第二章

插 值 方 法

—— 曲线拟合的最小二乘法

内容提要

- 曲线拟合
  - 什么是曲线拟合
  - 曲线拟合的最小二乘法
  - 最小二乘拟合多项式

什么是曲线拟合

给定数据：

x_0	x_1	x_2	…	x_m
y_0	y_1	y_2	…	y_m

在函数族 Φ 中寻找函数 $S^*(x)$，使得

$$\sum_{i=0}^{m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|^2=\min_{S(x)\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\left|S(x_i)-y_i\right|^2$$

$\Rightarrow$ **曲线拟合的最小二乘法**

若 $\Phi=H_n$，则称 $g^*(x)$ 为 n 次最小二乘拟合多项式

$$\Phi=\text{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$$

$$m>>n$$

其他拟合方法

- 使得 $\max\limits_{0\le i\le m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|$ 最小

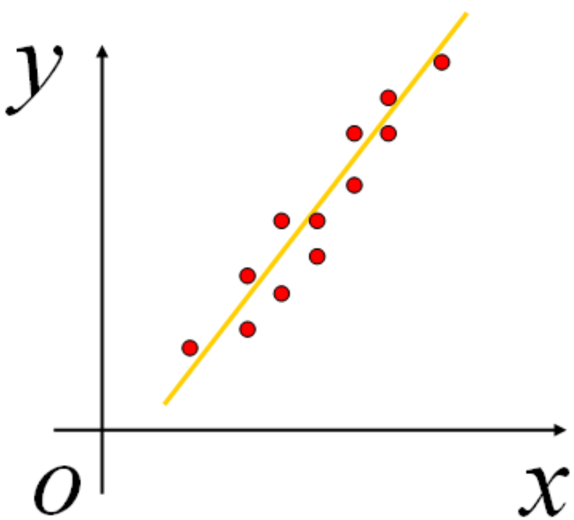
$\longrightarrow$ 求解复杂 ☹

- 使得 $\sum\limits_{k=0}^{m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|$ 最小

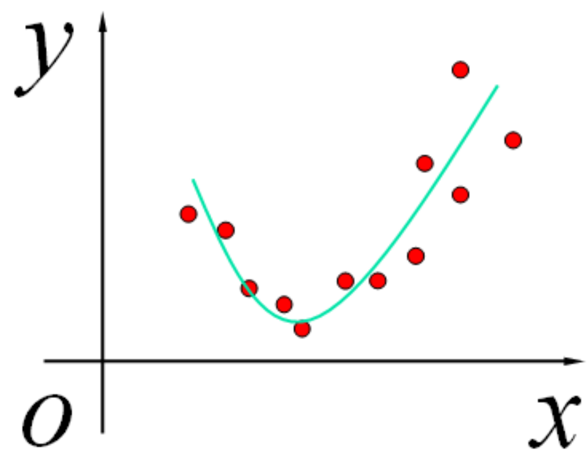
$\longrightarrow$ 不可导，求解困难 ☹

举例

最小二乘问题中，如何选择数学模型很重要，即如何选取函数空间 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$，通常需要根据物理意义，或所给数据的分布情况来选取合适的数学模型。



$y = ax + b$



$y = ax^2 + bx + c$

2 直线拟合（一次函数）

a）问题的提法

通过观测、测量或试验得到某一函数在 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的函数值 $y_1,y_2,\cdots,y_n$，即得到 n 组数据 (x_1,y_1)，$(x_2,y_2),\cdots,(x_n,y_n)$ 如果这些数据在直角坐标系中近似地分布在一条直线上，我们可以用直线拟合的方法。

问题:已知数据 $(x_1,y_1),(x_2,y_2),\ \cdots,(x_n,y_n)$，求一个一次多项式 $\varphi(x)=a+bx$（实际上，就是求 a,b），使得

$$Q(a,b)=\sum_{k=1}^{n}\left(y_k-\varphi(x_k)\right)^2=\sum_{k=1}^{n}\left(y_k-a-bx_k\right)^2$$

达到最小

注意到 $Q(a,b)$ 中，x_k,y_k 均是已知的，而 a,b 是未知量，$Q(a,b)$ 是未知量 a,b 的二元函数，利用高等数学中求二元函数极小值（最小值）的方法，因此，上述问题转化为求解下列方程组

$$\begin{cases}\dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial a}=0\\[2ex]\dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial b}=0\end{cases}$$

b） 正则方程组

由 $Q(a,b)=\sum_{k=1}^{n}\left(y_k-a-bx_k\right)^2$ 得：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial a}=-2\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)=0\\ \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial b}=-2\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)x_k=0\end{cases}$$

因为

$$\sum_{k=1}^{n}a=na,\quad \sum_{k=1}^{n}bx_k=b\sum_{k=1}^{n}x_k,$$

得到如下的正则方程组

$$\begin{cases}na+\left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)b=\sum_{k=1}^{n}y_k\\ \left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)a+\left(\sum_{k=1}^{n}x_k^2\right)b=\sum_{k=1}^{n}x_k y_k\end{cases}$$

这是个关于 a，b 的二元一次方程组，称其为最小二乘问题的正则方程组。解得 a，b，便得到最小二乘问题的拟合函数 $y=a+bx$。

例：已知10对数据如下表，利用最小二乘法求拟合直线 $y = a + bx$ 。

x_k	2	4	4	4.6	5	5.2	5.6	6	6.6	7
y_k	5	3.5	3	2.7	2.4	2.5	2	1.5	1.2	1.2

demo_2_10.m

解：先列表来计算四个 $\sum$ ：$\sum x_k$, $\sum y_k$, $\sum x_k^2$, $\sum x_k y_k$

	x_k	y_k	x_k^2	$x_k y_k$
	2	5	4	10
	4	3.5	16	14
	4	3	16	12
	4.6	2.7	21.16	12.46
	5	2.4	25	12
	5.2	2.5	27.04	13
	5.6	2	31.36	11.2
	6	1.5	36	9
	6.6	1.2	43.56	7.92
	7	1.2	49	8.4
$\sum$	50	25	269.12	109.94

形成正则方程组

$$\begin{cases} 10a + 50b = 25 \\ 50a + 269.12b = 109.94 \end{cases}$$

解得

$$a = 6.4383 \qquad b = -0.7877$$

于是，最小二乘拟合一次函数为

$$y = 6.4383 - 0.7877x$$