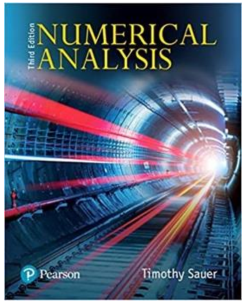
计算方法

刘景铖

计算机软件新技术国家重点实验室
南京大学

课程基本信息

- 教师：刘景铖
- Email：liu@nju.edu.cn
- Office hour：周二 16:00-18:00?，计算机系516
- 课程主页：https://tcs.nju.edu.cn/wiki
- 数值分析（Numerical Analysis）（原书第2版）Timothy Sauer, 机械工业出版社



参考：

– Numerical Algorithms: Methods for Computer Vision, Machine Learning, and Graphics. Justin Solomon. CRC Press
– Lx=b,拉普拉斯方程求解以及它的应用（Lx=b, Laplacian Solver and Their Algorithmic Applications） Nisheeth K. Vishnoi

课程QQ群

- 作业每两周发布一次
- 第二次作业已经发布
- 作业Email: nm_nju_2025@163.com
- QQ群可以讨论课程相关的问题
- 作业可以小组讨论（<=3人）
  - 清晰标明合作者，及各自的贡献
  - 使用了的参考资料必须注明
  - 但写作必须由自己独立完成，不可照抄
  - 类似地，别人提供的想法也必须注明
- 分辨合作与作弊之间的区别
  - 参与讨论之前，请先花时间自己进行思考
  - 避免参与你不能提供贡献的讨论
  - 作弊不仅让你丧失一次学习的机会
  - 还会影响你以后的自信心
- 对学术不诚信的行为零容忍
- 迟交作业需要提前预约

对作弊的认定参照http://www.acm.org/publications/policies/plagiarism_policy

计算方法 2025

群号：1019649082

扫一扫二维码，加入群聊

回顾

- 插值：给定数据点，找出多项式经过所有点
  - 对于 n **个数据点**，有且仅有一个
  - **存在性**：拉格朗日插值方法
  - **唯一性**：代数基本定理
  - 龙格现象：等距采样
  - 插值的不可预测性：分享秘密
  - 多项式的插值表示的唯一性：自纠错码（Reed-Solomon code）
- **函数逼近/**拟合：给定函数，找出与之相近的函数（多项式）
  - Weierstrass**定理**：对于连续函数，多项式可以任意地逼近（即使是等距采样）

这节课：

- **Chebyshev多项式**
- **最小二乘法**

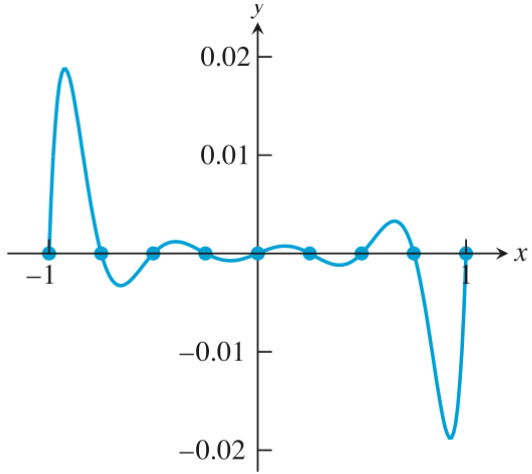
回顾插值中的龙格现象

对连续n次可导函数f，在$x_1, \ldots, x_n$上拉格朗日插值的误差

$$f(x) - P(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_n)}{n!} f^{(n)}(c),$$

证明：令$q(t)$为$x_1, \ldots, x_n, x$上插值的多项式

- 则$q(t) = P(t) + \lambda \prod_{j=1}^{n}(t - x_j)$，其中$\lambda = \frac{f(x)-P(x)}{\prod_{j=1}^{n}(x-x_j)}$
- 考虑$\phi(t) \coloneqq f(t) - q(t)$，则$\phi(t)$在$n+1$个点处为零
- 由Rolle定理，$\phi'(t)$在n个点处为零
- 反复应用Rolle定理，$\phi^{(n)}(t)$在区间上某个点为零
- 在该点$\phi^{(n)}(c) = 0 \Rightarrow f^{(n)}(c) = q^{(n)}(c) = \lambda n!$
- 整理即得误差公式



使用等距采样插值时的误差函数

如何选点$x_1, \ldots, x_n$，才能最小化误差？插值的表现可否媲美函数逼近？

- **采用更多靠近边界的点**

Chebyshev插值基点

不失一般性地， 假设函数是定义在[-1,1]上的

目标：选取$x_1, \dots, x_n$**使得**

$$\max_{x\in[-1,1]} |(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)| \qquad (*)$$

最小

<u>定理</u>：令$x_i = \cos\frac{(2i-1)\pi}{2n}, i = 1, \dots, n$，得到(*)最小值${}^1/_{2^{n-1}}$

- Chebyshev多项式 $T_n(x) := 2^{n-1}(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$
- Chebyshev插值多项式：选取Chebyshev基点进行拉格朗日插值得到的多项式

Chebyshev多项式

等价的定义 $T_n(x) := \cos(n \arccos x)$， $x \in [-1,1]$

这为什么是一个多项式？

- 回忆三角函数的倍角公式
- $\cos(n\theta)$**可以展开成**为关于 $\cos\theta$**的**n**次多项式**
- **令**$x = \cos\theta$，则$\cos(n\theta)$**是关于**x**的**n**次多项式**
- $\cos(n\theta) = \cos(n \arccos x)$

$$T_0(x) = 1$$
$$T_1(x) = x$$
$$T_2(x) = \cos 2\theta = 2\cos^2\theta - 1 = 2x^2 - 1$$

Chebyshev多项式

等价的定义 $T_n(x) := \cos(n \arccos x)$， $x \in [-1,1]$

令$x = \cos\theta$

$$T_0(x) = 1$$
$$T_1(x) = x$$
$$T_2(x) = \cos 2\theta = 2\cos^2\theta - 1 = 2x^2 - 1$$

应用倍角公式：

$$T_{n+1}(x) = \cos(n\theta + \theta) = \cos n\theta \cos\theta - \sin n\theta \sin\theta$$
$$T_{n-1}(x) = \cos(n\theta - \theta) = \cos n\theta \cos\theta + \sin n\theta \sin\theta$$

两式相加

$$T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = 2\cos n\theta \cos\theta = 2xT_n(x)$$

递归关系

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

Chebyshev多项式

等价的定义 $T_n(x) := \cos(n \arccos x)$， $x \in [-1,1]$

一些观察：

- 次数为n，最高次项的系数是2^{n-1}
- $T_n(1) = 1, T_n(-1) = (-1)^n$
- $|T_n(x)| \leq 1$
- $T_n(x)$的零点恰好是 $x_i = \cos\frac{(2i-1)\pi}{2n}, i = 1, \dots, n$
  - ➢ $\cos n\theta = 0 \quad \text{iff} \quad n\theta = (2i-1) \cdot \frac{\pi}{2}, i = 1, \dots, n$
- $T_n(x)$在-1到1之间来回往返n+1次，分别在 $\cos 0, \cos\frac{\pi}{n}, \dots, \cos\frac{(n-1)\pi}{n}, \cos\pi$

Chebyshev多项式

观察：$T_n(x)$在-1到1之间来回往返$n+1$次，分别在 $\cos 0, \cos\frac{\pi}{n}, \dots, \cos\frac{(n-1)\pi}{n}, \cos\pi$

Chebyshev定理：令$x_i = \cos\frac{(2i-1)\pi}{2n}, i = 1, \dots, n$，得到$\max\limits_{x\in[-1,1]}(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$最小值${}^1/_{2^{n-1}}$

证明：

- 假设有另一组x_i的选择，使得$P_n(x) \coloneqq (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$在[-1,1]上有更小的极大值。换言之，$\forall x\in[-1,1]$，$|P_n(x)| < {}^1/_{2^{n-1}}$ 。
- 考虑$P_n(x) - T_n(x)/2^{n-1}$，则在n+1个点上的符号是正负交替的。因此$P_n(x) - T_n(x)/2^{n-1}$有n个零点。
- 注意到 $P_n(x)$和 $T_n(x)/2^{n-1}$都是首1的多项式（最高次系数为1）
- $P_n(x) - T_n(x)/2^{n-1}$的次数最多为n-1次，这与$P_n(x) - T_n(x)/2^{n-1}$有n个零点矛盾。（除非$P_n(x) - T_n(x)/2^{n-1}$为零多项式）

函数逼近与插值

- **插值**：必须经过给定的所有的点
  - **有些**应用场景确实需要插值
  - 选点对误差影响非常大
  - **分段**插值
- **函数逼近**：不要求经过给定的点，但要求尽可能地减少误差
  - Weierstrass定理即是其中的一个例子

函数逼近与插值

Weierstrass **定理**: 对于连续函数f， **多**项式可以任意地逼**近**，**衡量**误差的是无穷范数:

$$\|f-p\|_\infty := \sup_x |f(x)-p(x)|$$

一般来说，要找最佳一致逼近的多项式是比较困难的

- 但可以找到与最佳一致逼近的多项式表现相差不大的
- **通**过Chebyshev**点插**值得到的n**次多**项式，与最佳一致逼近的n**次**多项式之间，在无穷范数上只差$O(\log n)$

函数逼近理论在计算机科学

更快的算法:

- **更快地模**拟随机游走
- **迭代求解**线性方程组 Conjugate gradient; Chebyshev iteration
- 计算最大特征值/**特征方向** Lanczos iteration
- ……

复杂性理论:

- **神**经网络(perceptron)**表示**PARITY**的**复杂性
- 电路复杂性 circuit complexity
- **通信**复杂性 communication complexity
- ……

课外拓展：**更多的例子可以参见**

[The Polynomial Method. In Quantum and Classical Computing]

[Faster Algorithms Via Approximation Theory]

[Chebyshev Polynomials and Approximation Theory in Theoretical Computer Science and Algorithm Design]

函数空间上的线性代数

向量空间：支持向量加法，数的乘法，闭合的线性空间
线性相关：一组向量是线性相关的，如果存在它们的一组非零的线性组合为零

例子：
- 实数域上的n维向量$\mathbb{R}^n$
- 实系数的多项式$\mathbb{R}[x]$
  - 加法：两个多项式相加
  - 数的乘法：一个常数乘上一个多项式
  - 线性：$c\,(p(x)+q(x)) = c\,p(x) + c\,q(x)$, $(a+b)p(x) = a\,p(x) + b\,p(x)$
  - 它的一组基为$1, x, x^2, x^3, \ldots$
  - Chebyshev多项式亦可作为它的一组基，生成相同的向量空间（思考：为什么？）

- 类似地，对连续函数，可定义$C[a,b]$
- 对p阶连续可导函数，记为$C^p[a,b]$
- 所有连续函数这个空间非常的大，考虑一组基生成的函数；由Weierstrass，多项式可以任意近似有限区间上的连续函数。
- 称函数族$\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots, \phi_n(x)$是线性相关的，如果存在$c_1, c_2, \ldots, c_n$，非全为零，使得

$$c_1\,\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \ \ldots + c_n\phi_n(x) = 0, \forall x$$

否则称它们是线性无关的

向量空间的范数

$\mathbb{R}^n$上的无穷范数，对于向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^\top$

$$\|x\|_\infty := \max_i |x_i|$$

$\mathbb{R}^n$上的2-范数，对于向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^\top$

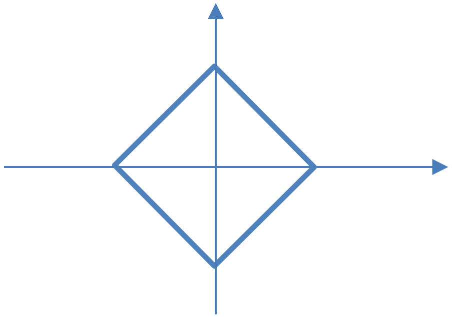
$$\|x\|_2 := \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\langle x, x\rangle}$$

$\mathbb{R}^n$上的1-范数，对于向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^\top$

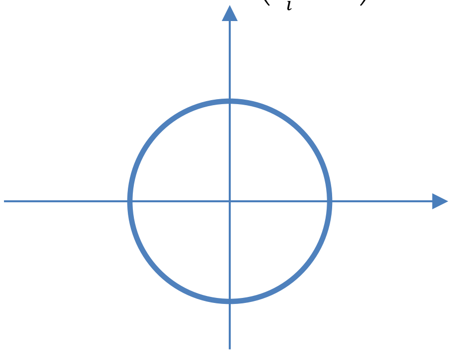
$$\|x\|_1 := \sum_i |x_i|$$

$\mathbb{R}^n$上的p-范数，对于向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^\top$

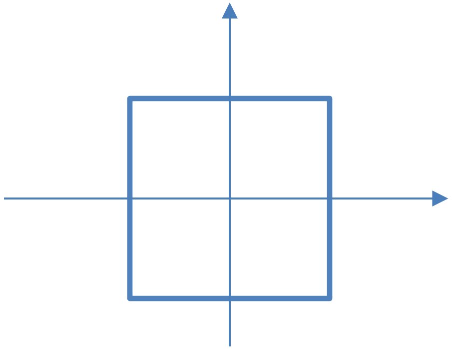
$$\|x\|_p := \left(\sum_i |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$



1-范数为1



2-范数为1



无穷范数为1

向量空间的范数

$\mathbb{R}^n$ **上的无穷范数**，对于向量$x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$

$$\|x\|_\infty := \max_i |x_i|$$

$\mathbb{R}^n$ 上的**2-范数**，对于向量$x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\top$

$$\|x\|_2 := \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\langle x, x\rangle}$$

函数f的无穷范数 (∞-norm)：

$$\|f\|_\infty := \sup |f|$$

函数f的2-范数 (2-norm)：

$$\|f\|_2 := \sqrt{\int |f(x)|^2 \, dx}$$

如果要找到函数f的最佳2-范数近似（最佳平方逼近），要比最佳无穷范数的近似容易得多：最小二乘法

最小二乘法—求解线性方程

给定矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，向量$b \in \mathbb{R}^m$，求$x \in \mathbb{R}^n$**使得**$Ax = b$

只有三种情况

- 对任意的向量b，**存在唯一解**
- 不可解，或方程不一致 (inconsistent, over-determined)
- **存在无**穷多组解 (under-determined)

性质：只要存在两个不同的解，则一定存在无穷多组解。

接下来：对于方程不一致的情况，我们讨论**最小二乘法**

最佳平方逼近

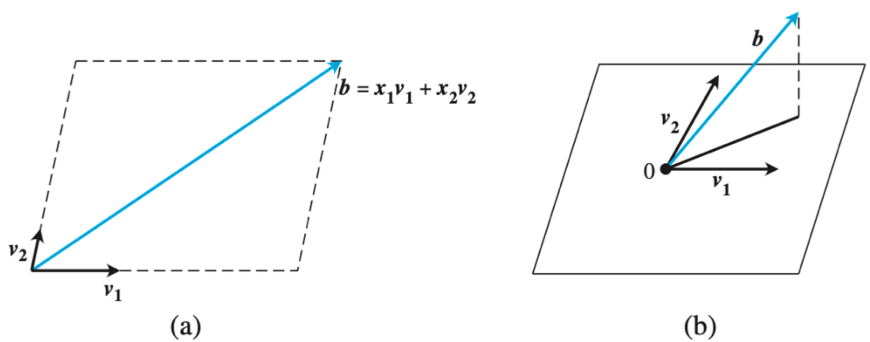
最小二乘法-离散线性版本

从最简单的设定开始。我们想要找出一个线性拟合，使误差的2-范数最小化：

- 给定矩阵A，向量b，求x使得$\|Ax-b\|_2^2$**最小**

$$\begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1A_1 + x_2A_2 + \cdots + x_nA_n$$

- **右边是** $A_1, A_2, \dots, A_n$**能够**生成的线性子空间



向量b不一定在该子空间内，此时，应该找“最接近”的

下节课

最小二乘法

傅里页变换

三角插值