第5章 插值与拟合

在实际问题中，一个函数$y=f(x)$往往是从实验观测得到的，所知道的仅为函数$f(x)$在某区间$[a,b]$上一系列点上的值

$$y_i=f(x_i),\quad i=0,1,\cdots,n,$$

当需要在这些结点$x_0,x_1,\cdots,x_n$之间的点x上的函数值时，常用较简单的、满足一定条件的函数$\phi(x)$去代替$f(x)$，插值法是一种常用方法，其插值函数$\phi(x)$满足条件

$$\phi(x_i)=y_i,\quad i=0,1,\cdots,n.$$

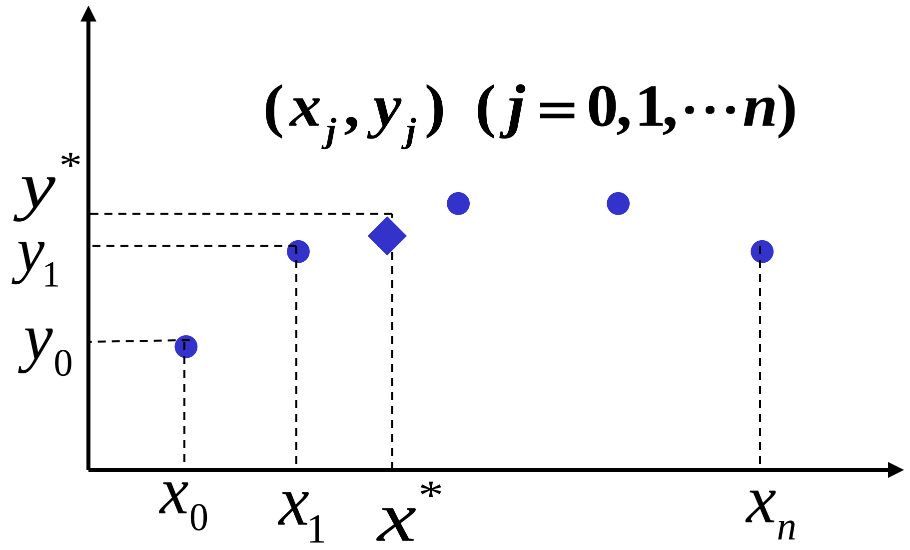
拟合也是已知有限个数据点，求近似函数，不要求过已知数据点，只要求在某种意义下它在这些点上的总偏差最小。

插值和拟合都是要根据一组数据构造一个函数作为近似由于近似的要求不同，二者的数学方法上是完全不同的。而面对一个实际问题，究竟应该用插值还是拟合，有时容易确定，有时则并不明显。

插值问题

已知 $\boldsymbol{n}$+1个节点 (x_j, y_j) $(j=0,1,\cdots n,$ 其中 $\boldsymbol{x}_j$ 互不相同, 不妨设 $a=x_0<x_1<\cdots<x_n=b)$,

求任一插值点 $x^*(\neq x_j)$ 处的插值 y^*.

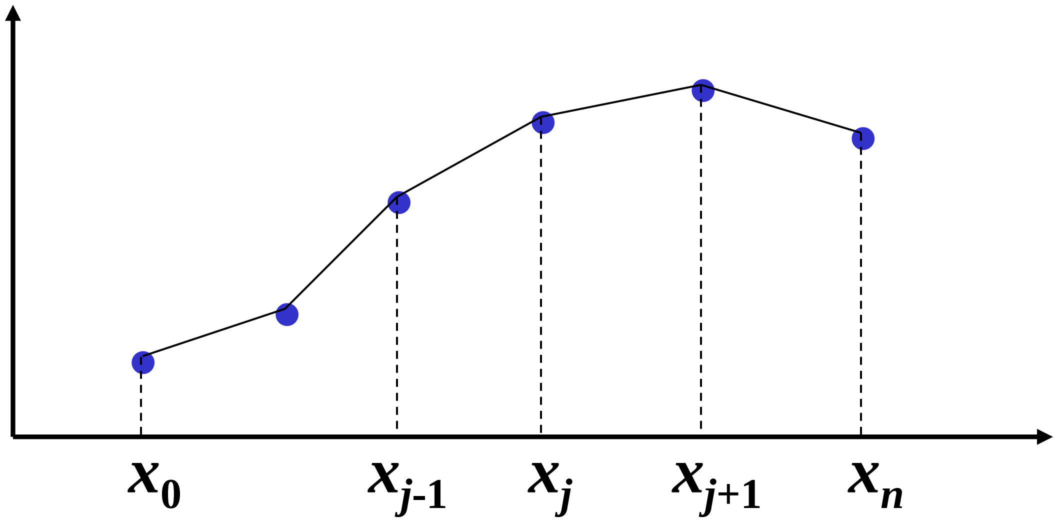


节点可视为由 $y=g(x)$ 产生,

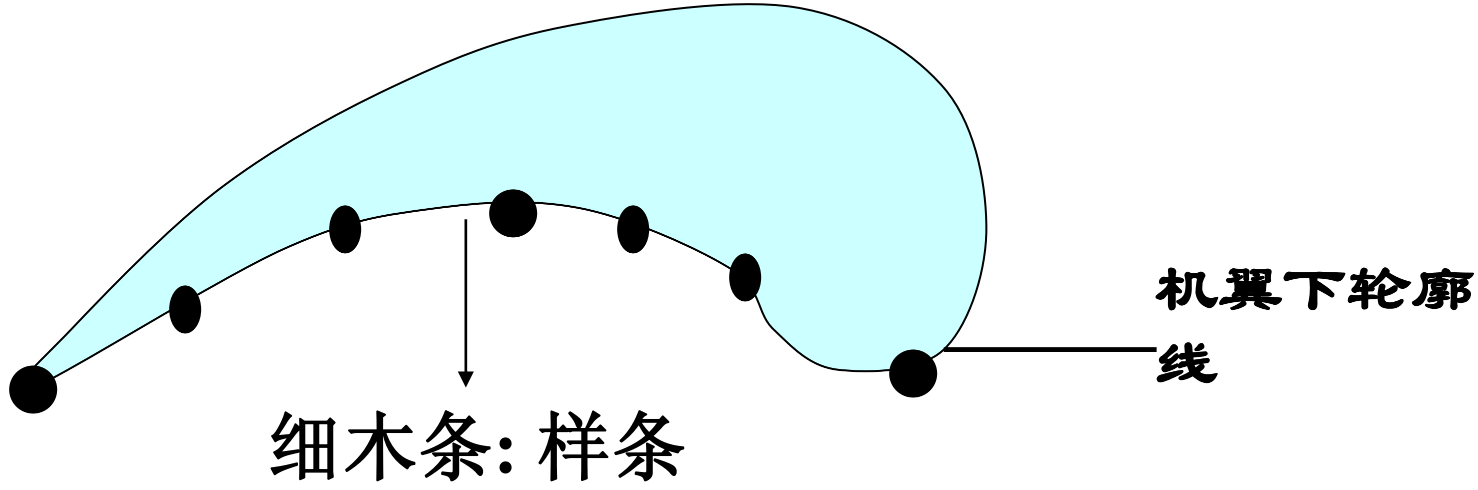
$\boldsymbol{g}$ 表达式复杂, 甚至无表达式

实用插值方法

1. 分段线性插值



2. 三次样条插值



用Matlab作插值计算

1. 分段线性插值: 已有程序 y=interp1(x0,y0,x)

y=interp1(x0,y0,x,'linear') 线性（默认）

输入: 节点x0, y0, 插值点x (均为数组,长度自定义);

输出: 插值y (与x同长度数组).

2. 三次样条插值: 已有程序 y=interp1(x0,y0,x,'spline')

或 y=spline(x0,y0,x)

5.1 插值方法

在工程和数学应用中，经常有这样一类数据处理问题，在平面上给定一组离散点列，要求一条曲线，把这些点按次序连接起来，称之为插值。

已知$n+1$个点(x_i, y_i)（$i=0,1,\cdots,n$），下面求各种插值函数。

数学建模

5.1.1 分段线性插值

简单地说，将每两个相邻的节点用直线连起来，如此形成的一条折线就是分段线性插值函数，记作$I_n(x)$，它满足$I_n(x_i)=y_i$，且$I_n(x)$在每个小区间$[x_i,x_{i+1}]$上是线性函数$(i=0,1,\cdots,n)$。

$I_n(x)$可以表示为$I_n(x)=\sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x)$，其中

$$l_i(x)=\begin{cases} \dfrac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}, & x\in[x_{i-1},x_i] \quad (i\neq 0), \\ \dfrac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}, & x\in[x_i,x_{i+1}] \quad (i\neq n), \\ 0, & \text{其它}. \end{cases}$$

$I_n(x)$有良好的收敛性，即对于$x\in[a,b]$，有

$$\lim_{n\to\infty} I_n(x) = f(x).$$

用$I_n(x)$计算x点的插值时，只用到x左右的两个节点，计算量与节点个数n无关。但n越大，分段越多，插值误差越小。实际上用函数表作插值计算时，分段线性插值就足够了，如数学、物理中用的特殊函数表，数理统计中用的概率分布表等。

5.1.2 拉格朗日插值多项式

拉格朗日插值的基函数为

$$l_i(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i}$$

$$=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\ ,\qquad (i=0,1,\cdots,n).$$

$l_i(x)$**是**n**次多项式，满足**

$$l_i(x_j)=\begin{cases}0, & j\neq i,\\ 1, & j=i.\end{cases}$$

拉格朗日插值函数

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}y_i l_i(x)=\sum_{i=0}^{n}y_i\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)$$

5.1.3 样条插值

许多工程技术中提出的计算问题对插值函数的光滑性有较高要求，如飞机的机翼外形，内燃机的进、排气门的凸轮曲线，都要求曲线具有较高的光滑程度不仅要连续，而且要有连续的曲率，这就导致了样条插值的产生。

5.1.3.1 样条函数的概念

所谓样条（Spline）本来是工程设计中使用的一种绘图工具，它是富有弹性的细木条或细金属条。绘图员利用它把一些已知点连接成一条光滑曲线(称为样条曲线)，并使连接点处有连续的曲率。三次样条插值就是由此抽象出来的。

数学上将具有一定光滑性的分段多项式称为样条函数。具体地说，给定区间$[a,b]$的一个分划

$$\Delta: \quad a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b.$$

如果函数$S(x)$满足

（1）在每个小区间$[x_i, x_{i+1}](i = 0,1,\cdots,n-1)$上$S(x)$是$m$次多项式;

（2）$S(x)$在$[a,b]$上具有$m-1$阶连续导数。

则称$S(x)$为关于分划Δ的m次样条函数，其图形为m次样条曲线。

显然，折线是一次样条曲线。

5.1.4 Matlab插值工具箱
5.1.4.1 一维插值函数

Matlab 中有现成的一维插值函数 interp1，语法为

y=interp1(x0,y0,x,'method')

其中 method 指定插值的方法，默认为线性插值。其值可为

'nearest' 最近项插值

'linear' 线性插值

'spline' 立方样条插值

'cubic' 立方插值

所有的插值方法要求 x0 是单调的。

当 x0 为等距时可以用快速插值法，使用快速插值法的格式为'*nearest'、'*linear'、'*spline'、'*cubic'。

5.1.4.2 三次样条插值

Matlab 中三次样条插值有如下函数

y=interp1(x0,y0,x,'spline')；

y=spline(x0,y0,x)；

pp=csape(x0,y0,conds)；

pp=csape(x0,y0,conds,valconds)； y=ppval(pp,x)；

其中 x0,y0 是已知数据点，x 是插值点，y 是插值点的函数值。

对于三次样条插值，提倡使用函数 csape，csape 的返回值是 pp 形式，要求插值点的函数值，必须调用函数 ppval

pp=csape(x0,y0)使用默认的边界条件，即 Lagrange 边界条件。

pp=csape(x0,y0,conds,valconds)中的 conds 指定插值的边界条件，其值可为

'complete'　　边界为一阶导数，一阶导数的值在 valconds 参数中给出，若忽略 valconds 参数，则按缺省情况处理。

'not-a-knot'　　非扭结条件。

'periodic'　　　周期条件。

'second'　　　　边界为二阶导数，二阶导数的值在 valconds 参数中给出，若忽略 valconds 参数，二阶导数的缺省值为[0, 0]。

'variational'　　设置边界的二阶导数值为[0,0]。

对于一些特殊的边界条件，可以通过 conds 的一个1×2矩阵来表示，conds 元素的取值为 0，1，2。

conds(i)=j 的含义是给定端点i的j阶导数，即 conds 的第一个元素表示左边界的条件，第二个元素表示右边界的条件，conds=[2,1]表示左边界是二阶导数，右边界是一阶导数，对应的值由 valconds 给出。

详细情况请使用帮助 doc csape。

例 5.1　机床加工

待加工零件的外形根据工艺要求由一组数据(x, y)给出（在平面情况下），用程控铣床加工时每一刀只能沿x方向和y方向走非常小的一步，这就需要从已知数据得到加工所要求的步长很小的(x, y)坐标。

表 5.1 中给出的x, y数据位于机翼断面的下轮廓线上，假设需要得到x坐标每改变 0.1 时的y坐标。试完成加工所需数据画出曲线，并求出$x=0$处的曲线斜率和$13 \le x \le 15$范围内y的最小值。要求用分段线性和三次样条两种插值方法计算。

表 5.1　插值数据点

x	0	3	5	7	9	11	12	13	14	15
y	0	1.2	1.7	2.0	2.1	2.0	1.8	1.2	1.0	1.6

gtext('sin(x)');

例 5.2 已知速度曲线$v(t)$上的四个数据点如表 5.2 所示。

表 5.2 速度的四个观测值

t	0.15	0.16	0.17	0.18
$v(t)$	3.5	1.5	2.5	2.8

用三次样条插值求位移$S=\int_{0.15}^{0.18} v(t)dt$。

数学
建模

求出三次样条插值函数为

$$v(t)=\begin{cases}-616666.7(t-0.15)^3+33500(t-0.15)^2-473.33(t-0.15)+3.5, x\in[0.15,0.16]\\-616666.7(t-0.16)^3+15000(t-0.16)^2-11.67(t-0.16)+1.5, x\in[0.16,0.17]\\-616666.7(t-0.17)^3-3500(t-0.16)^2-126.67(t-0.17)+2.5, x\in[0.17,0.18]\end{cases}$$

$$S=\int_{0.15}^{0.18}v(t)dt=0.0686。$$

quadl (   )

5.1.4.3 二维插值

前面讲述的都是一维插值，即节点为一维变量，插值函数是一元函数（曲线）。若节点是二维的，插值函数就是二元函数，即曲面。如在某区域测量了若干点（节点）的高程（节点值），为了画出较精确的等高线图，就要先插入更多的点（插值点），计算这些点的高程（插值）。

1. 插值节点为网格节点

已知$m\times n$个节点：(x_i, y_j, z_{ij})

$(i=1,2,\cdots,m; j=1,2,\cdots,n)$，且$x_1<\cdots<x_m$；$y_1<\cdots<y_n$。

求点(x,y)处的插值z。

Matlab 中有一些计算二维插值的命令。如

```
z=interp2(x0,y0,z0,x,y,'method')
```

其中 x0, y0 分别为m维和n维向量，表示节点，z0 为$n \times m$维矩阵，表示节点值，x，y 为一维数组，表示插值点，x 与 y 应是方向不同的向量，即一个是行向量，另一个是列向量，z 为矩阵，它的行数为 y 的维数，列数为 x 的维数，表示得到的插值，'method'的用法同上面的一维插值。

如果是三次样条插值，可以使用命令

pp=csape({x0,y0},z0,conds,valconds)， z=fnval(pp,{x,y})

其中 x0，y0 分别为m维和n维向量，z0 为$m \times n$维矩阵，z为矩阵，它的行数为 x 的维数，列数为 y 的维数，表示得到的插值，具体使用方法同一维插值。

例5.3 在一丘陵地带测量高程，x和y方向每隔100米测一个点，得高程如表3，试插值一曲面，确定合适的模型，并由此找出最高点和该点的高程。

max(max(z))

对列求最大

对行求最大

表5.3 高程数据点

x \ y	100	200	300	400	500
100	636	697	624	478	450
200	698	712	630	478	420
300	680	674	598	412	400
400	662	626	552	334	310

2. 插值节点为散乱节点

已知n个节点$(x_i, y_i, z_i)(i = 1, 2, \cdots, n)$，求点$(x, y)$处的插值$z$。

对上述问题，Matlab 中提供了插值函数 griddata，其格式为

ZI = griddata(x,y,z,XI,YI)

其中 x、y、z 均为n维向量，指明所给数据点的横坐标、纵坐标和竖坐标。向量 XI、YI 是给定的网格点的横坐标和纵坐标，返回值 ZI 为网格（XI，YI）处的函数值。XI 与 YI 应是方向不同的向量，即一个是行向量，另一个是列向量。

例 5.4 在某海域测得一些点（x,y）处的水深 z 由表 5.4 给出，在适当的矩形区域内画出海底曲面的图形。

表 5.4 海底高程数据

x	129	140	103.5	88	185.5	195	105	157.5	107.5	77	81	162	162	117.5
y	7.5	141.5	23	147	22.5	137.5	85.5	–6.5	-81	3	56.5	–66.5	84	-33.5
z	4	8	6	8	6	8	8	9	9	8	8	9	4	9

zi=zi1;

zi(isnan(zi1))=zi2(isnan(zi1))

5.2 曲线拟合的线性最小二乘法

5.2.1 线性最小二乘法

曲线拟合问题的提法是，已知一组（二维）数据，即平面上的n个点(x_i, y_i)，$i = 1, 2, \cdots, n$，x_i互不相同，寻求一个函数（曲线）$y = f(x)$，使$f(x)$在某种准则下与所有数据点最为接近，即曲线拟合得最好。

线性最小二乘法是解决曲线拟合最常用的方法，基本思路是，令

$$f(x)=a_1r_1(x)+a_2r_2(x)+\cdots+a_mr_m(x), \tag{5.3}$$

其中$r_k(x)$是事先选定的一组线性无关的函数，a_k是待定系数$(k=1,2,\cdots,m,m<n)$。拟合准则是使y_i，$i=1,2,\cdots,n$，与$f(x_i)$的距离δ_i的平方和最小，称为最小二乘准则。

5.2.1.1 系数a_k的确定

记

$$J(a_1,\cdots,a_m)=\sum_{i=1}^{n}\delta_i^2=\sum_{i=1}^{n}[f(x_i)-y_i]^2\ , \qquad (5.4)$$

为求$a_1,\cdots,a_m$使J达到最小，只需利用极值的必要条件$\frac{\partial J}{\partial a_j}=0(j=1,\cdots,m)$，得到关于$a_1,\cdots,a_m$的线性方程组

$$\sum_{i=1}^{n}r_j(x_i)[\sum_{k=1}^{m}a_k r_k(x_i)-y_i]=0，(j=1,\cdots,m),$$

即

$$\sum_{k=1}^{m}a_k[\sum_{i=1}^{n}r_j(x_i)r_k(x_i)]=\sum_{i=1}^{n}r_j(x_i)y_i\ ,\ (j=1,\cdots,m). \qquad (5.5)$$

记

$$R=\begin{bmatrix} r_1(x_1) & \cdots & r_m(x_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ r_1(x_n) & \cdots & r_m(x_n) \end{bmatrix}_{n\times m},$$

$$A=[a_1,\cdots,a_m]^T,\ Y=[y_1,\cdots,y_n]^T,$$

方程组（5.5）可表为

$$R^T RA = R^T Y. \tag{5.6}$$

当$\{r_1(x),\cdots,r_m(x)\}$线性无关时，R列满秩，$R^T R$可逆，于是方程组（5.6）有唯一解

$$A=(R^T R)^{-1} R^T Y.$$

5.2.1.2 函数$r_k(x)$的选取

面对一组数据$(x_i, y_i), i=1,2,\cdots,n$，用线性最小二乘法作曲线拟合时，首要的也是关键的一步是恰当地选取$r_1(x),\cdots,r_m(x)$。如果通过机理分析，能够知道y与x之间应该有什么样的函数关系，则$r_1(x),\cdots,r_m(x)$容易确定。若无法知道y与x之间的关系，通常可以将数据$(x_i, y_i), i=1,2,\cdots,n$作图，直观地判断应该用什么样的曲线去作拟合。

人们常用的曲线有

(1) 直线 $y=a_1x+a_2$;

(2) 多项式 $y=a_1x^m+\cdots+a_mx+a_{m+1}$ (一般 $m=2,3$, 不宜太高);

(3) 双曲线（一支） $y=\frac{a_1}{x}+a_2$;

(4) 指数曲线 $y=a_1e^{a_2x}$。

对于指数曲线，拟合前需作变量代换，化为对 a_1, a_2 的线性函数。

已知一组数据，用什么样的曲线拟合最好，可以在直观判断的基础上，选几种曲线分别拟合，然后比较，看哪条曲线的最小二乘指标 J 最小。

用Matlab进行数据拟合

实验目的：

1. 了解多项式和非线性曲线拟合命令。

2. 掌握用数学软件求解拟合问题。

用Matlab进行数据拟合

1. 多项式曲线拟合：polyfit.

p=polyfit(x,y,m)

其中, x, y为已知数据点向量, 分别表示横,纵坐标, m为拟合多项式的次数, 结果返回m次拟合多项式系数, 从高次到低次存放在向量p中.

y0=polyval(p,x0)

可求得多项式在x0处的值y0.

例1 已知观测数据点如表所示

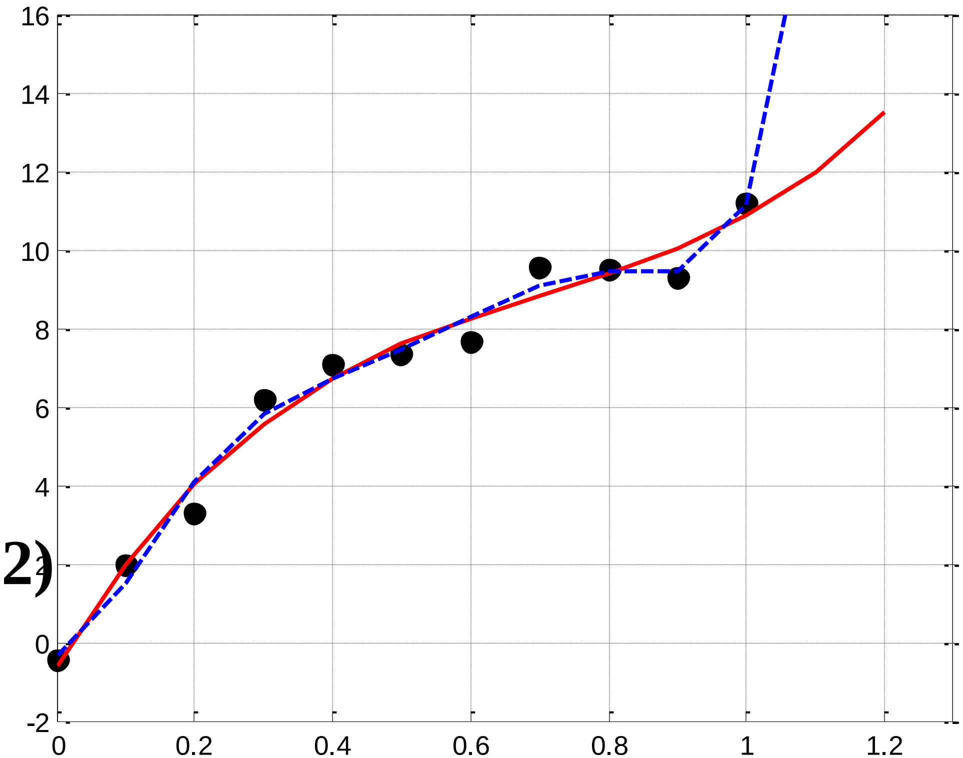
x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
y	-0.447	1.978	3.28	6.16	7.08	7.34	7.66	9.56	9.48	9.3	11.2

分别用3次和6次多项式曲线拟合这些数据点.

编写Matlab程序如下:

```
x=0:0.1:1
y=[-0.447,1.978,3.28,6.16,7.08,7.34,7.66,9.56,9.48,9.3,11.2]
plot(x,y,'k.','markersize',25)
axis([0 1.3 -2 16])
p3=polyfit(x,y,3)
p6=polyfit(x,y,6)
```

```
x=0:0.1:1
y=[-0.447,1.978,3.28,6.16,7.08,7.34,7.66,9.56,9.48,9.3,11.2]
plot(x,y,'k.','markersize',25)
axis([0 1.3 -2 16])
p3=polyfit(x,y,3)
p6=polyfit(x,y,6)

t=0:0.1:1.2
s=polyval(p3,t)
s1=polyval(p6,t)
hold on
plot(t,s,'r-','linewidth',2)
plot(t,s1,'b--','linewidth',2)
grid on
```



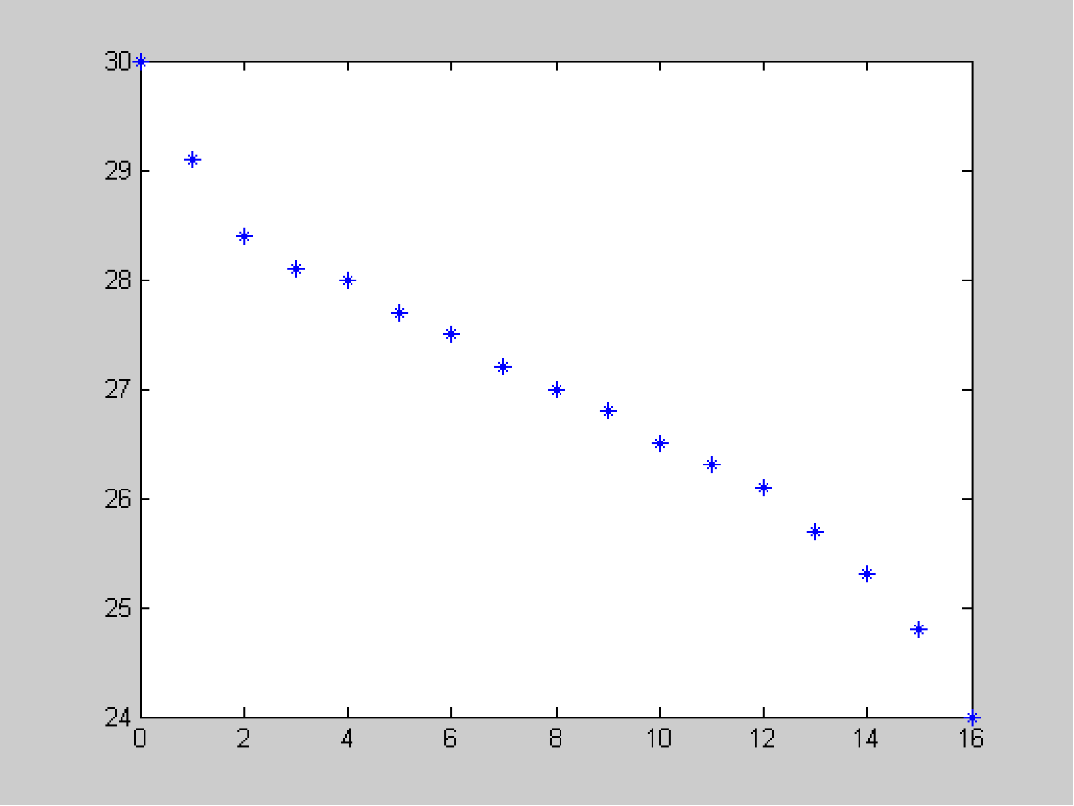
例2 用切削机床进行金属品加工时, 为了适当地调整机床, 需要测定刀具的磨损速度. 在一定的时间测量刀具的厚度, 得数据如表所示:

切削时间 t/h	0	1	2	3	4	5	6	7	8
刀具厚度 y/cm	30.0	29.1	28.4	28.1	28.0	27.7	27.5	27.2	27.0

切削时间 t/h	9	10	11	12	13	14	15	16
刀具厚度 y/cm	26.8	26.5	26.3	26.1	25.7	25.3	24.8	24.0

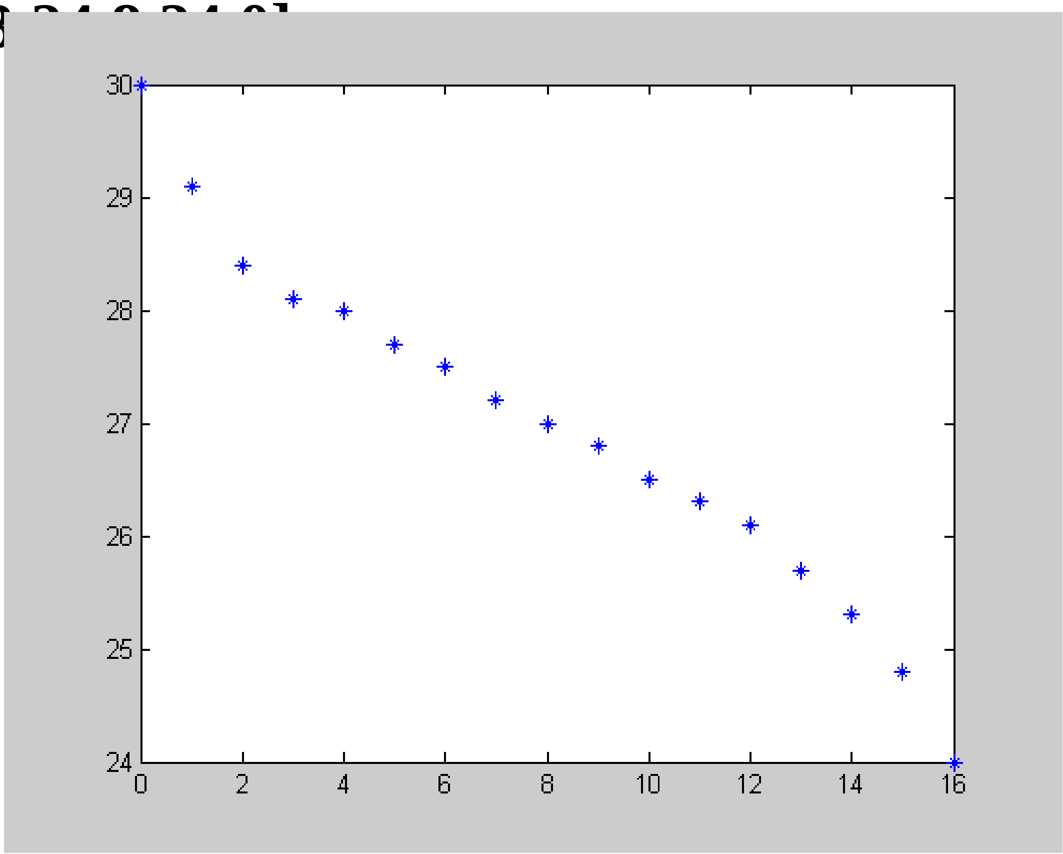
解：描出散点图, 在命令窗口输入：

```
t=[0:1:16]
y=[30.0 29.1 28.4 28.1 28.0 27.7 27.5 27.2 27.0 26.8
26.5 26.3 26.1 25.7 25.3 24.8 24.0]
plot(t,y,'*')
```



解：描出散点图, 在命令窗口输入:

```
t=[0:1:16]
y=[30.0 29.1 28.4 28.1 28.0 27.7 27.5 27.2 27.0 26.8
26.5 26.3 26.1 25.7 25.3 24.8 24.0]
plot(t,y,'*')

a=polyfit(t,y,1)

a =
   -0.3012   29.3804

hold on

y1=-0.3012*t+29.3804

plot(t, y1), hold off
```



例2 用切削机床进行金属品加工时, 为了适当地调整机床, 需要测定刀具的磨损速度. 在一定的时间测量刀具的厚度, 得数据如表所示:

切削时间 t/h	0	1	2	3	4	5	6	7	8
刀具厚度 y/cm	30.0	29.1	28.4	28.1	28.0	27.7	27.5	27.2	27.0

切削时间 t/h	9	10	11	12	13	14	15	16
刀具厚度 y/cm	26.8	26.5	26.3	26.1	25.7	25.3	24.8	24.0

拟合曲线为：$y=-0.3012t+29.3804$

例3 一个15.4cm×30.48cm的混凝土柱在加压实验中的应力-应变关系测试点的数据如表所示

$\sigma/(\mathrm{N/m^2})$	1.55	2.47	2. 93	3. 03	2.89
ε	500×10^{-6}	1000×10^{-6}	1500×10^{-6}	2000×10^{-6}	2375×10^{-6}
$\sigma/\varepsilon/(\mathrm{N/m^2})$	3.103×10^{3}	2.465×10^{3}	1.953×10^{3}	1.517×10^{3}	1.219×10^{3}

已知应力-应变关系可以用一条指数曲线来描述, 即假设

$$\sigma = k_1 \varepsilon e^{-k_2 \varepsilon}$$

式中, σ 表示应力, 单位是 $\mathrm{N/m^2}$; ε表示应变.

已知应力-应变关系可以用一条指数曲线来描述, 即假设

$$\sigma = k_1 \varepsilon e^{-k_2 \varepsilon}$$

式中, σ 表示应力, 单位是 N/m^2; ε表示应变.

解 选取**指数函数**作拟合时, 在拟合前需作变量代换,

化为 k_1, k_2 的线性函数.

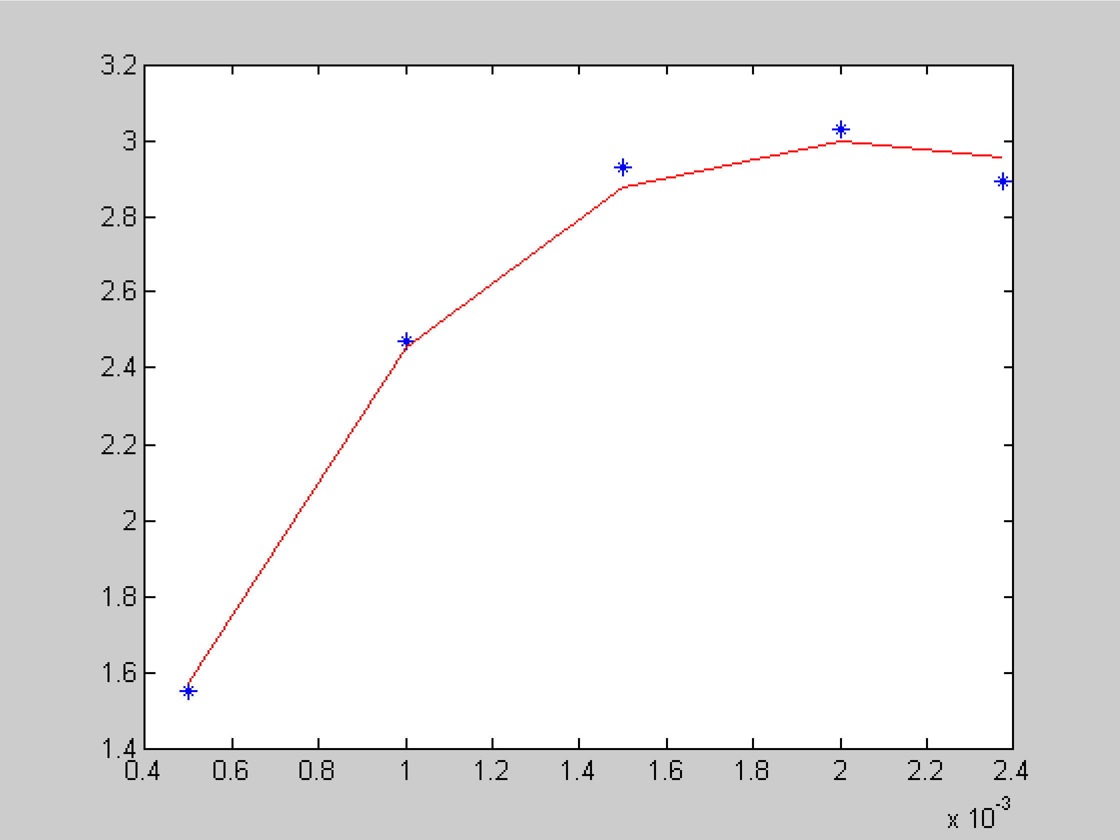
于是, $\ln \dfrac{\sigma}{\varepsilon} = \ln k_1 - k_2 \varepsilon$

令 $z = \ln \dfrac{\sigma}{\varepsilon},\ a_0 = -k_2,\ a_1 = \ln k_1$

即 $z = a_0 \varepsilon + a_1$

在命令窗口输入:

```
x=[500*1.0e-6 1000*1.0e-6 1500*1.0e-6 2000*1.0e-6 2375*1.0e-6];
y=[3.103*1.0e+3 2.465*1.0e+3 1.953*1.0e+3 1.517*1.0e+3
1.219*1.0e+3];
z=log(y);
a=polyfit(x,z,1);
a0=a(1,1);
k1=exp(a(1,2));
w=[1.55 2.47 2.93 3.03 2
plot(x,w,'*')
hold on
y1=k1*x.*exp( a0*x);
plot(x,y1,'r-')
```



已知应力-应变关系可以用一条指数曲线来描述, 即假设

$$\sigma = k_1 \varepsilon e^{-k_2 \varepsilon}$$

式中, σ 表示应力, 单位是 N/m^2; ε表示应变.

令 $z = \ln\dfrac{\sigma}{\varepsilon}$, $a_0 = -k_2$, $a_1 = \ln k_1$, 则 $z = a_0\varepsilon + a_1$

求得 $a_0 = -k_2 = -494.5209$, $a_1 = \ln k_1 = 8.3009$,

于是 $k_1 = 4.0275\times 10^3$, $k_2 = 494.5209$

拟合曲线为: $\sigma = 4.0275\times 10^3 \varepsilon e^{-494.5209\varepsilon}$

在实际应用中常见的拟合曲线有:

直线 $y = a_0 x + a_1$

多项式 $y = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_n$ 一般 n=2, 3, 不宜过高.

双曲线(一支) $y = \dfrac{a_0}{x} + a_1$

指数曲线 $y = ae^{bx}$

2. 非线性曲线拟合：lsqcurvefit.

x=lsqcurvefit(fun, x0, xdata, ydata)

[x, resnorm]=lsqcurvefit(fun, x0, xdata, ydata)

功能: 根据给定的数据 xdata, ydata (对应点的横, 纵坐标), 按函数文件 fun 给定的函数, 以x0为初值作最小二乘拟合, 返回函数 fun中的系数向量x和残差的平方和resnorm.

例4 已知观测数据点如表所示

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
y	3.1	3.27	3.81	4.5	5.18	6	7.05	8.56	9.69	11.25	13.17

求三个参数 a, b, c的值, 使得曲线 $f(x)=ae^x+bx^2+cx^3$ 与已知数据点在最小二乘意义上充分接近.

首先编写存储拟合函数的函数文件.

```
function  f=nihehanshu(x,xdata)
f=x(1)*exp(xdata)+x(2)*xdata.^2+x(3)*xdata.^3
```

保存为文件 nihehanshu.m

例4 已知观测数据点如表所示

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
y	3.1	3.27	3.81	4.5	5.18	6	7.05	8.56	9.69	11.25	13.17

求三个参数 a, b, c的值, 使得曲线 $f(x)=ae^{x}+bx^{2}+cx^{3}$ 与已知数据点在最小二乘意义上充分接近.

编写下面的程序调用拟合函数.

```
xdata=0:0.1:1;
ydata=[3.1,3.27,3.81,4.5,5.18,6,7.05,8.56,9.69,11.25,13.17];
x0=[0,0,0];
[x,resnorm]=lsqcurvefit(@nihehanshu,x0,xdata,ydata)
```

编写下面的程序调用拟合函数.

```
xdata=0:0.1:1;
ydata=[3.1,3.27,3.81,4.5,5.18,6,7.05,8.56,9.69,11.25,13.17];
x0=[0,0,0];
[x,resnorm]=lsqcurvefit(@nihehanshu,x0,xdata,ydata)
```

程序运行后显示

```
x =
   3.0022    4.0304    0.9404

resnorm =
   0.0912
```

例4 已知观测数据点如表所示

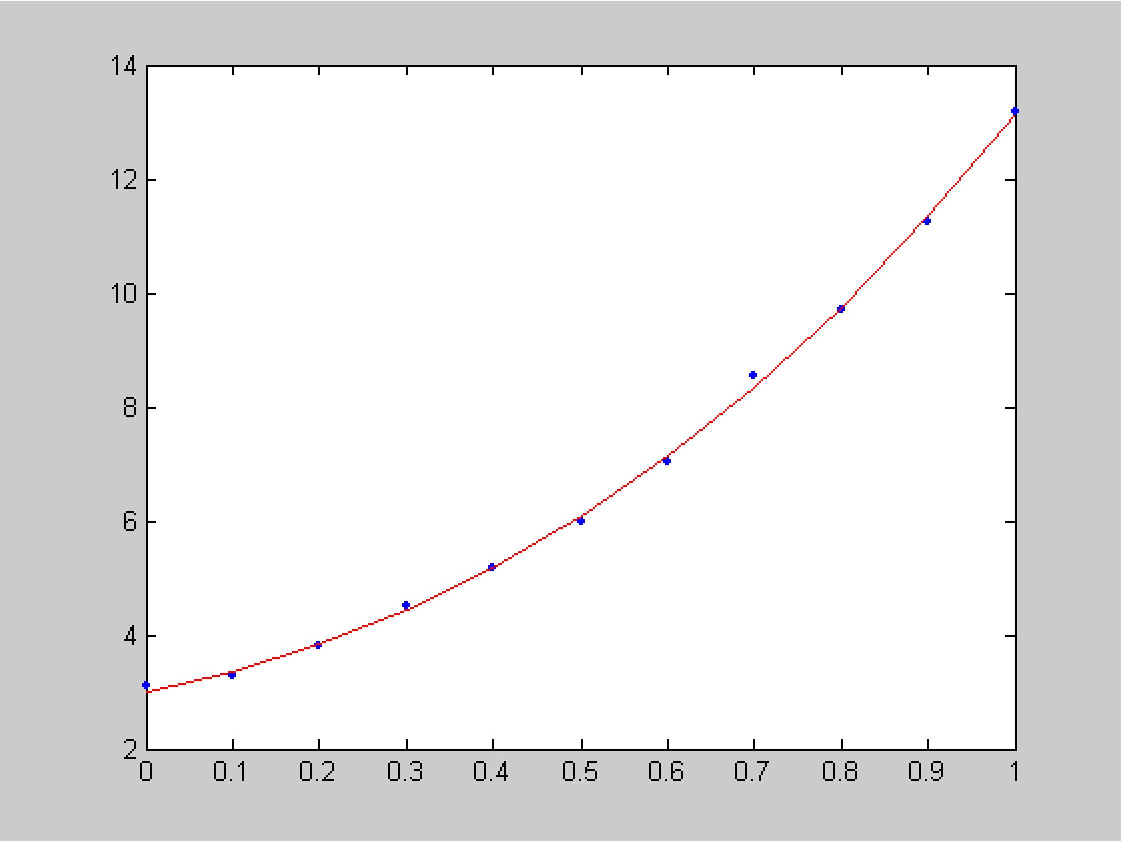
x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
y	3.1	3.27	3.81	4.5	5.18	6	7.05	8.56	9.69	11.25	13.17

求三个参数 a, b, c的值, 使得曲线 $f(x)=ae^x+bx^2+cx^3$ 与已知数据点在最小二乘意义上充分接近.

说明: 最小二乘意义上的最佳拟合函数为

$$f(x)= 3e^x+ 4.03x^2 + 0.94\, x^3.$$

此时的残差是: 0.0912.



拟合函数为：$f(x) = 3e^x + 4.03x^2 + 0.94x^3$.

5.2.2 最小二乘法的 Matlab 实现

5.2.2.1 解方程组方法

在上面的记号下，

$$J(a_1,\cdots,a_m)=\| RA-Y \|^2.$$

Matlab 中的线性最小二乘的标准型为

$$\underset{A}{\text{Min}} \ \left\| RA-Y \right\|_2^2,$$

命令为 $A=R\backslash Y$。

例 5.6 某乡镇企业 1990-1996 年的生产利润如表 5.6。

表 5.6 乡镇企业的利润表

年份	1990	1991	1992	1993	1994	1995	1996
利润(万元)	70	122	144	152	174	196	202

试预测 1997 年和 1998 年的利润。

例 5.5　用最小二乘法求一个形如 $y = a + bx^2$ 的经验公式，使它与表 5.5 所示的数据拟合。

表 5.5　拟合数据表

x	19	25	31	38	44
y	19.0	32.3	49.0	73.3	97.8

5.2.2.2 多项式拟合方法

如果取$\{r_1(x),\cdots,r_{m+1}(x)\}=\{1,x,\cdots,x^m\}$，即用$m$次多项式拟合给定数据，Matlab 中有现成的函数

a=polyfit(x0,y0,m)

其中输入参数 x0,y0 为要拟合的数据，m 为拟合多项式的次数，输出参数 a 为拟合多项式 y=a(1)x^m+…+a(m)x+a(m+1)的系数向量 a=[a(1), …, a(m), a(m+1)]。

多项式在 x 处的值 y 可用下面的函数计算

y=polyval(a,x)。

解　作已知数据的的散点图，发现该乡镇企业的年生产利润几乎直线上升。因此，我们可以用$y=a_1x+a_0$作为拟合函数来预测该乡镇企业未来的年利润。

求得一次多项式 $y=a_1x+a_0$ 的系数 $a_1=21$，$a_0=-4.0705\times10^4$，1997 年的生产利润 y97=233.4286，1998 年的生产利润 y98=253.9286。

5.3 最小二乘优化

在无约束最优化问题中，有些重要的特殊情形，比如目标函数由若干个函数的平方和构成。这类函数一般可以写成

$$F(x)=\sum_{i=1}^{m} f_i^2(x), x\in R^n,$$

其中 $x=[x_1,\cdots,x_n]^T$，一般假设 $m\geq n$。把极小化这类函数的问题

$$\min \quad F(x)=\sum_{i=1}^{m} f_i^2(x)$$

称为最小二乘优化问题。

最小二乘优化是一类比较特殊的优化问题，在处理这类问题时，Matlab 也提供了一些强大的函数。在 Matlab 优化工具箱中，用于求解最小二乘优化问题的函数有 lsqlin、lsqcurvefit、lsqnonlin、lsqnonneg，下面介绍这些函数的用法。

5.3.1 lsqlin 函数

求解 $$\min_x \frac{1}{2}\|C\cdot x-d\|_2^2,$$

$$\text{s.t.}\quad \begin{cases} A\cdot x\le b, \\ Aeq\cdot x=beq, \\ lb\le x\le ub, \end{cases}$$

其中C,A,Aeq为矩阵，d,b,beq,lb,ub,x为向量。

Matlab 中的函数为

x=lsqlin(C,d,A,b,Aeq,beq,lb,ub,x0)

例 5.7　用 lsqlin 命令求解例 5.5。

5.3.2 lsqcurvefit 函数

给定输入输出数列 $xdata, ydata$，求参量 x，使得

$$\min_{x} \frac{1}{2}\|F(x,xdata)-ydata\|_2^2=\frac{1}{2}\sum_i F(x,xdata_i)-ydata_i{}^{2}.$$

Matlab 中的函数为

x=lsqcurvefit(fun,x0,xdata,ydata,lb,ub,options)

其中 fun 是定义函数 $F(x,xdata)$ 的 M 文件。

例 5.8 用表 5.7 中的观测数据，拟合函数 $y = e^{-k_1 x_1}\sin(k_2 x_2) + x_3^2$ 中的参数 k_1, k_2。

表 5.7 已知观测数据

序号	$y(kg)$	$x_1(cm^2)$	$x_2(kg)$	$x_3(kg)$	序号	$y(kg)$	$x_1(cm^2)$	$x_2(kg)$	$x_3(kg)$
1	15.02	23.73	5.49	1.21	14	15.94	23.52	5.18	1.98
2	12.62	22.34	4.32	1.35	15	14.33	21.86	4.86	1.59
3	14.86	28.84	5.04	1.92	16	15.11	28.95	5.18	1.37
4	13.98	27.67	4.72	1.49	17	13.81	24.53	4.88	1.39
5	15.91	20.83	5.35	1.56	18	15.58	27.65	5.02	1.66
6	12.47	22.27	4.27	1.50	19	15.85	27.29	5.55	1.70
7	15.80	27.57	5.25	1.85	20	15.28	29.07	5.26	1.82
8	14.32	28.01	4.62	1.51	21	16.40	32.47	5.18	1.75
9	13.76	24.79	4.42	1.46	22	15.02	29.65	5.08	1.70
10	15.18	28.96	5.30	1.66	23	15.73	22.11	4.90	1.81
11	14.20	25.77	4.87	1.64	24	14.75	22.43	4.65	1.82
12	17.07	23.17	5.80	1.90	25	14.35	20.04	5.08	1.53
13	15.40	28.57	5.22	1.66					

例 5.9 用最小二乘法拟合 $y=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ 中的未知参数 μ,σ，其中已知数据值 x_i,y_i（$i=1,2,\cdots,n$）分别放在 Matlab 数据文件 data3.mat 中的 x0 和 y0 中，这里的 data3.mat 是由如下 Matlab 程序产生的。

x0=-10:0.01:10;

y0=normpdf(x0,0,1); %计算标准正态分布密度函数在 x0 处的取值

save data2 x0 y0 %把 x0，y0 保存到文件 data2.mat 中

5.3.3 lsqnonlin 函数

已知函数向量$F(x)=[f_1(x),\cdots,f_k(x)]^T$，求$x$使得

$$\min_x \frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2,$$

Matlab 中的函数为

x=lsqnonlin(fun,x0,lb,ub,options)

其中 fun 是定义向量函数$F(x)$的 M 文件。

例 5.10　用 lsqnonlin 函数求解例 5.9。

5.3.4 lsqnonneg 函数

求解非负的 x，使得满足 $\min\limits_{x}\frac{1}{2}\|Cx-d\|_2^2$.

Matlab 中的函数为

x=lsqnonneg(C,d,options).

例 5.11 已知$C=\begin{bmatrix}0.0372 & 0.2869\\ 0.6861 & 0.7071\\ 0.6233 & 0.6245\\ 0.6344 & 0.6170\end{bmatrix}$, $d=\begin{bmatrix}0.8587\\ 0.1781\\ 0.0747\\ 0.8405\end{bmatrix}$,

求$x=[x_1,x_2]^T\,(x\geq 0)$满足$\min\limits_x \frac{1}{2}\|Cx-d\|_2^2$.

5.3.5 Matlab 的曲线拟合用户图形界面解法

Matlab 工具箱提供了命令 cftool, 该命令给出了一维数据拟合的交互式环境。具体执行步骤如下

（1）把数据导入到工作空间;

（2）运行 cftool，打开用户图形界面窗口;

（3）对数据进行预处理;

（4）选择适当的模型进行拟合;

（5）生成一些相关的统计量，并进行预测。

可以通过帮助（运行 doc cftool）熟悉该命令的使用细节。

5.4 曲线拟合与函数逼近

前面讲的曲线拟合是已知一组离散数据 $\{(x_i, y_i), i=1,\cdots,n\}$，选择一个较简单的函数 $f(x)$，如多项式，在一定准则如最小二乘准则下，最接近这些数据。

如果已知一个较为复杂的连续函数 $y(x), x\in[a,b]$, 要求选择一个较简单的函数 $f(x)$，在一定准则下最接近 $y(x)$，就是所谓函数逼近。

与曲线拟合的最小二乘准则相对应，函数逼近常用的一种准则是最小平方逼近，即

$$J=\int_a^b [f(x)-y(x)]^2 dx \tag{5.7}$$

达到最小。与曲线拟合一样，选一组函数$\{r_k(x), k=1,\cdots,m\}$构造$f(x)$，即令

$$f(x)=a_1 r_1(x)+\cdots+a_m r_m(x),$$

代入（5.7）式，求$a_1,\cdots,a_m$使J达到极小。

利用极值必要条件可得

$$\begin{bmatrix} (r_1,r_1) & \cdots & (r_1,r_m) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (r_m,r_1) & \cdots & (r_m,r_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (y,r_1) \\ \vdots \\ (y,r_m) \end{bmatrix}, \qquad (5.8)$$

这里$(g,h)=\int_a^b g(x)h(x)dx$。当方程组（5.8）的系数矩阵非奇异时，有唯一解。

最简单的当然是用多项式逼近函数，即选$r_1(x)=1$，$r_2(x)=x$，$r_3(x)=x^2$，…。并且如果能使$\int_a^b r_i(x)r_j(x)dx=0$，$(i\neq j)$，方程组（5.8）的系数矩阵将是对角阵，计算大大简化。满足这种性质的多项式称正交多项式。

勒让得（Legendre）多项式是在[−1,1]区间上的正交多项式，它的表达式为

$$P_0(x)=1,\quad P_k(x)=\frac{1}{2^k k!}\frac{d^k}{dx^k}(x^2-1)^k, k=1,2,\cdots.$$

可以证明

$$\int_{-1}^{1}P_i(x)P_j(x)dx=\begin{cases}0, & i\neq j,\\ \dfrac{2}{2i+1}, & i=j,\end{cases}$$

$$P_{k+1}(x)=\frac{2k+1}{k+1}xP_k(x)-\frac{k}{k+1}P_{k-1}(x),\quad k=1,2,\cdots.$$

常用的正交多项式还有第一类切比雪夫（Chebyshev）多项式

$$T_n(x)=\cos(n\arccos x),\quad (x\in[-1,1], n=0,1,2,\cdots)$$

和拉盖尔（Laguerre）多项式

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}),\ (x\in[0,+\infty), n=0,1,2,\cdots).$$

例 5.12 求 $f(x)=\cos x, x\in\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right]$在 $H=\mathrm{Span}\{1,x^2,x^4\}$中的最佳平方逼近多项式。