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

上节课：

- Chebyshev插值
- Chebyshev多项式
- 由函数/多项式亦可组成的向量空间

这节课：

- 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
- FFT

课程计划

最小二乘法

- **建模和应用讨论：图像拼接**
- **三角级数近似**

傅里叶变换 (Fourier Transform)

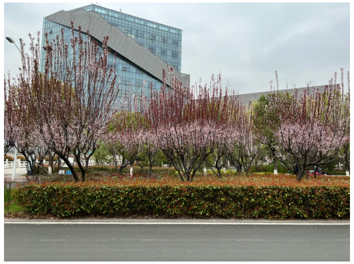
- 复数、单位根
- 离散傅里叶变换 (Discrete Fourier Transform, DFT)
- 快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform, FFT)
- 复杂性分析
- 快速傅里叶变换的逆变换(Inverse FFT)

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？

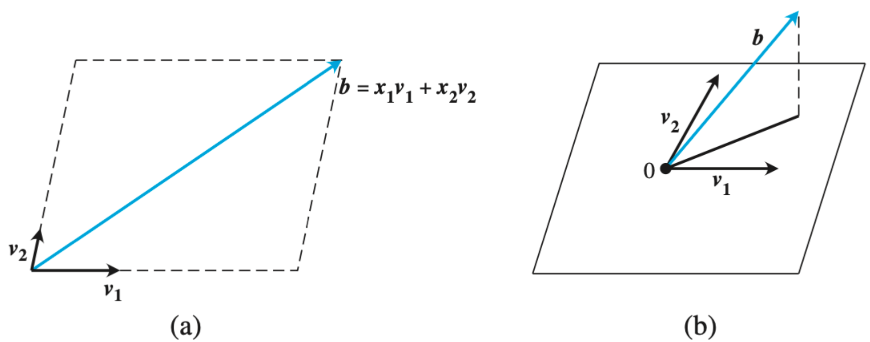
最小二乘法-离散线性版本

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

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

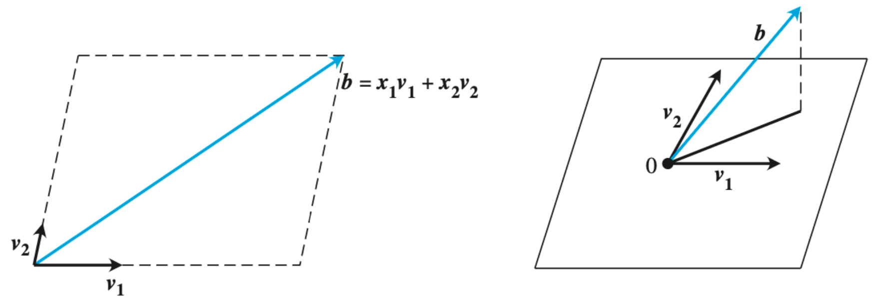
- 右边是 $A_1, A_2, \dots, A_n$能够生成的线性子空间



向量b不一定在该子空间内，此时，应该找“最接近”的

最小二乘法-几何解释

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：



(a) (b)

最接近的点记为$A\overline{x}$，则$(A\overline{x} - b) \perp \{A\ x: x \in R^n\}$

即$\forall x \in R^n, (A\ x)^T(A\overline{x} - b) = 0$，或者$x^T A^T(A\overline{x} - b) = 0$

要$\forall x \in R^n$同时成立，只有一种可能: $A^T(A\overline{x} - b) = 0$

因此$A^T A\overline{x} = A^T b$ 　　　　**法线方程**

最小二乘法-微积分解释

注意到最小化 $\|x\|_2$ 和最小化$\|x\|_2^2$是等价的（单调性）

记$\bar{x} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \|Ax - b\|_2^2$

对x求梯度

$$\nabla \|Ax - b\|_2^2 = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right) \|Ax - b\|_2^2$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right) (x^T A^T A x + b^T b - b^T A x - x^T A^T b)$$

$$= 2A^T A\, x - 2A^T b$$

把梯度设为0，亦可得到法线方程$A^T A \bar{x} = A^T b$

注：一般不会直接通过$\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$来运算

解线性方程组，与矩阵求逆是两回事，以后会展开讨论

最小二乘法-变分法解释

记误差函数为$E(x) := \|Ax-b\|_2^2$

则$\overline{x}$满足法线方程$A^TA\overline{x} = A^Tb$当且仅当

$$\forall y, E(\overline{x}) \le E(\overline{x}+y)$$

证明(Sketch)：

$$E(\overline{x}+y) = E(x) + (Ay)^\top (Ay) + 2y^\top A^\top (A\overline{x}-b)$$

注意到

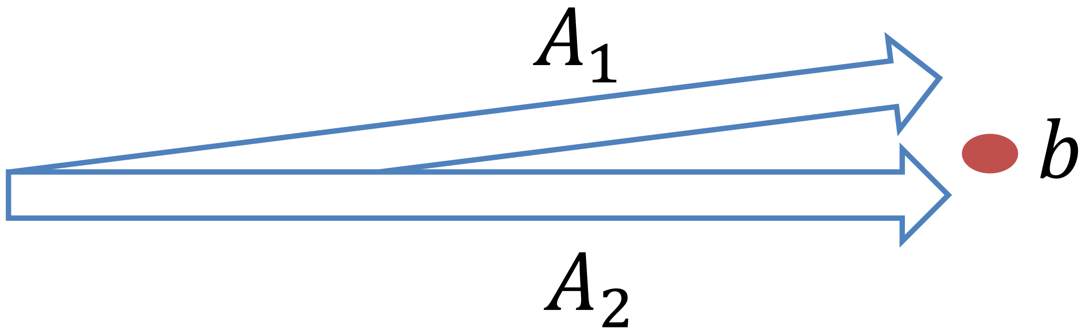
$$(\forall y, y^\top A^\top (A\overline{x}-b) = 0) \iff A^\top (A\overline{x}-b) = 0$$

最小二乘法与正交性

给定矩阵A，向量b，求x使得$\|Ax-b\|_2^2$最小。

由法线方程 $A^TA\bar{x}=A^Tb$，**得出** $\bar{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb$

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



- **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-Gram-Schmidt正交化

一个更好的做法是通过Gram-Schmidt求$A = QR$分解

- 如果A的每一列是正规化的(orthonormal)？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

$$A_i^T A_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

则$A^T A = I$

法线方程$A^T A\overline{x} = A^T b$简化为$\overline{x} = A^T b$

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

- 给定A，如何找出一组正规化的(orthonormal)基？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \cdots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

- $y_1 = A_1, q_1 = y_1/\|y_1\|_2$
- $y_2 = A_2 - q_1(A_2^T q_1), q_2 = y_2/\|y_2\|_2$
- 类似地
- $y_j = A_j - q_1\left(A_j^T q_1\right) - q_2\left(A_j^T q_2\right) - \cdots, q_j = y_j/\left\|y_j\right\|_2$

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

- 给定A，如何找出一组正规化的(orthonormal)基？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \cdots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

Classical Gram–Schmidt orthogonalization

Let $A_j, j = 1, \ldots, n$ be linearly independent vectors.

for $j = 1, 2, \ldots, n$
  $y = A_j$
  for $i = 1, 2, \ldots, j-1$
    $r_{ij} = q_i^T A_j$
    $y = y - r_{ij} q_i$
  end
  $r_{jj} = ||y||_2$
  $q_j = y / r_{jj}$
end

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

- 给定A，如何找出一组正规化的(orthonormal)基？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \cdots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

Modified Gram–Schmidt orthogonalization

Let $A_j, j = 1, \ldots, n$ be linearly independent vectors.

for $j = 1, 2, \ldots, n$
  $y = A_j$
  for $i = 1, 2, \ldots, j-1$
    $r_{ij} = q_i^T y$
    $y = y - r_{ij} q_i$
  end
  $r_{jj} = ||y||_2$
  $q_j = y / r_{jj}$
end

最小二乘法与正交性

通过Gram-Schmidt求$A = QR$分解

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

- 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

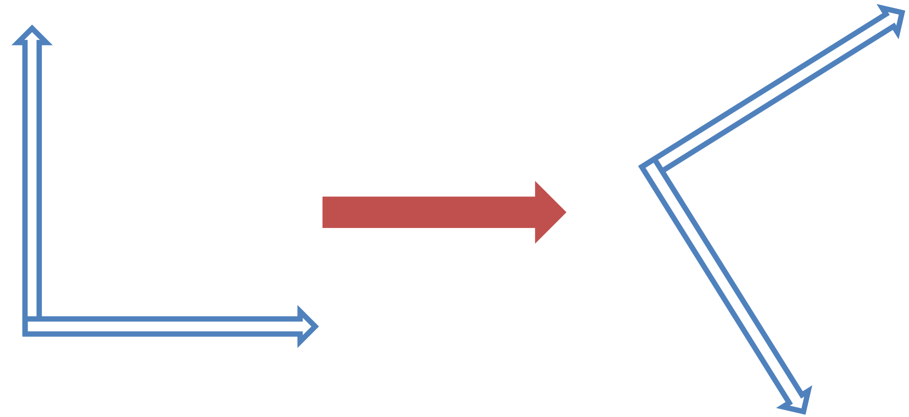
通过QR分解，$A^T A \overline{x} = A^T b \Rightarrow \overline{x} = R^{-1} Q^T b$

并不需要计算 $A^T A$

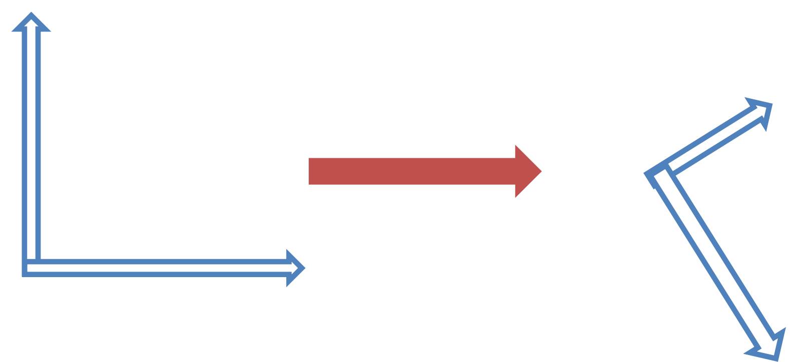
实践中，更常用，更数值稳定的是Householder反射子，而不是Gram-Schmidt

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

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

最小二乘法-方程不一致的情形

- $(A^TA)^{-1}A^T$是A的一个$pseudoinverse$

只要A的列是线性无关的，则A^TA可逆

$$\overline{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$$

思考：如果是方程数不足呢 (under-determined)？

- $Ax = b$的解并不唯一，有无穷多组解
- 能否找到长度最短的解？
- 下次作业：A的行是线性无关的话，亦可写出一个pseudoinverse
- Bonus: 验证这样找到的，是长度最短的解

内积空间

内积$\langle\cdot,\cdot\rangle$

- 对称性 $\langle x,y\rangle=\langle y,x\rangle$
- 线性$\langle a\,x+b\,y,z\rangle=a\langle x,z\rangle+b\langle y,z\rangle$
- 正定性$\langle x,x\rangle>0,\forall x\neq 0$

函数的内积：

$$\langle f,g\rangle:=\int f(x)g(x)dx$$

带权重的函数内积

$$\langle f,g\rangle_w:=\int f(x)g(x)\,w(x)dx$$

内积天然自带范数的定义: $\|x\|=\sqrt{\langle x,x\rangle}$

正交函数族与正交多项式

称函数族$\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots$是正交化的，如果它们满足：

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \begin{cases} C_i, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

- 如果 $\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots$是多项式，也称之为正交多项式

Chebyshev多项式也是多项式的一组基

它关于$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$所定义的内积是正交的：

$$\langle f, g \rangle_w := \int_{-1}^{1} f(x)g(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

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 $\phi_0 = \frac{1}{2}$,

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

则函数族$\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots$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：

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

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

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

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

能否找到系数$\{a_i, b_i\}$使得，$\forall j$

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

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

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

- 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：

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

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

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

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：

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

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

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：

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \cdots + a_n x^n$$

1. 多项式的系数$a_0, a_1, \ldots, a_n$
   - 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$x_0, x_1, \ldots, x_m$，写下$p(x_0), p(x_1), \ldots, p(x_m)$，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$r(x_0), r(x_1), \ldots, r(x_m)$只需要写下$p(x_0)q(x_0), p(x_1)q(x_1), \ldots, p(x_m)\, q(x_m)$

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$x_0, x_1, \ldots, x_m$，计算$p(x_0), \ldots, p(x_m)$和 $q(x_0), \ldots, q(x_m)$
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次单位根 = $\{z \in C: z^n = 1\}$

2次单位根=$\{\pm 1\}$

4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

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

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

开平方	1							
2次单位根	+1	−1						
4次单位根	+1	−1	+i	−i				
8次单位根	+1	−1	+i	−i	$\sqrt{i}$	$-\sqrt{i}$	$\sqrt{-i}$	$-\sqrt{-i}$

- 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$a_0, a_1, \ldots, a_n$

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

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

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

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

快速傅里叶变换 (Fast Fourier Transform)

Figure 2.7 The fast Fourier transform (polynomial formulation)

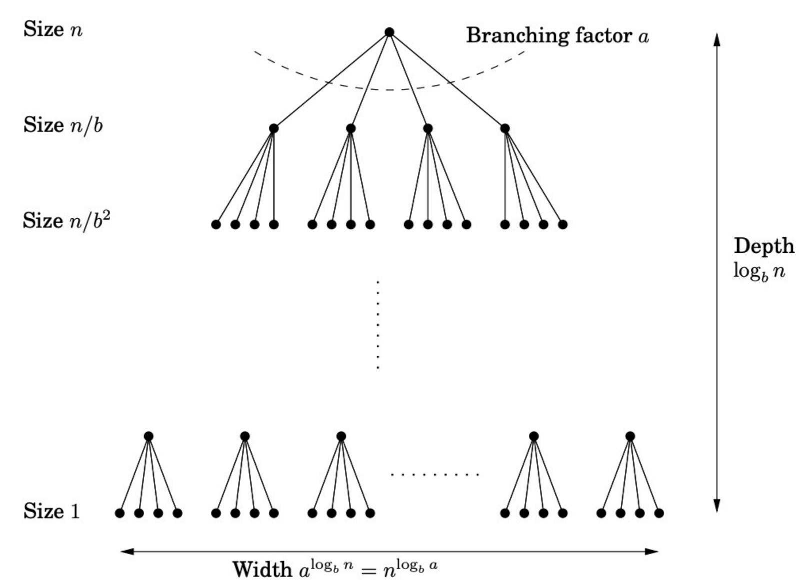
```
function FFT(A, ω)
Input:  Coefficient representation of a polynomial A(x)
        of degree ≤ n−1, where n is a power of 2
        ω, an nth root of unity
Output:  Value representation A(ω^0), ..., A(ω^{n−1})

if ω = 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(ω^j) = A_e(ω^{2j}) + ω^j A_o(ω^{2j})

return A(ω^0), ..., A(ω^{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
- $T(n) = 2T\left(\frac{n}{2}\right) + Cn$
- $T(n) = 4T\left(\frac{n}{4}\right) + 2Cn = \cdots$
- 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

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

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

快速傅里叶逆变换 (Inverse FFT)

逆变换（插值）

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

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

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

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$\omega \to \omega^{-1}$，并且前面多了系数$\frac{1}{n+1}$

傅里叶变换的矩阵表达形式

给定 $\{a_j\}$，求$\{p(\omega^l)\}$

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

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

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

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

给定 $\{p(\omega^l)\}$，求$\{a_j\}$

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

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

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

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$\omega \to \omega^{-1}$，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:

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

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$\omega \to \omega^{-1}$，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

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

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$2m$

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

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

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

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

实部和虚部都必须为零！

值得注意的是，$e^{i\,r\,x_j}=e^{-i\,r\pi}\,\omega^{rj}$，其中$\omega$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，$\forall j$

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

最小二乘法解得

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

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

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

傅里叶变换的unitary性质 ↔️ 三角级数的正交性

快速傅里叶变换的实现（选讲）

- 参考资料：TAOCP II 4.3.3.C, by Donald E. Knuth

- 通过FFT来实现整数乘法只需要$O(\log n)$位的精度

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)