

初等数据处理方法

谭忠



当今应用



源头问题



初等数据分析思想



目录 CONTENTS

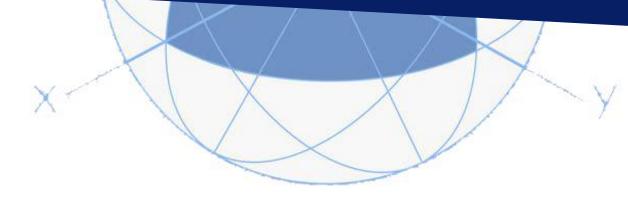


案例分析





源头问题与当今应用





函数概念的萌芽,可以追溯到古代对图形轨迹的研究,随着社会的发展,人们开始逐渐发现,某些量之间存在着一种规律:一个或几个量的变化会引起另一个量的变化,这从数学本身的运算中反映出来的量与量之间的相互依赖关系,就是函数概念的萌芽。

- (1) 函数的力学来源
- (2) 1637 年笛卡尔的《几何学》中,第一次涉及到变量,也引入了函数思想



- (3) 英国数学家格雷果里在 1667 年给出的函数的定义,被认为是函数解析定义的开始
- (4) 公认的最早提出函数概念的,是 17 世纪德国数学家莱布尼茨。



为了得到变量之间的函数关系,我们需要采集数据,但如何采集数据、采集什么数据、怎样分析数据等问题就成为越来越令人瞩目的问题。

由此产生建立变量之间关系的三种基本方法:

观察法:利用好变量之间的比例关系

拟合方法、插值方法

统称为**初等数据分析方法**



在现实问题或竞赛命题中,有的提供数据.

例 2.1 2004 年全国大学生数学建模竞赛题"奥运场馆周围临时商店的建设问题",数据给了很多,这些数据是规划局在前三次亚运会期间采集的数据.采集人大概是"志愿者"之类的,完全不懂应该采集什么数据才能对解决这类问题有用,而将所有数据记录下来.



有的根本不给数据.

例 2.2 2010 年全国大学生数学建模竞赛题"试就某个或某几个方面评估上海世博会的影响力"。首先你必须确定从哪个方面评估,什么数据最能体现这个问题的本质,然后去查找相关数据。有的问题问你需要什么数据。

例 2.3 2011 年全国大学生数学建模竞赛 A 题《重金属的污染问题》,最后一问"需要什么数据,我们可以确定城市土质变化的趋势?



有的问题需要数据,但问题中不仅没有给出数据,就连采集什么数据也没有说明,需要你自己判明应该采集什么数据才能说明这件事情.

例 2.4 2015 年国赛 B 题 "互联网 +" 时代的出租车资源配置. "打车难"是人们关注的一个社会热点问题. 随着"互联网 +" 时代的到来,有多家公司依托移动互联网建立了打车软件服务平台,实现了乘客与出租车司机之间的信息互通,同时推出了多种出租车的补贴方案. 问题是搜集相关数据,建立数学模型研究如下问题:



- (1) 试建立合理的指标,并分析不同时空出租车资源的"供求匹配"程度
- (2) 分析各公司的出租车补贴方案是否对"缓解打车难"有帮助?
- (3) 如果要创建一个新的打车软件服务平台,你们将设计什么样的补贴方案,并论证其合理性.

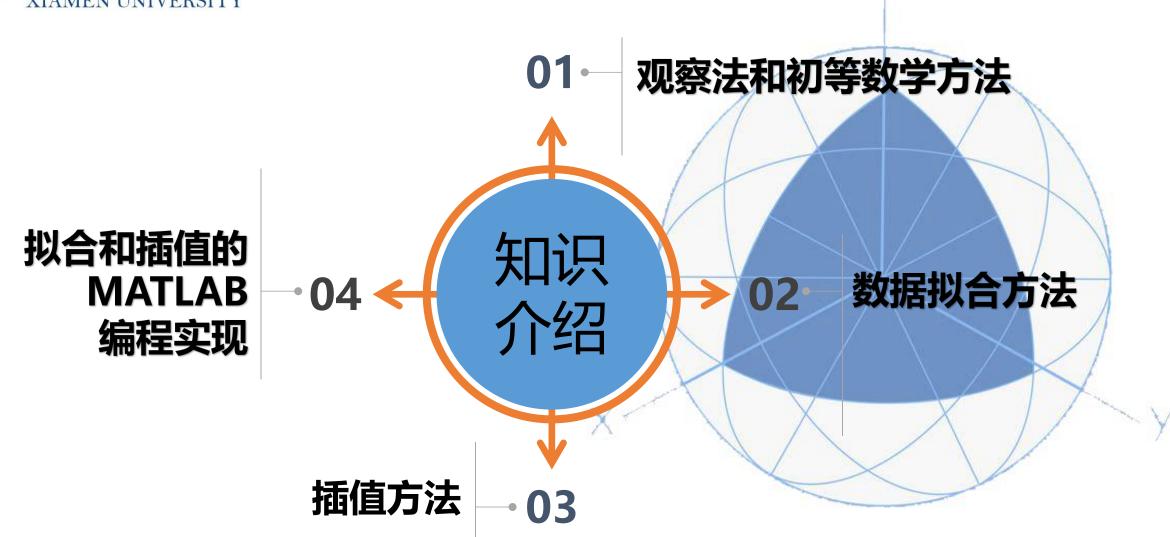
另外,无论我们怎样精心设计并极其细心地进行试验,我们仍需在 拟合模型前评估数据的精确性.数据是如何收集的?收集过程中测 量设备的精度如何?有没有疑问的点等。





初等数据分析的思想与建模方法







2.2初等数据分析思想与建模方法

在分析一个数据集合时,可能遇到的问题是:

- (1) 根据收集的数据进行建模.
- (2) 按照选出的一个或多个模型(函数) 类型对数据进行拟合.
- (3) 从一些已经拟合的模型(函数)类型中选取最合适的.例如,判断用最佳拟合指数模型是否比用最佳多项式模型要好. 首先,我们用观察法和初等数学方法进行建模:



2.2.1 观察法和初等数学方法

一、通过大量数据,利用变量之间的比例性质,得到自然规律

采集数据从远古就开始,可以追溯到 7000 年前的尼罗河沿岸居民对潮水的数据记录.到文艺复兴时,人们已经开始应用数据分析的方法处理问题了,最简单的方式就是数据本身呈现比例关系. 17-18 世纪应用大量观测数据还建立了许多理想状态下的物理规律.



例 2.5 (Kepler(开普勒)第三定律)

开普勒曾经帮助第谷 (Tycho Brahe)收集了 13 年有关火星的相对运动的观察资料. 到 1609 年开普勒已经形成了他的头两条定律:

- a)每个行星都沿一条椭圆轨道运行,太阳在该椭圆的一个焦点处.
- b)对每个行星来说,在相等的时间里,该行星和太阳的联线扫过相等的面积.

开普勒花了许多年来验证并形成了第三定律($T = cR^{\frac{1}{2}}$,其中 T 是周期 (天数)而 R 是行星到太阳的平均距离),他建立了轨道周期与从太阳到行星的平均距离之间的关系. 表 2.1 中的数据来自 1993 年的世界年鉴。



表 2.1

行星	周期 (天数)	平均距离(百万英里)
水星	88.0	36
金星	224.7	67.25
地球	365.3	93
火星	687.0	141.75
木星	4331.8	483.80
土星	10 760.0	887.97
天王星	30 684.0	1764.50
海王星	60 1 88.3	2791.05
冥王星	90 4 66.8	3653.90

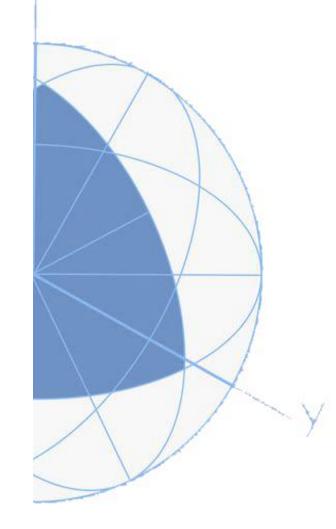
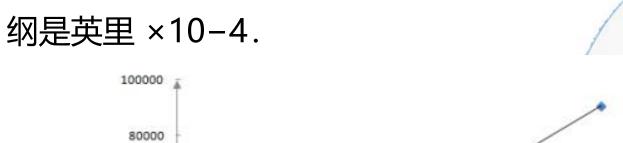
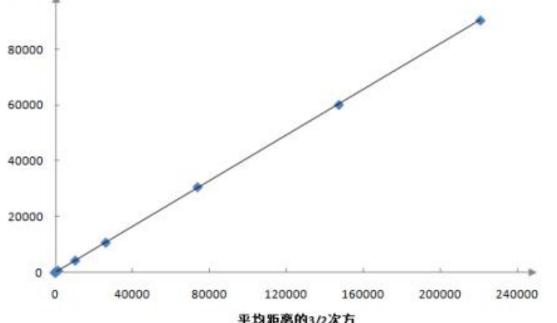




图 2.1 画出了周期对平均距离的 3/2 次方的图形. 该图形近 似于一条通过原点的直线. 纵坐标是周期(天数), 横坐标量



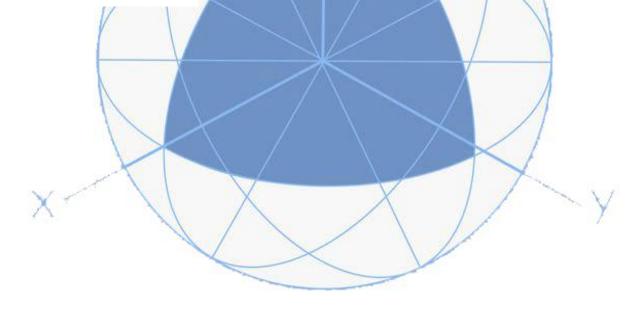




任取过原点的这条直线上的两点,很容易估计其斜率(比例常数):

斜率 =
$$\frac{90466.8 - 88}{220869.1 - 216} \approx 0.410$$

估计其模型为 $T = 0.410R^{\frac{3}{2}}$.





例 2.6 (波义耳定律 (Boyle's law) 一定量的理想气体的压强

P、体积 V 和绝对温度T 之间具有关系

$$P = \frac{RT}{V}$$

R 是普适气体常量,即压强 P 的变化同时依赖于 V 和 T.

例 2.7 (虎克定律 (Hooke)1678 年) 一个线性弹簧,考查它的

形变 (x) 与弹力 (F) 之间的关系, 也可用数学模型

$$F = -Kx^{\times}$$

来表示它们之间的规律,负号表示形变的方向与弹力方向相反。



例 2.8 (牛顿 (Newton)万有引力公式 1687 年) 考虑两个物体之间的相互作用时,对于它们之同的相互吸引这种属性,可用数学式子

$$F = k \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

来表示吸引力与其他因素之间的规律.这个数学模型及其理论是基于大量天文观测数据由牛顿在17世纪创立的.



例 2.9 (欧姆定律 (Ohm's law)1826 年) 在同一电路中, 通过某一导体的电流跟这段导体两端的电压成正比, 跟这段导体的电阻成反比, 这就是欧姆定律

$$I = \frac{U}{R}, \quad U = IR, \quad R = \frac{U}{I}$$

公式中物理量的单位: I: (电流) 的单位是安培 (A) 、U: (电

压)的单位是伏特 (V)、R: (电阻)的单位是欧姆 (Ω)



二、通过观察,利用初等数学的知识建立数学模型

例 2.11 半径为 1 的轮子置于平地上, 轮子边缘一点 A 与地面相接触。求当轮子滚动时, A点运动的函数表示。

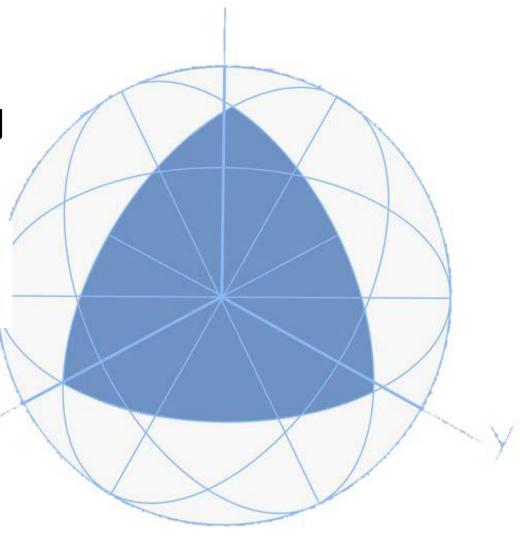
解 如图 2.2 建立坐标系 Oxy, 设轮子滚动时 A 点的坐标为 A(x, y), 当轮子滚动到 P 点时, 线段 OP 的长度等于圆弧 AP 的长度, 也等于轮子转过的角度 (以弧度为单位).



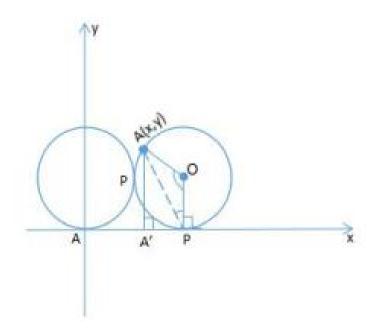
令参数 t 表示轮子转过的角度,于是得到

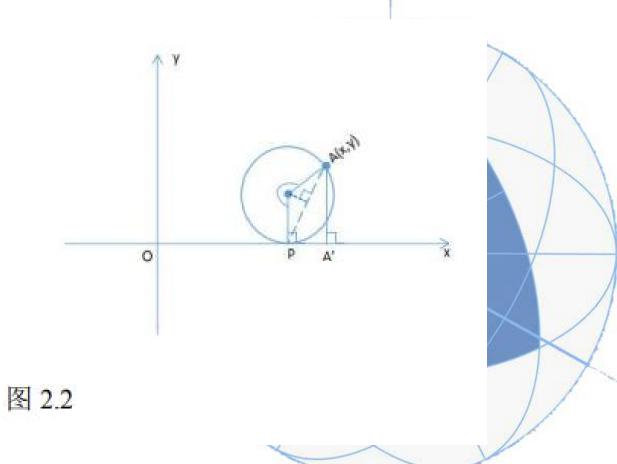
$$\begin{cases} x = t - sint, \\ y = 1 - cost. \end{cases}$$

此即为旋轮线的参数表示。











- 例 2.13 一船由甲地逆水匀速行驶到乙地, 甲乙两地相距 s (千米), 水速为常数 p (千米/时), 船在静水中的最大速度为 q (千米/时, 其中 q > p), 已知船每小时的燃料费用 (以元为单位)与船在水中的速度 v (千米/小时) 的平方成正比, 比例系数为 k.
- (1)把全程燃料费用 y (元) 表示为船在静水中的速度 v (千米/小时) 的函数,并指出这个函数的定义域;
- (2)为了使全程燃料费用最少,船的实际前进速度应为多少?



解(1)由题意知,船由甲地逆水匀速行驶到乙地,且水速 p,而船在静水中的速度 v. 因此,船在实际前进时的速度 v - p 为变量,再由船在静水中的最大速度 q 为常量,知 v 的范围是 p < v < q,由此,船由甲地均匀行驶到乙地所用的时间为 由于每小时燃料费用为 $y = kv^2$ (其中 k 为常数). 因此,所求全程燃料费用函数为:

$$y = ks \cdot \frac{v^2}{v - p}, v \in (p, q)$$



(2) 将船的实际前进速度 v - p 用 m 表示,则由 v ∈ (p, q) 可知,

 $m \in (0, p-q)$ 且v = p+m,得到

$$y = ks \cdot \frac{(m+p)^2}{m} = ks(m + \frac{p^2}{m} + 2p)$$

由题意可知, k, s, m 都是正数, 由算术平均值不小于几何平均值得:

$$y \ge ks(2p + 2p) = 4ksp$$

当且仅当 $m = \frac{p^2}{m}$,即 m = p 时取等号.





- ① 当 p ∈ (0, q p], 0 < p ≤ q p, 0 < 2p ≤ q, 即 q ≥ 2p, 即当 m = p 时, 全程燃料费用 y最小
- ② 当 $p \notin (0, q p]$, 即 q < 2p, 设:

$$y = ks \cdot \frac{(m+p)^2}{m} = f(m)$$

先证明当 $m \in (0, q - p]$ 时,全程燃料费用函数 y = f(m) 是减函数.



设0<m1<m2<q-p,有

$$f(m_1) - f(m_2) = ks \cdot \frac{(m_1 + p)^2}{m_1} - ks \cdot \frac{(m_2 + p)^2}{m_2}$$

$$= \frac{ks}{m_1 m_2} (m_1^2 m_2 + p^2 m_2 - m_1 m_2^2 - p^2 m_1)$$

$$= \frac{ks}{m_1 m_2} (m_2 - m_1) (p^2 - m_1 m_2)$$

所以 f(m1) > f(m2). 故 y = f(m) 在区间 (0, p - q) 上是减函数.



当 q < 2p 时有 f(m) > f(p - q), 当且仅当 m = p - q 时取等号, 即当 m = p - q 时全程燃料费用最少.

综上所述,为使全程燃料费用最少,当 $q \ge 2p$ 时,船的实际前进速度应为 p (千米/小时); 当 q < 2p 时,船的实际前进速度应为 q - p (千米/小时).



例 2.14 市场均衡问题 微观经济学认为,商品的价格是由其供需关系决定的.如果市场上某种商品的价格使得该种商品的总需求等于总供给,则称这一商品市场达到均衡,这时的价格称为均衡价格,在此价格下,商品的供给量(也就是需求量)称为均衡数量。

解 首先建立供需与价格关系的数学模型.对于一般商品而言,市场对该种商品的需求量总是随着价格的上扬而有所下降,即商品的需求量 Qd 是价格 P 的递减函数,记为 $Q_a(P)$.



但是,生产厂商的积极性会随着价格的上扬而上升,即商品的供应量 Qs 是价格 P 的递增函数,记为 $Q_s(P)$.

因此,经济学中需求和供给函数模型最简单的是线性函数分别为

$$Q_d(P) = -aP + b$$

$$Q_s(P) = cP - d$$

其中 a, b, c, d 均为非负常数。显然 $Q_a(P)$ 和 $Q_s(P)$ 分别是 P 的 递减和递增函数.



注意到当 P = 0 时, Qd = b, 即当该商品为免费时的需求量为 b. 因此, b 称为社会极大需求量. 而当 Qs(P) = cP - d = 0 时, 可解得 P = d/c, 即当价格为 d/c 时, 该商品的产量为 0, 即d/c 为生产商能够承受的最低价格.

所谓均衡价格, 就是使得 Qd(P) = Qs(P) 的价格 P. 由 Qd(P) 和

Qs(P)的表达式,应有

$$-aP + b = cP - d$$

由此解得均衡价格

$$\overline{P} = rac{b+d}{a+c}$$

和相应的均衡供求量

$$\overline{Q} = \frac{cb-ad}{a+c}$$

这就解决了均衡价格的问题。

7

在经济学中还有一些更加复杂的非线性模型. 比较典型的需求函数模型有

$$Q_d(P) = -aP^2 + b$$

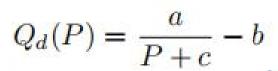
$$Q_d(P) = be^{-aP}$$

$$Q_d(P) = -a\sqrt{P} + b$$

它们分别称为二次函数模型、指数函数模型和根式函数模型



另外还有形如



的分式函数模型. 供给与价格关系的函数模型还有分式函数模型

$$Q_d(P) = \frac{aP - b}{-cP + d}$$

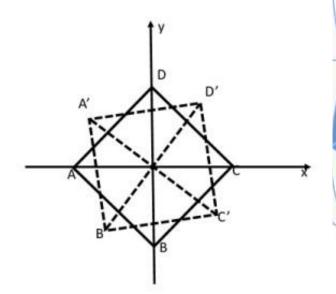
以上各模型中的 a, b, c, d 均为非负常数.



例 2.17 由于地面凹凸不平,我们很难将椅子一次放稳,由此提出

如下问题:将4条腿长相同的方椅子放在不平的地上,怎样才能

放平?如何才能把它抽象成数学问题?





问题分析

假定椅子中心不动,每条腿的着地点视为几何上的点,用 A、B、C、D 表示,把 AC 和 BD连线看做坐标系中的 x 轴和 y 轴, 把转动椅子看做坐标的旋转,如图 2.3.

用 θ 表示对角线 AC 转动后与初始位置 x 轴正向的夹角. 设 $g(\theta)$ 表示 A, C 两腿旋转 θ 角度后与地面距离之和. $f(\theta)$ 表示 B, D 两腿旋转 θ 角度后与地面距离之和. 当地面形成的曲面为连续函数时, $f(\theta)$, $g(\theta)$ 皆为连续函数. 因为三条腿总能同时着地,即对任意 θ , 总有 $f(\theta)$ · $g(\theta)$ = 0.



不妨设初始位置 $\theta = 0$ 时 $g(\theta) = 0$, $f(\theta) > 0$, 于是问题转化为: 是否存在一个 θ_0 , 使 $f(\theta_0) = g(\theta_0) = 0$.

这样椅子问题就抽象成如下数学问题: 已知 $f(\theta)$, $g(\theta)$ 连续, g(0) = 0, f(0) > 0, 且对任意的 θ 都有 $f(\theta)$, $g(\theta) = 0$. 求证: 存在 θ_0 , 使得

$$f(\theta_0) = g(\theta_0) = 0.$$

数学问题的证明: \diamondsuit $h(\theta) = g(\theta) - f(\theta)$, $\mathbb{Q}h(0) = g(0) - f(0) < 0$ 将椅子转动 $\frac{\pi}{2}$, 即将 AC 与 BD 位置互换, $\mathbb{Q}h(0) = g(0) - f(0) < 0$



$$h(\frac{\pi}{2}) = g(\frac{\pi}{2}) - f(\frac{\pi}{2}) > 0.$$

而 $h(\theta)$ 是连续函数,根据连续函数的零点定理知必存在 $\theta_0 \in (0, \frac{\pi}{2})$,使得 $h(\theta_0) = 0$,即 $g(\theta_0) = f(\theta_0)$;

又由条件对任意 θ ,恒有 $f(\theta) \cdot g(\theta) = 0$,所以 $g(\theta_0) = f(\theta_0) = 0$;即存在 θ_0 方向,四条腿能同时着地,所以椅子问题的答案是:如果地面为光滑曲面,椅子中心不动最多转动 $\frac{\pi}{2}$ 角度,则四条腿一定可以同时着地。



2.2.2 数据拟合方法

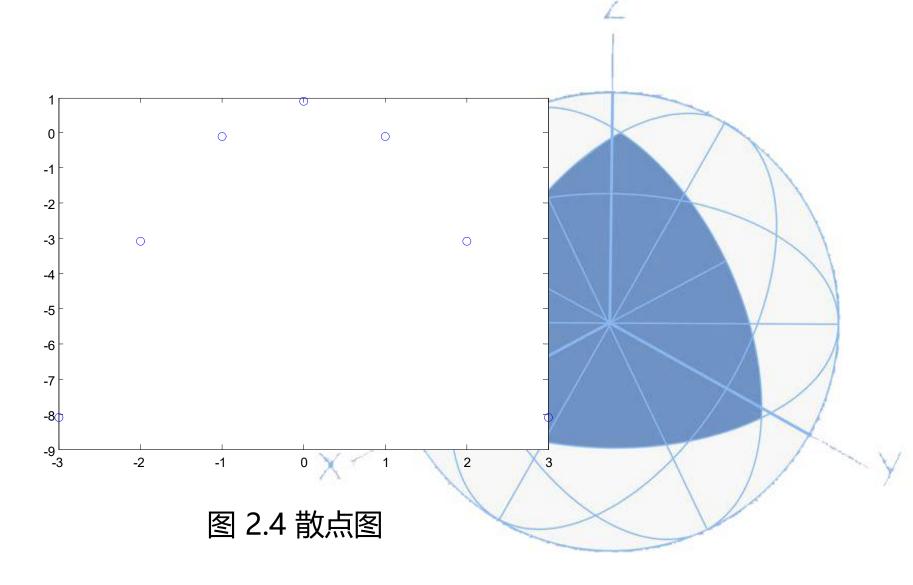
一、源头问题

有时,我们仅仅有变量之间的离散图,比如实验测得如下一列数 据

X	-3	-2	-1	0	1	2	3
Y	-8.0942	-3.0942	-0.0942	0.9058	-0.0942	-3.0942	-8.0942

作如下散点图 2.4.







问题 1: 请找出一个函数经过所有的数据点。

问题 2: 请预测当 x = 3.5 时, y 的值.

上述两个问题分别对应下面所要讲述的拟合和插值问题. 作为数据处理的基本方法, 拟合和插值都是要求通过已知的观测数据去寻求某个近似函数, 使得近似函数与已知数据有较高的拟合精度. 一般而言, 由于近似的要求不同, 两者在数学方法上是完全不同的.



具体来说:

拟合: 求过已知有限个数据点的近似函数,不要求过所有的已知数据点,只要求在某种意义下它在这些点上的总偏差最小.主要用来反应数据的基本趋势.

插值: 求过已知有限个数据点的近似函数, 要求所求的近似函数 过已知的数据点.

二、数据拟合思想与建模方法

数据拟合有几种不同的判别准则,如使偏差的绝对值之和最小,使偏差的最大绝对值最小和使偏差的平方和最小(即最小二乘法).

1、Chebyshev 近似准则

假设想要对数据点集用图形拟合一条直线 y = ax + b, 应如何选择 a 和 b, 使直线最好地拟合数据?从图上看, 当存在两个以上点时, 不能期望它们均精确地处于一直线上.尽管一条直线精确地做出了变量 x 和 y 间关系的模型,一些数据点和直线间总存在一些纵向差异,我们称这些纵向差异为**绝对偏差**.



定义 2.1 给定 m 个数据点 (xi, yi) 的集合,用直线 y = ax + b 拟合该集合,确定参数 a 和b,使任一数据点 (xi, yi) 和其对应的直线上的点 (xi, axi + b) 间的距离之和最小,即:极小化绝对偏差 |yi - y(xi)| 的和.

同理,我们也可以将直线的极小化绝对偏差之和准则推广到给定曲线情形:给定某一函数y = f(x),以及 m 个数据点 (xi, yi) 的集合,极小化绝对偏差 |yi - y(xi)| 的和,也就是确定函数类型 y = f(x) 的参数,极小化

$$\sum_{i=1}^{m} |y_i - f(x_i)|.$$



再看另一种选择

定义 2.2 给定 m 个数据点的集合 (xi, yi), i = 1, 2, · · · , m, 用直线 y = ax + b 拟合该集合,确定参数 a 和 b, 使任一数据点 (xi, yi) 和其对应的直线上的点 (xi, axi + b) 间的距离最小,也就是对整个数据点集极小化最大绝对偏差 |yi - y(xi)|.

多数人视觉上仅限于拟合直线,那如何用图示拟合曲线作为模型呢?



现在将直线的极小化最大绝对偏差准则推广到给定曲线的情形:给定某种函数 y = f(x) 和m 个数据点 (xi, yi) 的一个集合,对整个集合极小化最大绝对偏差 |yi - y(xi)|,即确定函数类型 y = f(x) 的参数从而极小化数量

 $Max|yi - y(xi)|, i = 1, 2, \cdot \cdot \cdot , m$

这一重要的准则常称为 Chebyshev 近似准则, Chebyshev 准则的困难在于实际应用中通常很复杂,应用这一准则所产生的最优化问题可能需要高级的数学方法.



例 2.18 设我们要度量图 2.5 表示的线段 AB, BC 和 AC, 假定你的测量的结果为 AB = 13、BC = 7、AC = 19.

A B C

可以预想到在实地测量中会有产生矛盾的结果. 这时, AB 和 BC 值加起来是 20 而不是测出的 AC = 19. 现在用 Chebyshev 准则 来解决这一个单位的差异,也就是用一个方法为三个线段指定数值,使得指定的和观测的任一对应数之间的最大偏差达到极小.



解 假定对每一次测量有相同的信任度,这样每一测量值有相等的权值.这种情况下,差异应均等地分配到每一线段. 令 x1 代表线段 AB 长度的真值, x2 代表 BC 的真值. 为易于表示, 令 r1、r2、r3 表示真值和测量值间的差异.即

数值 r1、r2、r3 称为残差.



如果用 Chebyshev 近似准则,应指定 r1、r2、r3 的值,使三个数值 |r1|、|r2|、|r3| 的最大者达到最小.如果记最大的数为 r,那 么我们要求最小化 r,约束有三个条件

$$\begin{cases} |r_1| \le r \mathbf{x} - r \le r_1 \le r \\ |r_2| \le r \mathbf{x} - r \le r_2 \le r \\ |r_3| \le r \mathbf{x} - r \le r_3 \le r \end{cases}$$

这些条件的每一个可换为两个不等式. 例如 $|r1| \le r$ 能替换为 $r - r1 \ge 0$ 和 $r + r1 \ge 0$, 其他类似.



问题则叙述为经典的数学问题:

min r

S.t.
$$\begin{cases} r - x_1 + 13 \ge 0(r - r_1 \ge 0) \\ r + x_1 - 13 \ge 0(r + r_1 \ge 0) \\ r - x_2 + 7 \ge 0(r - r_2 \ge 0) \\ r + x_2 - 7 \ge 0(r + r_2 \ge 0) \\ r - x_1 - x_2 + 19 \ge 0(r - r_3 \ge 0) \\ r + x_1 + x_2 - 19 \ge 0(r + r_3 \ge 0) \end{cases}$$

这一问题称为线性规划问题.



推广这一过程,给定某一函数类型 y = f(x),其参数侍定,以及给定 m 个数据点 (xi, yi)的一个集合,并确定出残差为 ri = yi - f(xi). 如果 r 代表这些残差的最大绝对值,那么问题表示如下

min r

s.t.
$$r-r_i \geq 0$$
 $r+r_i \geq 0$

其中, i=1,2,..., m.



2、最小二乘准则

问题:确定函数类型 y = f(x) 的参数,极小化和数

$$\sum_{i=1}^{m} |y_i - f(x_i)|^2$$

如果从概率角度考虑,假定误差是随机分布时,使用最小二乘方法更好.最小二乘法广泛用于实际生活中,物理学、化学、生物学、医学、经济学、商学统计等方面都要用到它来计算经验公式.在数学上,数理统计中的回归分析方法就要用到这个工具。熟悉计算机的读者会发现,许多计算机软件也是用这种方法来做出拟合曲线的。



最小二乘准则的几何解释:

考虑三个点的情况,以 Ri = |yi - y(xi)| 记观测到的和预测的值间的绝对偏差,i = 1, 2, 3,将 Ri 考虑为偏差向量的一个数量分量.

那么向量 $R = R_1 i + R_2 j + R_3 k$ 代表了观测值和预测值间产生的偏离. 这一偏离向量的长度给定为

$$|R| = \sqrt{R_1^2 + R_2^2 + R_3^2}$$

要极小化 |R| 可以极小化 $|R|^2$.



所以最小二乘问题是:确定函数类型 y = f(x) 的参数,以便极小

化

$$|R|^2 = \sum_{i=1}^3 R_i^2 = \sum_{i=1}^3 |y_i - f(x_i)|^2$$

也就是,可以解释最小二乘准则为极小化向量的长度,该向量的坐标代表了观测值和预测值之间的绝对偏差。



例 2.19 下表是收集到的数据

х	1	2	3	4
z	8.1	22.1	60.1	165

画出这批数据在直角坐标上的散点图. 如图 2.6

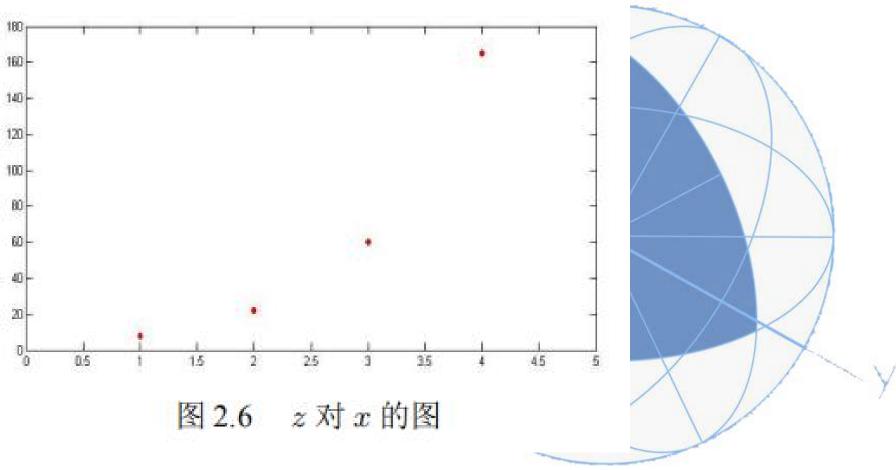
看起来两者呈指数关系, 因此可设 z 与温度 x 的关系为

$$z = \beta e^{\alpha x}$$









Z

我们的任务是具体确定常数 α,β.上式两边取对数,令 y

Inz, $a = \alpha$, $b = In\beta$, 则原式变成了线性关系

$$y = ax + b$$

而原来的表格变为:

х	1	2	3	4
y=ln z	2.1	3.1	4.1	5.1



散点图变为图 2.7:

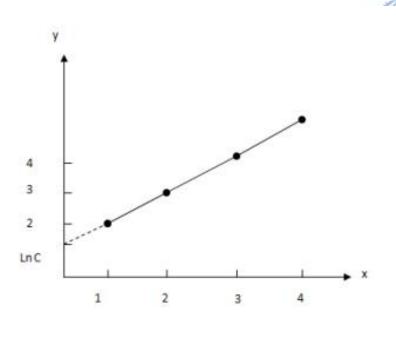
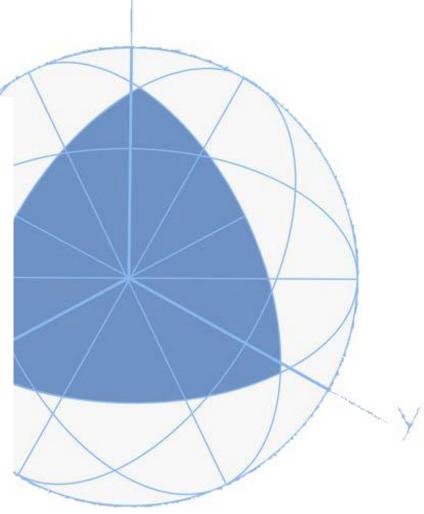


图 2.7 lnz 对 x 的图





于是,问题化为找一直线 y = ax + b,即寻找 a,b 使得上表中的数据基本满足这个函数关系.使得所有观铡值 yi 与函数值 axi + b 之偏差的平方和 $Q = \sum_{i=0}^{n} (y_i - ax_i - b)^2$ 最小.

确定常数 a, b 用的就是二元函数求极值的方法, 显然 Q 是 a, b 的函数. 令

$$\frac{\partial Q}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)x_i = 2a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n} x_i y_i + 2b\sum_{i=1}^{n} x_i = 0$$

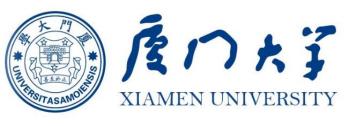
$$\frac{\partial Q}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b) = 2a\sum_{i=1}^{n} x_i - 2\sum_{i=1}^{n} y_i + 2nb = 0$$

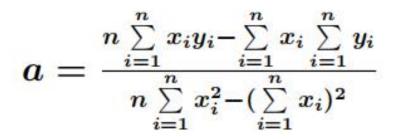


就得到线性方程组

$$\left[egin{array}{ccc} \sum\limits_{i=1}^n x_i^2 & \sum\limits_{i=1}^n x_i \ \sum\limits_{i=1}^n x_i & n \end{array}
ight] \left[egin{array}{c} a \ b \end{array}
ight] = \left[egin{array}{c} \sum\limits_{i=1}^n x_i \ \sum\limits_{i=1}^n y \end{array}
ight]$$

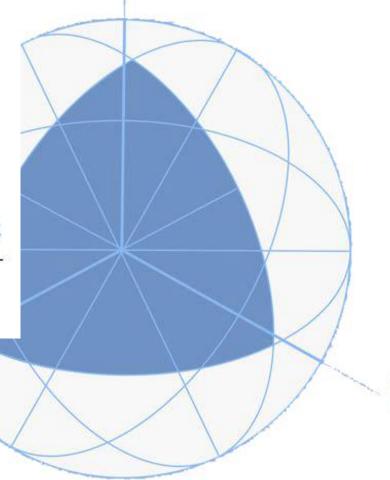
解这个方程组,得到





$$b = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \sum\limits_{i=1}^{n} y_i - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i}{n \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - (\sum\limits_{i=1}^{n} x_i)^2}$$

由问题知, Q 在这个 (a, b) 点取最小值。





现在解决本段开始提出的问题.从表 2.4 可得表2.5:

i	1	2	3	4
x_i	1	2	3	4
y_i	2.1	3.1	4.1	5.1

通过计算可得

$\sum_{i=1}^{4} x_i$	$\sum_{i=1}^{4} x_i^2$	$\sum_{i=1}^{4} x_i y_i$	$\sum_{i=1}^{4} y_i$	a	b	e^b
10	30	41	14.4	1	1.1	3



由表2.6可知

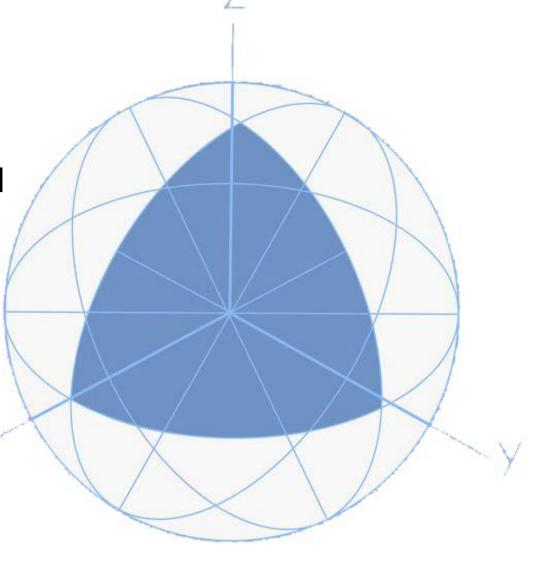
a = 1, b = 1.1

于是, 表的拟合直线方程为

$$y = x + 1.1,$$

z与x的关系为

$$z = 3e^x$$





2.2.3 插值方法

一、源头问题

已知某函数 $y = f(x)(未知)的一组观测或试验数据 (xi, yi)(i = 0, 1, 2, \cdots, n)$,要寻求一个函数 $\varphi(x)$,使得 $y = y_i(i = 0, 1, 2, \cdots, n)$ 则 $\varphi(x) \approx f(x)$.

具体而言,实际中在不知道函数 y = f(x) 的具体表达式的情况下,对于 x = xi 有实验测量值 $y = y_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$,寻求 另一函数 φ 使满足 $\varphi(x_i) = y_i = f(x_i)$ $i = 0, 1, 2, \dots, n$

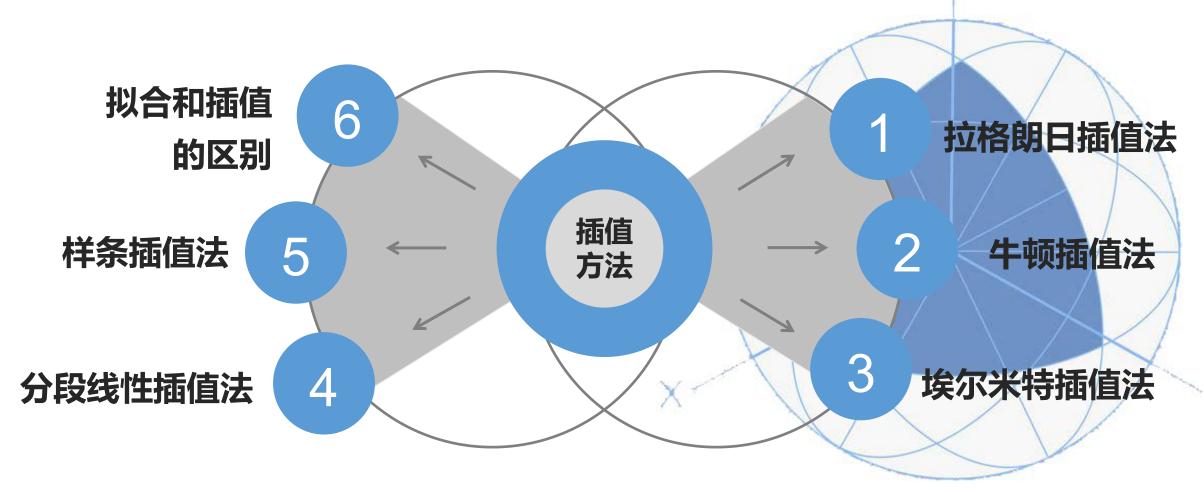
称此问题为一维插值问题.



并称函数 φ(x) 为 f(x) 的插值函数, x0, x1, x2, \cdots , xn 称为插值结点, $φ(xi) = yi(i = 0, 1, 2, \cdots, n)$ 称为插值条件, 则 φ(x) ≈ f(x). 在实际问题中所遇到的插值问题除了一维插值问题外, 还有二维插值问题.

下面介绍几种基本的、常用的一维插值方法: 拉格朗日插值法、 牛顿插值法、Hermite 插值法、分段线性插值法和三次样条插 值法。







二、插值思想与建模方法

1.拉格朗日 (Lagrange) 插值:

(1) 插值多项式简介

已知函数 y = f(x) 在 n + 1 个相异点 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 上的函数值 $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$,要求一个次数不超过 n 的代数多项式

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n,$$

使在结点 xi 上有 $p_n(x_i) = y_i (i = 0, 1, 2, \dots, n)$ 成立,称 $p_n(x)$ 为**插值多项式**.



则 f(x) 的 n + 1个待定系数 a0, a1, · · · , an 满足

$$\left\{egin{array}{l} a_0+a_1x_0+a_2x_0^2+\cdots+a_nx_0^n=y_0\ a_0+a_1x_1+a_2x_1^2+\cdots+a_nx_1^n=y_1\ \cdots &\cdots\ a_0+a_1x_n+a_2x_n^2+\cdots+a_nx_n^n=y_n \end{array}
ight.$$

记此方程组的系数矩阵为 A,则

$$det(A) = egin{bmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \ dots & dots & dots \ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix}$$



是范德蒙 (Vandermonde)行列式. 当 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 互不相同时, 此行列式值不为零. 因此, 方程组有唯一解. 这表明, 只要 n+1 个插值节点 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 互异 满足插值条件的插值多项式存在 唯一.

从几何上看, n 次多项式插值就是过 n + 1 个点 (xi, yi) 作一条多项式曲线 $y = p_n(x)$ 来近似曲线 来近似曲线y = f(x). 可以证明 n 次代数插值问题的解是惟一的.



当 $x \in [a, b]$ 且 $x \neq x_i (i = 0, 1, \dots, n)$ 时,称被插函数 f(x) 与插值函数多项式 pn(x) 之问的差

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x)$$

为插值多项式 pn(x) 的截断误差,或插值余项.

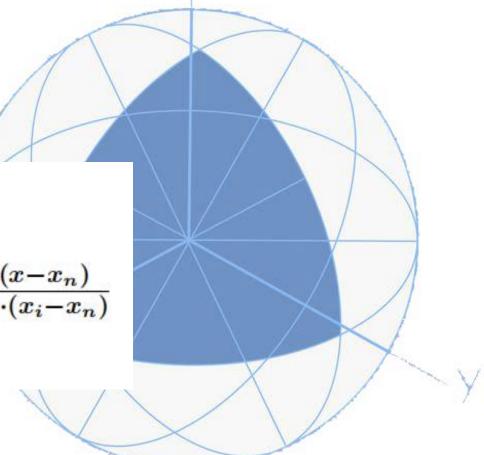
也就是说:用多项式函数 pn(x) 作为插值函数时,希望通过解方程组而得到待定系数 a0, a1, ···, an 的做法,当 n 比较大时是不现实的。因此,我们采用的拉格朗日 (Lagrange)插值多项式。



(2) 拉格朗日 (Lagrange)插值多项式

首先我们可以构造一组基函数

$$egin{aligned} l_i(x) &= \prod_{j=0, j
eq i}^n rac{x-x_j}{x_i-x_j} \ &= rac{(x-x_0) \cdot \cdot \cdot (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \cdot \cdot \cdot (x-x_n)}{(x_i-x_0) \cdot \cdot \cdot (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \cdot \cdot \cdot (x_i-x_n)} \ &= (i=0,1,\cdots,n) \end{aligned}$$





显然 $l_i(x)$ 是 n 次多项式,且满足:

\$

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

称 pn 即为 n 次拉格朗日 (Lagrange)插值多项式,同样由唯一性, n + 1 个节点的 n 次拉格朗日 (Lagrange)插值多项式存在且唯一.



当 f(x) 在 [a, b] 上充分光滑时,利用罗尔 (Rolle)定理可推出:对于任意 x ∈ [a, b],插值多项式 pn(x)的余项

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i), \ \xi \in (a, b).$$

例 2.20 设 $f(x) = \sqrt[3]{x}$,取结点为 x = 1、1.728、2.744,求 f(x)的二次拉格朗日 (Lagrange)插值多项式 pn(x) 及其余项的表达式,并计算 P2(2) ($\sqrt{32} = 1.2599210 \cdots$).



解取x0 = 1, x1 = 1.728, x2 = 2.744 为插值结点,则函数

 $f(x) = \sqrt[3]{x}$ 的相应的函数值为

$$f(x_0) = 1$$
, $f(x_1) = 1.2$, $f(x_2) = 1.4$.

于是,由拉格朗日 (Lagrange)插值公式,

$$f(x) \approx p_2(x)$$

$$=1 \cdot \frac{(x-1.728)(x-2.744)}{(1-1.728)(1-2.744)}$$

$$+1.2 \cdot \frac{(x-1)(x-2.744)}{(1.728-1)(1.728-2.744)}$$

$$+1.4 \cdot \frac{(x-1)(x-1.728)}{(2.744-1)(2.744-1.728)} \approx -0.0447x^2 + 0.3965x + 0.6481$$



将 x = 2 代入就得到 ¾2 的近似值

$$\sqrt[3]{2} pprox p_2(2) = 1.2626$$

它与准确值的差的对值 (称为绝对误差)约为 0.0027, 而由插值 余项估计公式, 其误差约为

$$|R_n(2)| = \left| \frac{5}{81} \cdot \frac{(2-1)(2-1.728)(2-2.744)}{\xi^{\frac{8}{3}}} \right| \le 0.0125$$

2. 牛顿 (Newton) 插值:

(1)函数的差商及其性质

设有函数 f(x), 其中 x0, x1, x2, \cdots , xn 表示一系列互不相同的

节点,可定义以下差商:

一阶差商:

 $f[x_i,x_j]=rac{f(x_i)-f(x_j)}{x_i-x_j}$ $f[x_i,x_j,x_k]=rac{f[x_i,x_j]-f[x_j,x_k]}{x_i-x_k}$ 二阶差商:





n 阶差商: $f[x_0,x_1,\cdots,x_n]=rac{f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1}]-f[x_1,x_2,\cdots,x_n]}{x_0-x_n}$

差商有下列性质:

(I) 差商的可加性 $f[x_0, x_1, ..., x_n] = \sum_{k=0}^n \frac{f(x_k)}{\prod_{j=0, j \neq k} (x_k - x_j)}$

(II) 差商的对称性: 在 f[x0, x1, · · · , xn] 中任意调换 xi, xj 的次

序其值不变.即有:

$$f[x_0,...,x_i,...,x_j,...,x_n] = f[x_0,...,x_j,...,x_i,...,x_n]$$



(2)牛顿插值公式

由各阶差商的定义,依次可得如下结果:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x, x_0]$$

$$f[x,x_0] = f[x_0,x_1] + (x-x_1)f[x,x_0,x_1]$$

$$f[x,x_0,x_1]=f[x_0,x_1,x_2]+(x-x_2)f[x,x_0,x_1,x_2]$$

. . .

$$f[x,x_0,\cdots,x_{n-1}]=f[x_0,x_1,\cdots,x_n] \ +(x-x_n)f[x,x_0,\cdots,x_n]$$



将以上各式分别乘以 1,(x - x0),(x - x0)(x - x1),··

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f[x_0, x_1] + \cdots +$$
 $+ (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) f[x_0, x_1, \cdots, x_n]$

 $+(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)f[x,x_0,x_1,\cdots,x_n]$

记

$$N_n(x) = f(x_0) + (x-x_0)f[x_0,x_1] + \cdots + \ (x\!-\!x_0)(x\!-\!x_1)\cdots(x\!-\!x_{n-1})f[x_0,x_1,\cdots,x_n]$$



显然 Nn(x) 是至多 n 次多项式,且满足插值条件 $N_n(x_i) = f(x_i)$

这种形式的插值多项式称为Newton 插值多项式. 其优点在于每增加一个节点, 插值多项式只增加一项, 即

$$N_{n+1}(x) = N_n(x) + (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)f[x_0,x_1,\cdots,x_{n+1}]$$

从而便于进行递推运算,且计算量小于 Lagrange 插值

其余项为:
$$R(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)f[x_0,x_1,\cdots,x_n,x]$$



3. 埃尔米特 (Hermite) 插值:

如果对插值函数,不仅要求它在节点处与函数同值,而且要求它与函数有相同的一阶、二阶甚至更高阶的导数值,这就是Hermite 插值问题. 本节主要讨论在节点处插值函数与函数的值及一阶导数值均相等的 Hermite 插值

其一般提法为: 设已知函数 y = f(x) 在 n+1 个互异节点 x0, x1, \cdots , xn 上的函数值 $y_i = f(x_i)$ 和导数值 $y_i' = f'(x_i)$ 要求一个 至多 2n+1 次多项式 H(X), 使得

$$H(x_i)=y_i$$
 $H'(x_i)=y_i'(i=0,1,\cdots,n)$



满足上述条件的多项式 H(x) 称为 Hermite 插值多项式, 其具

体形式如下所示,

$$H(x) = \sum\limits_{i=0}^n h_i[(x_i-x)(2a_iy_i-y_i')+yi]$$

其中

$$egin{aligned} h_i &= \prod\limits_{j=0, j
eq i}^n (rac{x-x_j}{x_i-x_j})^2, \ a_i &= \sum\limits_{j=0, j
eq i}^n rac{1}{x_i-x_j}. \end{aligned}$$

$$a_i = \sum_{j=0, j
eq i}^n rac{1}{x_i - x_j}.$$



高次插值多项式的龙格 (Runge)现象

用拉格朗日插值多项式 pn(x) 作为区间 [a, b] 上连续函数 f(x) 的近 似函数,在大多数情况下,pn(x)的次数越高,逼近 f(x)的效果就越 好. 但是对于高阶多项式插值问题而言, 往往会造成插值多项式 pn(x) 的收敛性与稳定性变差,逼近效果不理想,甚至发生龙格现象, 这是龙格 (Runge)在 20 世纪初所发现的: 在 [-1, 1] 上用 n + 1 个 等距节点作函数 f(x) = 1/1 + 25x2 的插值多项式 pn(x), 则随着 n 的增大, pn(x) 振荡越来越大. 计算结果与理论证明表明, 当 n 趋 于无穷大时, pn(x) 在区问中部收敛于 f(x), 但对满足条件 0.726···≤ |x| < 1 的 x, pn(x) 并不收敛于 f(x).



上例表明,高次多项式插值的应用是不保险的,因此在实际计算 中一般不使用高次插值. 这反而启发我们使用分段插值方法, 即 将区间 [a, b] 分成一些小区间, 在每一个小区间上用低次多项式 进行插值, 在整个插值区间 [a, b] 上就得到一个分段低次多项式 插值函数。区间的划分可以是任意的,各小区间上插值多项式的 次数的选取也可按具体问题的要求而选择,分段低次多项式插值 通常有较好的收敛性和稳定性,算法简单,但插值函数光滑性变 差. 常用的分段多项式插值法有: 分段线性插值法和三次样条插 值法.

4.分段线性插值法

简单地说,分段线性插值就是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 [xi, xi+1] 上是线性函

数. 具体表示如下:
$$I_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

$$egin{aligned} l_i(x) = \ igg\{ rac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}, x \in [x_{i-1},x_i] \ rac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}, x \in [x_i,x_{i+1}] \ 0, 其他 \end{aligned}$$



这样构造的 ln(x) 有良好的收敛性,即对于 $x \in [a, b]$ 有

 $\lim_{n\to\infty} I_n(x) = f(x)$. 我们可以看出用 $\ln(x)$ 计算 x 点的插值时,只用到其左右的两个节点,所以计算量与节点个数 n 无关. 但是 n 越大,分段越多,则插值的误差越小. 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.样条插值法

设给定区间 [a, b] 的一个分划 $\triangle : a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$,如果函数 s(x) 满足条件:



- (1)在每个子区间 $[x_{i-1},x_i](i=1,2,\cdots,n)$ 上是 k 次多项式;
- (2)s(x) 及直到 k 1 阶的导数在 [a, b] 上连续;

则称 s(x) 是关于分划 \triangle 的一个 k 次多项式样条函数, x0, x1, \cdots , xn 称为**样条结点**, x1, x1,

若s(x) ∈ $S_p(\triangle, k)$,则 s(x) 是关于分划 \triangle 的 k 次多项式样条函数.k 次多项式样条函数的一般形式为

$$s_k(x) = \sum\limits_{i=0}^k rac{lpha_i x^i}{i!} + \sum\limits_{j=1}^{n-1} rac{eta_j}{k!} (x-x_j)_+^k$$

其中 αi(i = 0, 1, · · · , k) 和 βj (j = 1, 2, · · · , n – 1) 均为任意常

数,而

$$(x - x_j)_+^k = \begin{cases} (x - x_j)^k, & x \ge x_j, \\ 0, & x < x_j \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, n - 1).$$

在实际中最常用的是 k = 2 和 3 的情况,即为二次样条函数和三次样条函数。

二次样条函数: 对于 [a, b] 上的分划 △: a = x0 < x1 < · · · <

xn = b,则

$$s_2(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \frac{\alpha_2}{2!} x^2 + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\beta_j}{2!} (x - x_j)_+^2 \in S_p(\Delta, 2),$$



其中

$$(x - x_j)_+^2 = \begin{cases} (x - x_j)^k, & x \ge x_j, \\ 0, & x < x_j \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, n - 1).$$

三次样条函数: 对于 [a, b] 上的分划 △: a = x0 < x1 < · · · < xn = b,

$$s_3(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \frac{\alpha_2}{2!} x^2 + \frac{\alpha_3}{3!} x^3 + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\beta_j}{3!} (x - x_j)_+^3 \in S_p(\triangle, 3),$$

其中

$$(x - x_j)_+^3 = \begin{cases} (x - x_j)^k, & x \ge x_j, \\ 0, & x < x_j \end{cases} \quad (j = 1, 2, \dots, n - 1).$$



插值与拟合的区别:

综上所述,插值和拟合作为数据处理的基本方法,有共性也有区别,共性在于都是通过已知数据求整体的近似函数.

区别在于:数据拟合不要求近似函数通过所有数据点,而是要求它能较好地反映数据整体变化趋势.插值问题要求所得的近似函数(曲线或曲面)经过所已知的所有数据点.



2.2.4 拟合与插值的 MATLAB 编程实现

一、Matlab 多项式拟合

a = polyf it(x, y, n):多项式拟合,返回降幂排列的多项式系数.其中 x, y 是数据点的值, n 为拟合的最高次数.

y = polyval(a, x):计算拟合的多项式在 x 处的值.

在处理一些无约束条件的最小二乘拟合时往往会涉及到最小二乘优化,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: Isqlin、Isqcurvefit、Isqnonlin、Isqnonneg

二、Matlab 数据拟合工具箱

在 Matlab 中的工作区,输入命令 cftool,便会出现如下拟合工具箱

5 个命令按钮的功能分别如下:

Data 按钮:可输出、查看和平滑数据;

Fitting 按钮:可拟合数据、比较拟合曲线和数据集;

Exclude 按钮:可以从拟合曲线中排除特殊的数据点;

Ploting 按钮:在选定区间后,单击按钮,可以显示拟合曲线和数据



三、Matlab 一维插值

用 Matlab 实现分段线性插值不需要编制函数程序,Matlab 中关于一维插值的函数为 interp1.

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' 逐段 3 次样条插值,' cubic' 保凹凸性 3 次插值.

详细情况请使用 help interp1;



四、Matlab 二维插值

当插值节点为网格节点时,命令为

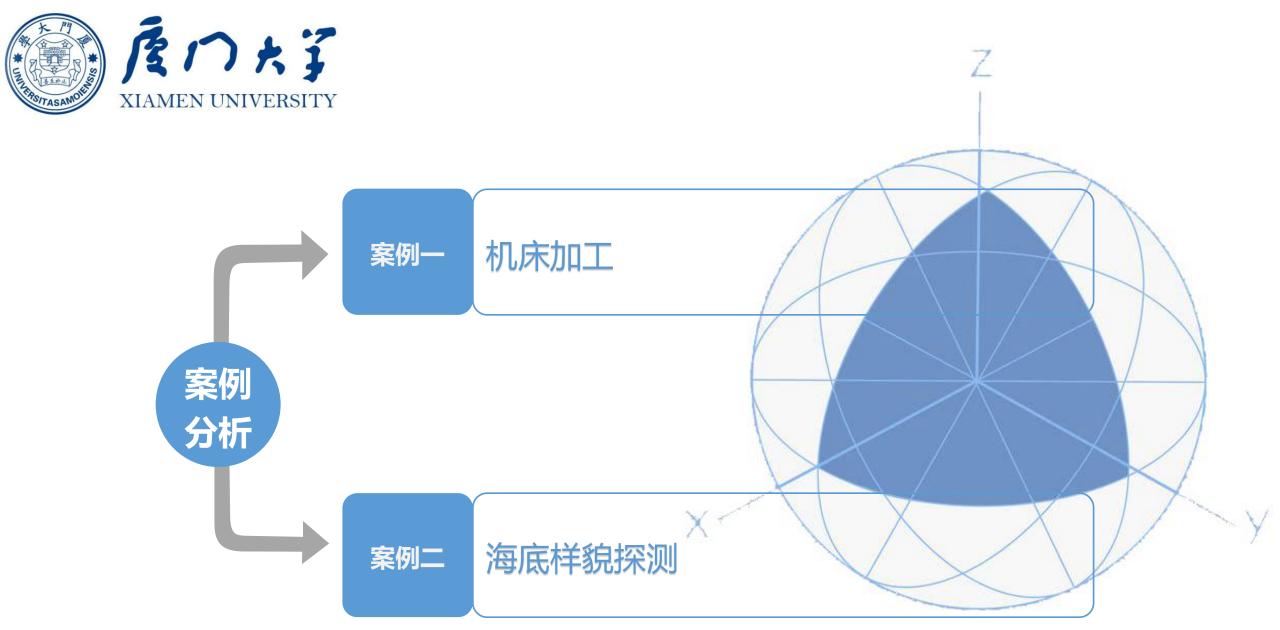
z = interp2(x0, y0, z0, x, y, method'),

其中 x0, y0 分别为 m 维和 n 维向量,表示节点, z0 为 m × n 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 x 的维数,列数为 y 的维数,表示得到的插值, 'method'的用法同上面的一维插值.



Part 3 案例分析







2.3案例分析

案例一: 机床加工

问题背景: 在工业加工时, 往往会对加工零件的外形有很高的要 求. 一般在单纯考虑平面的情况下, 待加工零件的外形根据工艺 要求由一组数据 (x, y) 给出, 用程控铣床加工时每一刀只能沿 x 方向和 y 方向移动非常小的一步, 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. 如下表所示给出的 x, y 数据是 位于机翼断面的下轮廓上,假设需要得到 x 坐标每改变 0.1 时的 y 坐标. 请完成加工所需数据并画出曲线。



						11				
у	0	1.2	1.7	2.0	2.1	2.0	1.8	1.2	1.0	1.6

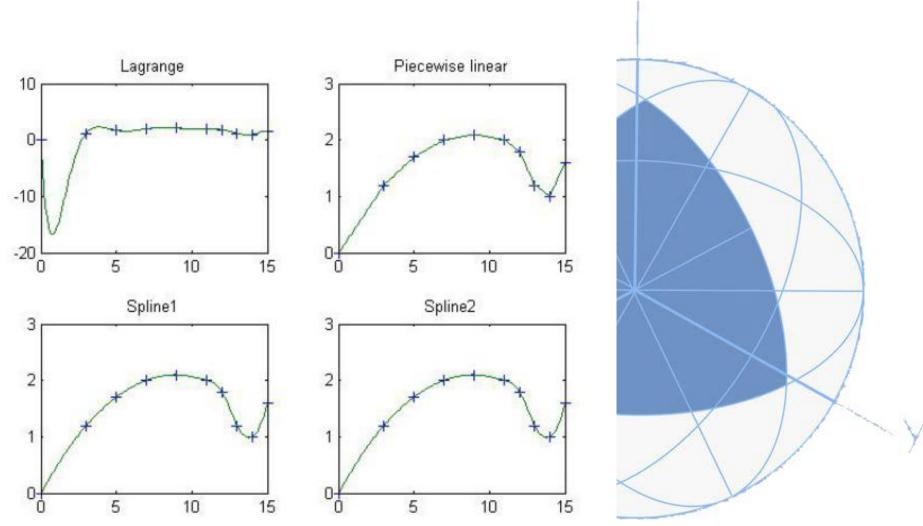
模型构建与求解

根据题意进行分析,我们会发现这是一个简单的插值问题,用

三次样条插值计算所得曲线如下图 2.13 所示。

因为所求的加工数据比较多,这就不——列出了。





案例二 海底地貌探测

问题背景: 现已知某海域测得一些点(x,y)处的水深 z 由下表给出,船的吃水深度为 5 英尺,所以船要避免进入水深在 5m 以下的水域.试画出海域的地貌图,以及在矩形区域(75,200) X (-50,150) 里的哪些地方船要避免进入。



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

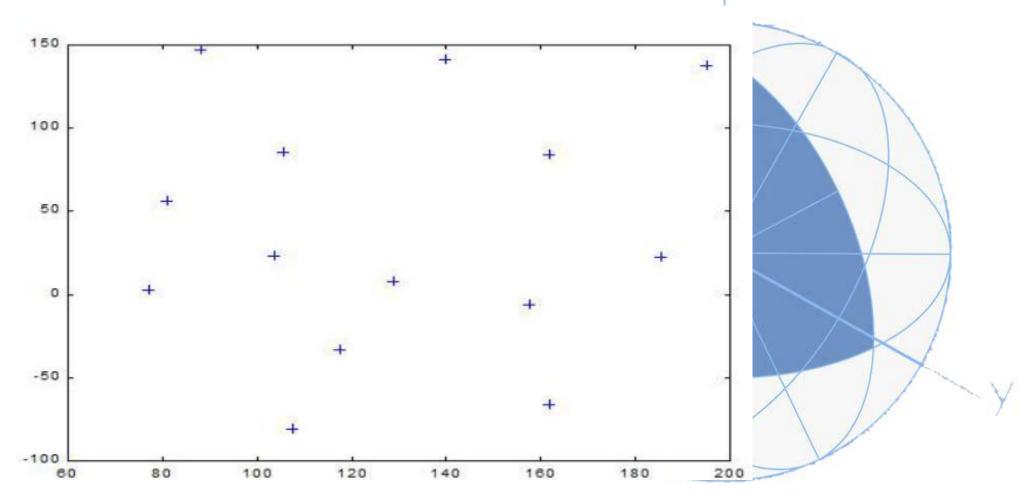
模型构建与求解

假设该海域海底是平滑的,由于测量点是散乱分布的,先在平面上作出测量点的分布图,再利用二维插值方法补充一些点的水深,然后作出海底曲面图和等高线图,并求出水深小于 5的海域范围.

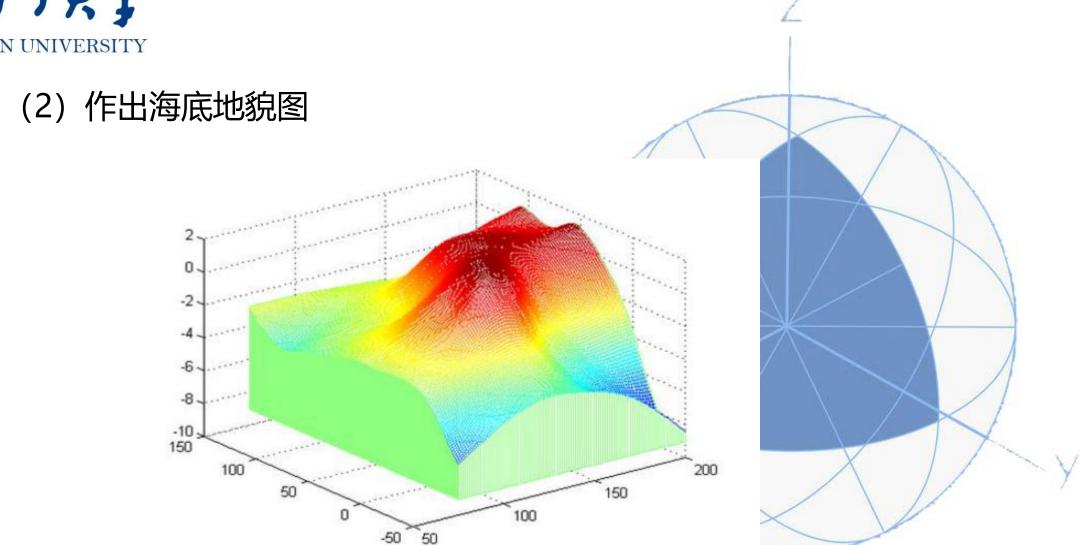
(1) 画出散点图 2.15 如下所示:



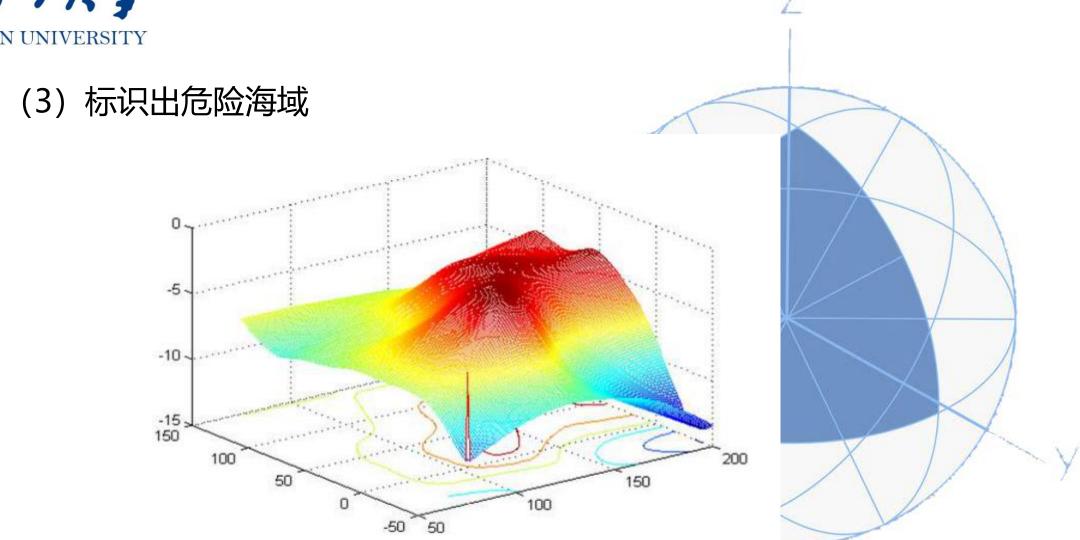














(4) 作出等高线图

