第三章　函数逼近

——最佳平方逼近与曲线拟合

刘可伋

上海财经大学 数学学院

一、最佳平方逼近

定义：已知 $f(x) \in C[a,b]$，线性无关的 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x) \in C[a,b]$，令

$$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$$

如果

$$\boxed{\|f(x) - S^*(x)\|_2^2 = \min_{S(x)\in\Phi} \|f(x) - S(x)\|_2^2}$$

称 $S^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中的最佳平方逼近，其中

$$\|f(x) - S(x)\|_2^2 = \int_a^b \rho(x)\big(f(x) - S(x)\big)^2\, dx$$

1.1 如何计算最佳平方逼近

对 $\forall S(x) \in \Phi$，可设

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

则“计算 $S^*(x)$ ”等价于“求如下多元函数的最小值点”：

$$I(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \int_a^b \rho(x)\left(f(x) - \sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x)\right)^2 dx$$

即求

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

那么

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

注记：$(f-S^*,\varphi_k)=0$

所以

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

法方程：
$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$
，记：$Ga=d$

1.2 最佳平方逼近的存在唯一性

法方程存在唯一解 $\Longleftrightarrow$ $\det(G) \neq 0$ $\Longleftrightarrow$ $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 线性无关

设解为 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_n^*$，并令 $S^*(x) = a_0^*\varphi_0 + a_1^*\varphi_1 + \cdots + a_n^*\varphi_n$

定理：$S^*(x)$ 为 $f(x)$ 在 Φ 中唯一的最佳平方逼近函数，且逼近误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x) - S^*(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{j=0}^{n} a_j^*(\varphi_j, f)$$

提示：$(f - S^*, \varphi_k) = 0$

若 $[a,b]=[0,1]$，$\rho(x)=1$，取 H_n 的一组基：$1,x,x^2,\cdots,x^n$，则法方程为

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

，记：$Ha=d$

注记：H 称为 **Hilbert 矩阵**，严重病态，

该方法只适合求低次最佳平方逼近

例1 求 $f(x)=\sqrt{1+x^2}$ 在[0,1]上的一次最佳平方逼近多项式，并计算误差.

解:

$$d_0=(\varphi_0,f)=\int_0^1\sqrt{1+x^2}\,dx\approx 1.147，\ d_1=(\varphi_1,f)=\int_0^1 x\sqrt{1+x^2}\,dx\approx 0.609$$

$$\begin{bmatrix}1 & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}d_0\\ d_1\end{bmatrix}，\ a_0\approx 0.934，\ a_1\approx 0.426，\ S_1^*(x)=0.934+0.426x$$

$$\|\delta(x)\|_2^2=\|f(x)\|_2^2-\sum_{j=0}^{n}a_j^*(\varphi_j,f)\approx 0.0026，\ \|\delta\|_\infty=\max_{x\in[0,1]}\left|\sqrt{1+x^2}-S_1^*\right|\approx 0.066$$

1.3 正交函数族的最佳平方逼近

若 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 正交，则法方程的解为

$$a_k^* = \frac{(\varphi_k, f)}{(\varphi_k, \varphi_k)},\quad k = 0,1,2,\cdots$$

那么 $S^*(x) = \dfrac{(\varphi_0, f)}{(\varphi_0, \varphi_0)}\varphi_0(x) + \dfrac{(\varphi_1, f)}{(\varphi_1, \varphi_1)}\varphi_1(x) + \cdots + \dfrac{(\varphi_n, f)}{(\varphi_n, \varphi_n)}\varphi_n(x)$

误差：$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^{n} \dfrac{(\varphi_k, f)^2}{(\varphi_k, \varphi_k)}$ $\Longrightarrow$ $\sum_{k=0}^{n} \dfrac{(\varphi_k, f)^2}{(\varphi_k, \varphi_k)} \le \|f(x)\|_2^2$

Bessel不等式

1.4 广义 Fourier 级数

设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是正交函数族，则称

$$a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + a_2^*\varphi_2(x)\cdots$$

为 $f(x)$ 的**广义 Fourier 级数**，其中

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

为 **广义 Fourier 系数**.

定理：设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$ 是**正交多项式族**，则

$$\lim_{n\to\infty} \|f(x) - S_n^*(x)\|_2 = 0$$

其中 $S_n^*(x)$ 为 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式，即

$$S_n^*(x) = \frac{(\varphi_0, f)}{(\varphi_0, \varphi_0)}\varphi_0(x) + \frac{(\varphi_1, f)}{(\varphi_1, \varphi_1)}\varphi_1(x) + \cdots + \frac{(\varphi_n, f)}{(\varphi_n, \varphi_n)}\varphi_n(x)$$

1.5 Legendre 最佳平方逼近

设 $f(x) \in C[-1,1]$，$\rho(x) = 1$，则 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式为

$$S_n^* = a_0^* P_0(x) + a_1^* P_1(x) + \cdots + a_n^* P_n(x)$$

其中

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

误差：$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{j=0}^{n} \frac{(P_k, f)^2}{(P_k, P_k)} = \int_{-1}^{1} f^2(x)\, dx - \sum_{k=0}^{n} \frac{2}{2k+1} (a_k^*)^2$

定理：若 $f(x) \in C^2[-1,1]$，则对 $\forall x \in [-1,1]$，$\forall \varepsilon > 0$，当 n 充分大时，

$$|f(x) - S_n^*(x)| \le \frac{\varepsilon}{\sqrt{n}}$$

定理：**首项系数为1的 n 次多项式中**，$\tilde{P}_n(x)$ 在[-1,1]上与0的平方逼近误差最小

$$\left\|\tilde{P}_n(x)\right\|_2 = \min_{P \in \tilde{H}_n, \deg(P)=n} \|P(x)\|_2$$

其中 $\tilde{P}_n(x)$ 是首项系数为1的 n 次 Legendre 多项式.

提示：$Q_n(x) = \tilde{P}_n(x) + \sum_{k=0}^{n-1} a_k \tilde{P}_k(x)$

例2 求 $f(x)=e^x$ 在 $[-1,1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式，并估计误差.

解:

$$(P_0,f)=\int_{-1}^{1}e^x\,dx\approx 2.3504,\ (P_1,f)=\int_{-1}^{1}xe^x\,dx\approx 0.7358$$

$$(P_2,f)=\int_{-1}^{1}(1.5x^2-0.5)e^x\,dx\approx 0.1431,\ (P_3,f)=\int_{-1}^{1}(2.5x^3-1.5x)e^x\,dx\approx 0.02013$$

$$S_3^*(x)\approx 0.1761x^3+0.5367x^2+0.9979x+0.9963$$

$$\|\delta(x)\|_2^2=\int_{-1}^{1}e^{2x}\,dx-\sum_{k=0}^{3}\frac{2}{2k+1}(a_k^*)^2\approx 0.0084,\ \|\delta\|_\infty=\max_{x\in[-1,1]}|e^x-S_3^*|\approx 0.0112$$

1.6 一般区间上的最佳平方逼近多项式

设 $f(x) \in C[a,b]$，$\rho(x) = 1$，则 $f(x)$ 的 n 次最佳平方逼近多项式为

基本思想：$[a,b] \Rightarrow [-1,1]$，则变量替换：$x = \dfrac{b-a}{2}t + \dfrac{b+a}{2}$

$$f(x) \Rightarrow f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right) \Rightarrow S^*(t) \Rightarrow S^*\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right)$$

1.7 Chebyshev 级数

广义 Fourier 级数中取 $\varphi_k = T_k \ (k = 0,1,2\cdots)$，可得 Chebyshev 级数

$$C^*(x) = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty} a_k^* T_k(x)$$

$$a_k^* = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} \frac{T_K(x)f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} f(\cos\theta)\cos k\theta \, d\theta$$

一致收敛性：若 $f''(x)$ 在 $[-1,1]$ 上分段连续，则

$$f(x) = C^*(x)$$

误差：

$$f(x) - C_N^*(x) \approx a_{N+1}^* T_{N+1}(x), \quad C_N^*(x) = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{k=1}^{N} a_k^* T_k(x)$$

所以 $C_N^*(x)$ 可看作 $f(x)$ 在 $[-1,1]$ 上的 n 次近似最佳一致逼近多项式.

二、曲线拟合与最小二乘法

问题：给定数据 $\{(x_i, y_i), \ i = 0,1,2,\cdots,m\}$，其中 $y_i = f(x_i)$，寻找

$$S^*(x) \in \Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$$

使得 $S^*(x)$ 离 $f(x)$ **最近**.

记 $\delta(S) = (S(x_0) - y_0, S(x_1) - y_1, \cdots, S(x_m) - y_m)$，则 **“距离”** 为：

$$\|\delta(S)\|_1 = \sum_{i=0}^{m} |S(x_i) - y_i| \qquad \|\delta(S)\|_\infty = \max_{0 \le i \le m} |S(x_i) - y_i| \qquad \|\delta(S)\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} |S(x_i) - y_i|^2$$

求解困难、复杂

“最近”：曲线拟合的最小二乘法

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

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

权系数

2.1 如何求解最小二乘拟合

求 $S^*(x)$ 等价于求下面的多元函数的最小值点：

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

最小值点 $\Longleftrightarrow$ $\dfrac{\partial I}{\partial a_k}=0,\quad k=0,1,\cdots,n$

引入记号：

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

最小值条件：$\dfrac{\partial I}{\partial a_k}=0 \Leftrightarrow \sum_{j=0}^{n}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k)$

法方程：$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \vdots & & \ddots & \vdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}d_0\\ d_1\\ \vdots\\ d_n\end{bmatrix}$，记：$Ga=d$

2.2 最小二乘法的存在唯一性

法方程存在唯一解 $\Longleftrightarrow$ $\det(G) \neq 0$ $\not\Longrightarrow$ $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 线性无关

Haar条件：$\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n \in C[a,b]$ 的任意（非零）线性组合在点集

$x_0, x_1, \cdots, x_m$ $(m \geq n)$ 上至多有 n 个不同的零点.

定理：若 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 在 $\{x_k\}_{k=0}^{m}$ 上满足 **Haar 条件**，则 ***G* 非奇异**，最小二乘法的解存在唯一.

注记：若取 $\varphi_k = x^k$，则 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 满足 **Haar 条件**

2.3 多项式最小二乘曲线拟合

取 $\Phi = H_n = \mathrm{span}\{1, x, \cdots, x^n\}$，即 $\varphi_i = x^i$，则法方程为：

$$
\begin{bmatrix}
\sum_{i=0}^{m} \omega_i & \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^n \\
\sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i & \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^2 & & \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^{n+1} \\
\vdots & & \ddots & \vdots \\
\sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^n & \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^{2n}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{i=0}^{m} \omega_i f_i \\
\sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i f_i \\
\vdots \\
\sum_{i=0}^{m} \omega_i x_i^n f_i
\end{bmatrix}
$$

$S^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* x^k$ 称为 $f(x)$ 的n 次最小二乘拟合多项式

例3 求以下数据的二次最小二乘拟合多项式

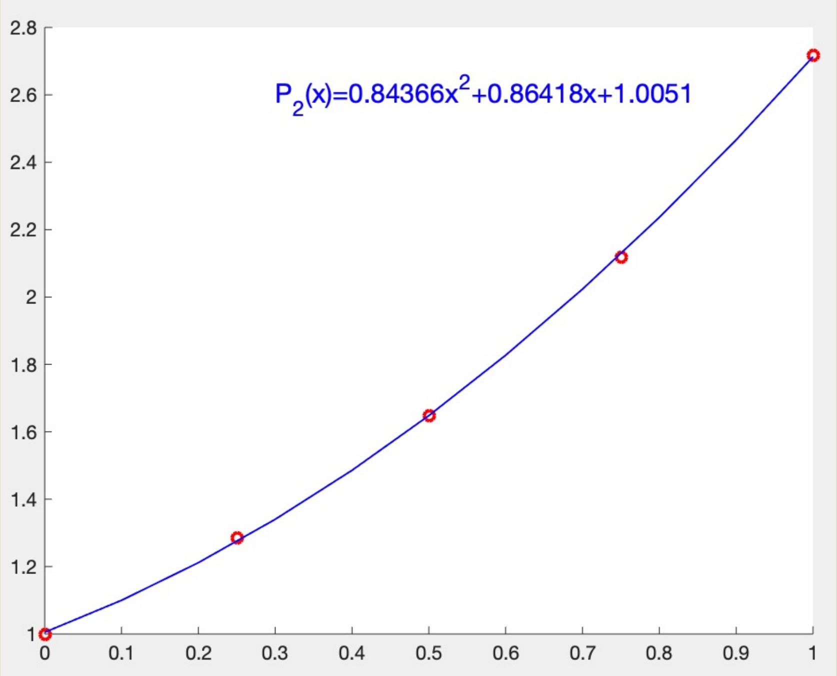
x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

解： 设 $P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$，则

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix},$$

$$a_0 = 1.0051, a_1 = 0.8642, a_2 = 0.8437$$

$$P_2(x) = 1.0051 + 0.8642x + 0.8437x^2$$



Ch3_4ex3.m

注记： 该方法不适合 n 较大的情形（**病态**）

2.4 正交多项式的最小二乘曲线拟合

给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 以及各点的权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$，若函数族 $\{\varphi_k\}_{k=0}^n$ 满足

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

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

若 φ_k 是首项系数非零的 k 次多项式，则为离散正交多项式族.

设多项式 $\{\varphi_k\}_{k=0}^{n}$ 关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$ 正交，则 $f(x)$ 在 H_n 中的最小二乘拟合多项式为

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

其中 $a_k = (\varphi_k, f)/(\varphi_k, \varphi_k)$，$k = 0,1,2,\cdots,n$

思考： 如何编程？Ch3_orth_poly.m

正交多项式族的构造方法：

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_1(x) = x - \alpha_0 \\ \varphi_{k+1}(x) = (x-\alpha_k)\varphi_k(x) - \beta_k\varphi_{k-1}(x) \end{cases}$$

$$\alpha_k = \frac{(x\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}, \quad k = 0,1,\cdots,n-1$$

$$\beta_k = \frac{(\varphi_k, \varphi_k)}{(\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1})}, \quad k = 1,2,\cdots,n-1$$

提示： 归纳法证明

注记： n 可根据误差自适应变动，编程中仅需增加迭代次数即可

例4　求以下数据的二次最小二乘拟合多项式

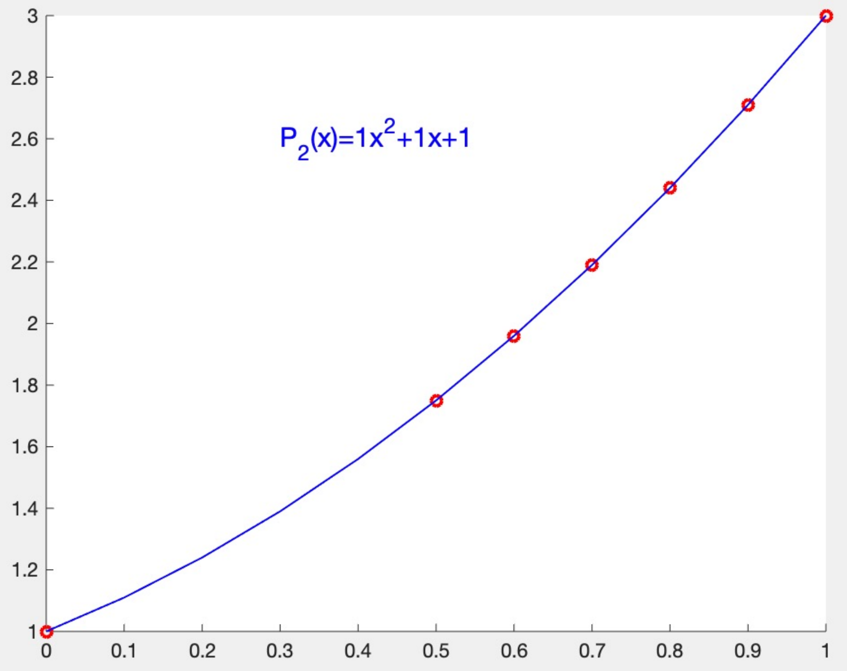
x_i	0	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.00
$f(x_i)$	1.00	1.75	1.96	2.19	2.44	2.71	3.00

解：

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{6}1=7，(f,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{6}f(x_i)=15.05，(x\varphi_0,\varphi_0)$$

$$a_0=\frac{(f,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}\approx 2.15，\alpha_0=\frac{(x\varphi_0,\varphi_0)}{(\varphi_0,\varphi_0)}\approx 0.64，\varphi_1(x)=x-0$$

$$a_0\approx 1，P_2(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+a_2\varphi_2(x)=x^2+x+1$$



注记：MATLAB拟合函数 polyfit(x, y, n)，拟合工具箱 cftool

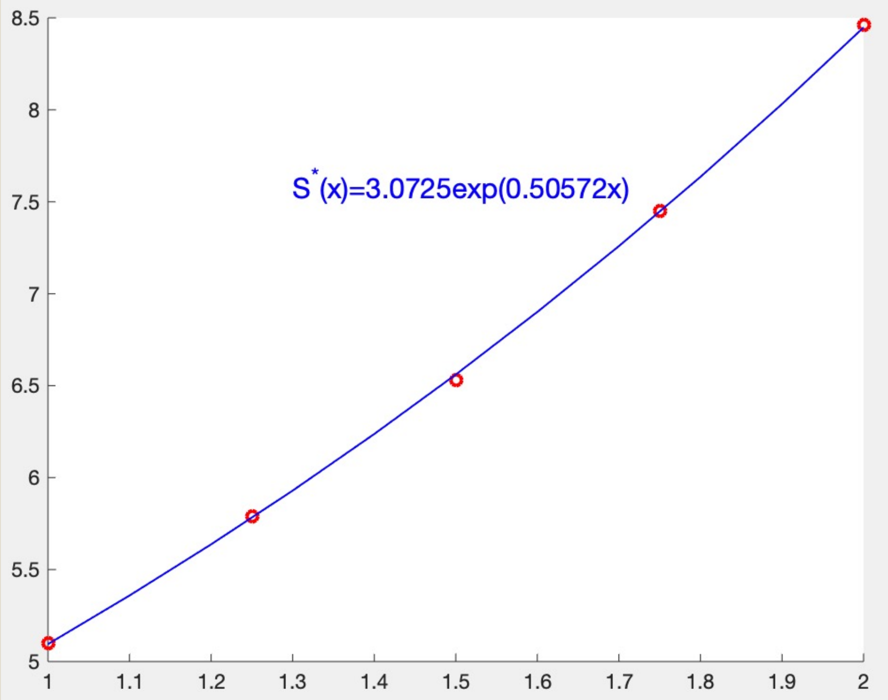
Ch3_4ex4.m

例5 用 $y = ae^{bx}$ 拟合以下数据

x_i	1	1.25	1.5	1.75	2
$f(x_i)$	5.1	5.79	6.53	7.45	8.46

解：变量代换：$z = \ln y$，则 $z(x) = bx + \ln a$

思考：非线性拟合都可转为线性拟合吗？



Ch3_4ex5.m

2.5 其它非线性拟合方法

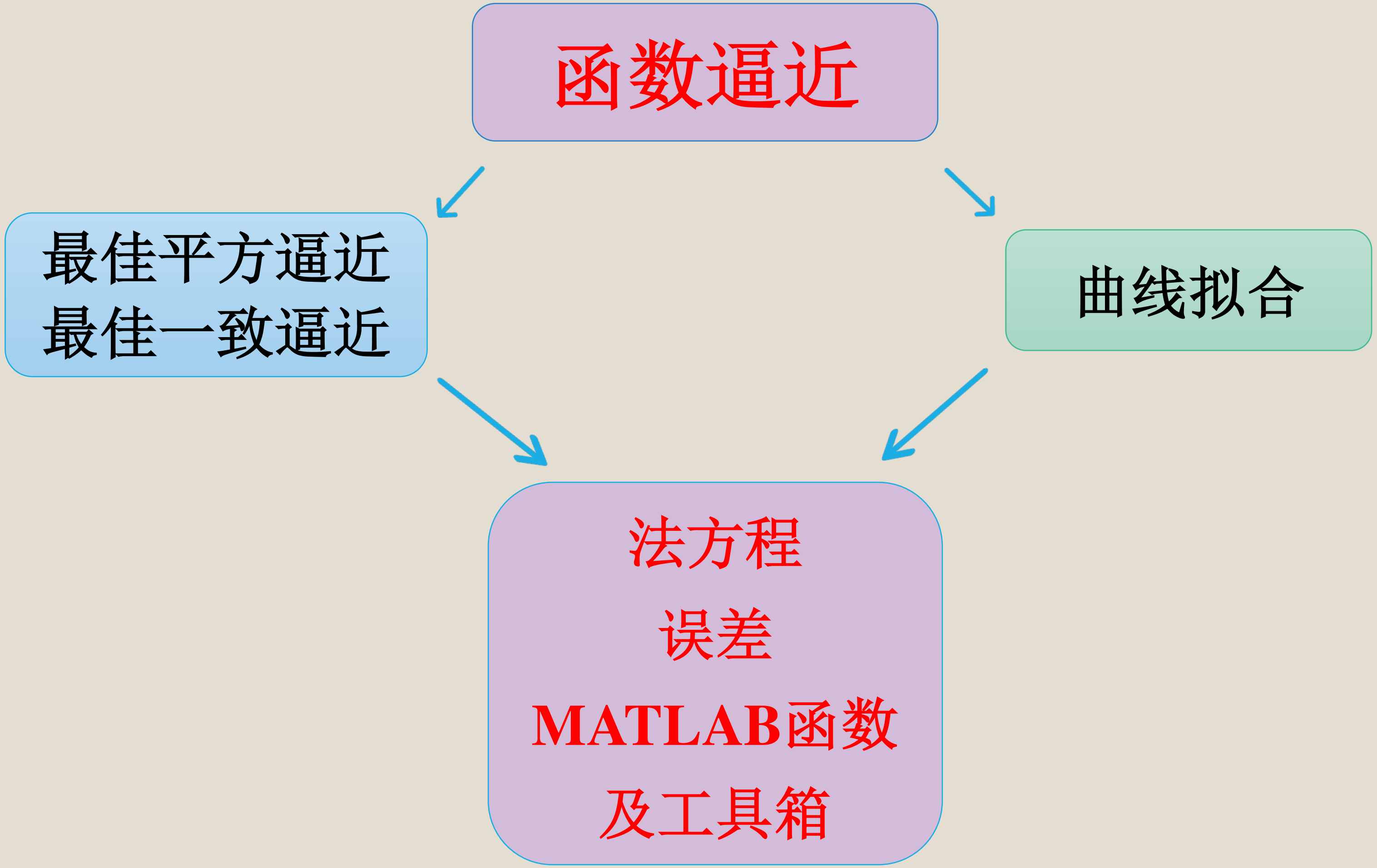
1. 三角函数拟合：$S(x) = a\sin bx$

2. 对数拟合： $S(x) = a + b\ln x$

3. 幂函数拟合： $S(x) = ax^b$

4. 双曲拟合： $\dfrac{1}{S(x)} = a + \dfrac{b}{x}$

小结



习题与编程题见课程网页：

1、参考书目

[1]《第三种科学方法：计算机时代的科学计算》，石忠慈著，清华大学出版社，2000

[2]《数值分析》，张平文等著，北京大学出版社，2007

[3]《数值分析》，冯烟利等译，高等教育出版社，2005

2、网络学习资源

(1) https://www.icourse163.org/course/NEU-1002089009?from=searchPage《数值分析》精品课程

(2) https://uk.mathworks.com/help/pdf_doc/matlab/getstart.pdf（MATLAB入门）

(3) https://www.icourse163.org/course/CSU-1002475002?from=searchPage《科学计算与MATLAB语言》精品课程

3、拓展性参考文献

[1]刘仁杰等，基于曲线拟合的探地雷达层状介质参数反演算法[J]，信号处理，2021 online.