2018-2019学年第一学期

计 算 方 法

第十讲：插值法与最小二乘法－5

第三章 §7

主讲人：张治国

zgzhang@szu.edu.cn

深圳大学 医学部 生物医学工程学院

SHENZHEN UNIVERSITY HEALTH SCIENCE CENTER SCHOOL OF BIOMEDICAL ENGINEERING

上节课回顾

- 分段插值法无法保证多项式在节点处的连续性。为解决这个问题，介绍了Hermite插值法和三次样条插值法。
- Hermite插值法要求插值函数具有一阶（或更高阶）的光滑度（不但节点上的函数值相等，而且对应的导数值也相等）。
- 分段两点三次Hermite插值多项式只有一阶光滑度。三次样条插值得到的函数具有二阶光滑度。

本节课内容

第三章 插值法与最小二乘法

§7 数据拟合的最小二乘法

7-1 最小二乘法的基本概念

7-2 法方程组

7-3 利用正交多项式作最小二乘拟合

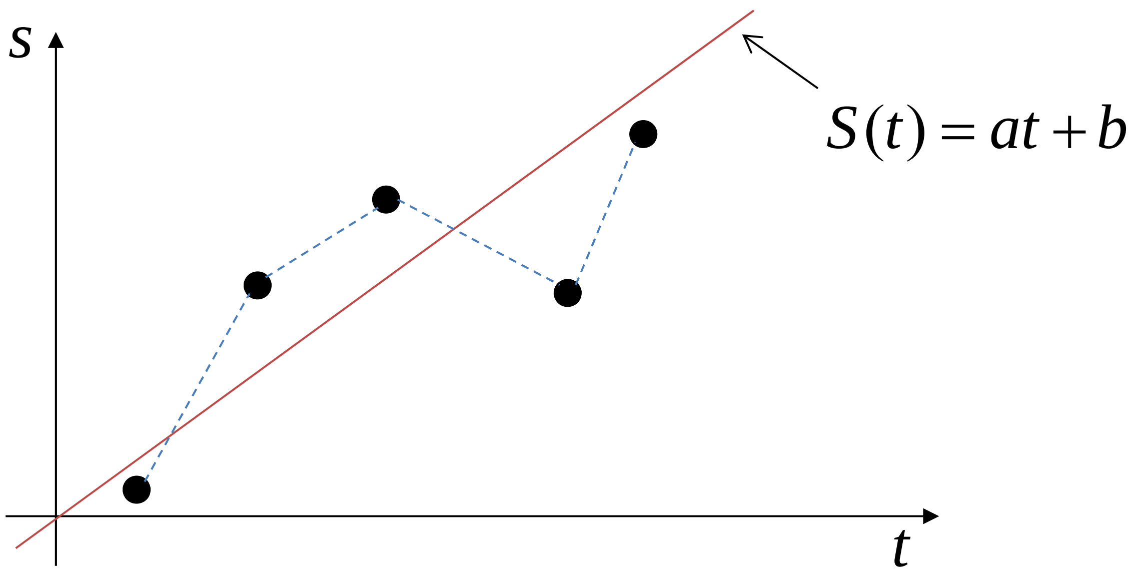
§7 数据拟合的最小二乘法

- 问题：在自然科学社会科学等领域内，为确定客观存在的变量之间的函数关系，需要根据大量实验、观测、或调查所得的数据建立函数关系式。但是，在实际中，观测数据往往带有随机误差（噪声）， 且有时无法重新采集。

- 如果利用有误差数据进行插值求函数的近似表达式，必然将噪声引入函数关系式中。
  - 插值条件要求在节点上，插值结果等于观测值。

§7 数据拟合的最小二乘法

- 例：若测试某物体的直线运动，测得的时间和速度数据为 $(t_i, s_i)(i = 0,1,\cdots,m)$，其真实线性函数为 $S(t) = at + b$。由于测试有误差，这些数据没有落在一条直线上。因此，利用插值法会得到不符合实际的结果。



7-1 最小二乘法的基本概念

- 直线的一般形式

$$S(t) = at + b \tag{7.1}$$

其中 a 和 b 为参数。

- 思路：利用数据 $(t_i, s_i)(i = 0,1,\cdots,m)$，在某种标准下确定 a 和 b，使 $S(t)$ 尽可能靠近该组数据点。

- 标准：令 $\delta_i = S(t_i) - s_i$，ω_i 表示测试数据 (t_i, s_i) 的重度，称为权系数（通常情况下都为1）。

- 利用 $\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i [S(t_i) - s_i]^2$

作为衡量 $S(t)$ 与数据 $(t_i, s_i)(i = 0,1,\cdots,m)$ 偏离大小的度量标准，对于求解(7.1)较为方便。

7-1 最小二乘法的基本概念

问题的一般情形：

- 设 $(x_i, y_i)(i=0,1,\cdots,m)$ 为给定的一组数据，$\omega_i > 0$ 为各点的权系数，要求在函数类

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

$$= \{a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x), a_i \in R\}$$

中，求一函数

$$S^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x) \quad (n \le m) \quad (7.2)$$

满足

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \omega_i [S^*(x_i) - y_i]^2 = \min_{S\in\Phi} \sum_{i=0}^{m} \omega_i [S(x_i) - y_i]^2 \quad (7.3)$$

其中，$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$ 为Φ中任意函数。

7-1 最小二乘法的基本概念

- 根据(7.3)求函数的方法称为数据拟合的最小二乘法。
- $S^*(x)$称为最小二乘解。
- $S(x)$ 为拟合函数。
- 数据拟合的最小二乘法问题可以转化为一个解方程组（称为法方程组）的问题。

7-2 法方程组

- 令 $\phi(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i [S(x_i) - y_i]^2$

$$= \sum_{i=0}^{m} \omega_i [\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i]^2$$

- 求最小二乘解的关键是求待定系数 $a_j^*(j = 0,1,\cdots,n)$ 。

- 由极值的必要条件，得

$$\frac{\partial \phi}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0,1,\cdots,n$$

- 即 $\sum_{i=0}^{m} \omega_i [\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - y_i] \varphi_k(x_i) = 0,\ k = 0,1,\cdots,n$

7-2 法方程组

- 因此

$$\sum_{j=0}^{n}\left(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\right)\cdot a_j=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k(x_i),\ k=0,1,\cdots,n \qquad (7.4)$$

- 定义内积

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) \qquad (7.5)$$

$$(f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k(x_i) \qquad (7.6)$$

其中 $\varphi_r=(\varphi_r(x_0),\varphi_r(x_1),\cdots,\varphi_r(x_m)),\quad r=0,1,\cdots,n$

$$f=(y_0,y_1,\cdots,y_m)$$

7-2 法方程组

- 则得 $$\sum_{j=0}^{n}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k),\qquad k=0,1,\cdots,n \tag{7.7}$$

  称为函数系 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 在离散点 $x_0,x_1,\cdots,x_m$ 上的法方程组，其矩阵形式为

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n)\\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots\\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(f,\varphi_0)\\ (f,\varphi_1)\\ \vdots\\ (f,\varphi_n)\end{bmatrix} \tag{7.8}$$

- 因为 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$ 是函数类 Φ 的基，故线性无关。
- 法方程组(7.8)的系数行列式称为基函数 $\{\varphi_j(x)\}_{j=0}^{n}$ 组成的Gram行列式，为非零，故(7.8)的解 $a_j=a_j^*(j=0,1,\cdots,n)$ 存在且唯一。

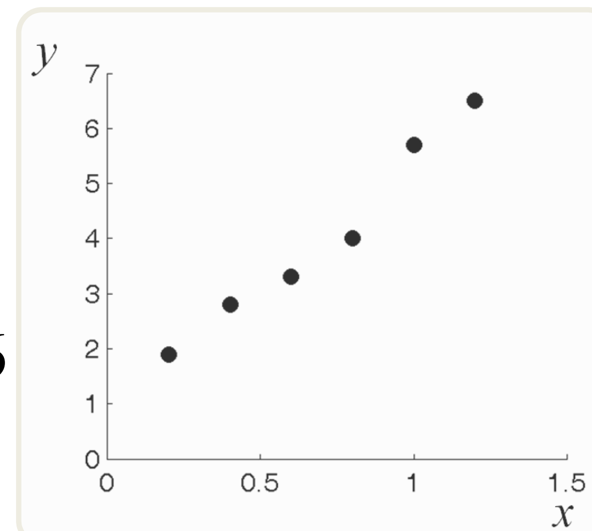
7-2 法方程组

- 例1 求拟合下列数据的最小二乘解。

i	0	1	2	3	4	5	6
x_i	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2
y_i	0.9	1.9	2.8	3.3	4.0	5.7	6.5

- 解：设线性拟合函数为 $P_1(x) = a_0 + a_1 x$
- 则所取的基函数为 $\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_1(x) = x$
- 从数据可知，$n = 1, m = 6, \omega_i = 1, i = 0, 1, \cdots, 6$

$n+1$：基函数的个数
$m+1$：观测值的个数



7-2 法方程组

- 建立法方程组：由(7.5)和(7.6)，得

$$(\varphi_0,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i\varphi_0(x_i)\varphi_0(x_i)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i=7$$

$$(\varphi_0,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i\varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i x_i=4.2$$

$$(\varphi_1,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i\varphi_1(x_i)\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i x_i^2=3.64$$

$$(f,\varphi_0)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i f(x_i)\varphi_0(x_i)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i y_i=25.1$$

$$(f,\varphi_1)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i f(x_i)\varphi_1(x_i)=\sum_{i=0}^{6}\omega_i x_i y_i=20.18$$

7-2 法方程组

- 因此，法方程组为

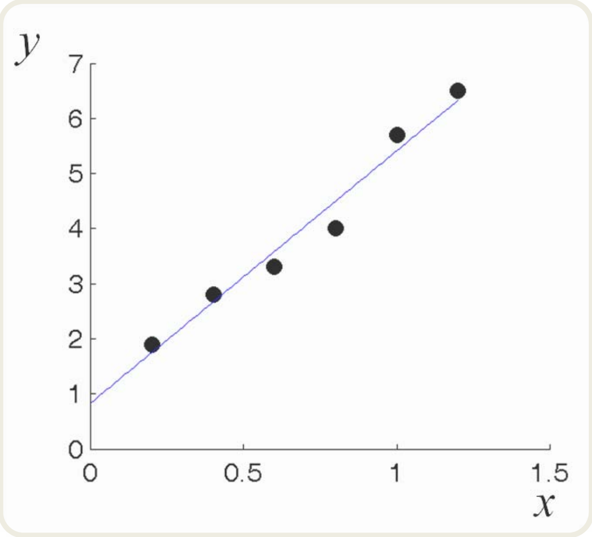
$$\begin{bmatrix} 7 & 4.2 \\ 4.2 & 3.64 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25.1 \\ 20.18 \end{bmatrix}$$

- 解上述线性方程组，得

$$a_0 = 0.843, \quad a_1 = 4.57$$

- 从而最小二乘解是：

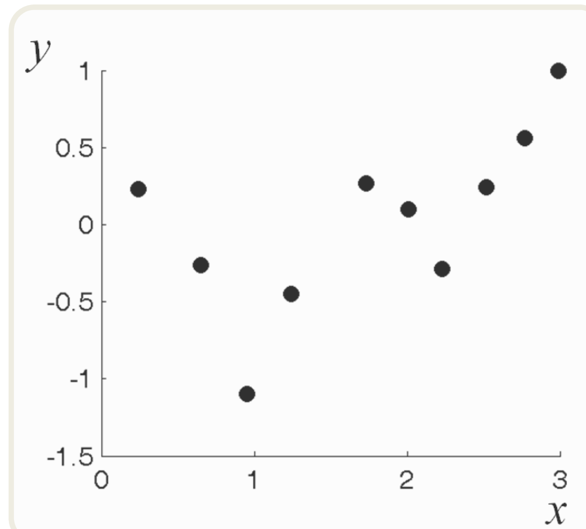
$$P_1(x) = 0.843 + 4.57x$$



7-2 法方程组

- 例2　求拟合下列数据的最小二乘解

x_i	0.24	0.65	0.95	1.24	1.73	2.01	2.23	2.52	2.77	2.99
y_i	0.23	–0.26	–1.10	–0.45	0.27	0.10	–0.29	0.24	0.56	1.00
ω_i	1	1	0.8	0.9	1	1	1	1	0.9	0.9



- 基函数为

$$y = \ln x,\ \ y = \cos(x),\quad y = e^{x}$$

7-2 法方程组

- 解：设拟合函数和基函数为

$$S(x) = a\ln x + b\cos(x) + ce^{x} \quad , \qquad n=2, m=9$$

$$\varphi_0(x) = \ln x,\ \varphi_1(x) = \cos(x),\quad \varphi_2(x) = e^{x}$$

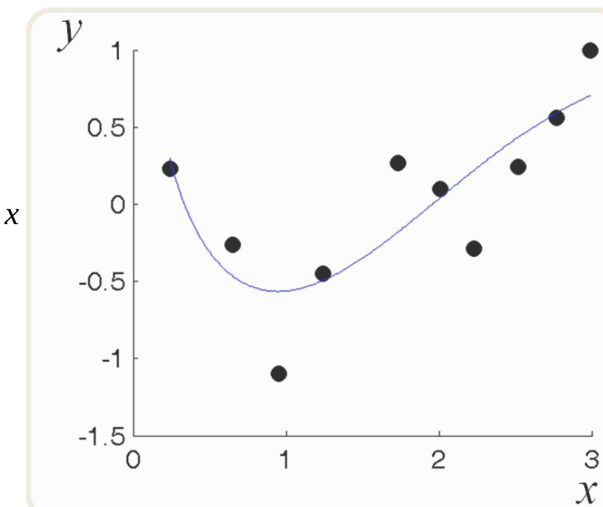
- 由(7.5)和(7.6)计算，并建立法方程组：

$$\begin{bmatrix} 6.5651 & -5.1453 & 59.407 \\ -5.1453 & 4.8457 & -45.969 \\ 59.407 & -45.969 & 934.96 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.4881 \\ -2.0891 \\ 24.619 \end{bmatrix}$$

- 解得

$$a = -0.99480,\quad b = -1.1957,\quad c = 0.030752$$

$$S(x) = -0.99480\ln x - 1.1957\cos(x) + 0.030752e^{x}$$



7-2 法方程组

- 如拟合函数是待定参量的线性函数，则称为线性最小二乘拟合。

- 上述两个例子都是线性最小二乘拟合。

- 常见线性最小二乘拟合所选的函数类还有多项式类：以

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

为拟合函数，基底为 $\varphi_j(x) = x^j (j = 0,1,\cdots,n)$ 。

7-2 法方程组

- 则有 $$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{j+k},\quad (j,k=0,1,\cdots,n)$$
$$(f,\varphi_k)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^k y_i,\quad (k=0,1,\cdots,n)$$
- 因此，法方程组(7.8)为

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n y_i \end{bmatrix} \qquad (7.10)$$

- 当 n 较大时，(7.10)的解对数据微小变化非常敏感，属于“病态”问题。为避开求解(7.10)，可以考虑使用正交多项式为基。

7-3 利用正交多项式作最小二乘拟合

正交多项式作基底：

- 定义7.1 设给定点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 及各点的权系数 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ ，如果多项式族 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 满足：

$$(P_k, P_j) = \sum_{i=0}^m \omega_i P_k(x_i) P_j(x_i) = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases}$$

则称 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 为关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 的正交多项式族。

- 定义7.2 设 $P_k(x)$ 是最高次项系数不为零的 k 次多项式，如果多项式族 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 满足：

$$(P_k, P_j) = \int_a^b \rho(x) P_k(x) P_j(x) dx = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases} \qquad (7.11)$$

则称 $\{P_k(x)\}_{k=0}^n$ 在 $[a, b]$ 上带权正交，$P_k(x)$ 是 $[a, b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的 k 次正交多项式。

7-3 利用正交多项式作最小二乘拟合

- 当取点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 正交的多项式族 $P_0(x), P_1(x), \cdots, P_n(x)$ 作为拟合多项式的基底时，其最小二乘解为 n 次多项式

$$g_n(x) = a_0 P_0(x) + a_1 P_1(x) + \cdots + a_n P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k P_k(x) \qquad (7.18)$$

- 其中，当 $P_0(x), P_1(x), \cdots, P_n(x)$ 为关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^m$ 的正交多项式族时，则有

$$a_k = (f, P_k)/(P_k, P_k) \qquad k = 0,1,\cdots,n \qquad (7.19)$$

本节课小结

- 当观测值有误差时，插值法不适合近似函数，需要使用最小二乘法。
- 介绍了数据拟合和最小二乘法的基本概念和解法（法方程组）。
- 简单介绍了利用正交多项式做最小二乘拟合。
- 拟合一组数据可采用不同函数，然后按误差大小或问题的实际背景决定是否使用计算结果或改变拟合函数。

本章小结

- 本章研究已知函数 $f(x)$ 的某些点 $(x_i, f(x_i))$后，求它的近似函数 $P_n(x)$ 的数值方法。
  - 如果要求 $P_n(x_i) = f(x_i)$，就用插值法；
  - 如果要求 $P_n(x_i)$ 对所有 $f(x_i)$ 在平方误差最小的原则下最接近，则可以采用最小二乘法。
- 插值方法在实际中用非常广泛的应用（如数据处理、函数求解等），也是许多其它计算方法（如函数逼近、数值微积分等）的基础。

本章小结

- 分段多项式插值具有良好的稳定性和收敛性，得到广泛使用。
- 样条函数的理论和应用也得到重视，是实际中重要的方法（本章只简单介绍三次样条插值）。
- 函数逼近是数值逼近的重要方法，本章介绍了最基本最重要的最小二乘法。其它重要方法包括快速傅立叶变换。

作业

习题三：23，25

【选做】25用MATLAB编程实现（50分）

作业上交日期：2018年11月20日

下节课内容

第四章 数值积分与微分

§1 Newton-Cotes公式

§2 复合求积法