第七讲 函数逼近

目录

7-5 最小二乘曲线拟合

7.5 最小二乘曲线拟合

7-5-1 曲线拟合介绍

曲线拟合 (curve fitting)

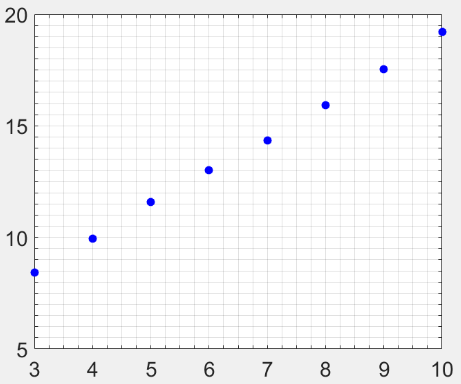
曲线拟合是指选择适当的曲线来拟合通过观测或实验所获得的数据.

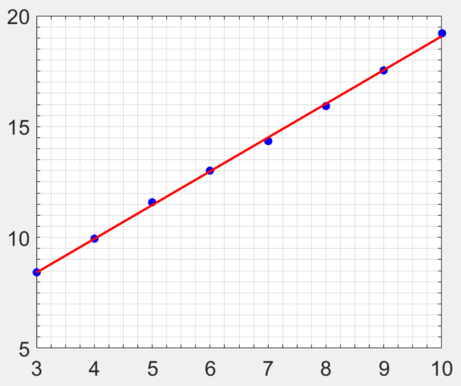
例 中学物理课的"速度与加速度"实验：假设某物体正在做加速运动，加速度未知，实验人员从时间 $t_0 = 3$ 秒时刻开始，每隔 1 秒时间对这个物体进行测速，得到一组速度和时间的离散数据 (见下表). 请根据实验数据推算该物体的加速度.

时间 t (秒)	3	4	5	6	7	8	9	10
速度 v (米/秒)	8.41	9.94	11.58	13.02	14.33	15.92	17.54	19.22

实验法

在坐标纸中画出这些点, 如下图 (左图) 所示, 测得的加速度值约为 1.52 米/秒 ^{2}.





数学方法

设加速度为 a (米/秒 ^{2}), 则速度 v 与时间 t 之间的关系式为 $\boxed{v = v_0 + a(t - t_0)}$

其中 $v_0 = 8.41, t_0 = 3$. 将实验数据 (t_i, v_i) 依次代入可得

$$\begin{cases} 9.94 = 8.41 + a \\ 11.58 = 8.41 + 2a \\ 13.02 = 8.41 + 3a \\ 14.33 = 8.41 + 4a \\ 15.92 = 8.41 + 5a \\ 17.54 = 8.41 + 6a \\ 19.22 = 8.41 + 7a \end{cases}$$

显然, 这个方程组是无解的.

事实上, 由于实验存在误差, 上面的每个方程并不需要严格成立, 只要偏差尽可能地小即可, 即转化为下面的最小二乘问题

$$\min_{a\in\mathbb{R}} \sum_{i=1}^{7} |v_i - v_0 - a(t_i - t_0)|^2 \triangleq \min_{a\in\mathbb{R}} \|b - Ta\|_2^2.$$

7-5-2 最小二乘与法方程

曲线拟合的最小二乘法

给定数据

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_{m-1}	x_m
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_{m-1}	y_m

在函数族 $\Phi \triangleq \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)\}$ 中寻找函数 $S^*(x)$, 使得它与这组数据的偏差平方和最小, 即

$$\sum_{i=0}^{m} |S^*(x_i) - y_i|^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} |S(x_i) - y_i|^2.$$

这就是**曲线拟合的最小二乘法**. 这里的 n 通常远远小于 m, 即 $n \ll m$.

曲线拟合的其他方法

极小化 ∞-范数

在进行数据拟合时, 也可以使用其他标准 (拟合方法), 如**极小化偏差的最大值**, 即

$$\max_{0\le i\le m} |S^*(x_i) - y_i| = \min_{S(x)\in\Phi} \max_{0\le i\le m} |S(x_i) - y_i|. \qquad (\infty\text{-范数})$$

但上述极小化问题求解很复杂.

极小化 1-范数

另一种拟合方法是**极小化偏差之和**, 即

$$\sum_{i=0}^{m} |S^*(x_i) - y_i| = \min_{S(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} |S(x_i) - y_i|. \qquad (1\text{-范数})$$

但由于目标函数不可导, 求解也很困难.

带权最小二乘

在某些应用中, 在各个点上的权重可能不一样, 因此我们需要带权的数据拟合问题, 即

$$\min_{S(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} \omega_i |S(x_i) - y_i|^2, \qquad \text{(带权内积导出范数)}$$

其中 ω_i 都是正实数, 代表在各个点处的权重.

注记

离散数据拟合的最小二乘问题实质上可以看作是最佳平方逼近问题的离散形式, 因此, 可以将求连续函数的最佳平方逼近函数的方法直接用于求解该问题.

带权最小二乘问题的求解

$$\min_{S(x)\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\omega_i|S(x_i)-y_i|^2$$

对任意 $S(x)\in\Phi=\mathrm{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\dots,\varphi_n(x)\}$, 可设

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

于是原问题就转化为求下面的多元函数的最小值点:

$$I(a_0,a_1,\dots,a_n)\triangleq\sum_{i=0}^{m}\omega_i|S(x_i)-y_i|^2=\sum_{i=0}^{m}\omega_i\left[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-y_i\right]^2.$$

由于 $I(a_0, a_1, \ldots, a_n)$ 是正定的, 因此其最小值点就是其驻点. 令偏导数为零, 可得

$$0 = \frac{\partial I(a_0, a_1, \ldots, a_n)}{\partial a_k} = 2\sum_{i=0}^{m} \omega_i \varphi_k(x_i) \left[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i\right], \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

整理后可写为

$$\sum_{j=0}^{n} \left[\sum_{i=0}^{m} \omega_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i)\right] a_j = \sum_{i=0}^{m} \omega_i y_i \varphi_k(x_i), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

引入记号

$$(\varphi_j, \varphi_k) \triangleq \sum_{i=0}^{m} \omega_i \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i), \quad (y, \varphi_k) \triangleq \sum_{i=0}^{m} \omega_i y_i \varphi_k(x_i),$$

则上面的方程可简写为

$$\sum_{j=0}^{n} (\varphi_j, \varphi_k) a_j = (y, \varphi_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

法方程

$$Ga = d,$$

其中

$$G = \begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix}, \quad a = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad d = \begin{bmatrix} (y, \varphi_0) \\ (y, \varphi_1) \\ \vdots \\ (y, \varphi_n) \end{bmatrix}.$$

将法方程的解记为 $a_0^*, a_1^*, a_2^*, \ldots, a_n^*$, 则最佳平方逼近函数为

$$S^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + \cdots + a_n^* \varphi_n(x).$$

法方程的解的存在唯一性

- 为了确保法方程的解存在唯一, 我们要求系数矩阵 G 非奇异.
- 引入的记号 (φ_j, φ_k) 并不构成 $C[a,b]$ 或 Φ 中的内积.
  因此仅仅凭借 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 的线性无关并不能推出 G 是非奇异的.

定理 设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x) \in C[a,b]$ 线性无关. 如果 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 的任意（非零）线性组合在点集 $\{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ 上至多只有 n 个不同的零点, 则 G 非奇异, 此时法方程存在唯一解.

✍ 上述定理中的条件称为 **Haar 条件**, 显然, 如果取 $\varphi_i(x) = x^i$, 则 Haar 条件成立.

例 已知数据表如下, 求 $f(x)$ 的最小二乘拟合函数 $S^*(x)$.

x_i	0.24	0.65	0.95	1.24	1.73	2.01	2.23	2.52	2.77	2.99
y_i	0.23	−0.26	−1.10	−0.45	0.27	0.10	−0.29	0.24	0.56	1.00

证明概要. 分两步走: 先确定一组基, 然后通过解法方程求出表出系数.

在坐标平面上描出数据点, 根据点的分布情况, 选取基函数

$$\varphi_0(x) = \ln x, \quad \varphi_1(x) = \cos x, \quad \varphi_2(x) = e^x.$$

由直接计算可得法方程

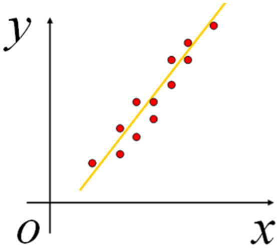
$$\begin{bmatrix} 6.7941 & -5.3475 & 63.259 \\ -5.3475 & 5.1084 & -49.009 \\ 63.259 & -49.009 & 1002.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.6131 \\ -2.3821 \\ 26.773 \end{bmatrix}.$$

解得 $a_0 = -1.0410, \quad a_1 = -1.2613, \quad a_2 = 0.03073$. 所以最小二乘拟合函数为

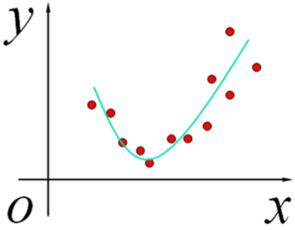
$$S^*(x) = -1.0410 \ln x - 1.2613 \cos x + 0.03073 e^x.$$

数学模型: 拟合函数空间

✍ 对于曲线拟合问题, 如何选择数学模型很重要 (即函数空间 Φ, 也即基函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_n(x)$), 通常需要根据物理意义或所给数据的分布情况来确定.



$y = ax + b$



$y = ax^2 + bx + c$

7-5-3 多项式拟合

在数据拟合时, 如果取 $\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=x, \ldots, \varphi_n(x)=x^n$, 即 $\Phi=\mathbb{H}_n$, 则法方程为

$$\begin{bmatrix} \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i & \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \cdots & \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n \\ \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2 & \cdots & \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n & \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i y_i \\ \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i y_i \\ \cdots \\ \sum\limits_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n y_i \end{bmatrix}.$$

设解为 $[a_0^*, a_1^*, \ldots, a_n^*]^{\mathsf{T}}$, 则

$$S^*(x)=a_0^*+a_1^*x+\cdots+a_n^*x^n$$

即为 $f(x)$ 的 n **次最小二乘拟合多项式**.

例 已知数据表如下, 求 2 次最小二乘拟合多项式. (权系数 ω_i 默认为 1)

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

证明概要. 设 2 次最小二乘拟合多项式为 $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$. 直接计算得法方程

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3825 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix}.$$

解得

$$a_0 = 1.0052, \quad a_1 = 0.8641, \quad a_2 = 0.8437.$$

所以此组数据的 2 次最小二乘拟合多项式为

$$S_2^*(x) = 1.0052 + 0.8641x + 0.8437x^2.$$

7-5-4 正交多项式与最小二乘拟合

定义 (离散情形的带权正交) 给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 以及各点处的权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$，如果函数族 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 满足

$$(\varphi_k, \varphi_j) \triangleq \sum_{i=0}^{m} \omega_i \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) = \begin{cases} 0, & k \neq j, \\ A_k \neq 0, & k = j, \end{cases}$$

(是否构成内积?)

则称 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 正交.

带权正交多项式

如果 $\varphi_k(x)$ 为首项系数不为零的 k 次多项式, 则 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^n$ 就是关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的带权正交多项式.

n 次最小二乘拟合多项式

定理 设多项式 $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x)$ 是关于点集 $x_0, x_1, \ldots, x_m$ 的带权 $\omega_0, \omega_1, \ldots, \omega_m$ 正交, 则 $f(x)$ 的 n 次最小二乘拟合多项式为

$$S_n^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + a_2^* p_2(x) + \cdots + a_n^* p_n(x),$$

其中

$$a_k^* = \frac{(p_k, f)}{(p_k, p_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

问题: 带权正交多项式 $p_0(x), p_1(x), \ldots, p_n(x)$ 如何计算?

带权正交 (离散情形) 多项式的递推计算方法

与正常的正交多项式类似, 我们也可以构造出在离散带权正交情形下的三项递推公式:

$$
\begin{aligned}
&p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = x - \alpha_0, \\
&p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \ldots,
\end{aligned}
$$

其中

$$
\alpha_k = \frac{(xp_k, p_k)}{(p_k, p_k)}, \quad k = 0, 1, \ldots, \qquad \beta_k = \frac{(p_k, p_k)}{(p_{k-1}, p_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \ldots.
$$

可以证明, 由上述递推方法构造出来的 $\{p_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 是带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$ 正交的.

- ✍ 在实际计算时, n 可以事先给定, 或在计算过程中根据计算精度来确定.
- ✍ 在计算过程中可以将构造正交多项式族、解法方程、形成拟合多项式穿插进行.
- ✍ 该方法非常适合编程实现, 是目前多项式最小二乘拟合的首选方法, 有通用程序.

例 已知数据表如下，求 2 次最小二乘拟合多项式（计算过程中小数点后保留 2 位）.

x_i	0	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.00
y_i	1.00	1.75	1.96	2.19	2.44	2.71	3.00

(Approxi_datafit_orth_poly_01.m) (MATLAB 最小二乘拟合多项式函数 polyfit)

证明概要. 由题意可知, $m=6$, $n=2$. 直接计算可得

$$(p_0,p_0)=\sum_{i=0}^{m}1=7,\quad (f,p_0)=\sum_{i=0}^{m}y_i=15.05,\quad (xp_0,p_0)=\sum_{i=0}^{m}x_i=4.5.$$

所以 $a_0=\dfrac{(f,p_0)}{(p_0,p_0)}\approx 2.15$, $\alpha_0=\dfrac{(xp_0,p_0)}{(p_0,p_0)}\approx 0.64$. 于是可得 $p_1(x)=x-0.64$.

不断利用三项递推公式, 可求得

$$a_1\approx 1.98,\quad \alpha_1\approx 0.36,\quad \beta_0\approx 0.094;\quad p_2(x)=x^2-0.98x+0.12;\quad a_2\approx 1.00.$$

所以此组数据的 2 次最小二乘拟合多项式为

$$S_2^*(x)=a_0p_0(x)+a_1p_1(x)+a_2p_2(x)=x^2+x+1.$$

7-6 有理逼近

7.6 有理逼近

为什么有理逼近?

- 多项式逼近的 **优点**: 计算简便.
- 多项式逼近的 **缺点**: 若 $f(x)$ 在某点附近无界 (比如奇点), 则用多项式逼近效果较差.

(勘误: 讲义上“无解”应该是“无界”)

有理逼近

用有理函数来做逼近

$$R_{nm}(x) \triangleq \frac{p_n(x)}{q_m(x)} = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k \Big/ \sum_{k=0}^{m} b_k x^k.$$

- 最佳有理一致逼近:

$$\boxed{\min \|R_{nm} - f(x)\|_\infty}$$

- 最佳有理平方逼近:

$$\boxed{\min \|R_{nm} - f(x)\|_2}$$

Pade 逼近与 Taylor 展开

Pade 逼近基本思想: 以尽可能快的速度与 Taylor 展开式相匹配.

定义 设 $f(x) \in C^{N+1}(-a,a)$, $N = m+n$, 如果有理函数

$$R_{nm}(x) \triangleq \frac{a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n}{1 + b_1 x + \cdots + b_m x^m} = \frac{p_n(x)}{q_m(x)}$$

满足 (1) $p_n(x)$ 与 $q_m(x)$ 无公共因式; (2) $R_{nm}(x)^{(k)}(0) = f^{(k)}(0)$, $k = 0, 1, \ldots, N$; 则称 $R_{nm}(x)$ 为 $f(x)$ 在 $x = 0$ 处的 (n, m) 阶 **Pade 逼近**, 记作 $R(n, m)$.

几点说明

- Pade 逼近是一类特殊的有理逼近.
- $R_{nm}(x)$ 和 $f(x)$ 的 Taylor 展开式的前 $m+n$ 项是一样的.
- $q_m(x)$ 的常数项为 1 (标准化处理, $b_0 \neq 0$)

$R(n,m)$ 的计算

记 $N=m+n$, 设 $f(x)\in C^{N+1}(-a,a)$, $f(x)$ 在 $x=0$ 处的 Taylor 展开为

$$f(x)=f(0)+f^{(1)}(0)x+\frac{1}{2!}f^{(2)}(0)x^2+\cdots+\frac{1}{N!}f^{(N)}(0)x^N+\frac{1}{(N+1)!}f^{(N+1)}(\xi)x^{N+1},$$

前 $N+1$ 项部分和为

$$p(x)=c_0+c_1x+c_2x^2+\cdots+c_Nx^N,\quad c_k=\frac{1}{k!}f^{(k)}(0).$$

设 $h(x)=p(x)q_m(x)-p_n(x)$, 则条件 $R_{nm}(x)^{(k)}(0)=f^{(k)}(0)$ 等价于

$$h^{(k)}(0)=0,\quad k=0,1,\ldots,N$$

又通过计算可知

$$\left.\big(p(x)q_m(x)-p_n(x)\big)^{(k)}\right|_{x=0}=k!\sum_{j=0}^{k}c_jb_{k-j}-k!a_k,$$

$R(n, m)$ 的计算 (续)

所以可得

$$\begin{cases} a_k = \sum_{j=0}^{k-1} c_j b_{k-j} + c_k, & k = 0, 1, 2, \ldots, n, \\ 0 = \sum_{j=0}^{k-1} b_{k-j}, & k = n+1, n+2, \ldots, N. \end{cases}$$

为了书写方便, 当 $j > m$ 时令 $b_j = 0$.

注记

$N + 1$ 个未知量: $a_0, a_1, \ldots, a_n, b_1, \ldots, b_m$, $N + 1$ 个方程, 因此存在唯一解的充要条件是系数矩阵非奇异.

(n, m) 阶 Pade 逼近

定理 设 $f(x) \in C^{N+1}(-a, a)$, $N = m + n$, 则 $R_{nm}(x)$ (其中 $b_0 = 1$) 是 $f(x)$ 的 (n, m) 阶 Pade 逼近的充要条件是 p_n 和 q_n 的系数满足上述递推公式.

✍ $b_1, b_2, \ldots, b_m$ 通过解方程得到, $a_0, a_1, \ldots, a_n$ 可直接计算.

谢谢

THANK YOU