

第4章 插值与拟合1

❖ 插值方法

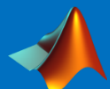
❖ 拟合方法

❖ MATLAB插值函数

➤ interp1

➤ spline

➤ pchip



上讲内容

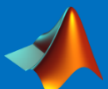


- MATLAB求解非线性方程组的函数：fzero, fsolve 和roots

```
[x,fval,exitflag,output] = fzero(fun,x0,options, p1, p2, ...)
```

```
r = roots(c)
```

```
[x,fval,exitflag,output,jacobian] = fsolve(fun,x0,options, p1, ...)
```



MATLAB程序基本结构

```
function [Output]=FcName (Input)
```

%Output和Input分别为输入和输出变量，有时并不需要，则函数声明语句可以更改为 `function FcName`

%主函数的功能完成主要计算过程并进行输出

%Step 1: 选择合适的核心的求解函数

%Step 2: 根据求解函数输入变量，按顺序进行赋值

%Step 3: 在核心求解函数之后，输出求解结果
(disp,fprintf,plot)

```
function [Output2]=SubFunction (Input2)
```

% 子函数主要功能是描述待求解问题，供主函数使用

% 子函数通常计算Input2指定处的目标函数值。

% 子函数与主函数是两个相对独立的空间，变量并不通用



函数逼近

一般采用函数表示自然现象、过程中各参数的变化规律

$$y = F(x)$$



解析法

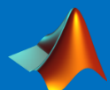
列表法

图示法



$$\phi(x) \approx F(x) \quad (\phi(x) \text{ 具有简单的形式})$$

插值和拟合是两种重要的函数逼近方法

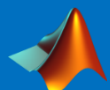


函数插值

已知熔盐在423~473K的密度和粘度如下表所示，估计450K时的密度和粘度。

如果可以寻找出与已测得的实验数据相适应的近似解析函数式，则可根据近似解析表达式求出未列点的函数值。

温度 (K)	密度 (kg/m ³)	粘度 (Pa·S)
423	1976	177.58
433	1967	146.51
443	1959	122.79
453	1951	104.6
463	1943	90.26
473	1934	78.79



函数插值的定义

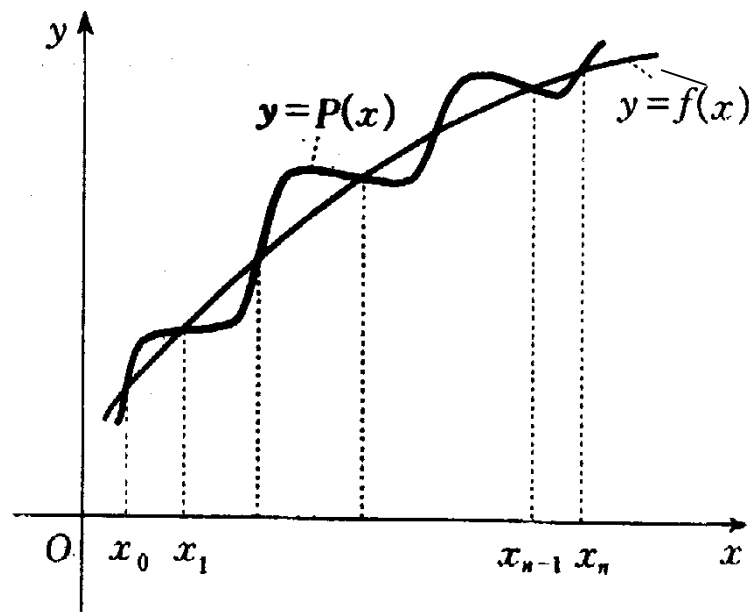
插值就是构造一个函数，使其在指定点取给定值的过程

已知函数 $f(x)$ 在互异节点 x_0, x_1, \dots, x_n 处的函数值 y_0, y_1, \dots, y_n



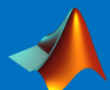
插值原则

- ① $f(x) \approx \phi(x), x \in [a, b];$
- ② $\phi(x_i) = y_i, i = 0, 1, 2, \dots, n$



n 次插值多项式的几何表示

当选用不同的插值函数时，相应的得到不同的插值方法



代数多项式插值法原理

代数多项式具有形式简单、计算方便、存在各阶导数等良好性质，是最常用的插值函数

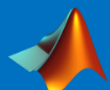
代数多项式 $P(x) = P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$

1. 构造多次插值多项式

函数 $y=F(x)$ 给出在 $n+1$ 个互异插值节点上的函数值，可构造一个不超过 n 次的多项式：

$$P(x) = P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n = \sum_{i=0}^n a_i x^i$$

如果以上的多项式满足插值原则②，就称 $P(x)$ 为 $F(x)$ 的插值多项式。



代数多项式插值原理

2. 确定 n 次多项式系数

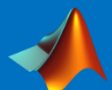
由于满足插值原则②，则有

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \cdots + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \cdots + a_nx_1^n = y_1 \\ \dots\dots\dots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \cdots + a_nx_n^n = y_n \end{cases}$$

以上方程组的系数行列式为范得蒙行列式

$$V(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{0 \leq i < j \leq n} (x_i - x_j)$$

由于节点互异，行列式不等于0，方程组存在唯一解，求解可得代数多项式系数，该多项式满足插值要求，可作为插值函数。



拉格朗日插值法

通常并不直接求解以上方程得到各个系数，而是采用一些简单的方法进行构造，如拉格朗日(Lagrange)法

线性插值, $n=1$

$$\text{插值多项式 } P_1(x) = a_0 + a_1x \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} y_0 = a_0 + a_1x_0 \\ y_1 = a_0 + a_1x_1 \end{cases}$$

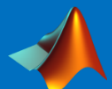
$$a_1 = \frac{y_0 - y_1}{x_0 - x_1}, \quad a_0 = y_0 - a_1x_0 = y_0 - \frac{y_0 - y_1}{x_0 - x_1}x_0$$

$$P_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

节点 x_0 和 x_1 的一次插值基函数

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}, \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

插值函数为基函数的线性组合，系数是对应节点上的函数值




拉格朗日二次插值

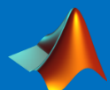
二次插值多项式: $P_2(x) = y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + y_2L_2(x)$

基函数如何确定?

基函数满足: $L_i(x) = \begin{cases} 1, (x = x_i) \\ 0, (x \text{ 在节点上, 但 } x \neq x_i) \end{cases}$

对于 $i=0$, 可假定 $L_0(x) = A(x-x_1)(x-x_2)$ $A = 1/(x_0-x_1)(x_0-x_2)$


$$\begin{cases} L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \\ L_1(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)} \\ L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \end{cases}$$



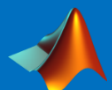
拉格朗日n次插值

拉格朗日插值法求多项式模型为：

$$L_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^n l_k(x) y_k$$

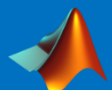
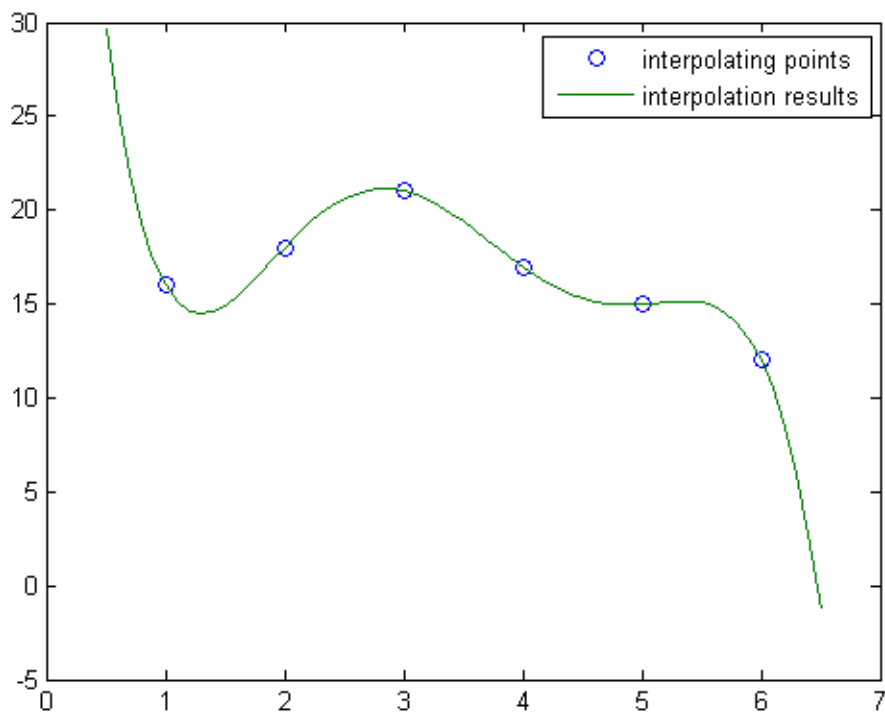
$$l_k(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_1)(x_k - x_2) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)}$$

$$l_k(x_i) = \begin{cases} 0 & i \neq k \\ 1 & i = k \end{cases}$$



拉格朗日插值法的特点

Lagrange插值多项式的优点在于不要求数据点是等间隔的，其缺点是数据点数不宜过大，通常不超过7个，否则计算工作量大且误差大，计算不稳定。

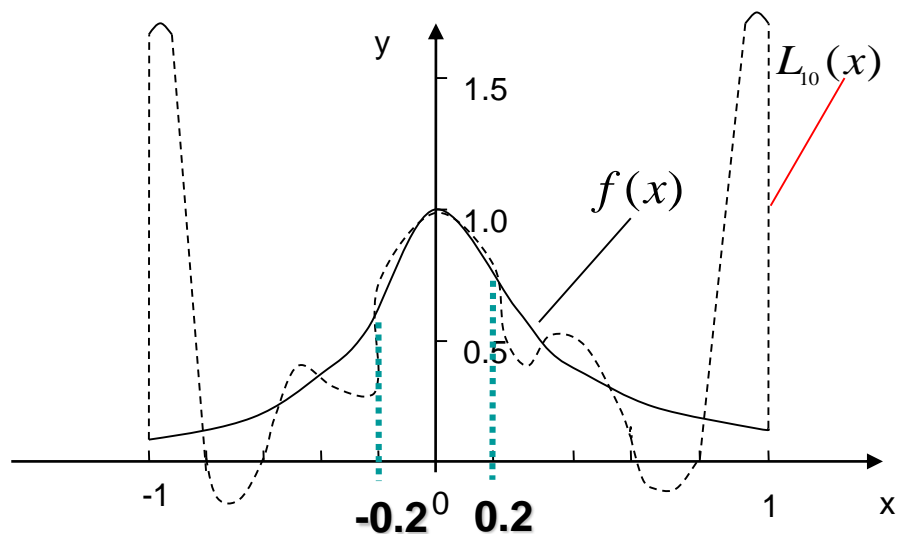


龙格现象

$$f(x) = 1/(1 + 25x^2), \quad -1 \leq x \leq 1$$

取等距节点 $x_i = -1 + 2i/n (i = 0, 1, 2, 3, \dots, 10)$, 建立拉格朗日插值多项式。函数 $y = f(x)$ 及插值多项式 $y = L_{10}(x)$ 的图形如下:

由图可见, 在区间 $[-0.2, 0.2]$ 上 $L_{10}(x)$ 比较接近 $f(x)$, 但在区间 $[-1, 1]$ 两端则误差很大。当 n 继续增大时, 部分区间上插值多项式误差偏大的现象更严重。这种现象称“龙格现象”。



拉格朗日插值多项式次数高, 不等于插值效果好!


分段插值法

- ✓ 将插值范围**分为若干段**，在每个分段上使用低次插值，就是分段插值法。
- ✓ 分段低次插值多项式的误差小于高次多项式。
- ✓ 最常使用的使分段线性和三次多项式插值。

分段线性Lagrange插值多项式

在每个分段插值区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 内

$$L_1^{(i)}(x) = y_i l_i(x) + y_{i+1} l_{i+1}(x) = y_i \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + y_{i+1} \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$



$$\tilde{L}_1(x_i) = \begin{cases} L_1^{(0)}(x) & x_0 \leq x \leq x_1 \\ L_1^{(1)}(x) & x_1 \leq x \leq x_2 \\ \vdots & \vdots \\ L_1^{(n-1)}(x) & x_{n-1} \leq x \leq x_n \end{cases}$$



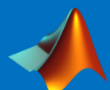
三次样条插值法

- 样条是机械设计制造过程中为描绘出光滑的外形曲线(放样)所用的工具;
- 从物理上讲, 样条满足插值点的约束, 同时使势能达到最小;
- 数学上样条是一段一段的三次多项式拼合而成的曲线, 在拼接处, 不仅函数是连续的, 且一阶和二阶导数也是连续的。

如果函数 $S(x)$ 在区间 $[a,b]$ 满足以下条件:

1. $S(x)$ 在每个小区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上都是三次多项式;
2. $S(x)$, $S'(x)$ 和 $S''(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续;
3. 在节点处, $S(x_i)=y_i$ 。

则称 $S(x)$ 为三次样条插值函数



三次样条插值原理

在 n 个小区间构造 $S(x)$ ，共有 n 个三次多项式，需确定 $4n$ 个参数

在所有节点上 $S(x_i) = y_i, i = 0, 1, \dots, n$

$n+1$ 个方程

在除端点外的节点上

$$\lim_{x \rightarrow x_i} S(x) = S(x_i) = y_i, i = 1, \dots, n-1$$

$$\lim_{x \rightarrow x_i} S'(x) = S'(x_i), i = 1, \dots, n-1$$

$$\lim_{x \rightarrow x_i} S''(x) = S''(x_i) = M_i, i = 1, \dots, n-1$$

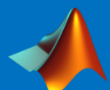
**$3(n-1)$ 个
方程**

1. $S''(x_0) = S''(x_n) = 0$ ，自然边界条件

边界条件 2. 已知 $S'(x_0)$ ， $S'(x_n)$

3. 已知 $2S''(x_0) = S''(x_1)$ 和 $2S''(x_n) = 2S''(x_{n-1})$

2个方程



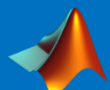
分段三次Hermite插值

如果已知插值点的函数值和一阶导数值，利用它们可以构造一个三次函数，使其在插值点的函数值和一阶导数值与已知值相等，这样的分段三次函数称为分段三次Hermite插值

$$\textcircled{1} \quad H_i(x) = a_{i0} + a_{i1}x + a_{i2}x^2 + a_{i3}x^3, i = 0, 1, 2, \dots, n$$

插值原则 $\textcircled{2} \quad H(x_i) = y_i, (i = 0, 1, 2, \dots, n)$

$$\textcircled{3} \quad H'(x_i) = m_i, (i = 0, 1, 2, \dots, n)$$



MATLAB一维插值函数：interp1

调用格式为：

$y_i = \text{interp1}(x, y, x_i, 'method')$

输入变量：

x ：样本点向量， x 必须严格单调递增；

y ：样本点对应的函数值，可以为向量或矩阵；

x_i ：需要插值的位置，它是一个向量；

$method$ 共有6种参数可供选择，当省略 $method$ 时，即默认为 $linear$ 线性插值，其他常用参数值包括：

‘spline’——分段三次样条插值 ‘pchip’——分段三次Hermite插值

‘makima’——修正的Akima插值法 ‘nearest’——等于最近插值点函数值

‘next’——等于后一个插值点函数

‘previous’——等于前一个插值点函数值

输出变量： y_i 为插值点自变量值 x_i 对应的函数值

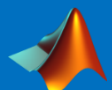


例题

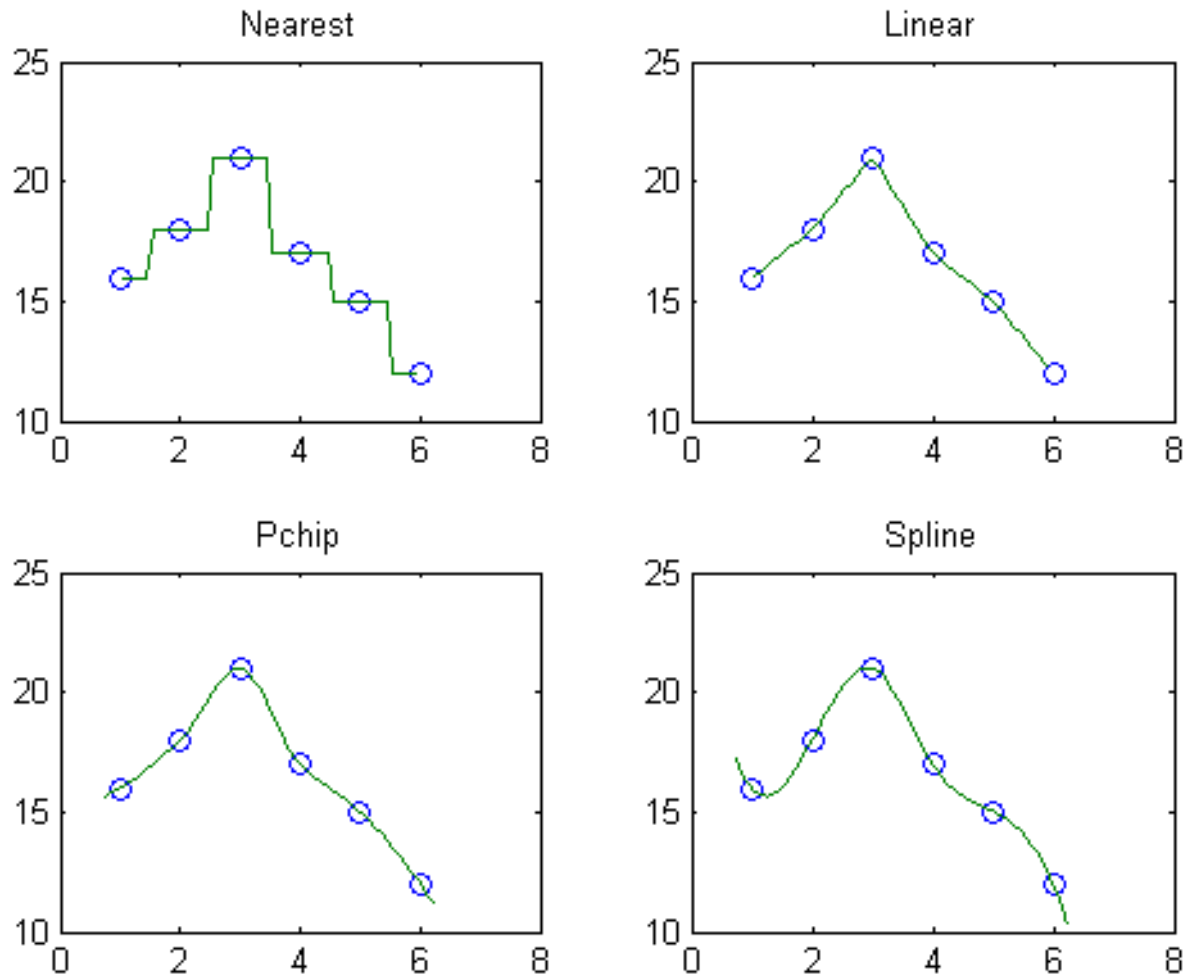
已知插值节点 $x=1:6$ ，节点处函数值 $y=[16\ 18\ 21\ 17\ 15\ 12]$ ；试采用interp1函数计算最近插值、线性插值、分段三次埃米特插值和分段样条插值在点 $x=0.75:0.1:6.25$ 处的值，并将插值结果作图进行比较。

```
function Cha4demo3
```

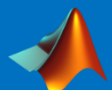
```
x=1:6;y=[16 18 21 17 15 12];xi=0.75:0.1:6.25;  
y1=interp1(x,y,xi,'nearest');y2=interp1(x,y,xi);  
y3=interp1(x,y,xi,'pchip');y4=interp1(x,y,xi,'spline')  
subplot(2,2,1)  
plot(x,y,'o',xi,y1,'-'),title('Nearest')  
subplot(2,2,2)  
plot(x,y,'o',xi,y2,'-'),title('Linear')  
subplot(2,2,3)  
plot(x,y,'o',xi,y3,'-'),title('Pchip')  
subplot(2,2,4)  
plot(x,y,'o',xi,y4,'-'),title('Spline')
```



例题



不同插值方法的效果比较



例题

已知某转子流量计在100-1000 mL/min流量范围内，刻度值与校正值有如下表。试用线性插值法计算流量计的刻度值为785时，实际流量为多少？

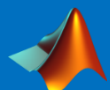
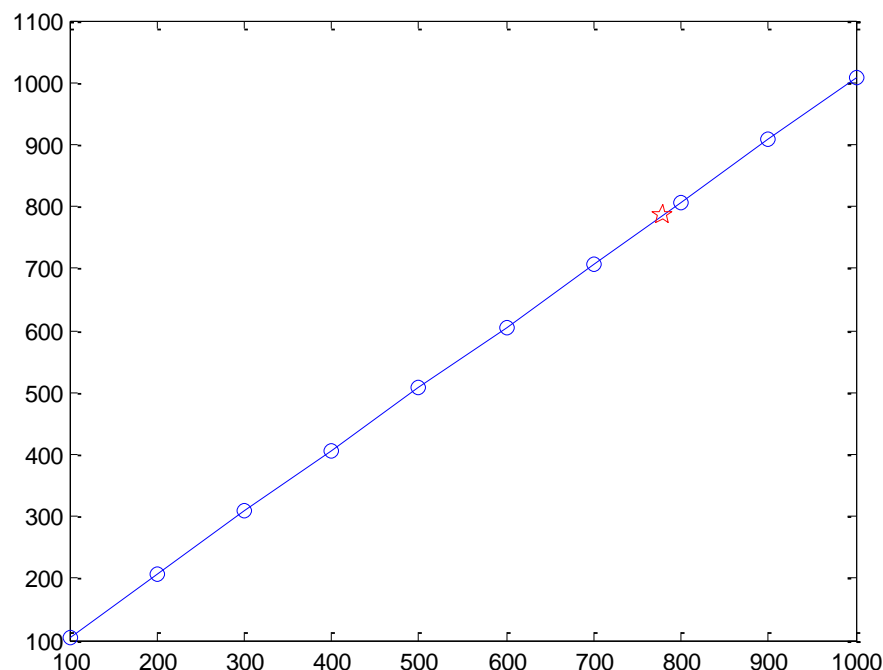
刻度值	校正值	刻度值	校正值
100	105.3	600	605.8
200	207.2	700	707.4
300	308.1	800	806.7
400	406.9	900	908.0
500	507.5	1000	107.9



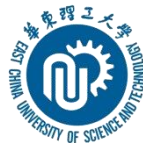
例题

```
function FlowInterp
X=[100,200,300,400,500,600,700,800,900,1000];
Y=[105.3,207.2,308.1,406.9,507.5,605.8,707.4,...
806.7,908.0,1007.9];
plot(X,Y,'b-o'),hold on
Xk=780;
Yk=interp1(X,Y,Xk)
plot(Xk,Yk,'rp',...
'Markersize',10)
```

执行结果: $Y_k = 786.8400$



逆插值



已知函数值 $f(x)$ ，求自变量 x 的值。

刻度值	校正值	刻度值	校正值
100	105.3	600	605.8
200	207.2	700	707.4
300	308.1	800	806.7
400	406.9	900	908.0
500	507.5	1000	107.9

一个转子流量计在100~1000mL/min流量范围内刻度值与校正值关系如例题4表所示，现需调整实际流量为850 ml/min，则流量计的读数应为多少？



逆插值

```
function InvFlowInterp
X=[100,200,300,400,500,600,700,800,900,1000];
Y=[105.3,207.2,308.1,406.9,507.5,605.8,707.4
,806.7,908.0,1007.9];
plot(Y,X,'b-o'),hold on
Yk=850;
Xk=interp1(Y,X,Yk)
plot(Yk,Xk,'rp','Markersize',10)
f=@(x) Yk-interp1(X,Y,x);
Xk2=fzero(f,Yk)
```



pchip和spline

埃米特插值

```
yi = pchip(x, y, xi)
```

```
pp=pchip(x, y)
```

```
yi=ppval(pp, xi)
```

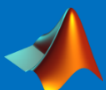
样条插值

```
yi = spline(x, y, xi)
```

```
pp=spline(x, y)
```

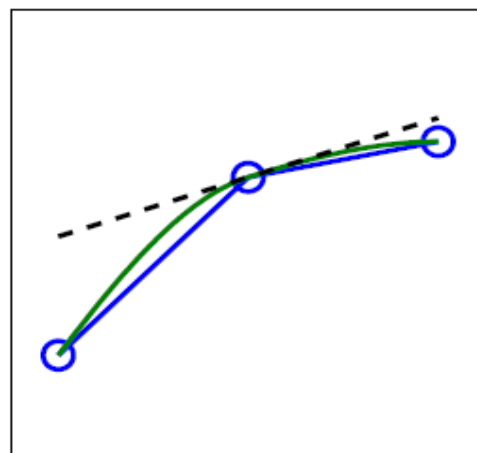
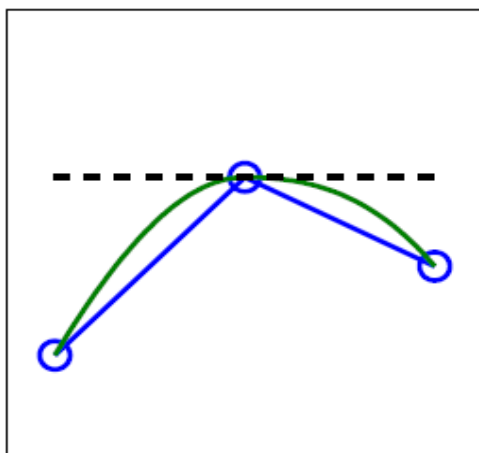
```
yi=ppval(pp, xi)
```

- 上述第一种方法与interp1函数功能相同；
- 第二种方法将三次多项式以结构体pp的形式返回，以便于利用其它函数进行微分、积分等运算；
- ppval用于计算分段多项式在指定点的函数值

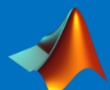


pchip与spline的区别

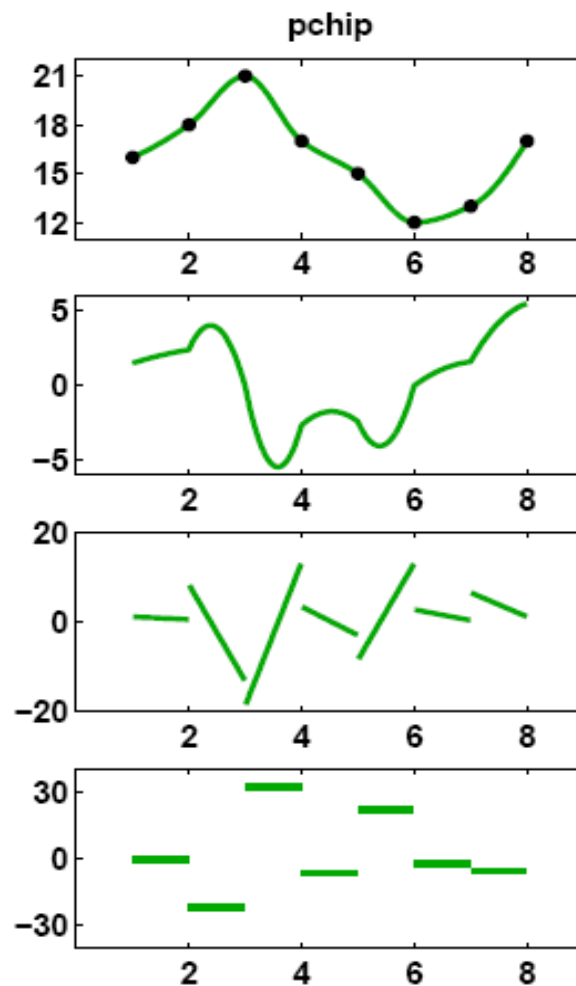
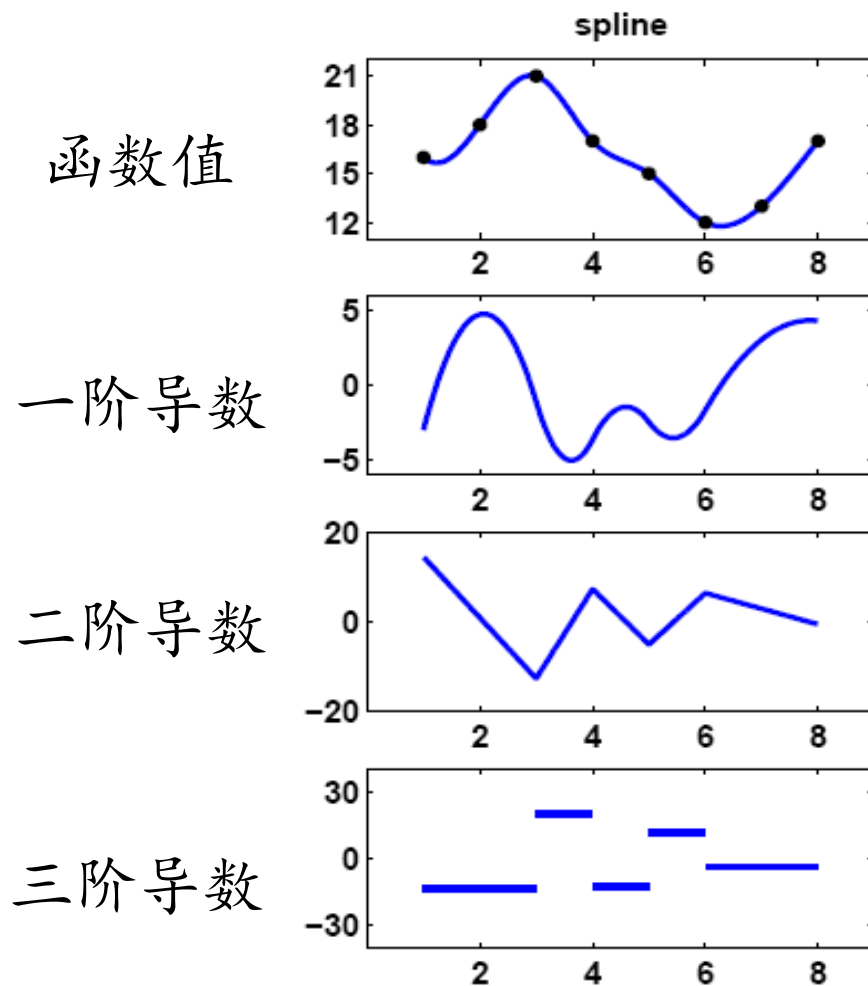
- `spline`函数使用not-a-knot边界条件构造插值多项式； not-a-knot边界条件的意义是第2个和倒数第2个节点处的三阶导数连续，因此这两个节点相当于没有；
- `spline`函数可以指定端点处的导数值，其方法为当 x , y 为向量时， y 可以比 x 多两个元素， $y(1)$ 和 $y(\text{end})$ 表示起始和终止点的导数； x 为向量， y 为矩阵时， $y(:,1)$ 和 $y(:,\text{end})$ 表示起始和终止点的导数。



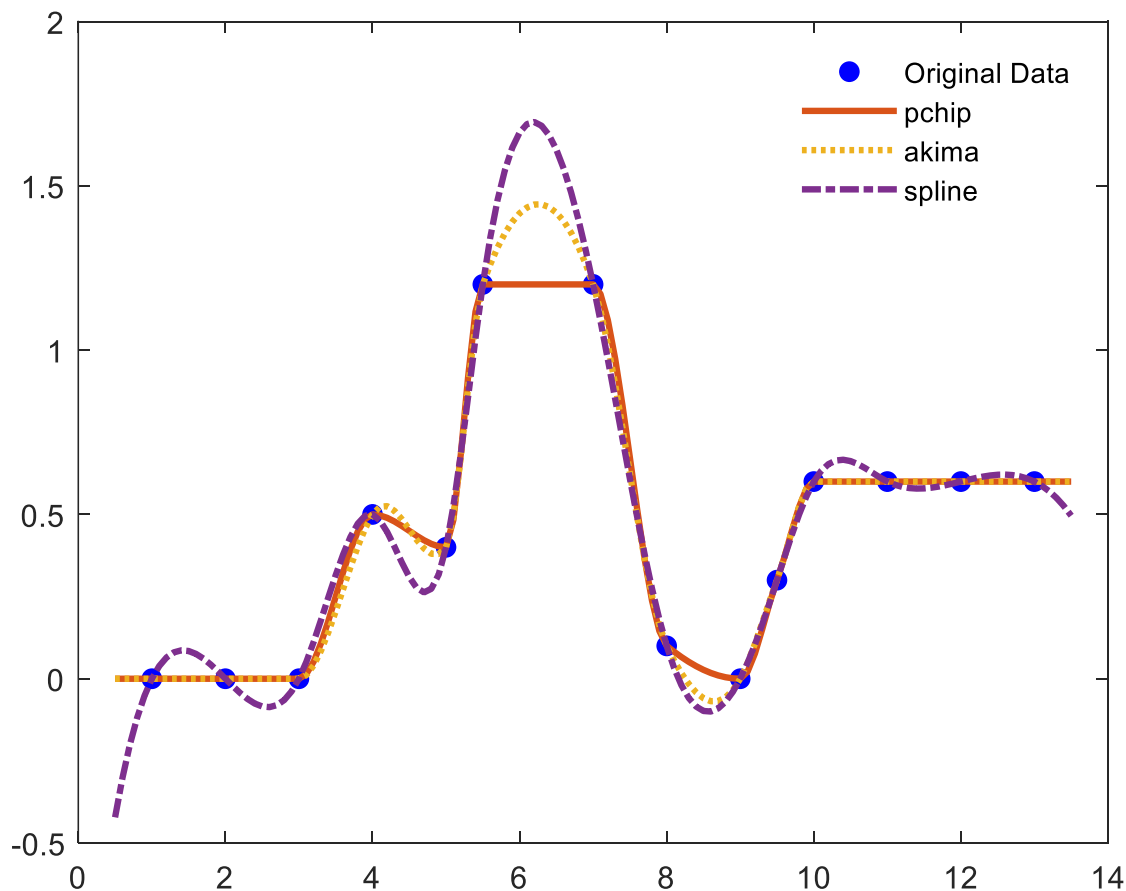
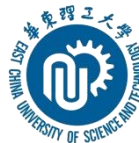
- `pchip`规定当节点两侧一阶导数异号时，节点处一阶导数取0；两侧同号时则取平均值；端点处另计



pchip与spline的区别



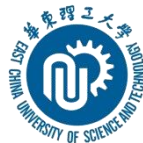
插值函数的选择



- 插值方法的选择主要根据原函数对连续性、凹凸性和单调性等要求
- 线性插值没有任何光滑性，但不会放大数据变化
- pchip可以保证函数的单调性
- 样条插值获得的函数更“光滑”但有可能放大数据。

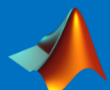


例题

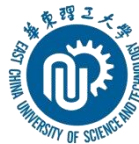


为了绘制乙醇—水二元溶液的气液平衡曲线，查到24点实验数据如表所示。表中 x 和 y 分别表示液相和气相中乙醇摩尔分数。但表中缺少低浓度点的数据，且数据分布不均匀。试用三次样条插值法对以下插值点插值并画出乙醇—水二元溶液的气液平衡曲线。

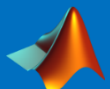
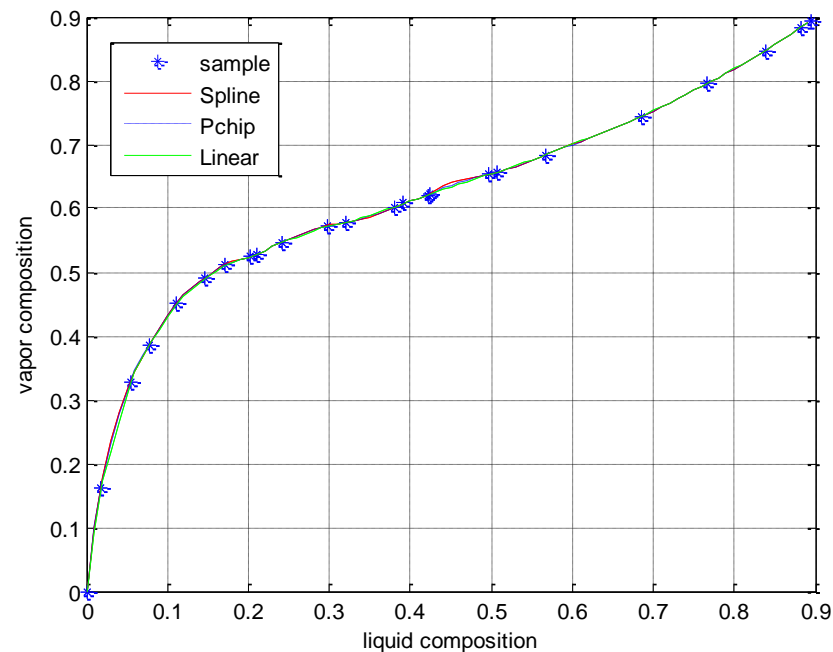
x	0	0.018	0.054	0.078	0.111	0.147	0.172	0.203	0.210	0.241	0.297	0.320
y	0	0.163	0.328	0.386	0.452	0.491	0.512	0.524	0.520	0.546	0.573	0.577
x	0.381	0.391	0.423	0.425	0.497	0.507	0.567	0.685	0.767	0.838	0.882	0.894
y	0.600	0.608	0.621	0.623	0.653	0.656	0.684	0.743	0.796	0.846	0.884	0.894



例题

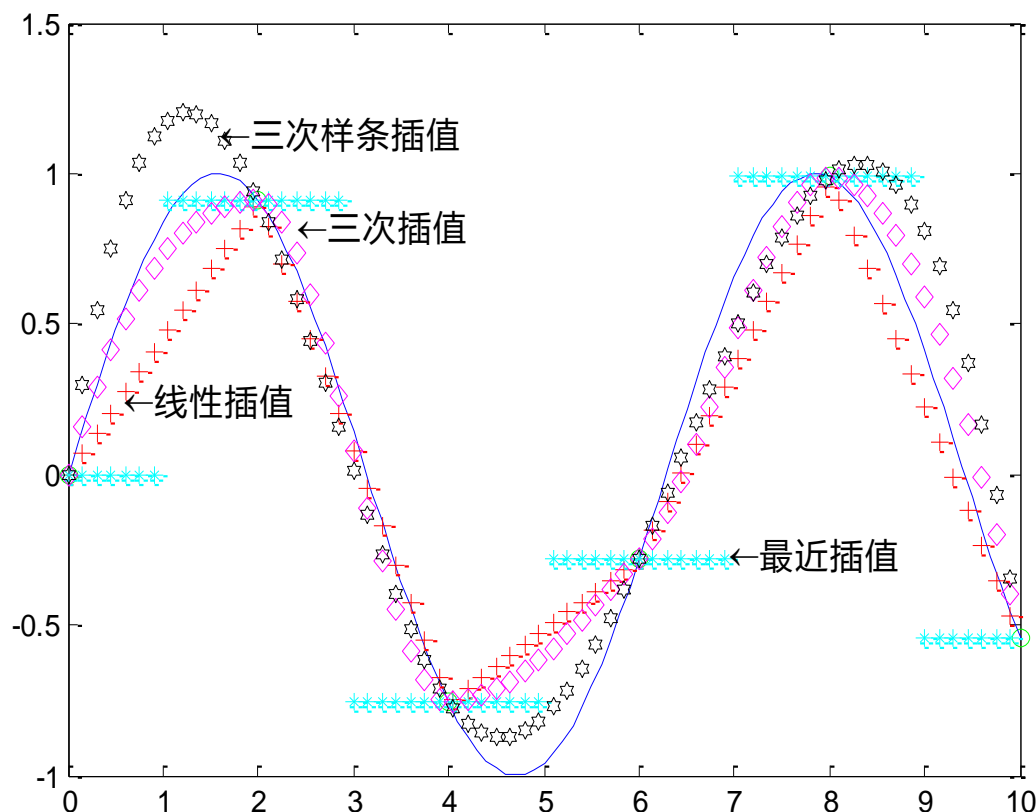


```
function PhaseEqInterp
x=[0,0.018,0.054,0.078,...];
y=[0,0.163,0.328,0.386,...];
xk=0:0.01:0.894;
plot(x,y,'*'),hold on
yk=spline(x,y,xk);
yk2=pchip(x,y,xk);
yk3=interp1(x,y,xk);
plot(xk,yk,'r',xk,yk2,'b:',xk,yk3,'g')
xlabel('liquid composition')
ylabel('vapor composition')
legend('Sample','Spline','Pchip','Linear')
grid on
```

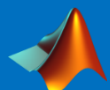


初始数据对于插值的影响

已知 $x=[0:2:10]$, $y=[0 \ 0.9093 \ -0.7568 \ -0.2794 \ 0.9894 \ -0.5440]$; ($y=\sin x$), 比较一维线性、线性最近、立方和三次样条插值所得 $x_i=0,0.15,0.30,0.45,\dots,10$ 处的值 y_i 。



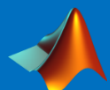
插值的原始数据必须尽可能反应其变化的趋势，数据不完整则插值不会取得良好的效果



例题：精馏塔理论板数

在一个连续的精馏塔中分离乙醇-水混合液。原料液中，含乙醇的摩尔分数 x_F 为0.4，加料热状态参数 q 为1.103。塔顶设全凝器，泡点回流，回流比 R 为3。塔顶馏出液含乙醇的摩尔分数 x_D 为0.78，釜液含乙醇的摩尔分数 x_W 为0.02。试求达到分离要求所需的理论板数。已知乙醇-水的气液平衡数据如下表所示。

摩尔分数 x	摩尔分数 y	温度 $t/^\circ\text{C}$	摩尔分数 x	摩尔分数 y	温度 $t/^\circ\text{C}$
0.000	0.000	100.0	0.600	0.698	79.1
0.050	0.310	90.6	0.700	0.755	78.7
0.100	0.430	86.4	0.800	0.820	78.4
0.200	0.520	83.2	0.894	0.894	78.15
0.300	0.575	81.7	0.950	0.942	78.3
0.400	0.614	80.7	1.000	1.000	78.3
0.500	0.657	79.9			



例题：精馏塔理论板数

McCabe-Thiele法求二元精馏的理论塔板数实际就是逐板计算法和图解计算法。

精馏段操作线方程：

$$y_{n+1} = \frac{R}{R+1} x_n + \frac{x_D}{R+1}$$

q线方程：

$$y_q = \frac{q}{q-1} x_q - \frac{x_F}{q-1}$$

1. 相平衡线（绿色） 1.0

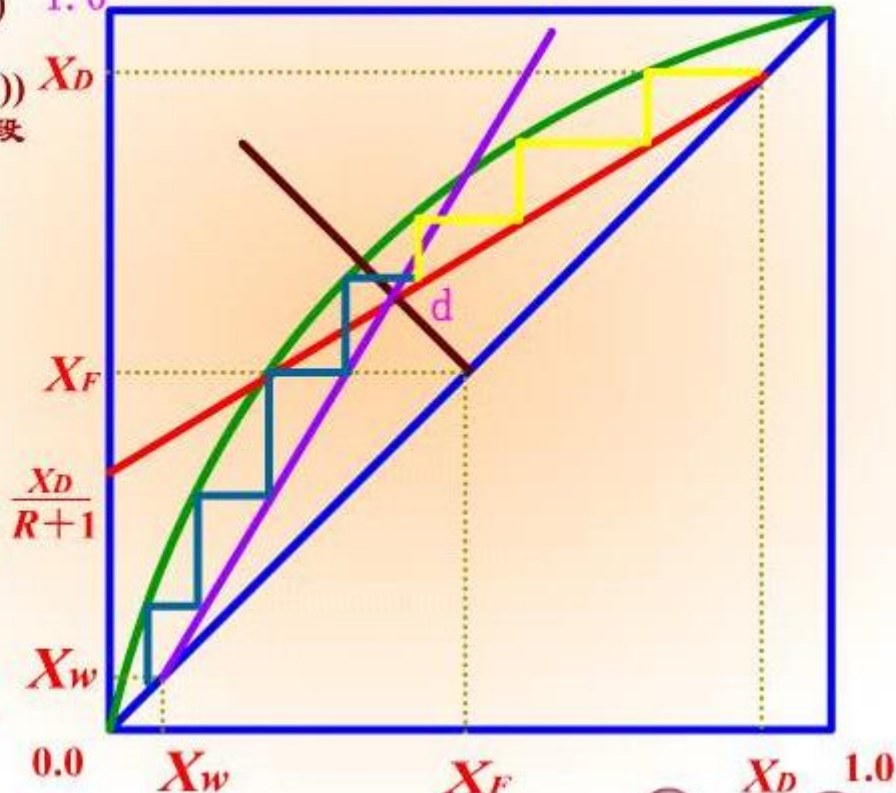
2. 以点 $(0, X_D/(R+1))$ 和 (X_D, X_D) 做精馏段操作线（红色）

3. 过点 (X_F, X_F) 作 q 线方程（褐色）

4. 过点 (X_W, X_W) 和 d 点作提馏段操作线（紫色）

5. 以 (X_D, X_D) 为起点在相平衡线和精馏段操作线之间作阶梯（黄色）

当进入 d 点左侧，在相平衡线和提馏段操作线之间作阶梯（湖蓝）



例题：精馏塔理论板数

```
function Cha4Demo07
```

```
% 计算所需参数
```

```
q = 1.103; R = 3; xD = 0.78; xW = 0.02; xF = 0.40;
```

```
%相平衡数据
```

```
x0 = [0 .05 .10 .20 .30 .40 .50 .60 .70 .80 .894 .95 1];
```

```
y0 = [0 .31 .43 .52 .575 .614 .657 .698 .755 .82 .894 .942  
1];
```

```
Yr = @(x) R/(R+1).*x + xD/(R+1); %精馏段操作线方程
```

```
fun = @(x) (q-1)*(R/(R+1).*x + xD/(R+1)) - (q*x-xF);
```

```
xQ = fzero(fun,0.5); %求操作线交点横坐标
```

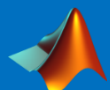
```
yQ = Yr(xQ); %求操作线交点纵坐标
```

```
xOP = [xW, xQ, xD];
```

```
yOP = [xW, yQ, xD]; %定义操作线上的纵坐标值，三点确定两条直线
```

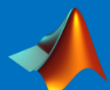
```
yfit = linspace(0,1,1001);
```

```
xfit = interp1(y0,x0,yfit,'pchip'); %插值获得相平衡线
```



例题：精馏塔理论板数

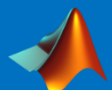
```
%续上页
% 绘制图形
hold on
box on
plot([0 1],[0 1], 'k'), %对角线
xlabel('x'), ylabel('y')
plot(x0,y0, 'r+')
plot(xfit,yfit, 'r-') %绘制相平衡线
plot(xF,xF, 'b*')
plot(xQ,yQ, 'bo'), plot(xOP,yOP, 'b-') %绘制操作性
k = 1;
yn(1) = xD;
xn(1) = interp1(y0,x0,yn(1), 'pchip'); %xn和yn由相平衡决定
plot([xD,xn(1)], [yn(1),yn(1)], 'b-')
text(xn(1), yn(1), num2str(1), ...
      'HorizontalAlignment', 'center', 'VerticalAlignment', 'bottom')
```



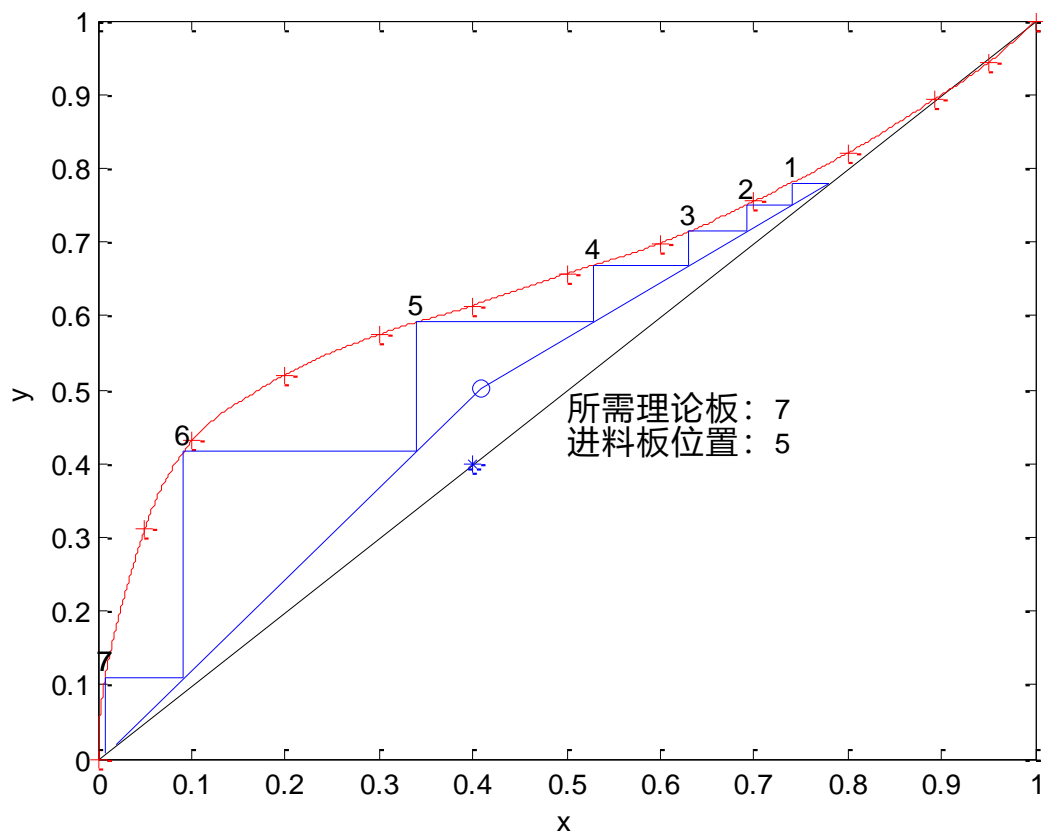
例题：精馏塔理论板数

%续上页

```
while xn(k) > xW
    yn(k+1) = interp1(xOP, yOP, xn(k)); %y(k+1)与x(k)的关系由操作线决定
    k = k + 1;
    xn(k) = interp1(y0, x0, yn(k), 'pchip');
    plot([xn(k-1), xn(k)], [yn(k-1), yn(k)], 'b-')
    plot([xn(k-1), xn(k)], [yn(k), yn(k)], 'b-')
    text(xn(k), yn(k), num2str(k), ...
        'HorizontalAlignment', 'center', 'VerticalAlignment', 'bottom')
end
N = k;
plot([xn(N), xn(N)], [yn(N), xn(N)], 'b-')
text(xn(N), yn(N), num2str(N), ...
    'HorizontalAlignment', 'center', 'VerticalAlignment', 'bottom')
text(0.5, 0.5, strcat('所需理论板: ', num2str(N)), ...
    'HorizontalAlignment', 'left', 'VerticalAlignment', 'top')
```



例题：精馏塔理论板数



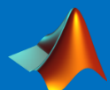
最小二乘法曲线拟合

$$\frac{\Delta p}{H} = 150 \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right)^2 \frac{\mu f}{d_p^2} W + 1.75 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^2} \rho f \frac{W^2}{d_p}$$
$$\frac{\alpha}{cG} \left[\frac{c\mu}{\lambda} \right]^{0.67} \left[\frac{LH}{D} \right]^{0.33} \left[\frac{\mu ST}{\mu} \right]^{0.14} = 1.86 / \left(\frac{DG}{\mu} \right)^{0.67}$$

对过程复杂的影响因素还不清楚时常采用经验模型对其描述

化工实验和工程实践中，可测得许多离散的实验数据和工业数据，通常需要寻找一条连续光滑曲线 $f(x)$ 来近似反映已知数据组间存在的某种关系的一般趋势，所得近似函数 $f(x)$ 可以很好地逼近离散数据 (x_i, y_i) ，但**不要求函数完全通过数据点**，以排除实验误差的影响这个函数逼近的过程称为**曲线拟合**或经验建模。

常用**最小二乘法**，即“近似函数在各实验点的计算结果与实验结果的偏差平方和最小”的原则进行曲线拟合



一元线性最小二乘法

最小二乘法按计算方法特点又分为线性和非线性最小二乘法。

对于一元线性函数: $y = a + bx$

测定了 m 个自变量值: $x_k (k = 1, 2, \dots, m)$

和 m 个应变量值: $y_k (k = 1, 2, \dots, m)$

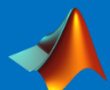
计算出 m 个应变量值: $y_k^* (k = 1, 2, \dots, m)$

定义偏差平方和: $Q = \sum e_k^2 = \sum (y_k - (a + bx_k))^2$

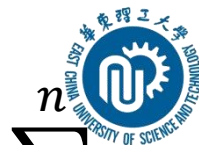
最小二乘法使 Q 最小, 应满足:

求解该法方程即可得 a, b

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial b} = 0 \end{cases}$$



多元线性最小二乘法



设多元线性函数: $y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \cdots + b_nx_n = \sum_{i=1}^n b_i x_i$

m次实验数据($m \geq n$), x_k, y_k 代表第k次实验数据

y的计算值:

$$\begin{aligned} y_k^* &= b_1x_{1k} + b_2x_{2k} + b_3x_{3k} + \cdots + b_nx_{nk} \\ &= f(x_{1k}, x_{2k}, x_{3k}, \cdots, x_{nk}; b_1, b_2, b_3, \cdots, b_n) \end{aligned}$$

根据最小二乘原则: 要使 $Q = \sum e_k^2 = \sum (y_k - y_k^*)^2$ 达到最小

要求: $\frac{\partial Q}{\partial b_i} = 2(b_1 \sum_{i=1}^m x_{1k}x_{ik} + b_2 \sum_{i=1}^m x_{2k}x_{ik} + \cdots + b_n \sum_{i=1}^m x_{nk}x_{ik} - \sum_{i=1}^m x_{1k}y_k) = 0$

$$\begin{cases} s_{11}b_1 + s_{12}b_2 + \cdots + s_{1n}b_n = s_{1y} \\ s_{21}b_1 + s_{22}b_2 + \cdots + s_{2n}b_n = s_{2y} \\ \cdots \\ s_{n1}b_1 + s_{n2}b_2 + \cdots + s_{nn}b_n = s_{ny} \end{cases}$$

求解该法方程
即可得参数 b_i

非线性最小二乘法

在应用最小二乘法曲线拟合时，通常遇到更多的是非线性函数。对比线性模型拟合，非线性模型拟合要困难的多。

非线性模型拟合的二个途径

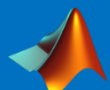


通过代换转化为线性关系



直接采用非线性拟合

- 从统计学原理讲，对于非线性拟合应尽可能采用直接拟合的方法，以便于估计误差。
- 线性拟合常可用于为非线性拟合提供初值。



非线性函数的线性化处理

1) 双曲线 $\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x}$

令: $Y = \frac{1}{y}, X = \frac{1}{x}$

2) 幂函数 $y = cx^b$

两边取对数 $\ln y = \ln c + b \ln x$

令: $Y = \ln y, X = \ln x, A = \ln c$

3) 指数函数 $y = ce^{bx}$

两边取对数 $\ln y = \ln c + bx$

令: $Y = \ln y, A = \ln c, X = x$

4) 负指数函数 $y = ae^{b/x}$

两边取对数

令: $Y = \ln y, X = 1/x$

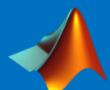
5) 对数函数 $y = a + b \lg x$

令: $Y = y, X = \lg x$

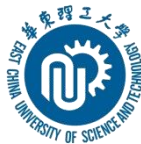
6) S型曲线 $y = \frac{1}{a + be^{-x}}$

变形后, $\frac{1}{y} = a + be^{-x}$

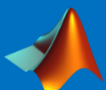
令: $Y = \frac{1}{y}, X = e^{-x}$



课堂练习

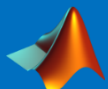


已知当 $y=[1 \ 3 \ 0 \ 20 \ 20 \ 4 \ 18]$ 时，对应的 $x=0:\text{length}(y)-1$ ，分别采用 **pchip** 和 **spline** 函数进行插值求 $x=-0.5:0.2:5.5$ 时对应的 y 值，并画出曲线，曲线要求已知的样本点采用蓝色的空心圆点，**pchip** 获得的插值点采用红色实线，**spline** 获得的插值点采用绿色的虚线表示，图形上加图例。

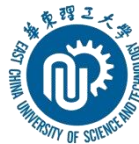


本讲小结

- 1) interp1函数的使用
- 2) spline和pchip函数的区别
- 3) 如何选择合适的插值方法
- 4) 最小二乘法的定义



作业



公共邮箱下载文档：work08.pdf，直接打印
、完成后上交

