



数学实验与实践

# 数据拟合

# 数据拟合

用插值的方法对一函数进行近似, 要求所得到的插值多项式经过已知插值节点; 在 $n$ 比较大的情况下, 插值多项式往往是高次多项式, 这也就容易出现振荡现象 (龙格现象), 即虽然在插值节点上没有误差, 但在插值节点之外插值误差变得很大, 从“整体”上看, 插值逼近效果将变得“很差”。

具体所谓数据拟合是求一个简单的函数, 例如是一个低次多项式, 不要求通过已知的这些点, 而是要求在整体上“尽量好”的逼近原函数。这时, 在每个已知点上就会有误差, 数据拟合就是从整体上使误差, 尽量的小一些。

# 1 多项式拟合

- n次多项式:  $g(x) = c_1x^n + c_2x^{n-1} + \cdots + c_{n+1}$
- 曲线与数据点的残差为:

$$r_i = y_i - g(x_i), \quad i = 1, 2, \cdots, L$$

- 残差的平方和为:

$$R = \sum_{i=1}^L r_i^2$$

- 为使其最小化, 可令R关于  $c_j$  的偏导数为零, 即:

$$\frac{\partial R}{\partial c_j} = 0, \quad j = 1, 2, \cdots, n+1$$

- 或 
$$\sum_{j=1}^{n+1} \left( \sum_{i=1}^L x_i^{2n+2-j-k} \right) c_j = \sum_{i=1}^L x_i^{n+1-k} y_i, k = 1, 2, \dots, n+1$$

- 或矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^L x_i^{2n} & \sum_{i=1}^L x_i^{2n-1} & \dots & \sum_{i=1}^L x_i^n \\ \sum_{i=1}^L x_i^{2n-1} & \dots & \dots & \sum_{i=1}^L x_i^{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=1}^L x_i^n & \dots & \dots & \sum_{i=1}^L x_i^0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^L x_i^n y_i \\ \sum_{i=1}^L x_i^{n-1} y_i \\ \dots \\ \sum_{i=1}^L y_i \end{bmatrix}$$

多项式拟合MATLAB命令: **polyfit**

格式: **p=polyfit(x,y,n)**

其中:

$x$  和  $y$  为原始的样本点构成的向量

$n$  为选定的多项式阶次

$p$  为多项式系数按降幂排列得出的行向量

例        已知的数据点来自  $f(x) = (x^2 - 3x + 5)e^{-5x} \sin x$ ,  
用多项式拟合的方法在不同的阶次下进行拟合

拟合该数据的 3 次多项式:

```
x0=0:.1:1; y0=(x0.^2-3*x0+5).*exp(-5*x0).*sin(x0);
```

```
p3=polyfit(x0,y0,3)
```

```
vpa(poly2sym(p3),10)    % 显示为多项式
```

```
p3 =
```

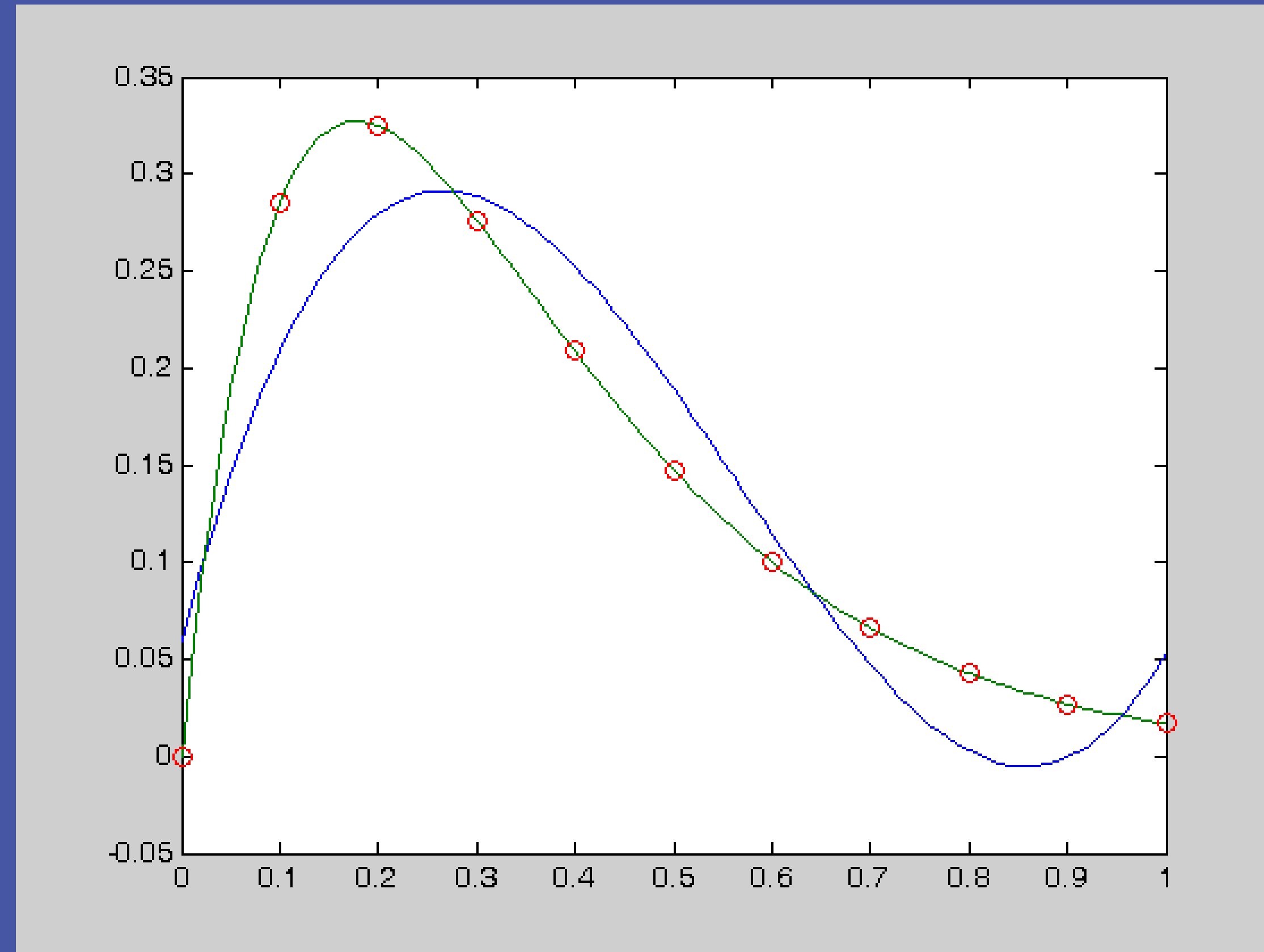
```
    2.8400   -4.7898   1.9432   0.0598
```

```
ans =
```

```
2.839962923*x^3-4.789842696*x^2+1.943211631*x+.5975248921e-1
```

- 绘制拟合曲线：

```
x=0:0.01:1; ya=(x.^2-3*x+5).*exp(-5*x).*sin(x);  
y1=polyval(p3,x); plot(x,y1,x,ya,x0,y0,'o')
```





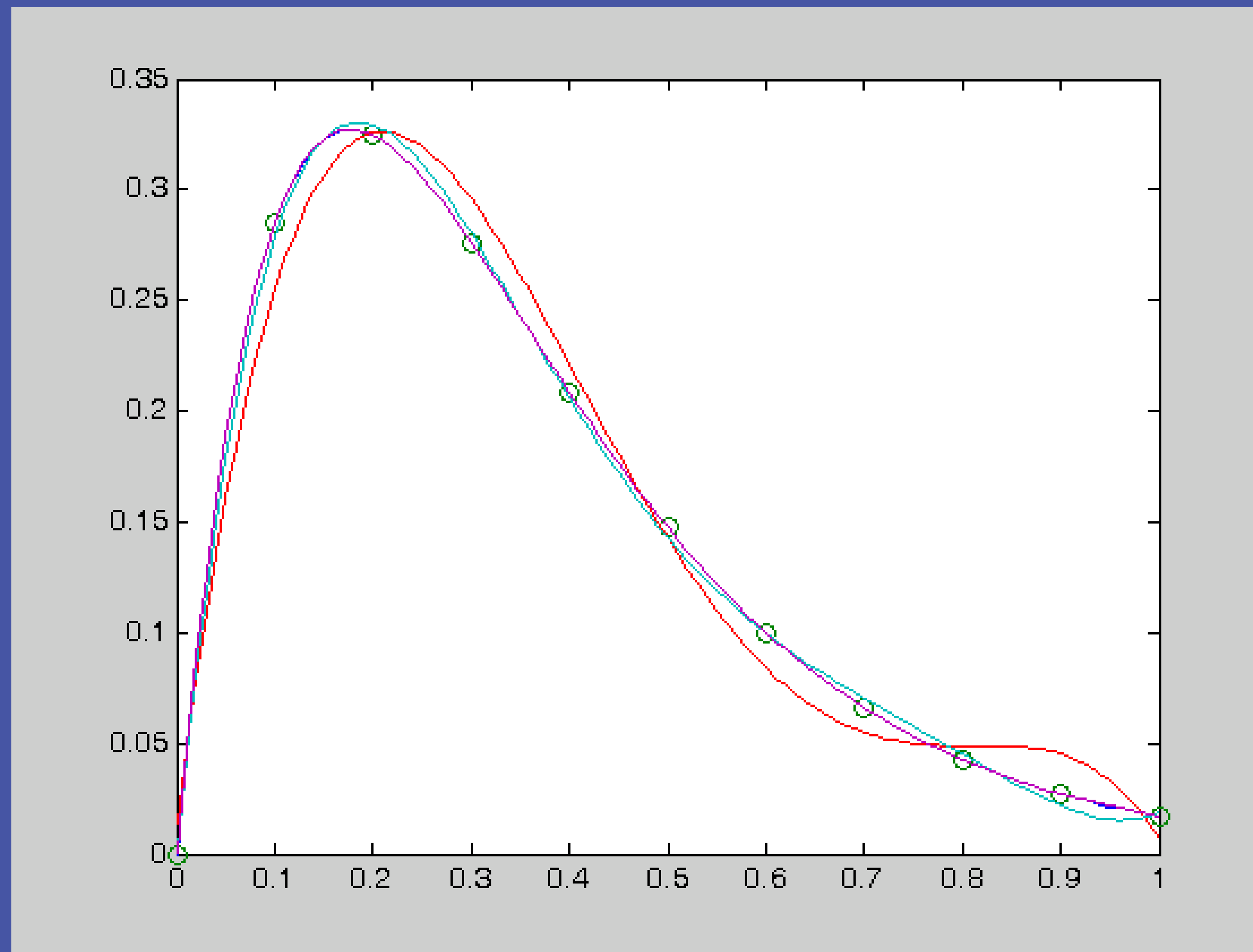
- 就不同的次数进行拟合:

```
p4=polyfit(x0,y0,4); y2=polyval(p4,x);
```

```
p5=polyfit(x0,y0,5); y3=polyval(p5,x);
```

```
p8=polyfit(x0,y0,8); y4=polyval(p8,x);
```

```
plot(x,ya,x0,y0,'o',x,y2,x,y3,x,y4)
```





- 拟合最高次数为8的多项式:

```
>> vpa(poly2sym(p8),5)
```

```
ans =
```

```
-8.2586*x^8+43.566*x^7-101.98*x^6+140.22*x^5-125.29*x^4+74.450*x^3-  
27.672*x^2+4.9869*x+.42037e-6
```

- Taylor幂级数展开:

```
>> syms x; y=(x^2-3*x+5)*exp(-5*x)*sin(x);
```

```
>> vpa(taylor(y,9),5)
```

```
ans =
```

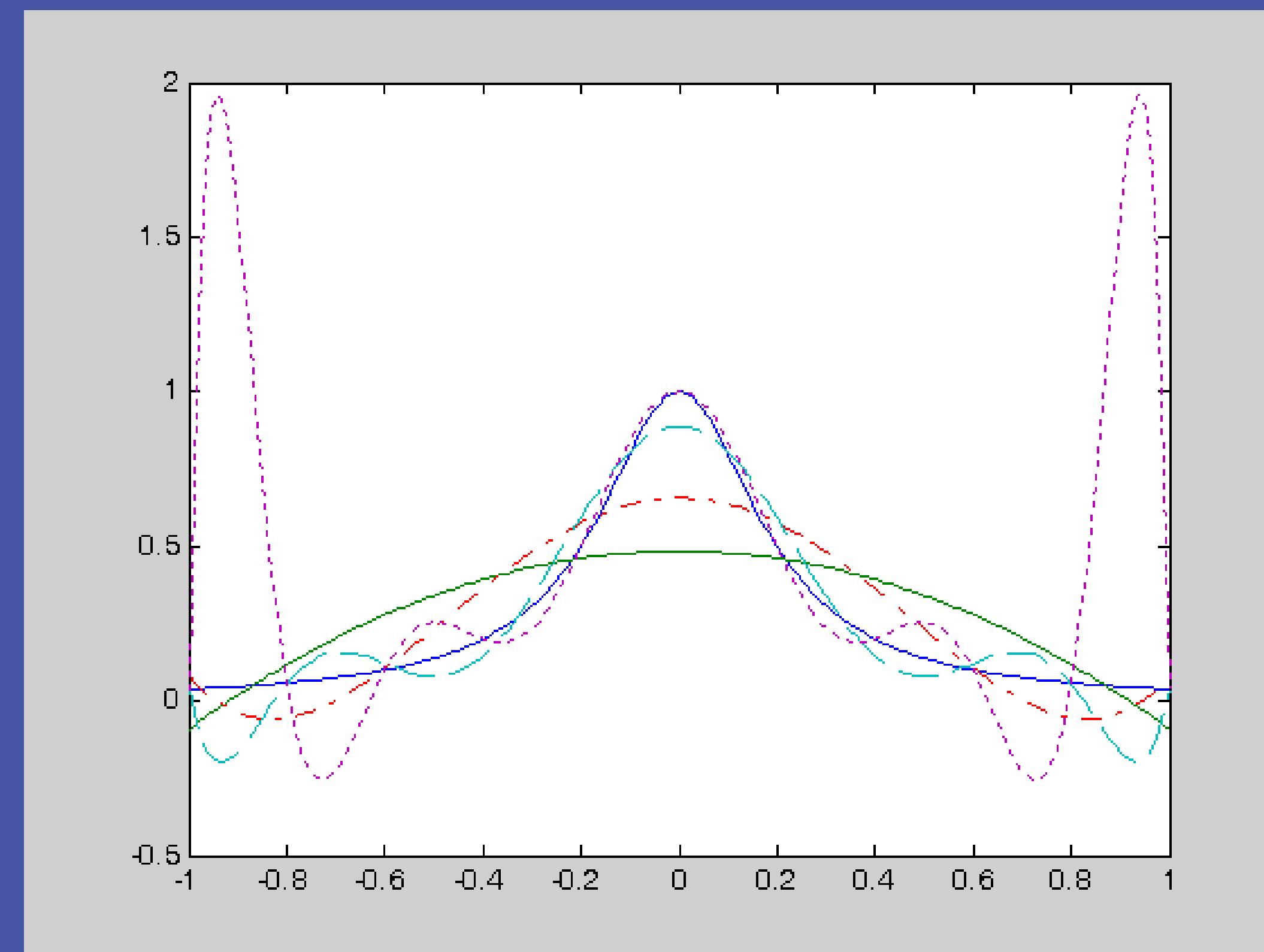
```
5.*x-28.*x^2+77.667*x^3-142.*x^4+192.17*x^5-204.96*x^6+179.13*x^7-131.67*x^8
```

- 多项式表示数据模型是不唯一的，即是两个多项式函数完全不同。  
在某一区域内其曲线可能特别近似。

例 对  $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ ,  $-1 \leq x \leq 1$  进行多项式拟合

多项式拟合的效果并不一定总是很精确的。

```
x0=-1+2*[0:10]/10; y0=1./(1+25*x0.^2);  
x=-1:.01:1; ya=1./(1+25*x.^2);  
p3=polyfit(x0,y0,3);  
y1=polyval(p3,x);  
p5=polyfit(x0,y0,5);  
y2=polyval(p5,x);  
p8=polyfit(x0,y0,8);  
y3=polyval(p8,x);  
p10=polyfit(x0,y0,10);  
y4=polyval(p10,x);  
plot(x,ya,x,y1,x,y2,'-.',x,y3,'--',x,y4,':')
```



- 用Taylor幂级数展开效果将更差。

```
>> syms x; y=1/(1+25*x^2); p=taylor(y,x,10)
```

```
p =
```

```
1-25*x^2+625*x^4-15625*x^6+390625*x^8
```

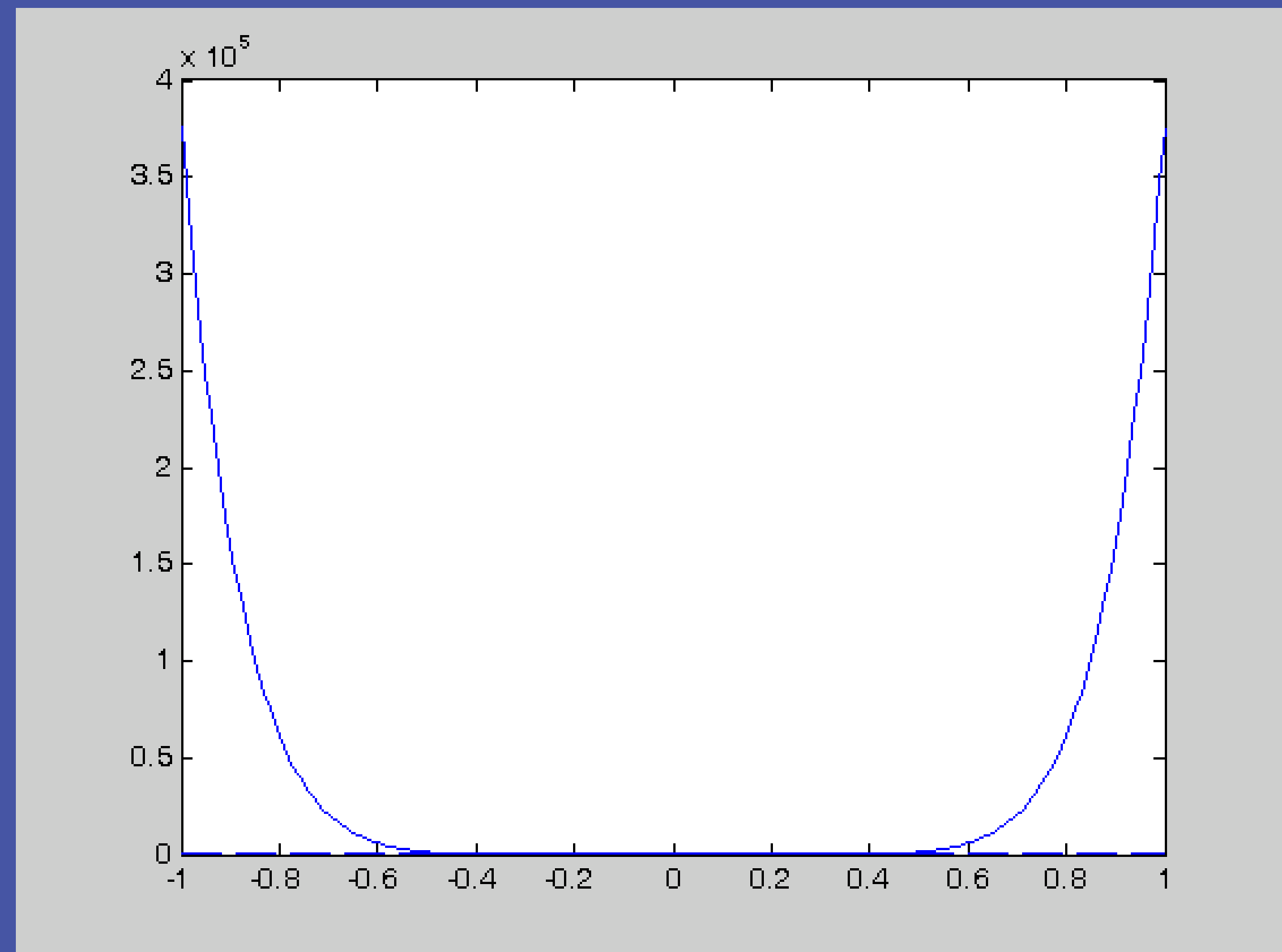
- 多项式拟合效果

```
>> x1=-1:0.01:1;
```

```
ya=1./(1+25*x1.^2);
```

```
y1=subs(p,x,x1);
```

```
plot(x1,ya,'--',x1,y1)
```



## 2 函数线性组合的曲线拟合方法

已知某函数的线性组合为:

$$g(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + c_3 f_3(x) + \cdots + c_n f_n(x)$$

其中  $f_1(x), f_2(x), \cdots, f_n(x)$  为已知函数  $c_1, c_2, \cdots, c_n$  为待定系数

假设已经测出数据  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_M, y_M)$

则可以建立如下的线性方程:

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{y}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_n(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_n(x_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ f_1(x_M) & f_2(x_M) & \cdots & f_n(x_M) \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_M \end{bmatrix}$$

且  $\boldsymbol{c} = [c_1, c_2, \cdots, c_n]^T$

该方程的最小二乘解为:

$$\boldsymbol{c} = A \backslash \boldsymbol{y}$$

例 假设测出一组  $(x_i, y_i)$ , 已知函数原型为

$$y(x) = c_1 + c_2 e^{-3x} + c_3 \cos(-2x) e^{-4x} + c_4 x^2,$$

用已知数据求出待定系数  $c_i$  的值

$x_i$	0	0.2	0.4	0.7	0.9
$y_i$	2.88	2.2576	1.9683	1.9258	2.0862

$x_i$	0.92	0.99	1.2	1.4	1.48	1.5
$y_i$	2.109	2.1979	2.5409	2.9627	3.155	3.2052

直接拟合  $c_i$  参数:

```
>> x=[0,0.2,0.4,0.7,0.9,0.92,0.99,1.2,1.4,1.48,1.5]';  
y=[2.88;2.2576;1.9683;1.9258;2.0862;2.109;  
    2.1979;2.5409;2.9627;3.155;3.2052];  
A=[ones(size(x)),exp(-3.*x), cos(-2.*x).*exp(-4.*x),x.^2];  
c=A\y; c1=c'
```

```
c1 =  
    1.2200    2.3397   -0.6797    0.8700
```



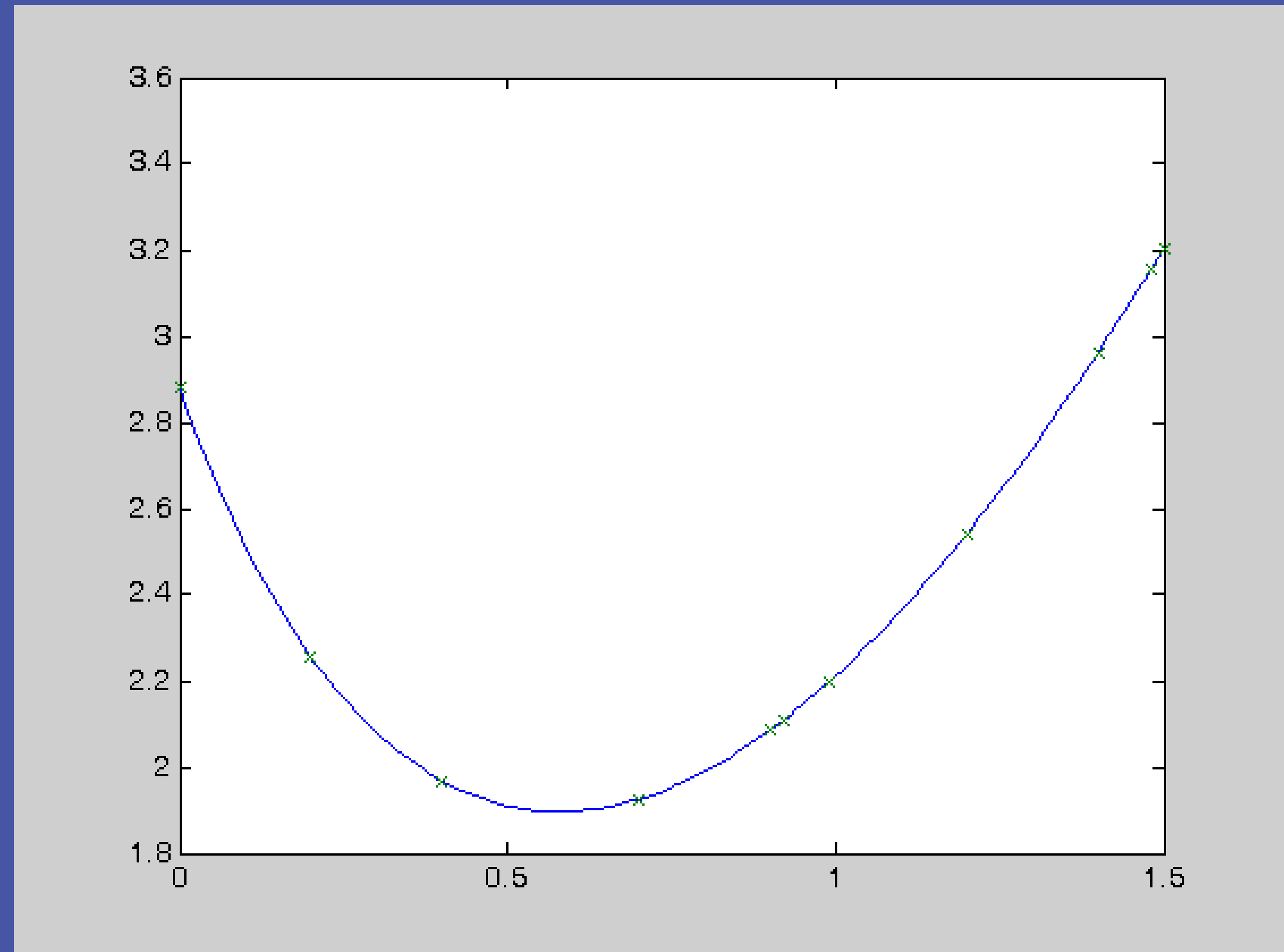
- 图形显示

```
>> x0=[0:0.01:1.5]';
```

```
A1=[ones(size(x0)),exp(-3*x0), cos(-2*x0).*exp(-4*x0), x0.^2];
```

```
y1=A1*c;
```

```
plot(x0,y1,x,y,'x')
```



例 假设测出一组实际数据，对其进行函数拟合

$x_i$	1.1052	1.2214	1.3499	1.4918	1.6487
$y_i$	0.6795	0.6006	0.5309	0.4693	0.4148

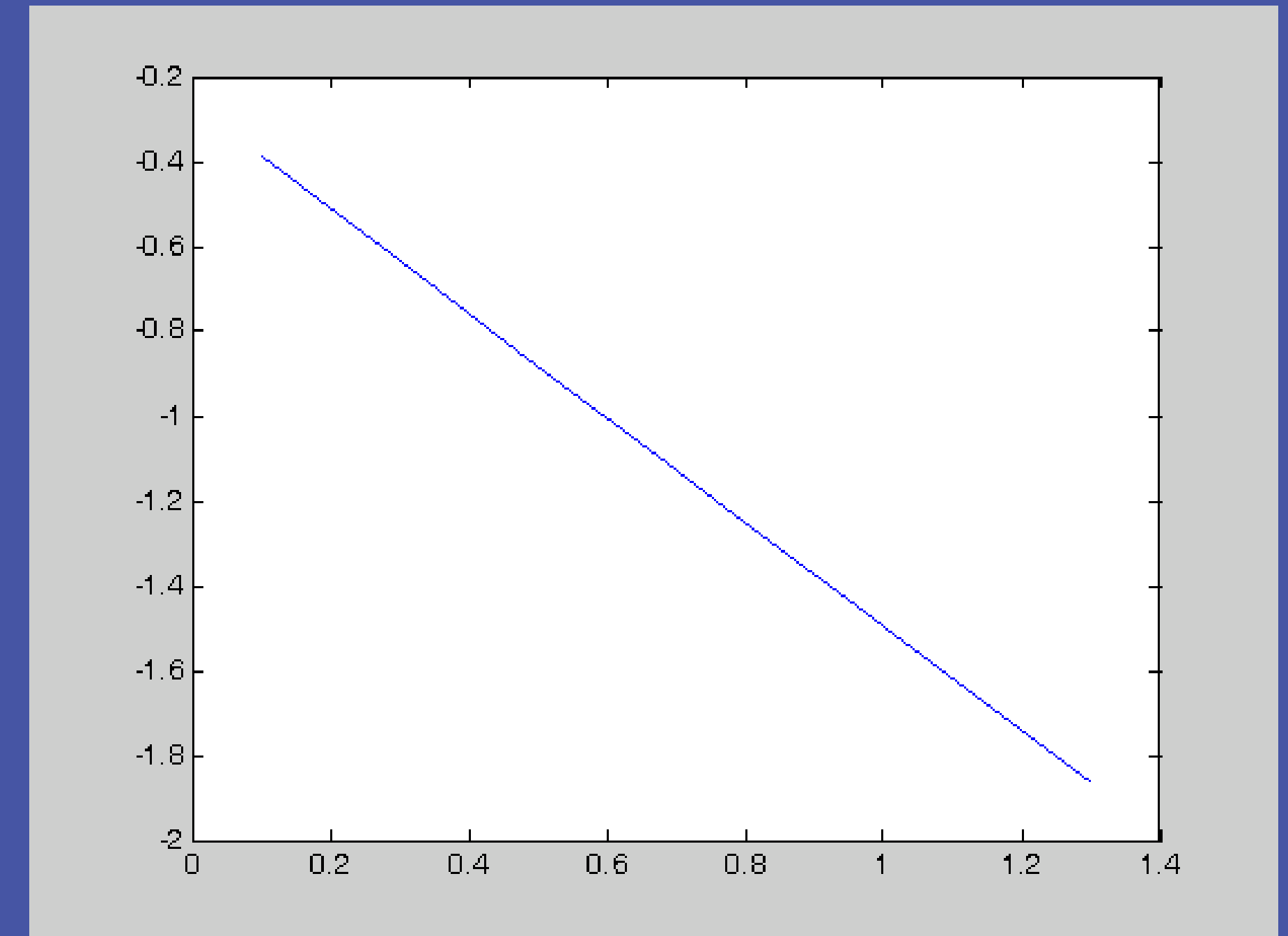
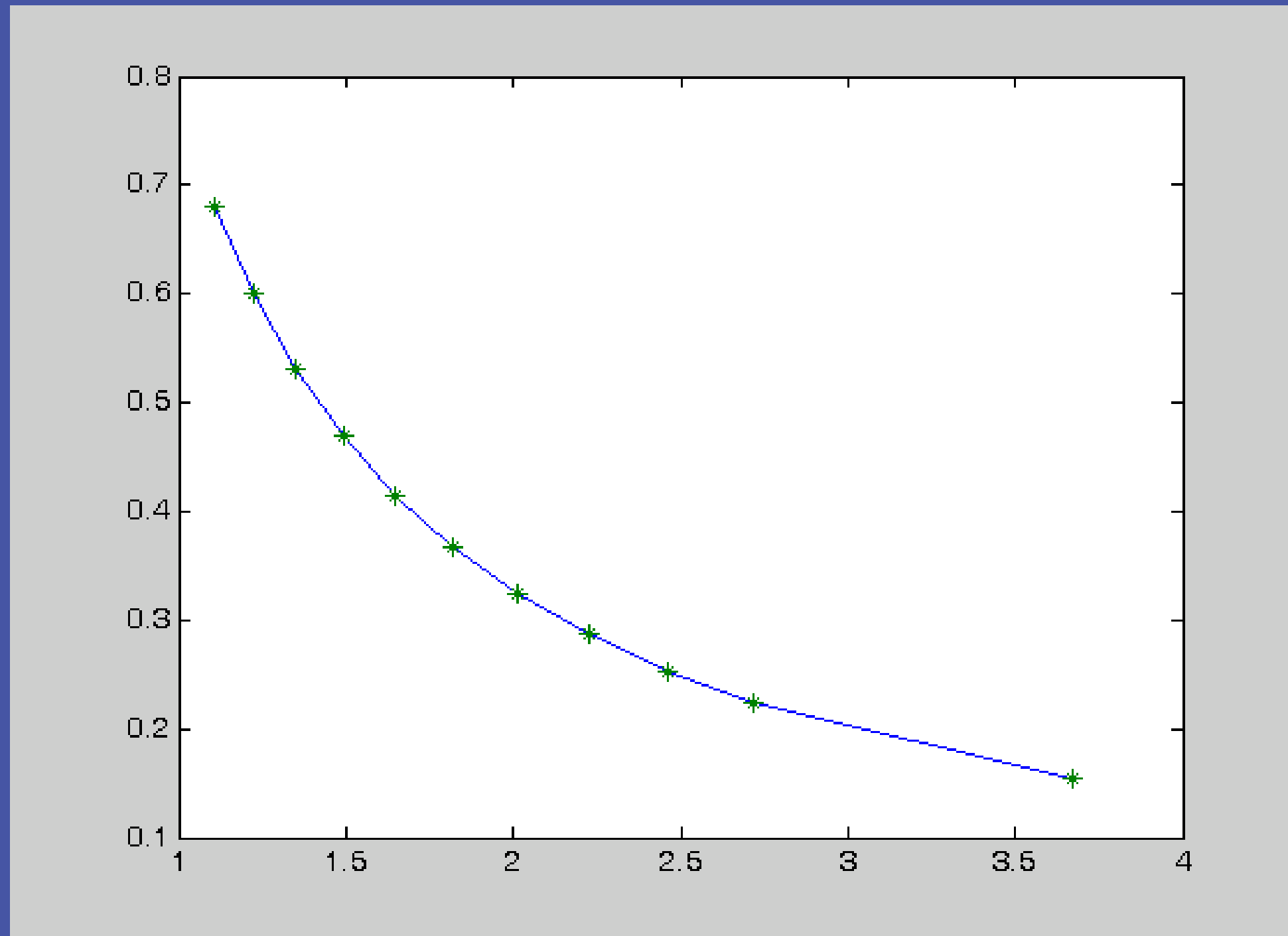
$x_i$	1.8221	2.0138	2.2255	2.4596	2.7183	3.6693
$y_i$	0.3666	0.3241	0.2865	0.2532	0.2238	0.1546

- 数据分析

```
>> x=[1.1052,1.2214,1.3499,1.4918,1.6487,1.8221,2.0138,...  
      2.2255,2.4596,2.7183,3.6693];  
y=[0.6795,0.6006,0.5309,0.4693,0.4148,0.3666,0.3241,...  
   0.2864,0.2532,0.2238,0.1546];  
plot(x,y,x,y,'*')
```

- 分别对 $x, y$ 进行对数变换:

```
>> x1=log(x); y1=log(y); plot(x1,y1)
```



用线性函数拟合的方法可以得出线性参数,

使得  $\ln y = a \ln x + b$ , 即  $y = e^b x^a$

求解系数  $a, b$  及  $e^b$ :

```
>> A=[x1', ones(size(x1'))]; c=[A\y1']
```

```
c =
```

```
-1.2339 -0.2630
```

```
>> exp(c(2))
```

```
ans =
```

```
0.7687
```

拟合函数:  $y(x) = 0.76871338819924x^{-1.23389448522593}$

例 对  $f(x) = (x^2 - 3x + 5)e^{-5x} \sin x$  进行多项式拟合，可以选择各个函数为

$f_i(x) = x^{n+1-i}, i = 1, 2, \dots, n$ ，并观察多项式拟合的效果

```
>> x=[0:0.1:1]'; y=(x.^2-3*x+5).*exp(-5*x).*sin(x); n=8; A=[];  
for i=1:n+1, A(:,i)=x.^(n+1-i); end  
c=A\y; vpa(poly2sym(c),5)
```

**ans =**

**-8.2586\*x^8+43.566\*x^7-101.98\*x^6+140.22\*x^5-125.29\*x^4+74.450\*x^3-  
27.672\*x^2+4.9869\*x+.42037e-6**

### 3 最小二乘曲线拟合

有一组数据  $x_i, y_i, i = 1, 2, \dots, N$

满足某一函数原型  $\hat{y}(x) = f(\mathbf{a}, x)$ , 其中  $\mathbf{a}$  为待定系数向量

则最小二乘曲线拟合的目标:

求出这一组待定系数的值, 使得目标函数

$$J = \min_{\mathbf{a}} \sum_{i=1}^N [y_i - \hat{y}(x_i)]^2 = \min_{\mathbf{a}} \sum_{i=1}^N [y_i - f(\mathbf{a}, x_i)]^2$$

为最小

- 格式:

$[a, j_m] = \text{lsqcurvefit}(\text{Fun}, a_0, x, y)$

其中:

**Fun** 为原型函数的 MATLAB 表示,

可以是 M-函数或 **inline()** 函数

$a_0$  为最优化的初值

$x, y$  为原始输入输出数据向量

$a$  为返回的待定系数向量

$J_m$  为在此待定系数下的目标函数的值



例 由下面的语句生成一组数据,

```
>> x=0:.1:10;
```

```
>> y=0.12*exp(-0.213.*x)+0.54*exp(-0.17.*x).*sin(1.23.*x);
```

并且该数据满足  $y(x) = a_1 e^{-a_2 x} + a_3 e^{-a_4 x} \sin(a_5 x)$ , 其中  $a_i$  为待定系数,  
采用最小二乘曲线拟合获得这些待定系数,使目标函数的值为最小。

编写函数:

```
>> f=inline('a(1).*exp(-a(2).*x)+a(3).*exp(-a(4).*x).*sin(a(5).*x)','a','x');
```

得出待定系数向量:

```
>> [xx,res]=lsqcurvefit(f,[1,1,1,1,1],x,y);xx',res
```

Optimization terminated successfully:

Relative function value changing by less than OPTIONS.TolFun

ans =

0.1197

0.2125

0.5404

0.1702

1.2300

res =

7.1637e-007

修改最优化选项：

```
>> ff=optimset; ff.TolFun=1e-20; ff.TolX=1e-15; % 修改精度限制
```

```
[xx,res]=lsqcurvefit(f,[1,1,1,1,1],x,y,[],[],ff); xx',res % []变量界
```

Optimization terminated successfully:

Relative function value changing by less than OPTIONS.TolFun

ans =

0.1200

0.2130

0.5400

0.1700

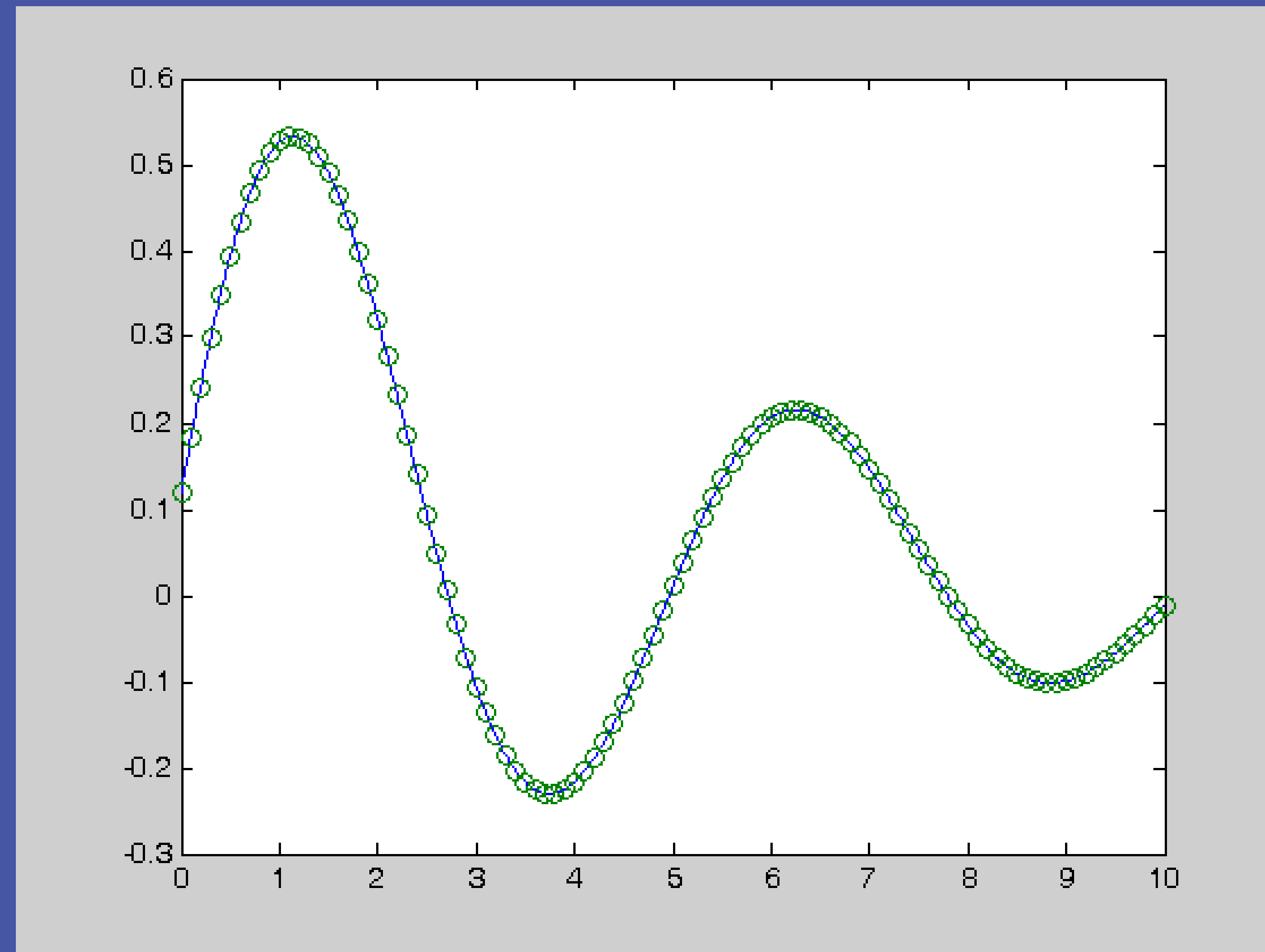
1.2300

res =

9.5035e-021

- 绘制曲线:

```
>> x1=0:0.01:10; y1=f(xx,x1); plot(x1,y1,x,y,'o')
```



例 已知数据可能满足  $y(x) = ax + bx^2e^{-cx} + d$ ,

$x_i$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
$y_i$	2.3201	2.6470	2.9707	3.2885	3.6008

$x_i$	0.6	0.7	0.8	0.9	1
$y_i$	3.9090	4.2147	4.5191	4.8232	5.1275

求满足数据的最小二乘解  $a, b, c, d$  的值

输入已知的参数:

```
>> x=0.1:0.1:1;
```

```
>> y=[2.3201,2.6470,2.9707,3.2885,3.6008,3.9090,4.2147,4.5191,4.8232,5.1275];
```

令  $a_1 = a, a_2 = b, a_3 = c, a_4 = d$

则原型函数可以写成:  $y(x) = a_1x + a_2x^2e^{-a_3x} + a_4$

编写函数:

```
function y=c8f3(a,x)
```

```
y=a(1)*x+a(2)*x.^2.*exp(-a(3)*x)+a(4);
```

求解:

```
>> a=lsqcurvefit('c8f3',[1;2;2;3],x,y); a'
```

```
Maximum number of function evaluations exceeded;
```

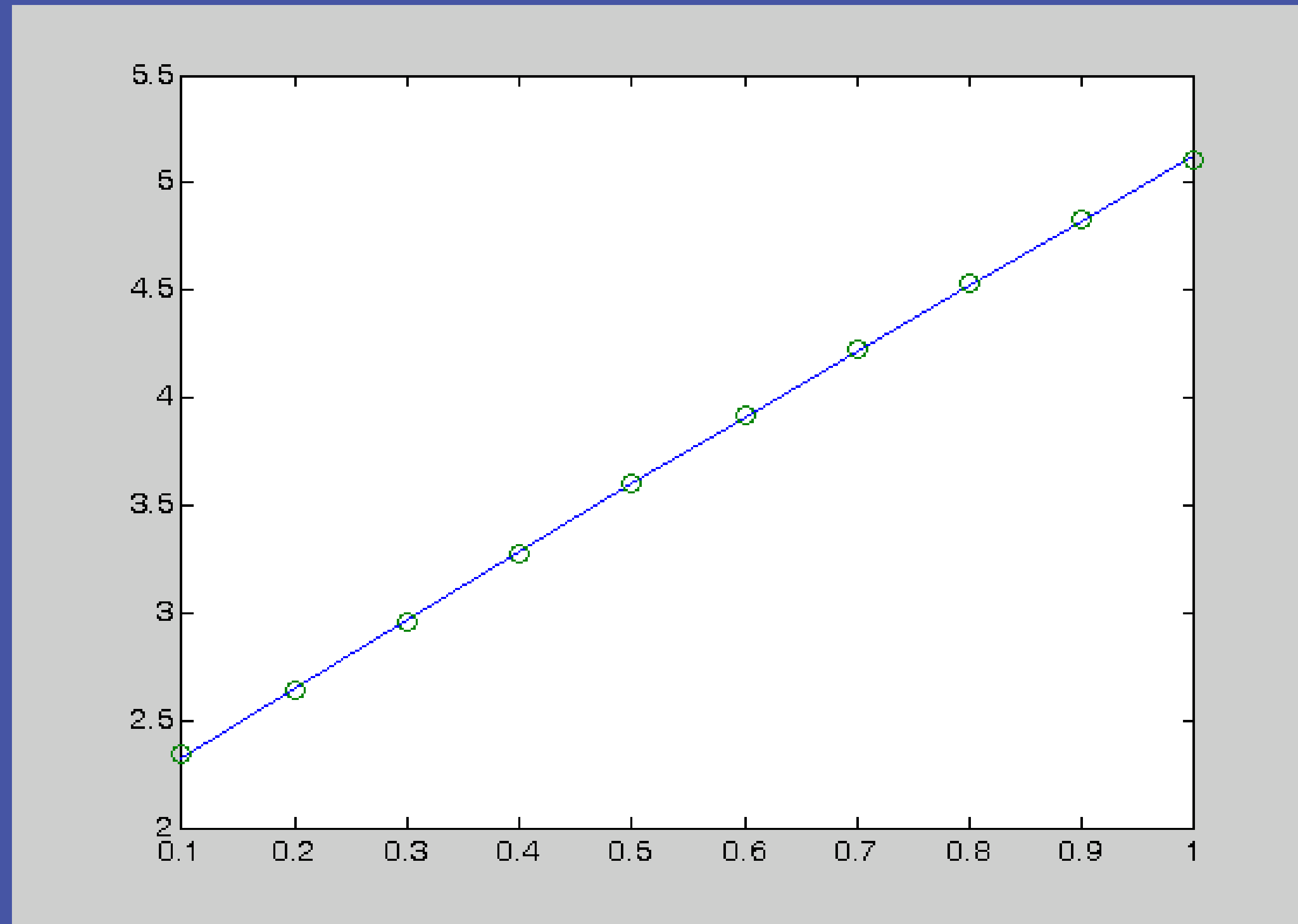
```
increase options.MaxFunEvals
```

```
ans =
```

```
2.4575 2.4557 1.4437 2.0720
```

- 绘制曲线：

```
>> y1=c8f3(a,x); plot(x,y,x,y1,'o')
```





## 4. B样条函数及其MATLAB表示

建立函数:

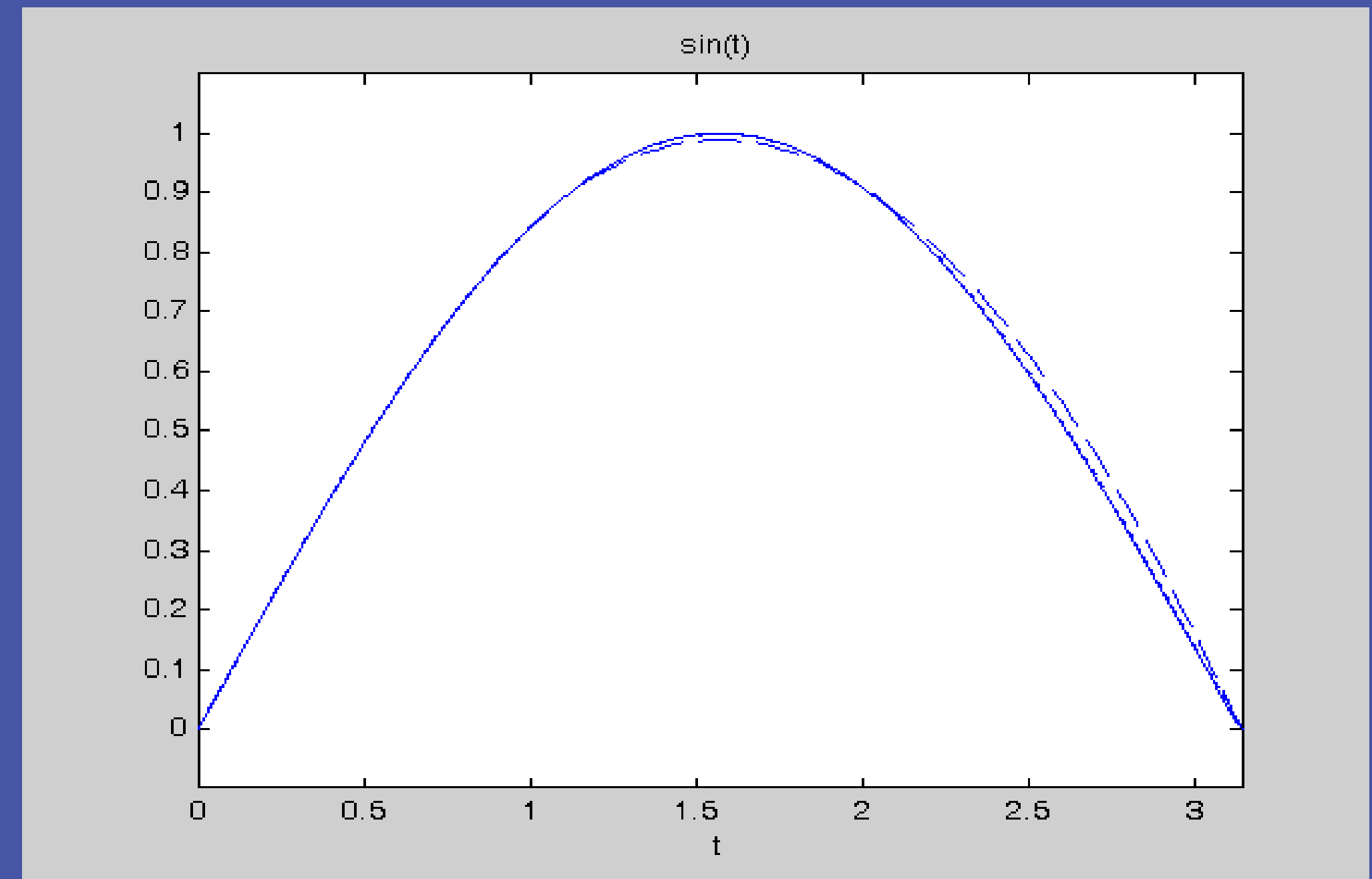
- 格式

$S = \text{spapi}(k, x, y)$

其中  $k$  为用户选定的 B 样条阶次, 一般选择  $k=4,5$

例 分别用 B 样条函数对  $y=\sin(t)$  和  
 $f(x) = (x^2 - 3x + 5)e^{-5x} \sin x$  中给出的数据  
进行 5 次 B 样条函数拟合，并与三次分段多项式  
样条函数拟合的结果相比较

```
x0=[0,0.4,1,2,pi];  
y0=sin(x0);  
ezplot('sin(t)',[0,pi]);  
hold on  
sp1=csapi(x0,y0)  
fnplt(sp1,'r--');    % 三次分段多项式样条插值  
sp2=spapi(5,x0,y0); fnplt(sp2,'b:') % 5 次 B 样条插值
```



```
>> x=0:.12:1; y=(x.^2-3*x+5).*exp(-5*x).*sin(x);  
>> ezplot('(x^2-3*x+5)*exp(-5*x)*sin(x)',[0,1]), hold on  
>> sp1=csapi(x,y); fnplt(sp1,'--'); sp2=spapi(5,x,y);  
    fnplt(sp2,'r:')
```

