



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



回顾

通知：第一次作业已经发回到同学们的邮箱；第三次作业今天已经发布

上节课：

- Chebyshev插值
- Chebyshev多项式
- 最小二乘法-离散线性版本：给定矩阵 A ，向量 b ，求 x 使得 $\|Ax - b\|_2^2$ 最小
 - 使用矩阵 A 的列向量进行线性组合
 - 由法线方程得出 $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$
 - 如果正交： $\bar{x} = A^T b$
- 由函数/多项式亦可组成的向量空间
 - 内积： $\langle f, g \rangle_w := \int f(x)g(x)w(x)dx$
 - 2范数： $\|x\|_w = \sqrt{\langle x, x \rangle_w}$
 - 正交函数族： $\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \begin{cases} C_i, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$
 - 作业：Gram-Schmidt过程中，哪些操作对应于“内积”？如何推广到函数空间？



课程计划

最小二乘法的一些建模和应用讨论:

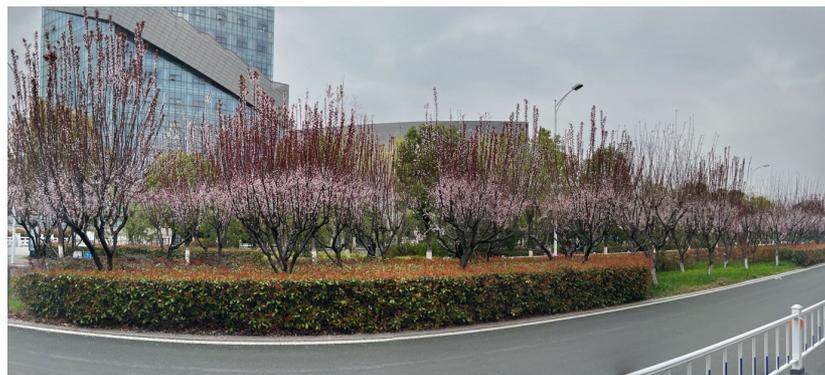
- 图像拼接
- 三角级数近似

傅里叶变换 (Fourier Transform)

- 复数、单位根
- 离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform, DFT)
- 快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform, FFT)
- 复杂性分析
- 快速傅里叶变换的逆变换(Inverse FFT)



最小二乘法建模：图像拼接



照片来源：由本人拍摄于2022-03-18



最小二乘法建模：图像拼接

- 在图片上选取一些参考点（比如同一个建筑，对应的树）
- 希望找到矩阵 $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^2$
- 使得对于每一个参考点都有



$$\approx A \times$$



$$+ b$$

- 未知量是什么？
- 思考：值得注意的是这里的量词的顺序
 - 如果，对于每一个参考点，都要求找到一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^2$ 最小化误差呢？

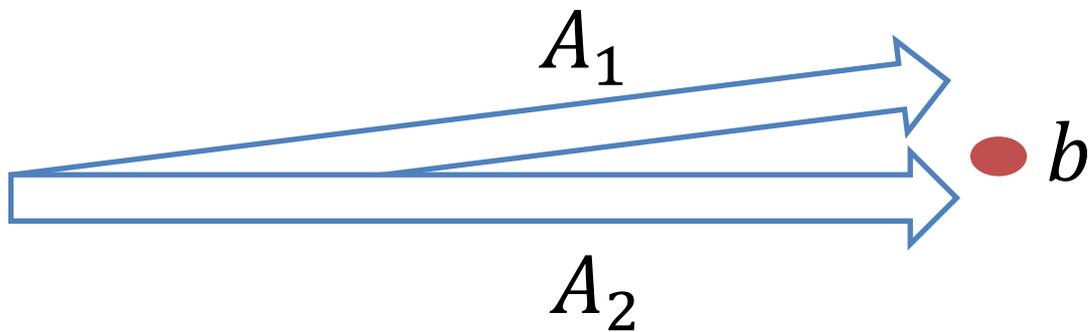


最小二乘法与正交性

给定矩阵 A ，向量 b ，求 x 使得 $\|Ax - b\|_2$ 最小。

由法线方程 $A^T A \bar{x} = A^T b$ ，得出 $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$

- 但是，一般数值算法中不会直接求解法线方程
- 更不会求 $(A^T A)^{-1}$



- 如图所示，不管选 A_1 还是 A_2 ，都能给出对 b 不错的近似，但是对应的 x 是非常不一样的



最小二乘法与正交性

一个更好的做法是通过Gram-Schmidt求 $A = QR$ 分解

$$\begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ q_1 & q_2 & q_3 & \dots & q_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & \dots & r_{1n} \\ 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & r_{nn} \end{pmatrix}$$

- 其中 Q 为正交阵: $Q^T Q = I$
 - 这意味着 $\langle q_i, q_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$
- R 为上三角阵

通过QR分解, $A^T A \bar{x} = A^T b \Rightarrow \bar{x} = R^{-1} Q^T b$

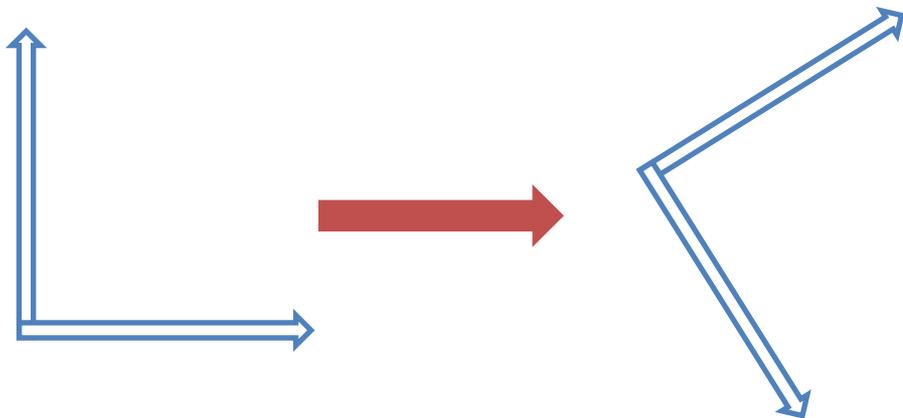
并不需要计算 $A^T A$

实践中, 更常用, 更数值稳定的是Householder反射子, 而不是Gram-Schmidt

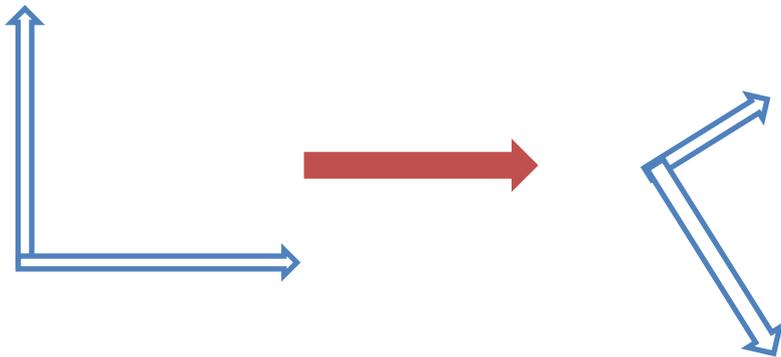


最小二乘法与正交性

正交变换



非正交变换





最小二乘法与正交性

若 Q 为正交阵: $Q^T Q = I$, 则 $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$

Isometry: 保距映射

思考: 除了长度, 还可以考虑角度

$$\langle Qx, Qy \rangle = ?$$



正交系统中的最小二乘法：傅里叶级数

给定函数 f 和一组基函数 ϕ_i ，能否找到系数 $\{c_i\}$ 使得

$$f(x) \approx \sum_i c_i \phi_i(x)$$

设 $\phi_0 = \frac{1}{2}$,

$$\phi_k(x) = \cos(kx), k = 1, 2, \dots, n,$$

$$\phi_{n+k}(x) = \sin(kx), k = 1, 2, \dots, n - 1$$

则函数族 $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots$ 在 $[-\pi, \pi]$ 上是正交的

证明： $\cos(kx)$ 和 $\sin(kx)$ 在 $[-\pi, \pi]$ 上的积分都为0，再由积化和差公式即可得：

$$\begin{aligned} \sin(y) \cos(x) &= \frac{1}{2} (\sin(y-x) + \sin(y+x)) \\ \cos(y) \cos(x) &= \frac{1}{2} (\cos(y-x) + \cos(y+x)) \\ \sin(y) \sin(x) &= \frac{1}{2} (\cos(y-x) - \cos(y+x)) \end{aligned}$$



正交系统中的最小二乘法：傅里叶级数（选讲）

给定函数 f ，能否找到系数 $\{a_i, b_i\}$ 使得

$$f(x) \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$$

这里也可以使用最小二乘法（sketch）：

- 记误差函数为

$$E(x) := f(x) - \left(\frac{a_0}{2} + a_n \cos nx + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) \right)$$

- 考虑 $\|E(x)\|_2^2 = \langle E(x), E(x) \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} E(x)^2 dx$
- 对 $\|E(x)\|_2^2$ 关于系数 $\{a_i, b_i\}$ 求偏导并设为 0，即得到法线方程
- 由于正交性，可推导得

$$a_k = \frac{\langle f, \cos kx \rangle}{\langle \cos kx, \cos kx \rangle}$$
$$b_k = \frac{\langle f, \sin kx \rangle}{\langle \sin kx, \sin kx \rangle}$$



正交系统中的最小二乘法：离散三角级数

给定数据点 $\{x_j, y_j\}_{j=0}^{2m-1}$ ，其中 $x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0, 1, \dots, 2m-1$

能否找到系数 $\{a_i, b_i\}$ 使得, $\forall j$

$$y_j \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j)$$

使用最小二乘法建模:

- 思考: 这里的变量是什么, 线性关系是什么?
- 记误差向量为

$$E(x_j) := f(x_j) - \left(\frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j) \right)$$

- 考虑 $\|E(x)\|_2^2 = \sum_{j=0}^{2m-1} E(x_j)^2$
- 这里的离散三角级数也有正交性
- 因此也可以证明

$$a_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j \cos kx_j$$
$$b_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j \sin kx_j$$



离散三角级数的正交性

设 $\phi_0 = 1$,

$$\phi_k(x) = \cos(kx), k = 1, 2, \dots, n,$$

$$\phi_{n+k}(x) = \sin(kx), k = 1, 2, \dots, n-1$$

则函数族 $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots$ 在 $[-\pi, \pi]$ 上是正交的

正交性的离散版本:

考虑对 $[-\pi, \pi]$ 进行 $2m$ 等分:

$$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0, 1, \dots, 2m-1$$

则 $\sum_{j=0}^{2m-1} \phi_k(x_j)\phi_l(x_j) = 0, \forall k \neq l$



离散三角级数的正交性

正交性的离散版本:

考虑对 $[-\pi, \pi]$ 进行 $2m$ 等分:

$$\begin{aligned}\phi_k(x) &= \cos(kx), k = 1, 2, \dots, n, \\ \phi_{n+k}(x) &= \sin(kx), k = 1, 2, \dots, n-1\end{aligned}$$

$$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0, 1, \dots, 2m-1$$

$$\text{则 } \sum_{j=0}^{2m-1} \phi_k(x_j) \phi_l(x_j) = 0, \forall k \neq l$$

主要思路:

同样使用积化和差

$$\cos(kx_j) \sin(lx_j) = \frac{1}{2} (\sin(l+k)x_j + \sin(l-k)x_j)$$

类似可得其它的正交性



离散三角级数的正交性

正交性的离散版本:

考虑对 $[-\pi, \pi]$ 进行 $2m$ 等分:

$$\begin{aligned}\phi_k(x) &= \cos(kx), k = 1, 2, \dots, n, \\ \phi_{n+k}(x) &= \sin(kx), k = 1, 2, \dots, n-1\end{aligned}$$

$$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0, 1, \dots, 2m-1$$

则 $\sum_{j=0}^{2m-1} \phi_k(x_j)\phi_l(x_j) = 0, \forall k \neq l$

我们将使用如下引理:

设整数 r 不能整除 $2m$, 则

$$\sum_{j=0}^{2m-1} \cos(rx_j) = 0, \sum_{j=0}^{2m-1} \sin(rx_j) = 0.$$

并且, $\sum_{j=0}^{2m-1} \cos^2(rx_j) = m, \sum_{j=0}^{2m-1} \sin^2(rx_j) = m.$

证明将会使用到复数, 而且本质上和傅里叶变换的正交性证明一样



傅里叶变换 (Fourier Transform): 多项式乘法

给定: 最多 n 次的多项式 $p(x), q(x)$ 的系数

目标: 求它们的乘积 $r(x) = p(x)q(x)$ 的系数

多项式的表示方式:

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n$$

1. 多项式的系数 a_0, a_1, \dots, a_n

– 计算 $r(x) = p(x)q(x)$ 需要 $O(n^2)$

– $c_k = \sum_{j=0}^k a_j b_{k-j}$

2. 多项式插值: 选定基点 x_0, x_1, \dots, x_m , 写下 $p(x_0), p(x_1), \dots, p(x_m)$, 则多项式 $p(x)$ 是唯一确定的

– 计算 $r(x) = p(x)q(x)$ 只需要 $O(n)$

– 令 $m \geq 2n + 1$, 计算 $r(x_0), r(x_1), \dots, r(x_m)$ 只需要写下 $p(x_0)q(x_0), p(x_1)q(x_1), \dots, p(x_m)q(x_m)$



多项式乘法

给定：最多 n 次的多项式 $p(x), q(x)$ 的系数

目标：求它们的乘积 $r(x) = p(x)q(x)$ 的系数

想法：

1. 给定 $p(x), q(x)$ 的系数
2. 令 $m \geq 2n + 1$ ，选定基点 x_0, x_1, \dots, x_m ，计算 $p(x_0), \dots, p(x_m)$ 和 $q(x_0), \dots, q(x_m)$
3. 计算 $r(x_j) = p(x_j)q(x_j)$
4. 对 $\{r(x_j)\}$ 插值，得到 $r(x) = p(x)q(x)$ 的系数

愿望：

- 第2步只需要 $O(n \log n)$
- 第4步也只需要 $O(n \log n)$
- 这样总的步骤就只需要 $O(n \log n)$



复数 (Complex number)

$$z = a + b i = r e^{i \theta}, i = \sqrt{-1}$$

单位根

$$n \text{次单位根} = \{z \in \mathbb{C} : z^n = 1\}$$

$$2 \text{次单位根} = \{\pm 1\}$$

$$4 \text{次单位根} = \{\pm 1, \pm i\}$$

在复平面上的单位圆上，等距分布的 n 个点

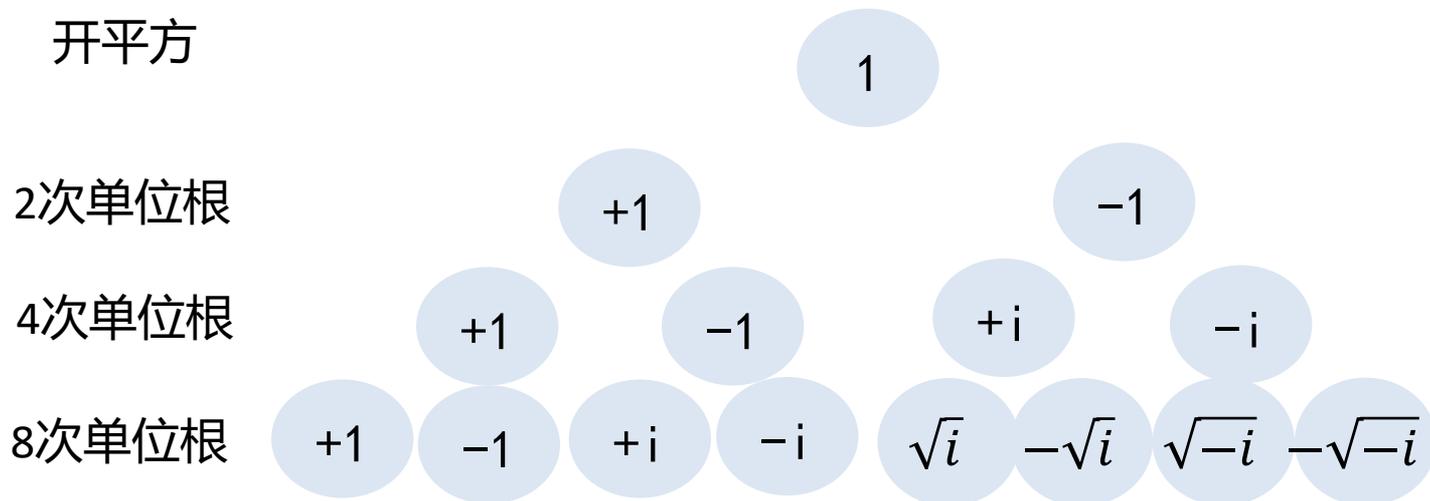
$$e^{\frac{2\pi l i}{n}} = \cos \frac{2\pi l}{n} + i \sin \frac{2\pi l}{n}, l = 0, 1, \dots, n-1$$

在这节课中，我们主要关心 $n = 2^k$ 次单位根

共轭复数: $\bar{z} = a - b i$



复数 (Complex number):单位根



- 从上往下, 开平方
- 从下往上, 平方
- 如果 x 是一个单位根, 则 $-x$ 也是



离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform)

DFT

- 输入: 多项式的系数 a_0, a_1, \dots, a_n

$$p(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$$

- 输出: 选定 x_0, x_1, \dots, x_m 为 $m+1$ 次单位根, 计算 $p(x_0), \dots, p(x_m)$

例子: 计算 $[1, 1, 1, 1]$ 的 DFT.

- $p(x) = 1 + x + x^2 + x^3$
- 4次单位根 = $\{\pm 1, \pm i\}$
- $p(1) = 4$
- $p(x) = 0$ otherwise

注意: 书上的定义中还要除上 $\sqrt{n+1}$



离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform)

DFT

- 输入：多项式的系数 a_0, a_1, \dots, a_n

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$$

- 输出：选定 x_0, x_1, \dots, x_m 为 $m+1$ 次单位根，计算 $p(x_0), \dots, p(x_m)$

逆变换（插值）

- 输入：给定 x_0, x_1, \dots, x_m 为 $m+1$ 次单位根，以及 $p(x_0), \dots, p(x_m)$
- 输出：多项式的系数 a_0, a_1, \dots, a_n



快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

FFT: 分治

输入: n 次多项式 $p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$
输出: $p(x)$ 在 $n+1$ 次单位根上的值

计算 $(n + 1)/2$ 次多项式在
 $(n + 1)/2$ 次单位根上的值

计算 $(n + 1)/2$ 次多项式在
 $(n + 1)/2$ 次单位根上的值

只需要 $O(n)$ 次操作合并



快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

输入: n 次多项式 $p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$
输出: $p(x)$ 在 $n+1$ 次单位根上的值

FFT: 分治

$$E(z) = a_0 + a_2 z + a_4 z^2 + a_6 z^3 + \dots$$

$$O(z) = a_1 + a_3 z + a_5 z^2 + a_7 z^3 + \dots$$

观察:
$$p(z) = E(z^2) + z O(z^2)$$

$$p(\{n+1\text{次单位根}\}) \leftarrow E(\{n+1\text{次单位根}\}^2), O(\{n+1\text{次单位根}\}^2)$$

$$\{n+1\text{次单位根}\}^2 = \{(n+1)/2\text{次单位根}\}$$

特别地
$$p(-z) = E(z^2) - z O(z^2)$$

$E(z)$, $O(z)$ 的次数为 $(n+1)/2$ 次

$$\text{FFT}(a_0, a_1, \dots, a_n) \leftarrow \text{FFT}(a_0, a_2, \dots), \text{FFT}(a_1, a_3, \dots)$$



快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

Figure 2.7 The fast Fourier transform (polynomial formulation)

function FFT(A, ω)

Input: Coefficient representation of a polynomial $A(x)$
of degree $\leq n-1$, where n is a power of 2
 ω , an n th root of unity

Output: Value representation $A(\omega^0), \dots, A(\omega^{n-1})$

if $\omega = 1$: return $A(1)$

express $A(x)$ in the form $A_e(x^2) + xA_o(x^2)$

call FFT(A_e, ω^2) to evaluate A_e at even powers of ω

call FFT(A_o, ω^2) to evaluate A_o at even powers of ω

for $j = 0$ to $n-1$:

 compute $A(\omega^j) = A_e(\omega^{2j}) + \omega^j A_o(\omega^{2j})$

return $A(\omega^0), \dots, A(\omega^{n-1})$

Source: Algorithms by S. Dasgupta, C.H. Papadimitriou, and U.V. Vazirani



快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

- 记 $T(n)$ 为 n 阶FFT需要的操作次数

- $T(n) = 2T\left(\frac{n}{2}\right) + Cn$

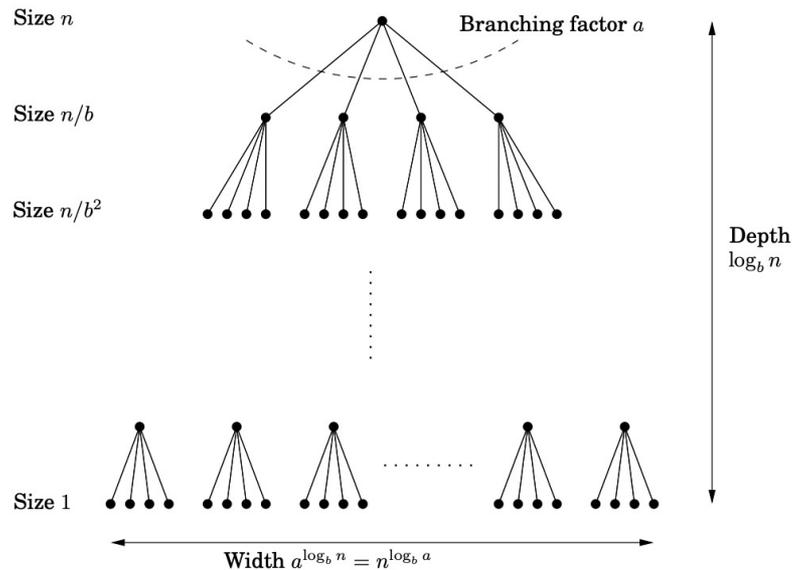
- $T(n) = 4T\left(\frac{n}{4}\right) + 2Cn = \dots$

- 设 $n = 2^k$,

- $T(n) = 2^k T\left(\frac{n}{2^k}\right) + kCn$

- $T(n) = O(n \log n)$

Figure 2.3 Each problem of size n is divided into a subproblems of size n/b .



then

$$T(n) = \begin{cases} O(n^d) & \text{if } d > \log_b a \\ O(n^d \log n) & \text{if } d = \log_b a \\ O(n^{\log_b a}) & \text{if } d < \log_b a. \end{cases}$$



快速傅里叶逆变换 (Inverse FFT)

逆变换 (插值)

- 输入: 给定 x_0, x_1, \dots, x_m 为 $m+1$ 次单位根, 以及 $p(x_0), \dots, p(x_m)$
- 输出: 多项式的系数 a_0, a_1, \dots, a_n

考虑 $n+1$ 次单位根: $\omega = e^{\frac{2\pi}{n+1}i} = \cos \frac{2\pi}{n+1} + i \sin \frac{2\pi}{n+1}$

DFT: $p(\omega^l) = \sum_{j=0}^n a_j \omega^{lj}$

FFT: 快速计算 DFT 的算法

$$p(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$$

Inverse FFT: $a_l = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n p(\omega^j) \omega^{-lj}$

也是一个 DFT, 唯一区别是把 $\omega \rightarrow \omega^{-1}$, 并且前面多了系数 $\frac{1}{n+1}$



傅里叶变换的矩阵表达形式

$$p(\omega^l) = \sum_{j=0}^n a_j \omega^{lj}$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$$

$$\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \cdots & \omega^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^n & \cdots & \omega^{n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(\omega^0) \\ p(\omega^1) \\ \vdots \\ p(\omega^n) \end{pmatrix}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数 $\omega \rightarrow \omega^{-1}$ ，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A ，“正交”的正确定义是指Unitary: $A^H A = I$



傅里叶逆变换的矩阵表达形式

$$a_l = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n p(\omega^j) \omega^{-lj}$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j$$

$$\frac{1}{n+1} \begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^{-1} & \cdots & \omega^{-n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^{-n} & \cdots & \omega^{-n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(\omega^0) \\ p(\omega^1) \\ \vdots \\ p(\omega^n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数 $\omega \rightarrow \omega^{-1}$ ，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A ，“正交”的正确定义是指Unitary: $A^H A = I$



傅里叶变换的矩阵表达形式

为什么这是一个逆变换？

$$\begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^{-1} & \cdots & \omega^{-n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^{-n} & \cdots & \omega^{-n^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \cdots & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \cdots & \omega^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^0 & \omega^n & \cdots & \omega^{n^2} \end{pmatrix} = (n+1)I$$

考虑乘积的 (i, j) 位置上的元素:

$$\sum_{k=0}^{n+1} \omega^{-ik} \omega^{kj} = \sum_{k=0}^{n+1} \omega^{k(j-i)} = \begin{cases} \frac{1 - \omega^{(n+1)(j-i)}}{1 - \omega^{j-i}}, & j \neq i \\ n+1, & j = i \end{cases}$$

注意：对复数向量的内积，通常需要取共轭复数后再做内积

单位根的共轭复数 $\omega \rightarrow \omega^{-1}$ ，这对应于Hermitian

对复数矩阵 A ，“正交”的正确定义是指Unitary: $A^H A = I$



回到离散三角级数的正交性

设整数 r 不能整除 $2m$, 则

$$\sum_{j=0}^{2m-1} \cos(rx_j) = 0, \sum_{j=0}^{2m-1} \sin(rx_j) = 0.$$

$$\text{并且, } \sum_{j=0}^{2m-1} \cos^2(rx_j) = m, \sum_{j=0}^{2m-1} \sin^2(rx_j) = m.$$

证明: 设整数 r 不能整除 $2m$

$$x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0, 1, \dots, 2m-1$$

$$e^{iz} = \cos z + i \sin z$$

$$\sum_{j=0}^{2m-1} \cos(rx_j) + i \sum_{j=0}^{2m-1} \sin(rx_j) = \sum_{j=0}^{2m-1} e^{i r x_j}$$

$$= e^{-i r \pi} \sum_{j=0}^{2m-1} e^{i r j \pi / m} = e^{-i r \pi} \frac{1 - e^{i 2 \pi r}}{1 - e^{i r \pi / m}} = 0$$

实部和虚部都必须为零!

值得注意的是, $e^{i r x_j} = e^{-i r \pi} \omega^{r j}$, 其中 ω 为 $2m$ 次单位根之一



傅里叶变换与离散三角插值的对比 (选讲)

离散三角插值: 给定数据点 $\{x_j, y_j\}_{j=0}^{2m-1}$, 其中 $x_j = -\pi + \frac{j}{m}\pi, j = 0, 1, \dots, 2m-1$

能否找到系数 $\{a_i, b_i\}$ 使得, $\forall j$

$$y_j \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx_j + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx_j + b_k \sin kx_j)$$

最小二乘法解得

$$a_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j \cos kx_j, \quad b_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j \sin kx_j$$

傅里叶变换相当于直接找到复平面上的系数 $\{c_k\}$ 使得, $\forall j$

$$y_j \approx \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{2m-1} c_k e^{ikx_j}$$

由逆变换可得 $c_k = \sum_{j=0}^{2m-1} y_j e^{\frac{ik\pi j}{m}}$, 进而由Euler公式可得

$$a_k + ib_k = \frac{1}{m} \sum_{j=0}^{2m-1} y_j (\cos kx_j + i \sin kx_j) = \frac{(-1)^k}{m} c_k.$$

傅里叶变换的unitary性质 \leftrightarrow 三角级数的正交性



下节课

- 解线性方程组的直接和迭代方法
- 条件数
- 算子范数(operator norm)