详细解答

STEP II 2000，第 5 题

纯数学 · 最小二乘近似

> **STEP II 2000，第 5 题**
>
> 继续阅读之前，请先看题目（原题为英文）。题目载于 STEP Support Programme 的试题资料库：
>
> step.maths.org/questions/00-s2-q5

关键思路

把平方展开之后，要求最小值的量其实只是 λ 的二次式（quadratic），其系数都是固定的数（涉及 f 的积分）。只要配方（completing the square），就能一次过求出最佳的 λ 和最小的误差。至于正弦函数的例子，要点在于当 n 很大时，$\sin(\pi x/n)$ 几乎就是一条通过原点的直线，而小角近似（small-angle approximations）正好把这个说法精确化。

解答

λ 的最佳值

设

$$J = \int_0^1 x f(x)\,\mathrm{d}x, \qquad K = \int_0^1 (f(x))^2\,\mathrm{d}x.$$

这两个都是常数，与 λ 无关。把平方展开，并利用 $\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}$，得

$$\begin{aligned} I(\lambda) = \int_0^1 (f(x) - \lambda x)^2\,\mathrm{d}x &= K - 2\lambda J + \tfrac{1}{3}\lambda^2 \\ &= \tfrac{1}{3}(\lambda - 3J)^2 + K - 3J^2. \end{aligned}$$

平方项永不为负，而且只在 $\lambda = 3J$ 时等于零，所以 $I(\lambda)$ 恰好在

$$\lambda = 3\int_0^1 x f(x)\,\mathrm{d}x,$$

时取得最小值，这正是所求。（等价地，由 $I'(\lambda) = -2J + \frac{2}{3}\lambda = 0$ 可得 $\lambda = 3J$，而 $I''(\lambda) = \frac{2}{3} > 0$ 确认这是极小值。）

残差

R^2 是 I 的最小值，即残差（residual error）的平方；由配方后的式子可见，这个最小值是 $K-3J^2$。由于 $J=\lambda/3$，我们有 $3J^2=\frac{1}{3}\lambda^2$，所以

$$R^2=\int_0^1 \big(f(x)\big)^2\,\mathrm{d}x-\tfrac{1}{3}\lambda^2,$$

这正是所求。（如果你是用求导的方法找出 λ，可把 $J=\lambda/3$ 代入 $K-2\lambda J+\frac{1}{3}\lambda^2$，得到 $K-\frac{2}{3}\lambda^2+\frac{1}{3}\lambda^2$，结果相同。）

$f(x)=\sin(\pi x/n)$ 的情况

为了令代数运算较为简洁，设 $a=\pi/n$，于是 $f(x)=\sin ax$，而且当 $n\to\infty$ 时 $a\to 0$。取 $u=x$ 和 $\mathrm{d}v=\sin ax\,\mathrm{d}x$ 作分部积分（integration by parts），

$$\begin{aligned}\int_0^1 x\sin ax\,\mathrm{d}x&=\Big[-\frac{x\cos ax}{a}\Big]_0^1+\frac{1}{a}\int_0^1\cos ax\,\mathrm{d}x\\&=-\frac{\cos a}{a}+\frac{\sin a}{a^2},\end{aligned}$$

所以

$$\lambda=\frac{3(\sin a-a\cos a)}{a^2}.$$

想一想 为甚么 $\sin\theta$ 的近似式中需要保留 θ^3 项，而不能只用 $\sin\theta\approx\theta$?

如果只用 $\sin a\approx a$ 和 $\cos a\approx 1$，分子就变成 $a-a=0$，这甚么也没有告诉我们：首项互相抵消了，答案藏在下一阶的项之中。把提示中的两个近似式都用上，

$$\sin a-a\cos a\approx\Big(a-\tfrac{1}{6}a^3\Big)-a\Big(1-\tfrac{1}{2}a^2\Big)=\tfrac{1}{3}a^3,$$

因此当 n 很大时，

$$\lambda\approx\frac{3\cdot\frac{1}{3}a^3}{a^2}=a=\frac{\pi}{n}$$

这就是结果 (i)。

至于 (ii)，我们还需要 K。利用 $\sin^2 ax=\frac{1}{2}(1-\cos 2ax)$，

$$K=\int_0^1\sin^2 ax\,\mathrm{d}x=\frac{1}{2}-\frac{\sin 2a}{4a}.$$

当 $n\to\infty$ 时，$a\to 0$ 而 $\dfrac{\sin 2a}{2a}\to 1$，所以 $K\to\frac{1}{2}-\frac{1}{2}=0$。同时 $\lambda\to 0$，因为 $\lambda\approx\pi/n$。故此

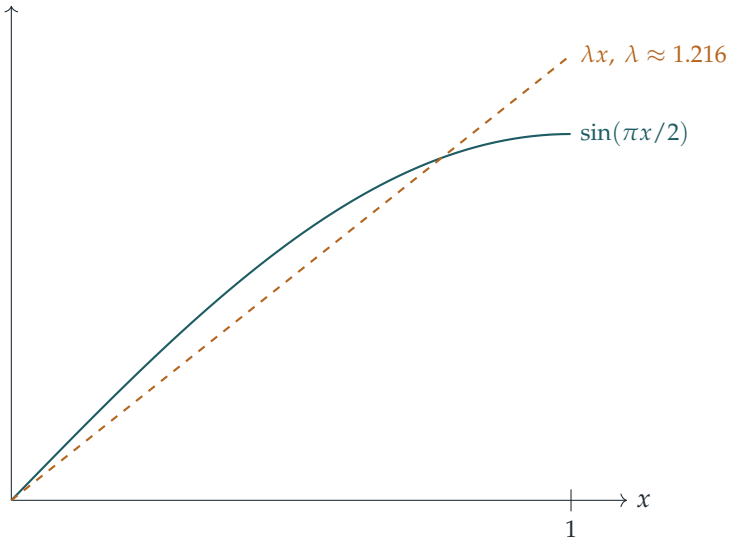
$$R^2=K-\tfrac{1}{3}\lambda^2\to 0-0=0,$$

又因为 $R\ge 0$，我们得到 $\lim_{n\to\infty}R=0$。这就是结果 (ii)。

事实上，这里的抵消远比上述的更彻底。利用 $\sin 2a \approx 2a - \frac{4}{3}a^3$，我们得到 $K \approx \frac{1}{2} - (\frac{1}{2} - \frac{1}{3}a^2) = \frac{1}{3}a^2$，而 $\frac{1}{3}\lambda^2 \approx \frac{1}{3}a^2$ 亦然。所以 R^2 不单是小：与 K（即 f 本身的大小）相比，它也是小的。这条直线几乎完全捕捉了 f。

为何这些结果在意料之中

在 $0 \leq x \leq 1$ 上，角 $\pi x/n$ 介乎 0 与 π/n 之间，当 n 很大时这个角很小。所以在整个区间上 $\sin(\pi x/n) \approx \pi x/n$：这个函数本身就非常接近线性函数 λx，其中 $\lambda = \pi/n$。因此，最佳拟合直线的斜率（gradient）应该接近 π/n，而拟合应该变得近乎完美，所以残差应该趋向零。下图显示，即使 $n = 2$，曲线与直线也相差不远。



验算

- 如果本来就有 $f(x) = cx$，则 $\lambda = 3c\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = c$ 而 $R^2 = \frac{1}{3}c^2 - \frac{1}{3}c^2 = 0$，正如所料。
- 以数值计算，当 $n = 10$ 时，精确公式给出 $\lambda = 0.31107$，而 $\pi/10 = 0.31416$；当 $n = 100$ 时，比值 $\lambda/(\pi/n)$ 为 0.99990。
- 当 $n = 10$ 时，数值积分（quadrature）给出 $R^2 \approx 6.0 \times 10^{-7}$，而 $K \approx 0.032$，所以与 f 相比，残差确实微不足道。

常见错误

- 停在 $\sin a \approx a$、$\cos a \approx 1$ 而得到 $\lambda \approx 0$：这是对的，但毫无用处。要保留三次项。

▶ 忘记了 $\lambda = 3\int_0^1 xf(x)\,\mathrm{d}x$ 中的 3 是来自 $\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}$。

STEP 之外

这就是最小二乘逼近（least-squares approximation），而它本质上是几何。把 $[0,1]$ 上的函数看成向量，并以 $\langle f,g\rangle = \int_0^1 fg\,\mathrm{d}x$ 作为“点积”（dot product）。那么 λx 就是 f 在 x 所张成的直线上的正交投影（orthogonal projection），而 $R^2 = K - \frac{1}{3}\lambda^2$ 就是毕氏定理（Pythagoras′ theorem）。把展开式再推进一步，可得 $R^2 \approx a^6/1575$，这来自把 x^3 项中沿 x 方向的分量投影掉。Strang 的 *Introduction to Linear Algebra*（线性代数入门）详细阐述了投影与最小二乘法，而同样的想法更可引伸至傅里叶级数（Fourier series）。

Beyond STEP 详细解答：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hans/。解答文字采用 CC0 1.0；题目本身版权属 Cambridge University Press & Assessment 所有（©），本文件不予转载。由机器从英文翻译而成；尚未经审阅。