数据表 … 在一条抛物线附近。

故选择拟合函数为二次多项式

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2,$$

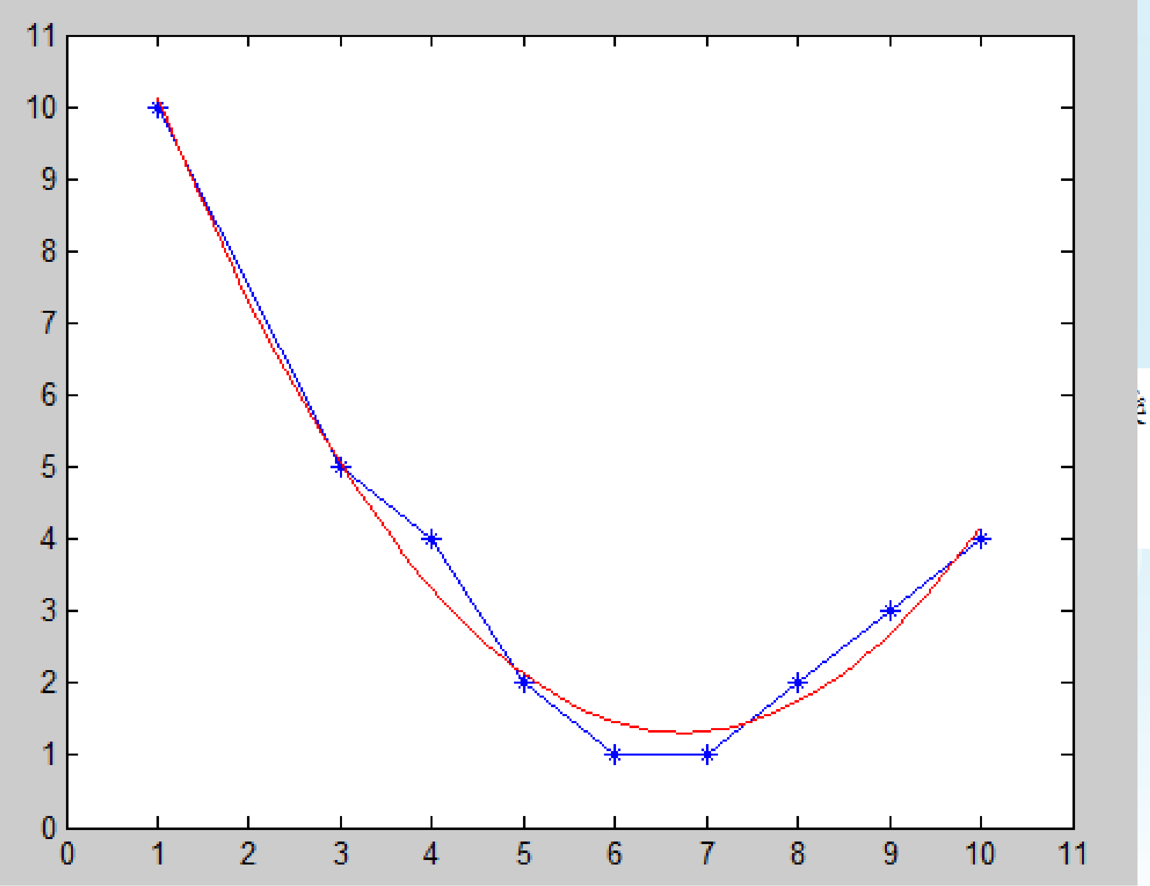
$\varphi_0(x) = 1, \varphi_1(x) = x, \varphi_2(x) = x^2$。

将数据表代入

$$\begin{cases} 9a_0 + 5 \\ 53a_0 + 38 \\ 381a_0 + 301 \end{cases}$$

其解为 $a_0 = 13.4$ …二次拟合多

项式为 $P_2(x) = 1$



线性最小二乘法（线性代数）

例 6.1.1： 求数据表的最小二乘二次拟合多项式。

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

故选择拟合函数为二次多项式

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2,$$

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

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_9 & x_9^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_9 \end{bmatrix}$$

超定方程 $Aa = y$ 的最小二乘解 $\Longleftrightarrow$ 法方程组 $A^T A a = A^T y$

江南大学

线性最小二乘法（线性代数）

法方程组

$$\begin{bmatrix}1&1&1&1&1&1&1&1&1\\1&3&4&5&6&7&8&9&10\\1&9&16&25&35&49&64&81&100\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1&1\\1&3&9\\1&4&16\\1&5&25\\1&6&36\\1&7&49\\1&8&64\\1&9&81\\1&10&100\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}1&1&1&1&1&1&1&1&1\\1&3&4&5&6&7&8&9&10\\1&9&16&25&35&49&64&81&100\end{bmatrix}\begin{bmatrix}10\\5\\4\\2\\1\\1\\2\\3\\4\end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow\quad\begin{cases}9a_0+53a_1+381a_2=32\\53a_0+381a_1+3017a_2=147\\381a_0+3017a_1+25317a_2=1025\end{cases}$$

江南大学

6.1.2可化为多项式拟合类型

（一）指数拟合

例 6.1.2：已知 x 与 y 服从 $y = ae^{bx}$（a，b 为常数）的经验公式。现测得 x 与 y 的数据如下表：

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	15.3	20.5	27.4	36.6	49.1	65.6	87.8	117.6

试用最小二乘法确定 a 和 b，以及 x 与 y 的近似函数关系。

两边取对数，$\tilde{y} = lny = lna + bx$中$\tilde{y}$和$x$是线性关系

其求解过程如下：

（1）求出数据组$(x_i, \ln y_i)$（$i = 1, 2, \cdots, n$）的最小二乘拟合直线 $\tilde{y} = a_0 + a_1 x$；

（2）两边取指数即得数据组(x_i, y_i)（$i = 1, 2, \cdots, n$）的最小二乘的指数拟合

$$y = e^{a_0 + a_1 x} = e^{a_0} e^{a_1 x}。$$

江南大学

解： 由经验公式两边取自然对数可得 $\ln y = bx + \ln a$，作函数表

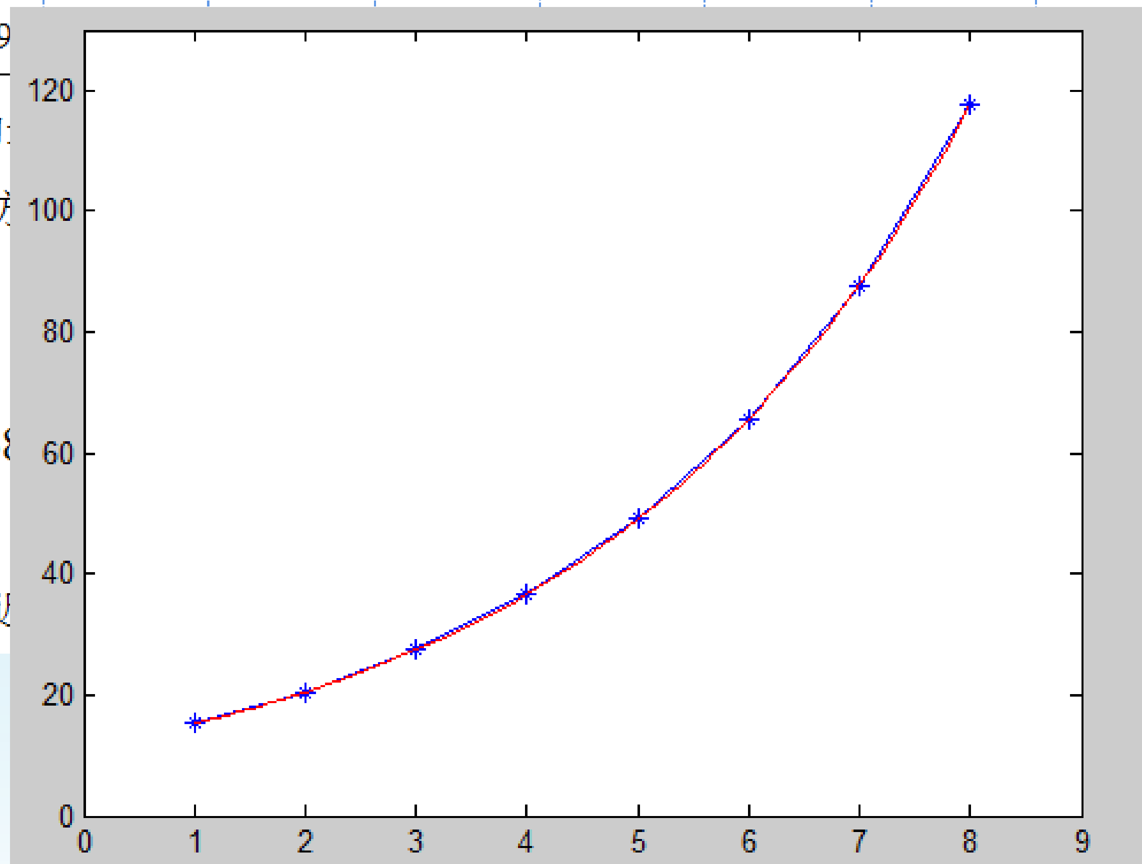
x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
$\ln y_i$	2.7279							3

先求数据表的 … 入式

（6.1.8），得正则方 …

其解为 $a_0 = 2.436$ …

因此，x 与 y 的近 …



（二）分式线性拟合

如果数据点(x_i, y_i)（$i=1,2,\cdots,n$）的分布近似于分式线性函数$y=\dfrac{1}{ax+b}$的图像

其求解过程如下：

(1)求出数据组$(x_i, \dfrac{1}{y_i})$（$i=1,2,\cdots,n$）的最小二乘一次拟合多项式$\tilde{y}=ax+b$

（$\tilde{y}=\dfrac{1}{y}=ax+b$）

(2)两边取倒数即得数据组(x_i, y_i)（$i=1,2,\cdots,n$）的最小二乘的分式线性拟合

江南大学

若取拟合函数的形式为 $y=\dfrac{x}{ax+b}$

其求解过程如下：

(1)求出数据组 $(t_i,\tilde{y}_i)=(\dfrac{1}{x_i},\dfrac{1}{y_i})$（$i=1,2,\cdots,n$）的最小二乘拟合直线 $\tilde{y}=a+bt=a+\dfrac{b}{x}$

（$\tilde{y}=\dfrac{1}{y}=\dfrac{ax+b}{x}=a+\dfrac{b}{x}$，$t=\dfrac{1}{x}$）

(2)两边取倒数得所求拟合函数 $y=\dfrac{1}{\tilde{y}}=\dfrac{1}{a+\dfrac{b}{x}}=\dfrac{x}{ax+b}$

江南大学

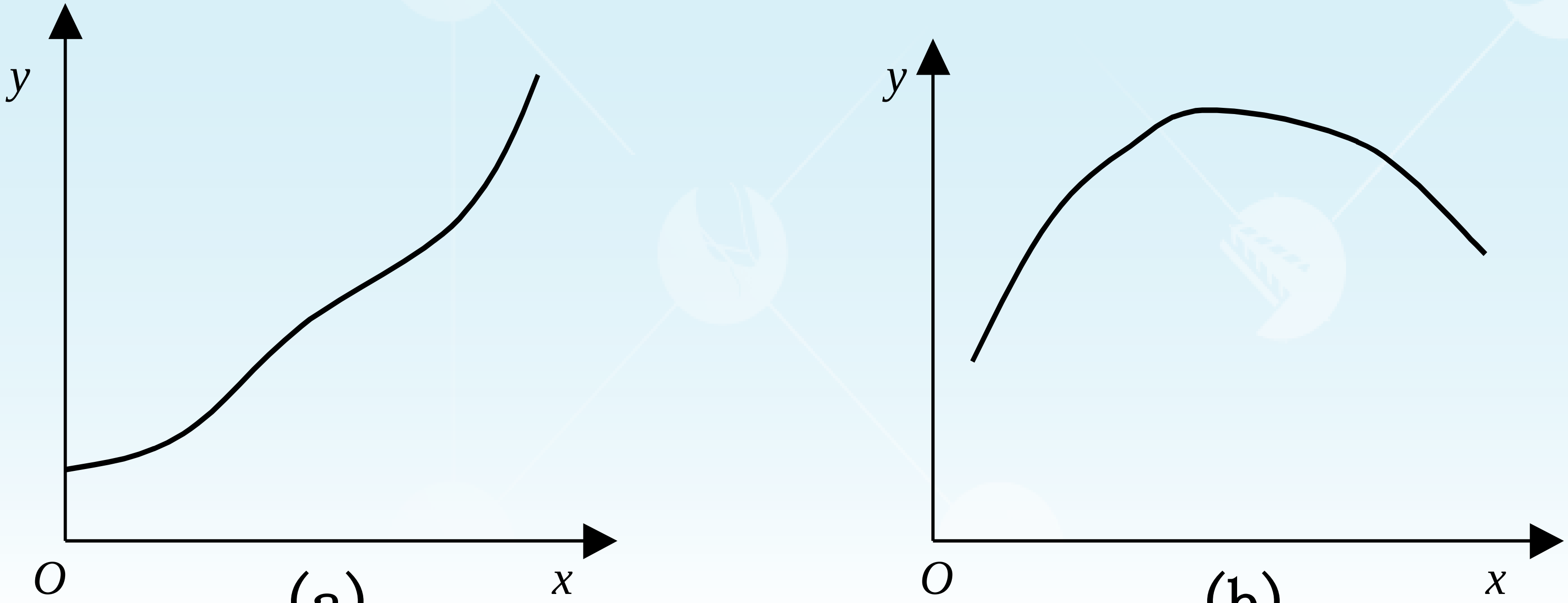
可化为多项式拟合类型

曲线拟合方程	变换关系	变换后线性拟合方程
$y=ae^{bx}$	$\bar{y}=\ln y$	$\bar{y}=\bar{a}+bx(\bar{a}=\ln a)$
$y=ax^{\mu}+c$	$\bar{x}=x^{\mu}$	$y=a\bar{x}+c$
$y=\dfrac{x}{ax+b}$	$\bar{y}=\dfrac{1}{y},\bar{x}=\dfrac{1}{x}$	$\bar{y}=a+b\bar{x}$
$y=\dfrac{1}{ax+b}$	$\bar{y}=\dfrac{1}{y}$	$\bar{y}=b+ax$
$y=\dfrac{1}{ax^2+bx+c}$	$\bar{y}=\dfrac{1}{y}$	$\bar{y}=ax^2+bx+c$
$y=\dfrac{x}{ax^2+bx+c}$	$\bar{y}=\dfrac{x}{y}$	$\bar{y}=ax^2+bx+c$

江南大学

常见拟合类型（1）

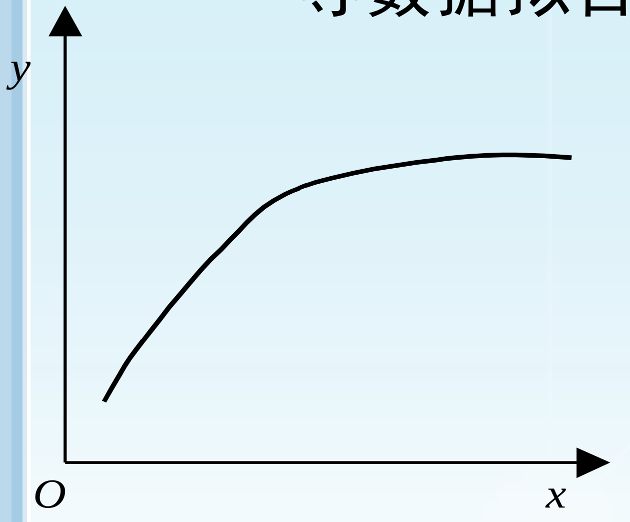
几种常见的数据拟合情况。图(a)表示数据接近于直线，故宜采用线性函数 $y=a_0+a_1x$ 拟合；图(b)数据分布接近于抛物线。可采拟合；二次多项式 $y=a_0+a_1x+a_2x^2$ 拟合；



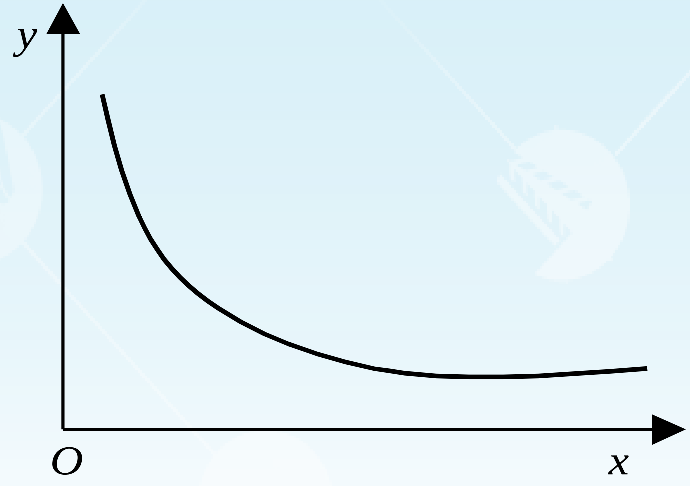
(a) (b)

常见拟合类型（2）

图 (c) 的数据分布特点是开始曲线上升较快随后逐渐变慢, 宜采用双曲线型函数 $y=\frac{x}{a+bx}$ 或指数型函数 $y=ae^{-\frac{b}{x}}$ 图 (d) 的数据分布特点是开始曲线下降快, 随后逐渐变慢, 宜采用 $y=\frac{1}{a+bx}$ 或 $y=\frac{x}{a+bx^2}$ 或 $y=ae^{-bx}$ 等数据拟合。



(c)



(d)

江南大学

例2 设某实验数据如下：

i	1	2	3	4	5	6
x_i	0	0.5	1	1.5	2	2.5
y_i	2.0	1.0	0.9	0.6	0.4	0.3

用最小二乘法求拟合曲线

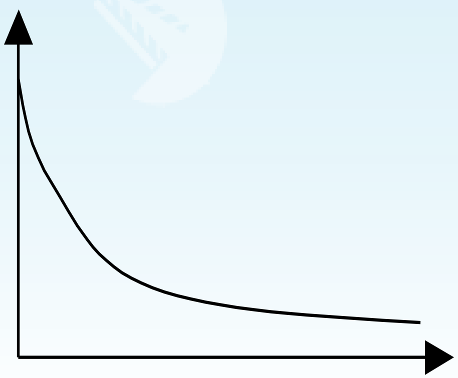
解：看出这些点接近指数曲线，因而可取指数函数 $y = ae^{-bx}$ 作为拟合函数.

两边取对数，得线性模型

$$\ln y = \ln a - bx$$

令 $\bar{y} = \ln y, a_0 = \ln a, a_1 = -b$

$$\bar{y} = a_0 + a_1 x$$



则正规方程组为

$$\begin{cases} 6a_0 + a_1 \sum_{i=1}^{6} x_i = \sum_{i=1}^{6} \ln y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{6} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{6} x_i^2 = \sum_{i=1}^{6} x_i \ln y_i \end{cases}$$

其中 $\sum_{i=1}^{6} x_i = 7.5$ $\sum_{i=1}^{6} x_i^2 = 13.75$ $\sum_{i=1}^{6} \ln y_i = -2.043302$ $\sum_{i=1}^{6} x_i \ln y_i = -5.714112$

将以上数据代入上式正规方程组，得

$$\begin{cases} 6a_0 + 7.5a_1 = -2.043302 \\ 7.5a_0 + 13.75a_1 = -5.714112 \end{cases}$$

解得 $a_0 = 0.562302,\quad a_1 = -0.772282$

江南大学

由 $a_0 = \ln a$ 得 $a = e^{a_0} = e^{0.562302} = 1.754708,$

由 $a_1 = -b$ 得 $b = -a_1 = 0.772282$

于是得到拟合指数函数为

$$y = 1.754708 e^{-0.772282x}$$

最小二乘法中的条件数

例 在区间[2,4]中等距11个节点$x_1 = 2.0, x_2 = 2.2, \cdots, x_{11} = 4.0$，设$y_i = 1 + x_i + x_i^2 + \cdots x_i^7, 1 \le i \le 11$，求7次多项式的二乘拟合。

可知法方程组的精确解$a_1 = a_2 = \cdots = a_n = 1$

实际数值解

```
>> x=(2+(0:10)/5)';
>> y=1+x+x.^2+x.^3+x.^4+x.^5+x.^6+x.^7;
>> A=[x.^0 x x.^2 x.^3 x.^4 x.^5 x.^6 x.^7];
>> c=(A'*A)\(A'*y)
```

```
c =

    6.1636
  -11.7488
   14.3537
   -6.6933
    3.6333
    0.4644
    1.0600
    0.9971
```

```
>> cond(A'*A)

ans =

   5.4507e+18
```

当n较大时(n≥7),其法方程的系数矩阵的条件数cond(A'*A)一般较大,所以往往是病态的,因而给求解工作带来了困难。

离散内积下的正交函数族

近年来, 产生一些直接解线性最小二乘问题的新方法，例如正交三角化方法。另外, 如果能选取基函数

$$\varphi_k(x)(k=0,1,\cdots,m)$$

使得 $k\neq j$ 时，$(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=1}^{n}\omega_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)=0$

当 $k=j$ 时，$(\varphi_k,\varphi_j)>0$

这组基函数就称为以 $\{\omega_i\}(i=1,2,\cdots,n)$ 权系数，

点集 $\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$ 上的正交函数族。

正交函数族下最小二乘法

正则方程组可写为

$$\begin{bmatrix} (\phi_0,\phi_0) & & & \\ & (\phi_1,\phi_1) & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\phi_m,\phi_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (y,\phi_0) \\ (y,\phi_1) \\ \vdots \\ (y,\phi_m) \end{bmatrix}$$

解为

$$a_k = \frac{(y,\varphi_k)}{(\varphi_k,\varphi_k)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \omega_i y_i \varphi_k(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} \omega_i \varphi_k^2(x_i)} \qquad (k = 0,1,\cdots,m)$$

江南大学

构造离散正交多项式——Gram-Schmidt正交化方法

$$\boxed{\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_1(x) = x - \alpha_1 \\ \varphi_k(x) = (x - a_k)\varphi_{k-1}(x) - \beta_k \varphi_{k-2}(x) \end{cases}} \qquad k = 2,3,\cdots,m \qquad (6.1.12)$$

其中

$$\alpha_k = \frac{(x\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})}{(\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \omega_i x_i \varphi^{2}{}_{k-1}(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} \omega_i \varphi_{k-1}^{2}(x_i)} \qquad k = 1,2,\cdots,m$$

$$(6.1.13)$$

$$\beta_k = \frac{(\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})}{(\varphi_{k-2}, \varphi_{k-2})} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \omega_i \varphi^{2}{}_{k-1}(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} \omega_i \varphi_{k-2}^{2}(x_i)} \qquad k = 2,3,\cdots,m$$

离散正交多项式的最小二乘法

例 6.1.3： 利用正交函数族求下列所给数据表的最小二乘二次拟合多项式。

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x_i	-1	-0.75	-0.5	-0.25	0	0.25	0.5	0.75	1
y_i	-0.2209	0.3395	0.8826	1.4392	2.0003	2.5645	3.1334	3.7601	4.2836

解： 按式（6.1.12）和（6.1.13）计算可得：$\varphi_0(x)=1$；

$$\alpha_1=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}x_i}{\sum_{i=1}^{9}1}=\frac{0}{9}=0,\quad \varphi_1(x)=x;\quad \alpha_2=\frac{(x\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}x_i^3}{\sum_{i=1}^{9}x_i^2}=0,$$

$$\beta_2=\frac{(\varphi_1,\varphi_1)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}x_i^2}{\sum_{i=1}^{9}1}=\frac{3.75}{9}=0.41667,\quad \varphi_2(x)=x^2-0.41667。$$

由式（6.1.10）计算得：

$$a_0=\frac{(y,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}y_i}{\sum_{i=1}^{9}1}=\frac{18.1723}{9}=2.01914$$

$$a_1=\frac{(y,\varphi_1)}{(\varphi_1,\varphi_1)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}y_ix_i}{\sum_{i=1}^{9}x_i^2}=\frac{8.4842}{3.75}=2.2625$$

$$a_2=\frac{(y,\varphi_2)}{(\varphi_2,\varphi_2)}=\frac{\sum_{i=1}^{9}y_i(x_i^2-0.41667)}{\sum_{i=1}^{9}(x_i^2-0.41667)}=\frac{0.04545}{1.2031}=0.0378$$

将上述结果代入（6.1.11）即得最小二乘二次拟合多项式为

$$\begin{aligned}\varphi(x)&=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+a_2\varphi_2(x)\\&=2.01914+2.2625x+0.0378(x^2-0.41667)\\&=2.0034+2.2625x+0.0378x^2\end{aligned}$$