詳細解答

STEP II 2000，第 5 題

純數學 • 最小二乘近似

> **STEP II 2000，第 5 題**
>
> 繼續閱讀之前，請先看題目（原題為英文）。題目載於 STEP Support Programme 的試題資料庫：
>
> step.maths.org/questions/00-s2-q5

關鍵思路

把平方展開之後，要求最小值的量其實只是 λ 的二次式（quadratic），其係數都是固定的數（涉及 f 的積分）。只要配方（completing the square），就能一次過求出最佳的 λ 和最小的誤差。至於正弦函數的例子，要點在於當 n 很大時，$\sin(\pi x/n)$ 幾乎就是一條通過原點的直線，而小角近似（small-angle approximations）正好把這個說法精確化。

解答

λ 的最佳值

設

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

這兩個都是常數，與 λ 無關。把平方展開，並利用 $\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}$，得

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

平方項永不為負，而且只在 $\lambda = 3J$ 時等於零，所以 $I(\lambda)$ 恰好在

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

時取得最小值，這正是所求。（等價地，由 $I'(\lambda) = -2J + \frac{2}{3}\lambda = 0$ 可得 $\lambda = 3J$，而 $I''(\lambda) = \frac{2}{3} > 0$ 確認這是極小值。）

殘差

R^2 是 I 的最小值，即殘差（residual error）的平方；由配方後的式子可見，這個最小值是 $K - 3J^2$。由於 $J = \lambda/3$，我們有 $3J^2 = \frac{1}{3}\lambda^2$，所以

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

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

$f(x) = \sin(\pi x/n)$ 的情況

為了令代數運算較為簡潔，設 $a = \pi/n$，於是 $f(x) = \sin ax$，而且當 $n \to \infty$ 時 $a \to 0$。取 $u = x$ 和 $\mathrm{d}v = \sin ax\,\mathrm{d}x$ 作分部積分（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 為甚麼 $\sin\theta$ 的近似式中需要保留 θ^3 項，而不能只用 $\sin\theta \approx \theta$？

如果只用 $\sin a \approx a$ 和 $\cos a \approx 1$，分子就變成 $a - a = 0$，這甚麼也沒有告訴我們：首項互相抵消了，答案藏在下一階的項之中。把提示中的兩個近似式都用上，

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

因此當 n 很大時，

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

這就是結果 (i)。

至於 (ii)，我們還需要 K。利用 $\sin^2 ax = \frac{1}{2}(1 - \cos 2ax)$，

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

當 $n \to \infty$ 時，$a \to 0$ 而 $\dfrac{\sin 2a}{2a} \to 1$，所以 $K \to \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$。同時 $\lambda \to 0$，因為 $\lambda \approx \pi/n$。故此

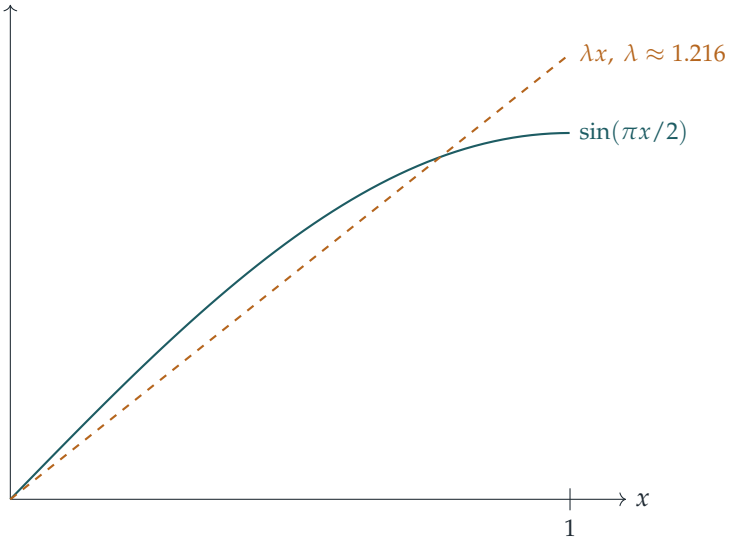
$$R^2 = K - \tfrac{1}{3}\lambda^2 \to 0 - 0 = 0,$$

又因為 $R \geq 0$，我們得到 $\lim_{n\to\infty} R = 0$。這就是結果 (ii)。

事實上，這裏的抵消遠比上述的更徹底。利用 $\sin 2a \approx 2a - \frac{4}{3}a^3$，我們得到 $K \approx \frac{1}{2} - (\frac{1}{2} - \frac{1}{3}a^2) = \frac{1}{3}a^2$，而 $\frac{1}{3}\lambda^2 \approx \frac{1}{3}a^2$ 亦然。所以 R^2 不單是小：與 K（即 f 本身的大小）相比，它也是小的。這條直線幾乎完全捕捉了 f。

為何這些結果在意料之中

在 $0 \le x \le 1$ 上，角 $\pi x/n$ 介乎 0 與 π/n 之間，當 n 很大時這個角很小。所以在整個區間上 $\sin(\pi x/n) \approx \pi x/n$：這個函數本身就非常接近線性函數 λx，其中 $\lambda = \pi/n$。因此，最佳擬合直線的斜率（gradient）應該接近 π/n，而擬合應該變得近乎完美，所以殘差應該趨向零。下圖顯示，即使 $n = 2$，曲線與直線也相差不遠。



驗算

- 如果本來就有 $f(x) = cx$，則 $\lambda = 3c\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = c$ 而 $R^2 = \frac{1}{3}c^2 - \frac{1}{3}c^2 = 0$，正如所料。
- 以數值計算，當 $n = 10$ 時，精確公式給出 $\lambda = 0.31107$，而 $\pi/10 = 0.31416$；當 $n = 100$ 時，比值 $\lambda/(\pi/n)$ 為 0.99990。
- 當 $n = 10$ 時，數值積分（quadrature）給出 $R^2 \approx 6.0 \times 10^{-7}$，而 $K \approx 0.032$，所以與 f 相比，殘差確實微不足道。

常見錯誤

- 停在 $\sin a \approx a$、$\cos a \approx 1$ 而得到 $\lambda \approx 0$：這是對的，但毫無用處。要保留三次項。

▶ 忘記了 $\lambda = 3\int_0^1 xf(x)\,\mathrm{d}x$ 中的 3 是來自 $\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}$。

STEP 之外

這就是最小二乘逼近（least-squares approximation），而它本質上是幾何。把 $[0,1]$ 上的函數看成向量，並以 $\langle f,g\rangle = \int_0^1 fg\,\mathrm{d}x$ 作為「點積」（dot product）。那麼 λx 就是 f 在 x 所張成的直線上的正交投影（orthogonal projection），而 $R^2 = K - \frac{1}{3}\lambda^2$ 就是畢氏定理（Pythagoras' theorem）。把展開式再推進一步，可得 $R^2 \approx a^6/1575$，這來自把 x^3 項中沿 x 方向的分量投影掉。Strang 的 *Introduction to Linear Algebra*（線性代數入門）詳細闡述了投影與最小二乘法，而同樣的想法更可引伸至傅立葉級數（Fourier series）。

Beyond STEP 詳細解答：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hant/。解答文字採用 CC0 1.0；題目本身版權屬 Cambridge University Press & Assessment 所有（©），本文件不予轉載。由機器從英文翻譯而成；尚未經審閱。