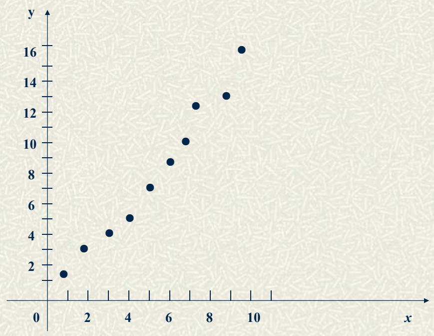
§8.4 曲线拟合的最小二乘法

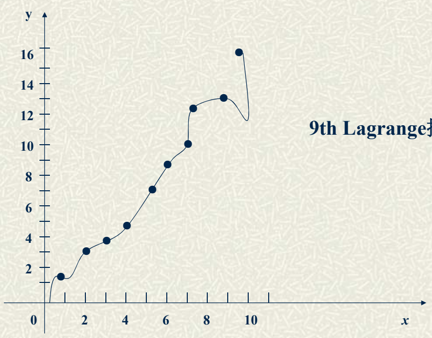
一、实例

- 某种合成纤维的强度与其拉伸倍数有直接关系，下表是实际测定的10个纤维样品的强度与相应拉伸倍数的记录。

编号	拉伸倍数	强度 kg/mm^2	编号	拉伸倍数	强度 kg/mm^2
1	1	1.3	6	6	8.8
2	2	3.5	7	7	10.1
3	3	4.2	8	8	12.5
4	4	5.0	9	9	13.0
5	5	7.0	10	10	15.6

- 将拉伸倍数作为x, 强度作为y,在座标纸上标出各点。





9th Lagrange插值多项式

- 从上图中可以看出强度与拉伸倍数大致成线性关系，可用一条直线来表示两者之间的关系。
- 解：设 $\varphi(x)=a+bx$ ，求a、b，使误差$y_i-\varphi(x_i)$的平方和达到最小。即：求a、b，使

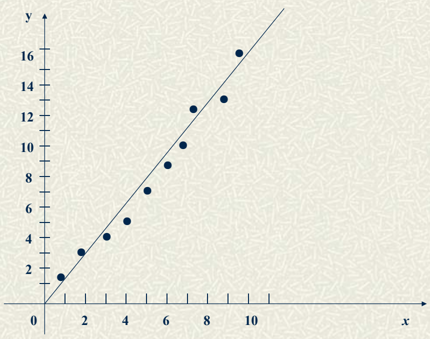
$$s(a,b)=\sum_{i=1}^{10}(y_i-a-bx_i)^2=\min$$

计算出它的正规方程得

$$\frac{\partial s}{\partial a}=0,\ \frac{\partial s}{\partial b}=0 \Leftrightarrow \begin{cases} 10a+55b=81 \\ 55a+385b=572.4 \end{cases}$$

解得： $a=-0.36$ ， $b=1.538$

直线方程为： $\varphi(x)=-0.36+1.538x$



二、线性最小二乘问题的法方程

1 问题的描述 给定 $m+1$对数据 $x_0,x_1,\cdots,x_m$

$y_0,y_1,\cdots,y_m$

及一组权系数: $\omega_0,\omega_1,\cdots,\omega_m$

设 $\Phi=\left\{\varphi(x)\,\middle|\,\varphi(x)=\sum_{i=0}^{n}c_i\varphi_i(x),c_i\in R,i=0,1,\cdots,n\right\}$

其中 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$线性无关， 称为基函数；

$S(c_0,c_1,\ldots,c_n)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(y_i-\varphi(x_i))^2$称为误差平方和。

求 $\varphi^*(x)\in\Phi$， $\varphi^*(x)=\sum_{i=0}^{n}c_i^*\varphi_i(x)$， 使

$$s(c_0^*,c_1^*,\cdots,c_n^*)=\min_{c_i\in R}s(c_0,c_1,\cdots,c_n)$$

$\varphi^*(x)$称为数据$(x_i,y_i)$$(i=0,1,\ldots,m)$的最小二乘拟合函数,其解法称为线性最小二乘法。

$f(x),g(x)$关于离散数据的带权内积

定义 $(f(x),g(x))=\sum_{i=0}^{m}\omega_i f(x_i)g(x_i)$ (1)

式（1）称为 $f(x)$与$g(x)$关于数据（x_i，y_i)的带权 ω_i内积。

关于连续函数的内积

定义 设$f(x),g(x)\in C[a,b]$，$\rho(x)$是$[a,b]$上的权函数，

称 $(f,g)=\int_a^b \rho(x)f(x)g(x)dx$

为$f(x)$与$g(x)$在$[a,b]$上以$\rho(x)$为权函数的内积。

定义 $(f(x),g(x))=\sum_{i=0}^{m}\omega_i f(x_i)g(x_i)$ (1)

式（1）称为 $f(x)$与$g(x)$关于数据（x_i，y_i)的带权 ω_i内积。

误差平方和 S的极小点 $c_0^*,c_1^*,\dots,c_n^*$应满足方程组

$$\frac{\partial S}{\partial c_k}=0,\qquad k=0,1,2,\dots,n$$

即 $$\frac{\partial S}{\partial c_k}=2\sum_{i=0}^{m}\omega_i[y_i-\sum_{j=0}^{n}c_j\varphi_j(x_i)]\varphi_k(x_i)=0$$

$$\Leftrightarrow\quad \sum_{j=0}^{n}c_j\Big(\sum_{i=0}^{m}\omega_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)\Big)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i y_i\varphi_k(x_i)$$

$$\Leftrightarrow\quad \sum_{j=0}^{n}c_j(\varphi_j,\varphi_k)=(y,\varphi_k),\quad (k=0,1,\dots,n)\qquad (2)$$

（2）称为**正规方程**或**法方程**。

求 $$\varphi^*(x)=\sum_{j=0}^{n}c_j^*\varphi_j(x)$$

使 $$s(c_0^*,c_1^*,\cdots,c_n^*)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(y_i-\varphi^*(x_i))^2=\min$$

步骤

1、确定 $M=span\{\varphi_0,\varphi_1,\dots,\varphi_n\}=\{\varphi=\sum_{j=0}^{n}c_j\varphi_j \mid c_j\in R\}$

2 求解正规方程 $\sum_{j=0}^{n}c_j(\varphi_k,\varphi_j)=(\varphi_k,y),\quad (k=0,1,\dots,n)$

3 计算$\varphi^*(x)=\sum_{j=0}^{n}c_j^*\varphi_j(x)$，其中$c_0^*,c_1^*,\dots,c_n^*$是正规方程的解。

$\varphi^*(x)$称为关于数据(x_i,y_i) $(i=0,1,\dots,m)$的最小二乘拟合函数。

其误差平方和为

$$s(c_0^*,c_1^*,\cdots,c_n^*)=\sum_{i=0}^{m}\omega_i(y_i^2-\varphi^*(x_i)y_i)$$

正规方程 $\sum_{j=0}^{n}c_j(\varphi_k,\varphi_j)=(\varphi_k,y),\quad (k=0,1,\dots,n)$

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \dots(\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \dots(\varphi_1,\varphi_n)\\ & \dots\dots\dots\dots & \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \dots(\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\\ \vdots\\ c_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\varphi_0,y)\\ (\varphi_1,y)\\ \vdots\\ (\varphi_n,y)\end{bmatrix}$$

定义 $(f(x),g(x))=\sum_{i=0}^{m}\omega_i f(x_i)g(x_i)$ (1)

式（1）称为 $f(x)$与$g(x)$关于数据（x_i，y_i)的带权 ω_i内积。

$$\varphi(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_n\varphi_n(x)$$

正规方程 $\sum_{j=0}^{n}c_j(\varphi_k,\varphi_j)=(\varphi_k,y),\quad (k=0,1,\dots,n)$

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \dots(\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \dots(\varphi_1,\varphi_n)\\ & \dots\dots\dots\dots & \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \dots(\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\\ \vdots\\ c_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\varphi_0,y)\\ (\varphi_1,y)\\ \vdots\\ (\varphi_n,y)\end{bmatrix}$$

定义 $(f(x),g(x))=\sum_{i=0}^{m}\omega_i f(x_i)g(x_i)$ (1)

式（1）称为 $f(x)$与$g(x)$关于数据（x_i，y_i)的带权 ω_i内积。

$$\varphi(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_n\varphi_n(x)$$

---

2 最小二乘多项式

给定数据(x_i,y_i) $(i=0,1,\dots,m)$,

取$\varphi_j=x^j, j=0,1,\dots,n,$ 则 $M=\left\{\varphi(x)\,\middle|\,\varphi(x)=\sum_{i=0}^{n}c_i x^i, c_i\in R\right\}$

此时最小二乘拟合函数为多项式称为最小二乘多项式:

$$\varphi^*(x)=c_0^*+c_1^*x+\cdots+c_n^*x^n$$

正规方程为

$$\begin{bmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \dots(\varphi_0,\varphi_n)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \dots(\varphi_1,\varphi_n)\\ & \dots\dots\dots\dots & \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \dots(\varphi_n,\varphi_n)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\\ \vdots\\ c_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\varphi_0,y)\\ (\varphi_1,y)\\ \vdots\\ (\varphi_n,y)\end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow\begin{bmatrix}m+1 & \sum_{i=0}^{m}x_i & \dots & \sum_{i=0}^{m}x_i^n\\ \sum_{i=0}^{m}x_i & \sum_{i=0}^{m}x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^{m}x_i^{n+1}\\ \dots & \dots & \dots & \dots\\ \sum_{i=0}^{m}x_i^n & \sum_{i=0}^{m}x_i^{n+1} & \dots & \sum_{i=0}^{m}x_i^{2n}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\\ \dots\\ c_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{i=0}^{m}y_i\\ \sum_{i=0}^{m}x_iy_i\\ \dots\\ \sum_{i=0}^{m}x_i^ny_i\end{bmatrix}$$

$$(\varphi_k,\varphi_j)=\sum_{i=0}^{m}x_i^{k+j},\quad (k,j=0,1,\dots,n),\omega_i=1$$

例题 给定离散数据 (x_i, y_i)，$(0\le i\le 4)$ 试用二次多项式进行拟合.

i	0	1	2	3	4
x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

解：取 $M = span\{1, x, x^2\}$，即取 $\varphi_j = x^j,\ j=0,1,2$

拟和函数φ(x)为 $\varphi(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$

正规方程为

$$\begin{bmatrix} 5 & \sum_{i=0}^4 x_i & \sum_{i=0}^4 x_i^2 \\ \sum_{i=0}^4 x_i & \sum_{i=0}^4 x_i^2 & \sum_{i=0}^4 x_i^3 \\ \sum_{i=0}^4 x_i^2 & \sum_{i=0}^4 x_i^3 & \sum_{i=0}^4 x_i^4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^4 y_i \\ \sum_{i=0}^4 x_i y_i \\ \sum_{i=0}^4 x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.415 \end{bmatrix}$$

解得 $C_0=1.0052$，$C_1=0.8641$，$C_2=0.8427$

所求二次多项式为 $\varphi^*(x)=1.0052+0.8641x+0.8437x^2$

最小平方误差为 $s=\sum_{i=0}^4 (y_i^2-\varphi^*(x_i)y_i)=2.76\times10^{-4}$

若 $\varphi(x)=c_0+c_1x+\cdots+c_nx^n$ 则对应大型方程组求解.

当n较大时，方程组病态严重。

解决办法：关于给定数据，构造正交基。

3 正交多项式作基函数 $(f(x),g(x))=\sum_{i=0}^m \omega_i f(x_i)g(x_i)$

定义 若 $(\varphi_k,\varphi_j)=\begin{cases} =0 & j\ne k \\ \ne 0 & j=k \end{cases}$

称函数组 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$是关于点集 $\{x_0,x_1,\ldots x_m\}$的带权 $w_0,w_1,\ldots,w_m$的正交函数组 .

(1) 原理

若 $\{\phi_j(x)\}_{j=0}^n$ 是关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 和权 $\{w_i\}_{i=0}^m$ 的正交函数组，

正规方程为

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & & & \\ & (\varphi_1,\varphi_1) & & \\ & & \cdots\cdots & \\ & & & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \cdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0,y) \\ (\varphi_1,y) \\ \vdots \\ (\varphi_n,y) \end{bmatrix}$$

正规方程为

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & & & \\ & (\varphi_1,\varphi_1) & & \\ & & \cdots\cdots & \\ & & & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \cdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0,y) \\ (\varphi_1,y) \\ \vdots \\ (\varphi_n,y) \end{bmatrix}$$

其中，$(\varphi_j,\varphi_j)=\sum_{k=0}^m \omega_k\varphi_j^2(x_k)\quad (j=0,1,\cdots,n)$

解得

$$c_j=\frac{(\varphi_j,y)}{(\varphi_j,\varphi_j)}=\frac{\sum_{k=0}^m \omega_k y_j\varphi_j(x_k)}{\sum_{k=0}^m \omega_k\varphi_j^2(x_k)}\quad (j=0,1,\cdots,n)$$

最佳平方逼近多项式为 $\varphi(x)=\sum_{j=0}^n c_j\phi_j(x)$

2. 构造关于点集的正交函数组

由 $1,x,x^2,\cdots,x^n$ 构造关于点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 的首 1 正交多项式

$$\begin{cases} \varphi_0(x)=1 \\ \varphi_{k+1}(x)=(x-\alpha_{k+1})\varphi_k(x)-\beta_k\varphi_{k-1}(x) \end{cases}\quad (k=0,1,2,\cdots)$$

其中

$$\begin{cases} \alpha_{k+1}=\dfrac{(x\varphi_k(x),\varphi_k(x))}{(\varphi_k(x),\varphi_k(x))} & (k=0,1,2,\cdots) \\ \beta_0=0,\ \beta_k=\dfrac{(\varphi_k(x),\varphi_k(x))}{(\varphi_{k-1}(x),\varphi_{k-1}(x))} & (k=1,2,\cdots) \end{cases}$$

式中内积定义为

$$(\varphi_k(x),\varphi_j(x))=\sum_{i=0}^m w_i\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i)$$

$$(x\varphi_k(x),\varphi_k(x))=\sum_{i=0}^m w_i x_i\varphi_k^2(x_i)$$

例 题　给出数据点 ..

$i = 0, \quad 1, \quad 2, \quad 3, \quad 4$

$x_i = 0.0 \quad 0.25 \quad 0.5 \quad 0.75 \quad 1.0$

$y_i = 1.0 \quad 1.2840 \quad 1.6487 \quad 2.1170 \quad 2.7183$

$w_i = 1.0 \quad 1.0 \quad 1.0 \quad 1.0 \quad 1.0$

用关于点集的正交函数组构造二次最佳平方逼近 元。

解:⑴ 先构造关于点集$\{0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0\}$和权$w_i = 1$,

的正交函数组$\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x)\}$.

$$\varphi_0(x) = 1, \qquad \varphi_1(x) = (x - \alpha_1)\varphi_0(x)$$

$$\alpha_1 = \frac{(x\varphi_0(x), \varphi_0(x))}{(\varphi_0(x), \varphi_0(x))} = \frac{2.5}{5} = \frac{1}{2}$$

$$\varphi_0(x) = 1 \qquad \varphi_1(x) = x - \frac{1}{2}$$

$$\varphi_2(x) = (x - \alpha_2)\varphi_1(x) - \beta_1\varphi_0(x)$$

$$\alpha_2 = \frac{(x\varphi_1(x), \varphi_1(x))}{(\varphi_1(x), \varphi_1(x))}, \beta_1 = \frac{(\varphi_1(x), \varphi_1(x))}{(\varphi_0(x), \varphi_0(x))}$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2}, \qquad \beta_1 = \frac{1}{8} \qquad \varphi_2(x) = (x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}$$

拟和函数$\varphi(x)$为　$\varphi(x) = c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)$

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & 0 & 0 \\ 0 & (\varphi_1, \varphi_1) & 0 \\ 0 & 0 & (\varphi_2, \varphi_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, y) \\ (\varphi_1, y) \\ (\varphi_2, y) \end{bmatrix}$$

$$c_0 = (y, \Phi_0)/(\Phi_0, \Phi_0) = \sum_{i=0}^{4} y_i \times 1 / \sum_{i=0}^{4} \times 1 = 8.768/5 = 1.7536$$

$$c_1 = (y, \Phi_1)/(\Phi_1, \Phi_1) = \sum_{i=0}^{4} y_i (x_i - \frac{1}{2}) / \sum_{i=0}^{4} (x_i - \frac{1}{2})^2 = 1.7078$$

$$c_2 = (y, \Phi_2)/(\Phi_2, \Phi_2) = \sum_{i=0}^{4} y_i ((x_i - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8}) / \sum_{i=0}^{4} ((x_i - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8})^2$$

$$= 0.8437$$

得到二次最佳平方逼近多项式为

$$\varphi(x) = 1.7536 + 1.7078(x - \frac{1}{2}) + 0.8437((x - \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{8})$$

三、线性模型引深及推广

- 上述线性模型实际上是多项式逼近函数的问题。它不仅可以解决一元问题还可用于多元问题。除此以外还可求解某些非线性问题。求解方法是将其通过一定的代数变换转换为可用线性模型求解的问题。
- 比如对函数 $y=a e^{bx}$ 取对数，得$ln\ y=ln\ a+b\ x$，
- 令 $Y=lny$, $A=ln\ a$, $B=b$ 则问题转化为解 $Y=A+Bx$的线性问题。P260
- 类似的再如，对$y=1/(a+bx)$拟和可对此函数取倒数，则新变量$1/y$与x成线性关系。

- 例题 给定离散数据（x_i，y_i），（$0\le i\le 4$）求形如 $y=ae^{bx}$ 拟合函数.

i	0	1	2	3	4	5	6	7
x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	15.3	20.5	27.4	36.6	49.1	65.6	87.8	117.6

解:　设 拟和函数φ为　$\varphi(x)= ae^{bx}$, $\omega_i=1$

两边取对数，得 $\ln\varphi(x) = \ln a + bx = c + bx$，

求c、b，使　$s(c,b) = \sum_{i=0}^{7} (\ln y_i - c - bx_i)^2 = \min$

正规方程为
$$\begin{bmatrix} 8 & \sum_{i=0}^{7} x_i \\ \sum_{i=0}^{7} x_i & \sum_{i=0}^{7} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{7} \ln y_i \\ \sum_{i=0}^{7} x_i \ln y_i \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 8 & 36 \\ 36 & 204 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 29.979 \\ 147.1359 \end{bmatrix}$$

解得　c=2.4370，b=0.2912，$a=e^c= 11.4383$

所求拟和函数为　$\varphi(x)= 11.4383\ e^{0.2912x}$

作业

习题 8
P278:
15,16,19