



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

第5章

插值与逼近



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

5.5 正交函数族在逼近中的应用

5.5.1 正交多项式简介

5.5.2 正交多项式的一些重要性质

5.5.3 数据拟合的最小二乘法



我们知道在 n 维欧式空间中，任意两个向量 \mathbf{x}, \mathbf{y} 的内积为

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n \omega_i \cdot x_i \cdot y_i$$

如果我们对于 $[a, b]$ 上的任意两个连续函数 $f(x), g(x)$ ，任取 $[a, b]$ 的分割之 n 个分点处的函数值：

$$f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n) \quad \text{和} \quad g(x_1), g(x_2), \dots, g(x_n)$$

将它们也对应相乘作和，即

$$(f, g) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[\sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot g(x_i) \Delta x \right] = \int_a^b f(x) \cdot g(x) dx$$

那么我们也可以定义出 $[a, b]$ 上连续函数的内积。



5.5.1 正交多项式简介

对于 $[a, b]$ 上的连续函数 $f(x)$ 、 $g(x)$ ，定义内积：

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

其中可积函数 $\rho(x) \geq 0$ ($x \in [a, b]$) 是权函数。

连续函数 $f(x)$ 、 $g(x)$ 和 $h(x)$ 的内积满足：

- (1) $(f, f) \geq 0$ ，当且仅当 $f \equiv 0$ 时， $(f, f) = 0$ ；
- (2) $(f, g) = (g, f)$ ；
- (3) $(\lambda f, g) = \lambda \cdot (f, g)$ ；
- (4) $(f + g, h) = (f, h) + (g, h)$ 。

若 $(f, g) = 0$ ，则称 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交。

定义 若定义在 $C[a, b]$ 上的一个实值函数,记为 $\|f\|$, 满足:

(1) 非负性 $\|f\| \geq 0$, 并且 $\|f\| = 0$ 当且仅当 $f(x) \equiv 0$;

(2) 齐次性 $\| \alpha f \| = | \alpha | \cdot \| f \|$;

(3) 三角不等式 $\| f + g \| = \| f \| + \| g \|$;

则称函数 $\| f \|$ 为 $C[a, b]$ 上的一个范数。

常用的连续函数范数有:

$$\|f\|_1 = \int_a^b \rho(x) |f(x)| dx, \quad \|f\|_\infty = \max_{a \leq x \leq b} |f(x)|$$

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

可以证明, 连续函数的2-范数与内积之间的关系满足
Cauchy-Schwarz不等式:

$$|(f, g)| \leq \|f\|_2 \cdot \|g\|_2$$



练习1 设函数 $f(x) = \left|x - \frac{1}{2}\right|$, $f \in C[0,1]$, 权函数 $\rho(x)=1$,

试计算: $\|f\|_1$, $\|f\|_\infty$ 和 $\|f\|_2$ 。

解:

$$\|f\|_\infty = \max_{0 \leq x \leq 1} \left|x - \frac{1}{2}\right| = \frac{1}{2}$$

$$\|f\|_1 = \int_0^1 \left|x - \frac{1}{2}\right| dx = \int_0^{\frac{1}{2}} -\left(x - \frac{1}{2}\right) dx + \int_{\frac{1}{2}}^1 \left(x - \frac{1}{2}\right) dx = \frac{1}{4}$$

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 dx} = \sqrt{\int_0^1 \left(x^2 - x + \frac{1}{4}\right) dx} = \frac{1}{2\sqrt{3}}$$

给定线性无关的函数组 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ ，可通过 **Schmidt** 正交化过程予以正交化，得到一组 **正规正交函数系**。

具体作法如下： 令 $\phi_0(x) = \varphi_0(x)$

$$\phi_i(x) = \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_{i-1}) & \varphi_0(x) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_{i-1}) & \varphi_1(x) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_i, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_i, \varphi_{i-1}) & \varphi_i(x) \end{vmatrix}, \quad i=1, 2, \cdots, n. \quad (5-67)$$

易证

$$(\varphi_i, \phi_j) = \begin{cases} 0, & j < i \\ \Delta_i, & j = i \end{cases} \quad (i, j = 0, 1, 2, \cdots, n) \quad (5-68)$$

此式中

$$\Delta_i = \begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_i) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_i) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_i, \varphi_0) & (\varphi_i, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_i, \varphi_i) \end{vmatrix}, \quad i = 0, 1, \cdots, n \quad (5-69)$$

由 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 的线性无关性, 可证 $\Delta_i > 0$ 。

因为 $\phi_i(x)$ 是 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_i(x)$ 的线性组合, 故由 (5-68) 不难验证 $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_n(x)$ 是正交函数系。

注: 对任意 $i > j$

$$(\phi_i, \phi_j) = \left(\phi_i, \sum_{k=0}^j A_k \varphi_k \right) = \sum_{k=0}^j A_k (\phi_i, \varphi_k) = \sum_{k=0}^j A_k \cdot 0 = 0,$$

$$\begin{aligned} (\phi_i, \phi_i) &= \left(\phi_i, \Delta_{i-1} \varphi_i + \sum_{k=0}^{i-1} A_k \varphi_k \right) = (\phi_i, \Delta_{i-1} \varphi_i) + \left(\phi_i, \sum_{k=0}^{i-1} A_k \varphi_k \right) \\ &= (\phi_i, \Delta_{i-1} \varphi_i) = \Delta_{i-1} (\varphi_i, \phi_i) = \Delta_{i-1} \Delta_i > 0. \end{aligned}$$

$$\text{若进一步令} \quad \begin{cases} \psi_0(x) = \frac{\phi_0(x)}{\sqrt{\Delta_0}}, \\ \psi_i(x) = \frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1} \Delta_i}}, \quad i = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (5-70)$$

那么, 有

$$(\psi_i, \psi_i) = \left(\frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}, \frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}} \right) = \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}} \right)^2 (\phi_i(x), \phi_i(x)) = \frac{\Delta_{i-1}\Delta_i}{\Delta_{i-1}\Delta_i} = 1$$

$$(\psi_i, \psi_j) = \left(\frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}, \frac{\phi_j(x)}{\sqrt{\Delta_{j-1}\Delta_j}} \right) = \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}\sqrt{\Delta_{j-1}\Delta_j}} \right) (\phi_i(x), \phi_j(x)) = 0$$

则 $\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_n(x)$ 成为标准正交函数系。

几种正交函数系:

三角函数系, 于 $[-\pi, \pi]$ 上正交

$1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots, \cos nx, \sin nx, \dots$

余弦函数系, 于 $[0, \pi]$ 上正交

$1, \cos x, \cos 2x, \dots, \cos nx, \dots$

正弦函数系, 于 $[0, \pi]$ 上正交

$1, \sin x, \sin 2x, \dots, \sin nx, \dots$

正交多项式系

特别取多项式系 $1, x, \dots, x^m, \dots$ 正交化可得正交多项式系。

下面通过Schmidt正交化构造正交多项式, 具体作法如下:

令 $\mu_m = \int_a^b \rho(x) \cdot x^m dx, m = 0, 1, \dots$; 取 $\phi_0(x) = 1$,

$$\phi_i(x) = \begin{vmatrix} (1,1) & (1,x) & \cdots & (1,x^{i-1}) & 1 \\ (x,1) & (x,x) & \cdots & (x,x^{i-1}) & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (x^i,1) & (x^i,x) & \cdots & (x^i,x^{i-1}) & x^i \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{i-1} & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_i & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i-1} & x^i \end{vmatrix} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

则 $\phi_0(x), \phi_i(x), i = 1, 2, \dots$, 构成 $[a, b]$ 上关于 $\rho(x)$ 的正交多项式系。

$$\text{且 } \Delta_i = \begin{vmatrix} (1,1) & (1,x) & \cdots & (1,x^i) \\ (x,1) & (x,x) & \cdots & (x,x^i) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (x^i,1) & (x^i,x) & \cdots & (x^i,x^i) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_i \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_{i+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mu_i & \mu_{i+1} & \cdots & \mu_{2i} \end{vmatrix}, \quad i = 0, 1, \dots,$$

则 $\psi_0(x) = \frac{\phi_0}{\sqrt{\Delta_0}}, \psi_i(x) = \frac{\phi_i(x)}{\sqrt{\Delta_{i-1}\Delta_i}}, i = 1, 2, \dots$, 构成标准正交多项式系。



练习1 求 $[-1,1]$ 上关于 $\rho(x)=1$ 二次正交多项式族。

解 $\mu_0 = \int_{-1}^1 1 \, dx = 2, \quad \mu_1 = \int_{-1}^1 x \, dx = 0,$

$$\mu_2 = \int_{-1}^1 x^2 \, dx = \frac{2}{3}, \quad \mu_3 = \int_{-1}^1 x^3 \, dx = 0,$$

则 $\phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = \frac{\mu_0}{\mu_1} x = \frac{2}{0} x = 2x$

$$\phi_2(x) = \frac{\begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & x \\ \mu_2 & \mu_3 & x^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 \\ \mu_1 & \mu_2 \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{2}{3} & x \\ \frac{2}{3} & 0 & x^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{vmatrix}} = \frac{4}{3}x^2 - \frac{4}{9} = \frac{4}{9}(3x^2 - 1)$$



下面验证 $\phi_0(x)$ 、 $\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$ 俩俩相互正交。

事实上，

$$(\phi_0, \phi_1) = \int_{-1}^1 1 \cdot 2x \, dx = 0$$

$$\begin{aligned} (\phi_0, \phi_2) &= \int_{-1}^1 1 \cdot \frac{4}{9} (3x^2 - 1) \, dx = \frac{4}{9} \int_{-1}^1 (3x^2 - 1) \, dx \\ &= \frac{4}{9} \left(\int_{-1}^1 3x^2 \, dx - 2 \right) = 0 \end{aligned}$$

$$(\phi_1, \phi_2) = \int_{-1}^1 2x \cdot \frac{4}{9} (3x^2 - 1) \, dx = \frac{8}{9} \int_{-1}^1 (3x^3 - x) \, dx = 0$$

练习2 求 $[-1,1]$ 上关于 $\rho(x)=|x|$ 二次正交多项式族。

$$\text{解 } \mu_0 = \int_{-1}^1 |x| \, dx = 1 \quad \mu_1 = \int_{-1}^1 |x| \cdot x^1 \, dx = 0,$$

$$\mu_2 = \int_{-1}^1 |x| \cdot x^2 \, dx = \frac{1}{2} \quad \mu_3 = \int_{-1}^1 |x| \cdot x^3 \, dx = 0$$

$$\text{则 } \phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = \begin{vmatrix} \mu_0 & 1 \\ \mu_1 & x \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & x \end{vmatrix} = x$$

$$\phi_2(x) = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & 1 \\ \mu_1 & \mu_2 & x \\ \mu_2 & \mu_3 & x^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & x \\ \frac{1}{2} & 0 & x^2 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{4} = \frac{1}{4}(2x^2 - 1)$$

下面举出两种常用的正交多项式的例子

例1 令 $T_0=1$, $T_n(x)=\cos(n\cdot\arccos x)$, $x\in[-1,1]$, 称 $T_n(x)$ 为 n 次 Chebyshev 多项式。

由三角恒等式: $\cos(n+1)\theta + \cos(n-1)\theta = 2\cos n\theta \cos \theta$

令 $x = \cos \theta$, 得

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \quad n=1, 2, \cdots,$$

所以 $T_n(x)$ 是 n 次多项式, 且具有

(1) 递归性 $T_0(x)=1, T_1(x)=x, T_2(x)=2x^2-1,$
 $T_3(x)=4x^3-3x, T_4(x)=8x^4-8x^2+1, \cdots,$

(2) 正交性

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



(3) 奇偶性

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

n 为偶数时为偶函数, n 为奇数时为奇函数;

(4) $T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos x)$, 在 $(-1, 1)$ 有 n 个互异实根:

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

所以 $\{T_n(x)\}$ 是 $[-1, 1]$ 上以 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 为权函数的正交多项式系。

而

$$\tilde{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) \quad (n \geq 1)$$

是首项系数为1的 n 次 Chebyshev 多项式。

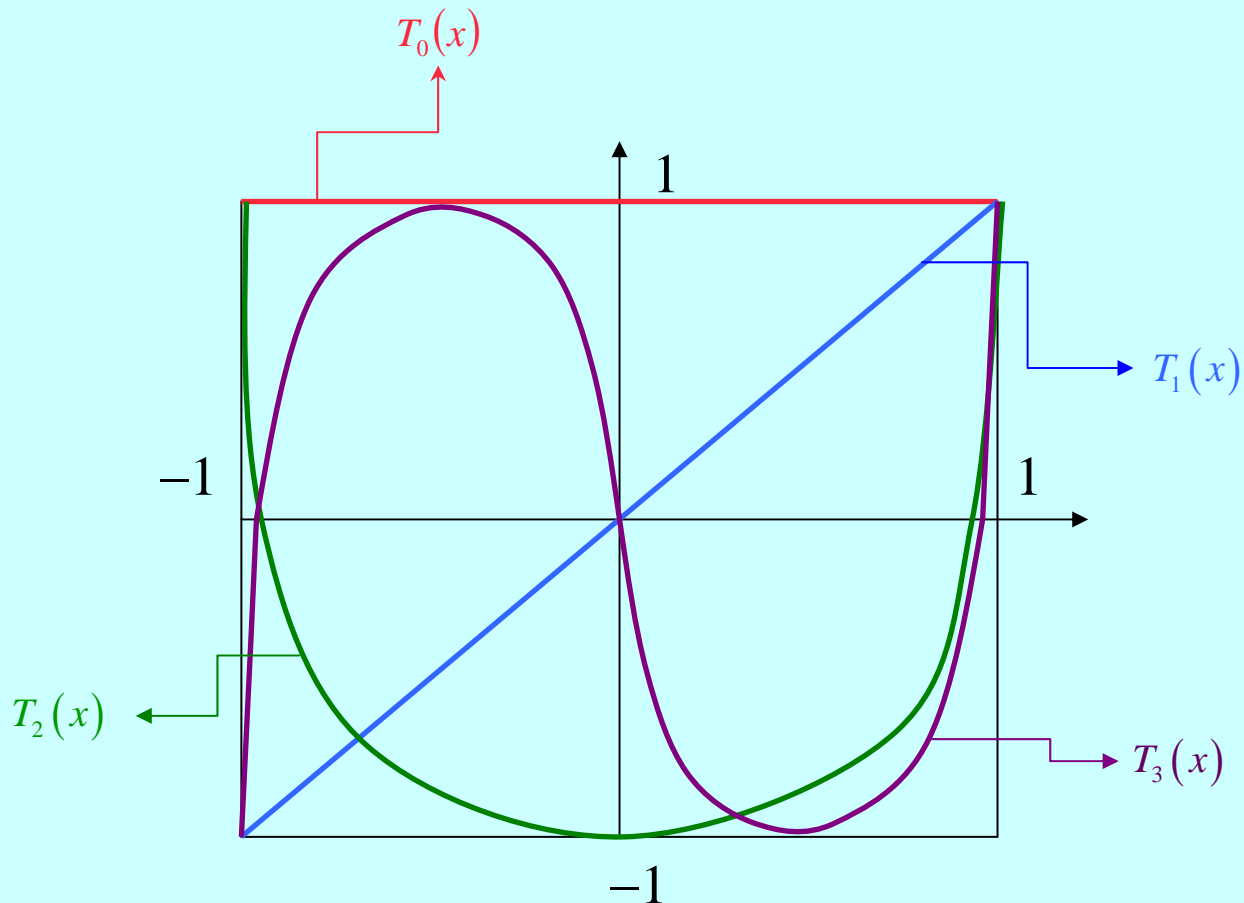


DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

$n=0, 1, 2, 3$ 次Chebyshev多项式的曲线



例2 设 $L_n(x)$, $x \in [-1, 1]$, 是以 $\rho(x) \equiv 1$ 为权函数的正交多项式, 称 $L_n(x)$ ($n=0, 1, \dots$) 为 n 次Legendre多项式。

n 次Legendre多项式的一般表达式为:

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} \left[(x^2 - 1)^n \right] \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

其具有:

(1) **递归性** $(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1) \cdot x \cdot L_n(x) - n \cdot L_{n-1}(x)$

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x, \quad L_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$L_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \quad L_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \quad \dots,$$

(2) **正交性**

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



(3) 奇偶性

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

n 为偶数时为偶函数, n 为奇数时为奇函数;

(4) $L_n(x)$ 在 $(-1, 1)$ 有 n 个互异实根:

所以 $\{L_n(x)\}$ 是 $[-1, 1]$ 上以 $\rho(x)=1$ 为权函数的正交多项式系。

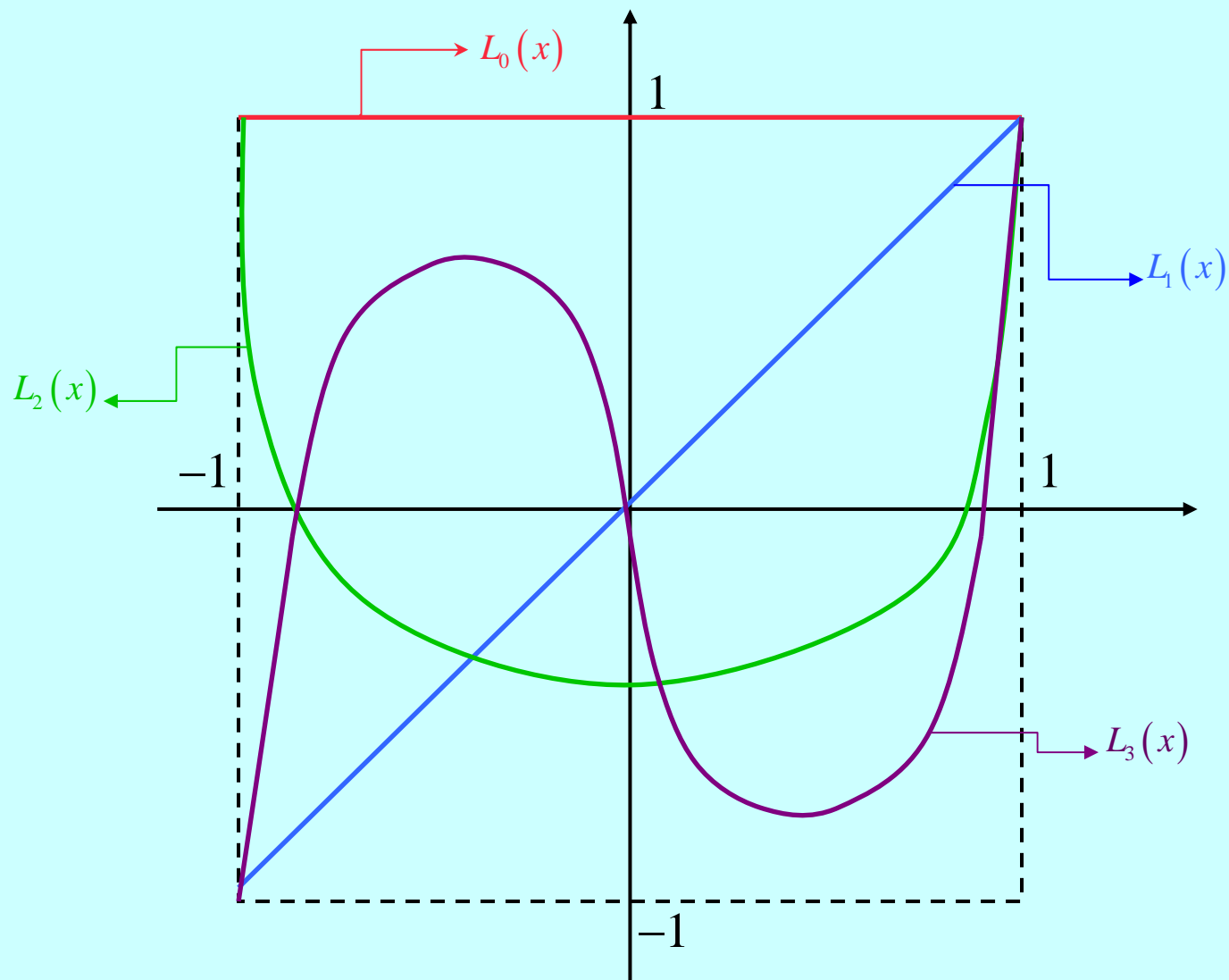
$$\text{而 } \tilde{L}_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] \quad (n \geq 1)$$

是首项系数为1的 n 次 **Legendre** 多项式。

$$\frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n] = \frac{d^n}{dx^n} [(x^2)^n + C_n^1 (x^2)^{n-1} + \dots] = (2n)(2n-1) \cdots (n+1) x^n + \dots$$

从而, 上述 n 次多项式的首项 x^n 的系数为: $\frac{(2n)!}{n!}$

$n=0, 1, 2, 3$ 次Legendre多项式的曲线



5.5.2 正交多项式的一些重要性质

性质 1 $\psi_n(x)$ 恰好是 n 次多项式,

$$\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_n(x)$$

是 \mathbf{P}_n 空间的一组正交基底函数。

即 $P_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k \psi_k(x)$ 是 n 次多项式,

性质 2 $\psi_n(x)$ 与次数低于 n 次的所有多项式正交。

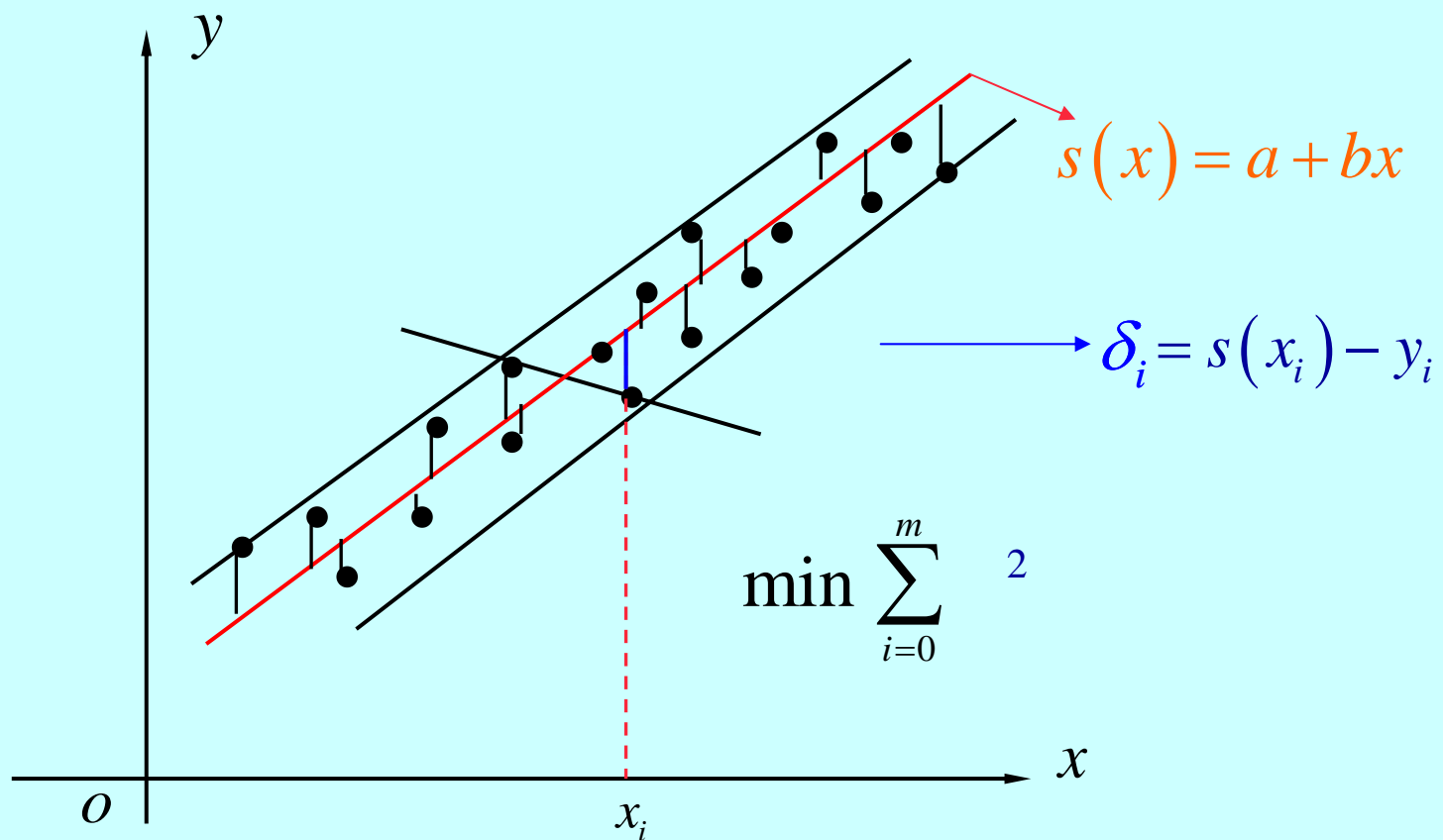
$$\text{即 } (\psi_n, P_m) = \int_a^b \rho(x) \cdot \psi_n(x) \cdot P_m(x) dx = 0 \quad m < n$$

性质 3 $\psi_n(x)$ 在 (a, b) 内恰有 n 个互异零点。

性质2和性质3是构造Gauss型求积公式的重要依据

5.5.3 数据拟合的最小二乘法

离散数据拟合问题： 给定一组数据 $(x_i, y_i) \quad i=0, 2, \cdots, m$





设 (x_i, y_i) ($i=0, 1, 2, \dots, m$) 为给定的一组数据求一个函数

$$s = a + bx$$

使其满足

$$\min = \sum_{i=0}^m (s(x_i) - y_i)^2$$

显然，求解 $s(x)$ 等价于求多元数

$$E(a, b) = \sum_{i=0}^m (s(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^m ((a + bx_i) - y_i)^2$$

的最小值点 (a^*, b^*) 。

$$E(a,b) = \sum_{i=0}^m \left((a + bx_i) - y_i \right)^2$$

令 $\frac{\partial E(a,b)}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial E(a,b)}{\partial b} = 0$, 得

$$\sum_{i=0}^m 2[(a + bx_i) - y_i] \cdot 1 = 0, \quad \sum_{i=0}^m 2 \cdot [(a + bx_i) - y_i] \cdot x_i = 0,$$

即

$$\sum_{i=0}^m (a + bx_i) = \sum_{i=0}^m y_i, \quad \sum_{i=0}^m (a + bx_i) \cdot x_i = \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i$$

进一步有,

$$\left(\sum_{i=0}^m 1 \right) a + \left(\sum_{i=0}^m x_i \right) b = \sum_{i=0}^m y_i$$

$$\left(\sum_{i=0}^m x_i \right) a + \left(\sum_{i=0}^m x_i^2 \right) b = \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i$$



即方程组:

$$\begin{pmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^m x_i \\ \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^m y_i \\ \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i \end{bmatrix}$$

可由**Cramer**法则求解该方程组，即得

$$a = \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=0}^m y_i & \sum_{i=0}^m x_i \\ \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^m x_i \\ \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 \end{vmatrix}}} = \frac{\left(\sum_{i=0}^m x_i^2\right) \cdot \left(\sum_{i=0}^m y_i\right) - \left(\sum_{i=0}^m x_i\right) \cdot \left(\sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i\right)}{(m+1) \cdot \left(\sum_{i=0}^m x_i^2\right) - \left(\sum_{i=0}^m x_i\right)^2}$$

$$b = \frac{\begin{vmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^m y_i \\ \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^m x_i \\ \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 \end{vmatrix}}} = \frac{(m+1) \cdot \left(\sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i\right) - \left(\sum_{i=0}^m x_i\right) \cdot \left(\sum_{i=0}^m y_i\right)}{(m+1) \cdot \left(\sum_{i=0}^m x_i^2\right) - \left(\sum_{i=0}^m x_i\right)^2}$$



同理给定的一组数据 $(x_i, y_i)(i=0,1,\cdots,m)$ 求如下函数形如

$$s(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

的最小二乘曲线的法方程组为：

$$\begin{pmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 \\ \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 & \sum_{i=0}^m x_i^3 \\ \sum_{i=0}^m x_i^2 & \sum_{i=0}^m x_i^3 & \sum_{i=0}^m x_i^4 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^m y_i \\ \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i \\ \sum_{i=0}^m x_i^2 \cdot y_i \end{bmatrix}$$

一般来说, 形如

$$s(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$$

称其为线性拟合问题, 即拟合函数是待定参量的线性函数。



DUT

大连理工大学

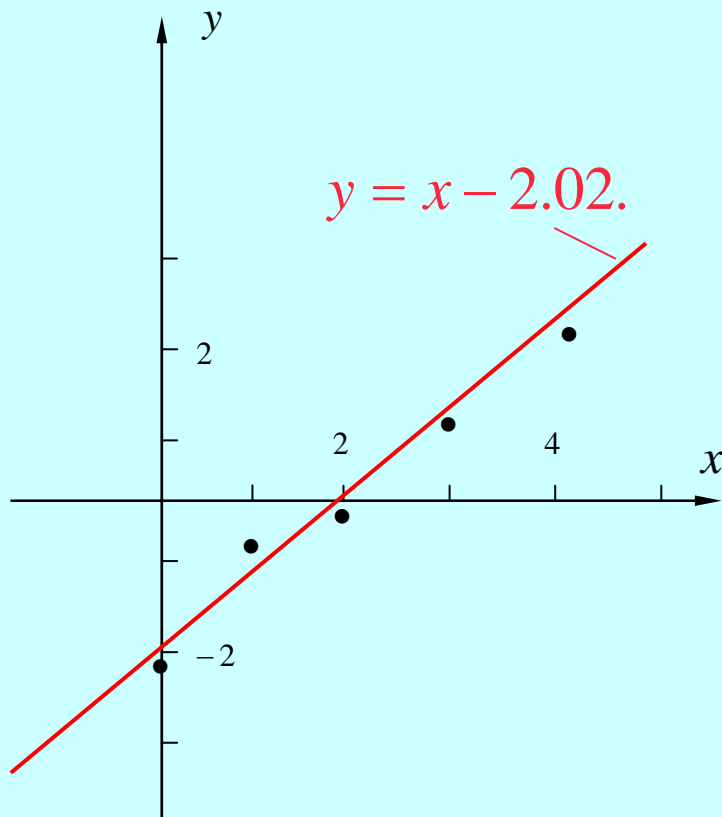
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

做数据拟合问题的步骤是：

- 根据散点图中散点的分布情况或根据经验确定拟合的曲线的类型；
- 建立并求解法方程组。

例3 求拟合下列数据的最小二乘曲线

x_i	0	1	2	3	4
y_i	-2.1	-0.9	-0.1	1.1	1.9



一般的拟合数据的最小二乘法

设 (x_i, y_i) ($i=0, 1, \dots, m$) 为给定的一组数据, $\omega_i > 0$ ($i=0, 1, \dots, m$)

为各点的权系数, 要求在函数空间

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \text{span} \{ \varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x) \} \\ &= \left\{ s(x) \mid s(x) = \sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x), \forall a_0, \dots, a_n \in \mathbf{R} \right\} \end{aligned}$$

中, 求一个函数

$$s^*(x) = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k(x) \in \mathbf{S}$$

使其满足

$$\sum_{i=0}^m \omega_i (s^*(x_i) - y_i)^2 = \min_{s(x) \in \mathbf{S}} \sum_{i=0}^m \omega_i (s(x_i) - y_i)^2 \quad (5-83)$$

则称 $s^*(x)$ 为离散数据 (x_i, y_i) ($i = 0, 1, \dots, m$) 在子空间 \mathbf{S} 中带权的
数据拟合的**最小二乘法** (离散**最小二乘逼近**), 简称最小二乘法,
并称 $s^*(x)$ 为**最小二乘解**。

显然，求 $s^*(x)$ 等价于求多元函数

$$E(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^m \omega_i (s(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^m \omega_i \left(\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) - y_i \right)^2 \quad (5-84)$$

的最小值点 $a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*$ 。令

$$\frac{\partial E}{\partial a_j} = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, n) \quad (5-85)$$

即

$$\sum_{i=0}^m \omega_i \left(\sum_{k=0}^n a_k \varphi_k(x_i) - y_i \right) \varphi_j(x_i) = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, n) \quad (5-86)$$

即为

$$\sum_{k=0}^n \left(\sum_{i=0}^m \omega_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) \right) a_k = \sum_{i=0}^m \omega_i \cdot y_i \cdot \varphi_j(x_i) \quad (j = 0, 1, \dots, n) \quad (5-87)$$

定义向量和内积：

$$\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T, \quad \boldsymbol{\varphi}_j = (\varphi_j(x_1), \varphi_j(x_2), \dots, \varphi_j(x_m))^T,$$

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^m \omega_i \cdot \varphi_k(x_i) \cdot \varphi_j(x_i), \quad (\mathbf{y}, \boldsymbol{\varphi}_j) = \sum_{i=0}^m \omega_i \cdot y_i \cdot \varphi_j(x_i) \quad (j = 0, 1, \dots, n)$$

即得法方程组

$$\sum_{k=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_k = (y, \varphi_j) \quad (j=0, 1, \dots, n) \quad (5-90)$$

矩阵形式为：

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_0) \\ (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (y, \varphi_0) \\ (y, \varphi_1) \\ \vdots \\ (y, \varphi_n) \end{pmatrix} \quad (5-91)$$

求解该方程组得到 $a_0^*, a_1^*, \dots, a_n^*$ 。

由 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 的线性无关性且满足**Haar**条件可知法方程组的系数矩阵非奇异，故法方程组有唯一解。

称 $(s^* - y, s^* - y) = \sum_{i=0}^m \omega_i (s^*(x_i) - y_i)^2$ 为最小二乘解 $s^*(x)$ 的平方误差，

$\sqrt{\sum_{i=0}^m \omega_i (s^*(x_i) - y_i)^2}$ 称为**均方差**。



特别地，对于拟合函数为直线，即取 $\varphi_0(x)=1$ ， $\varphi_1(x)=x$ 时，

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=0}^m 1, \quad (\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=0}^m x_i, \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=0}^m x_i \cdot x_i,$$

$$(y, \varphi_0) = \sum_{i=0}^m 1 \cdot y_i, \quad (y, \varphi_1) = \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i.$$

其法方程组，可直接写成如下形式：

$$\begin{pmatrix} m+1 & \sum_{i=0}^m x_i \\ \sum_{i=0}^m x_i & \sum_{i=0}^m x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^m y_i \\ \sum_{i=0}^m x_i \cdot y_i \end{pmatrix}$$



以上讨论的是线性最小二乘拟合问题，即拟合函数是待定参数的线性函数，法方程组是线性方程组。但有时也会遇到非线性情形。

例如，已知拟合曲线方程的形式为

$$y = ce^{bx} \quad \text{或} \quad y = cx^b$$

此时法方程组是非线性方程组（求解比较困难）：

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=0}^m c(e^{bx_i})^2 - y_i e^{bx_i} = 0 \\ \sum_{i=0}^m c^2 \cdot x_i \cdot (e^{bx_i})^2 - c \cdot x_i \cdot y_i e^{bx_i} = 0 \end{array} \right. \quad \text{和} \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=0}^m c(x_i^b)^2 - y_i \cdot x_i^b = 0 \\ \sum_{i=0}^m c^2 \cdot (x_i^b)^2 \cdot \ln x_i - c \cdot x_i^b \cdot y_i \cdot \ln x_i = 0 \end{array} \right.$$



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

我们可按如下方式将非线性问题转为线性问题：

$$y = cx^b \quad \text{或} \quad y = ce^{bx}$$

取 $\ln y = b \cdot \ln x + \ln c$, 记 $z = \ln y$, $t = \ln x$, $a = \ln c$;

取 $\ln y = bx + \ln c$, 记 $z = \ln y$, $a = \ln c$;

则上述非线性问题就变为由观测数据

(t_i, z_i) ($i = 0, 1, \dots, m$) 其中 $z_i = \ln y_i$ $t_i = \ln x_i$

或

(x_i, z_i) ($i = 0, 1, \dots, m$) 其中 $z_i = \ln y_i$

求最小二乘拟合曲线 $z = a + bt$ 或 $z = a + bx$ 这是个线性问题。

例4 求拟合下列数据的最小二乘曲线 $y = ce^{bx}$

x_i	1.00	+ 1.25	+ 1.50	+ 1.75	+ 2.00	= 7.50
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46	
$\ln y_i$	1.629	+ 1.756	+ 1.876	+ 2.008	+ 2.135	= 9.404

解 取 $\ln y = bx + \ln c$, 令 $z = \ln y$, $a = \ln c$ 则上述问题化为求最小二乘拟合曲线, $z = a + bx$ 。那么 $z_i = \ln y_i$ 相应的值见表所示

$$\begin{pmatrix} 5 & \sum_{i=1}^5 x_i \\ \sum_{i=1}^5 x_i & \sum_{i=1}^5 x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^5 \ln y_i \\ \sum_{i=1}^5 x_i \cdot \ln y_i \end{pmatrix} \quad \text{即} \quad \begin{pmatrix} 5 & 7.50 \\ 7.50 & 11.875 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.404 \\ 14.422 \end{pmatrix}$$

解得 $b = 0.5056$, $a = 1.122$, 又 $c = e^a = e^{1.122} \approx 3.071$ 。

故所求最小二乘曲线是 $y = 3.071e^{0.5056x}$



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

又例如，拟合曲线方程的形式为

$$y = \frac{1}{a+bx} \quad \text{或} \quad y = a + \frac{b}{x}$$

可设 $Y = \frac{1}{y}$ ，则得 $Y = a + bx$

又设 $X = \frac{1}{x}$ ，则得 $y = a + bX$

用最小二乘法可解超定方程组：

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad \text{其中 } \mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}, \mathbf{b} \in \mathbf{R}^m, \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n。$$

$$\text{首先, } E(x_1, x_2, \dots, x_n) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 \quad \text{则令 } \frac{\mathbf{d}\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2}{\mathbf{dx}} = 0$$

$$\text{可得 } \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{A}^T \mathbf{b} = 0 \Rightarrow \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b} \quad (\text{法方程组})$$

对于数据拟合问题例3，也可化成求解超定方程组，事实上

$$E(a, b) = \sum_{i=0}^m (s(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=0}^m ((a + bx_i) - y_i)^2 = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2^2$$

$$= \left\| \begin{pmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \right\|_2^2 \quad \text{其中 } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \mathbf{y} = \begin{pmatrix} -2.1 \\ -0.9 \\ -0.1 \\ 1.1 \\ 1.9 \end{pmatrix},$$

则法方程组为 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$

而

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2.1 \\ -0.9 \\ -0.1 \\ 1.1 \\ 1.9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 9.8 \end{pmatrix}$$

则求得法方程组为

$$\begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 30 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 9.8 \end{pmatrix}$$

解之 $y = x - 2.02$

例5 试按最小二乘法原理求解下列超定方程组

$$\begin{cases} 2x + 4y = 11 \\ 3x - 5y = 3 \\ x + 2y = 6 \\ 2x + y = 7 \end{cases}$$

解：按最小二乘法原理求此超定方程组的解等价于线性方程组

$(A^T A)Z = A^T b$ 的解，其中 $A = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$, $z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix}$ 。

从而有

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 2 \\ 4 & -5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 2 \\ 4 & -5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix}$$

即得法方程组： $\begin{pmatrix} 18 & -3 \\ -3 & 46 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 51 \\ 48 \end{pmatrix}$ ，解之，得到

$$x = 3.04029, y = 1.24176。$$



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

THE END



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



约瑟夫·路易·拉格朗日

(Joseph Louis Lagrange, 1736~1813), 法国数学家、物理学家

18世纪最伟大的科学家之一。在数学、力学和天文学三个学科领域中都有历史性的贡献，其中尤以数学方面的成就最为突出。他是参议员，帝国伯爵，并被授予帝国大十字勋章。

1755年拉格朗日发表第一篇论文“**极大和极小的方法研究**”，发展了欧拉所开创的变分法，为变分法奠定了理论基础。1756年，受欧拉的举荐，拉格朗日被任命为普鲁士科学院通讯院士。1783年，被任命为都灵科学院名誉院长。出任法国米制委员会主任。**制定了被世界公认的长度、面积、体积、质量的单位**，拉格朗日为此做出了巨大的努力。1791年，拉格朗日被选为**英国皇家学会会员**，又先后在巴黎高等师范学院和巴黎综合工科学学校任数学教授。1795年建立了法国最高学术机构——法兰西研究院后，拉格朗日被选为科学院数理委员会主席。他自己的一系列研究工作包括，编写了一批重要著作：《论任意阶数值方程的解法》、《解析函数论》和《函数计算讲义》。



DUT

大连理工大学

DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

拉格朗日科学研究所涉及的领域极其广泛。他在数学上最突出的贡献是使数学分析与几何与力学脱离开来，使数学的独立性更为清楚，从此数学不再仅仅是其他学科的工具。

拉格朗日在代数方程和超越方程的解法上，作出了有价值的贡献，推动了代数的发展。最终解决了高于四次的一般方程为何不能用代数方法求解的问题。因而也可以说拉格朗日是群论的先驱。

在《解析函数论》以及他早在1772年的一篇论文中，他用幂级数表示函数的处理方法对分析学的发展产生了影响，成为实变函数论的起点。

拉格朗日也是分析力学的创立者。拉格朗日在其名著《分析力学》中，在总结历史上各种力学基本原理的基础上，发展达朗贝尔、欧拉等人研究成果，引入了势和等势面的概念，建立了拉格朗日方程，把力学体系的运动方程从以力为基本概念 of 的牛顿形式，改变为以能量为基本概念的分析力学形式，奠定了分析力学的基础，为把力学理论推广应用到物理学其他领域开辟了道路。

拉格朗日用自己在分析力学中的原理和公式，建立起各类天体的运动方程。在天体运动方程的解法中，拉格朗日发现了三体问题运动方程的五个特解，即拉格朗日平动解。此外，他还研究彗星和小行星的摄动问题，提出了彗星起源假说等。

近百余年来，数学领域的许多新成就都可以直接或间接地溯源于拉格朗日的工作。所以他在数学史上被认为是对分析数学的发展产生全面影响的数学家之一。

