数学实验

Experiments in Mathematics

实验二 插值与拟合

清华大学数学科学系

什么是插值?

什么是拟合?

从查函数表和做物理实验说起

查函数表

标准正态分布函数表 $\Phi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x} e^{-t^2/2}dt$

x	0	1	2	…
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
1.0	0.8413	0.8438	0.8461	…
1.1	0.8643	0.8665	0.8686	…
1.2	0.8849	0.8869	0.8888	…
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

求 $\Phi(1.114)$

$\Phi(1.114)=0.8665+(0.8686-0.8665)\times0.4=0.8673$

插值

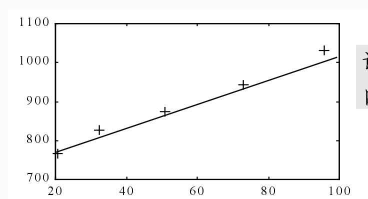
热敏电阻实验

测得一组实验数据

温度t(⁰C)	20.5	32.7	51.0	73.0	95.7
电阻R(Ω)	765	826	873	942	1032

求60⁰C时的电阻

MATLAB 5.3.lnk dianzu1



设 **R=at+b**，***a,b*** 由实验数据确定

拟合

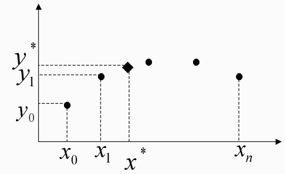
实验二 插值与拟合的基本内容

1. 插值的基本原理；三种插值方法：拉格朗日插值，分段线性插值，三次样条插值。
2. 拟合的基本原理；线性最小二乘拟合。
3. 插值与拟合的 **MATLAB** 实现。
4. 插值与拟合的应用（面对一个实际问题，应该用插值，还是拟合）。

插值的基本原理

插值问题的提法

已知 n+1个节点 (x_j, y_j) $(j=0,1,\cdots n$, 其中 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，

g表达式复杂，

甚至无表达式

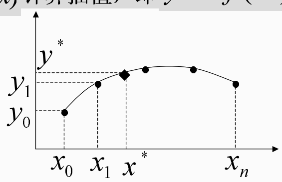
插值的基本原理

求解插值问题的基本思路

构造一个(相对简单的)函数 $y=f(x)$，通过全部节点，即

$$f(x_j)=y_j \quad (j=0,1,\cdots n)$$

再用 $f(x)$ 计算插值，即 $y^*=f(x^*)$.



三种插值方法

1. 拉格朗日(Lagrange)多项式插值

1.1 插值多项式

$$L_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0 \quad (1)$$

$$L_n(x_j)=y_j \ (j=0,1,\cdots n) \xrightarrow{\text{求}\,a_i} XA=Y \quad (2)$$

$$X=\begin{bmatrix} x_0^n & x_0^{n-1} & \cdots & 1 \\ \cdots & & & \\ x_n^n & x_n^{n-1} & \cdots & 1 \end{bmatrix},\quad A=\begin{bmatrix} a_n \\ \vdots \\ a_0 \end{bmatrix},\quad Y=\begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$\because \det(X)\neq 0$ (在什么条件下） $\therefore$ (2)有唯一解

三种插值方法

$$L_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0 \quad (1)$$

1.2 拉格朗插值多项式 $XA=Y \ (2)$

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n} y_i l_i(x) \quad (3)$$

$$l_i(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)},\quad i=0,1\cdots n$$

$$\because l_i(x_j)=\begin{cases}1, & i=j \\ 0, & i\neq j\end{cases} \quad \therefore L_n(x_j)=y_j$$

$l_i(x)$ 称基函数

又（2）有唯一解，故（3）与（1）相同。

1.3 误差估计

三种插值方法

$$R_n(x)=g(x)-L_n(x)=\frac{g^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}(x-x_j),\quad \xi\in(a,b)$$

$$\left|g^{(n+1)}(\xi)\right|\leq M_{n+1} \Longrightarrow \left|R_n(x)\right|\leq\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\prod_{j=0}^{n}\left|x-x_j\right|$$

如何使误差 $|R_n(x)|$ 减小（粗略地看）

x 接近 x_j $\quad$ g 平缓 $\quad$ n 增加

三种插值方法

思考

1）对于n+1个节点，拉格朗日插值为什么用n次多项式，若用次数大于n或小于n的多项式作插值，结果如何？

2）用n次多项式作插值，得到的 $L_n(x)$ 次数会不会小于n？可以用n=2来说明。

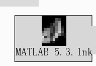
3）若产生n+1个节点的 $g(x)$ 为m次多项式，问 $L_n(x)$ 与 $g(x)$ 的关系如何（分m≤n，m>n两种情况）？

三种插值方法

1.4 拉格朗日插值多项式的振荡

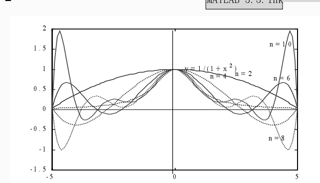
$$n\uparrow\Rightarrow L_n(x)?\Rightarrow |R_n(x)|\downarrow ?$$

$$g(x)=\frac{1}{1+x^2},\quad -5\leq x\leq 5$$



runge

取n=2,4,6,8,10,计算 $L_n(x)$, 画出图形

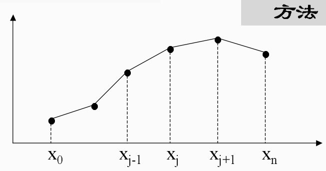


Runge现象

$$\lim_{n\to\infty}L_n(x)=g(x),\quad -3.63\leq x\leq 3.63$$

2. 分段线性插值

三种插值方法



$$I_n(x)=\sum_{j=0}^{n} y_j l_j(x)$$

$$l_j(x)=\begin{cases}\dfrac{x-x_{j-1}}{x_j-x_{j-1}}, & x_{j-1}\le x\le x_j\\ \dfrac{x-x_{j+1}}{x_j-x_{j+1}}, & x_j\le x\le x_{j+1}\\ 0, & \text{其它}\end{cases}$$

计算量与n无关；

n越大，误差越小.

$$\lim_{n\to\infty} I_n(x)=g(x), x_0\le x\le x_n$$

3. 三次样条插值

样条函数的由来

三种插值方法

$$S(x)=\{s_i(x), x\in[x_{i-1},x_i], i=1,\cdots n\}$$

1) $s_i(x)=a_i x^3+b_i x^2+c_i x+d_i \quad (i=1,\cdots n)$

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

3) $S(x)\in C^2[x_0,x_n]$

$4n$个待定系数 a_i, b_i, c_i, d_i

3）$\Rightarrow$ $s_i(x_i)=s_{i+1}(x_i), s_i'(x_i)=s_{i+1}'(x_i)$
$s_i''(x_i)=s_{i+1}''(x_i) \qquad (i=1, n-1)$ 3’）

2），3’）共 4n-2个方程

三种插值方法

三次样条插值确定4n个系数需增加 **2**个条件

4) $S''(x_0)=S''(x_n)=0$ (自然边界条件）

2）3）4）$\Rightarrow$ a_i, b_i, c_i, d_i $\Rightarrow$ $S(x)$

$$\lim_{n\to\infty} S(x)=g(x)$$

思考

1）自然边界条件的几何意义是什么

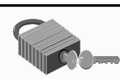
2）样条插值为什么普遍用3次多项式，而不是2或4次？

三种插值方法小结

• 拉格朗日插值（高次多项式插值）：
曲线光滑；误差估计有表达式；收敛性不能保证（振荡现象）。
用于理论分析，实际意义不大。

• 分段线性和三次样条插值（低次多项式插值）：
曲线不光滑（三次样条插值已大有改进）；误差估计较难（对三次样条插值）；收敛性有保证。
简单实用，应用广泛。

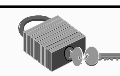
用MATLAB作插值计算



1. 拉格朗日插值：自编程序，如名为 `lagr1.m` 的M文件，
   第一行为 `function y=lagr1(x0,y0,x)`
   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））。
   应用时输入`x0,y0,x`后，运行 `y=lagr1(x0,y0,x)`
2. 分段线性插值：已有程序 `y=interp1(x0,y0,x)`
3. 三次样条插值：已有程序 `y=interp1(x0,y0,x,'spline')`
   或 `y=spline(x0,y0,x)`

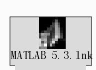
注：`lagr1.m` 程序可参考课本第60页

用MATLAB作插值计算



以 $g(x)=\dfrac{1}{1+x^2}$, $-5\le x\le 5$ 为例，作三种插值的比较

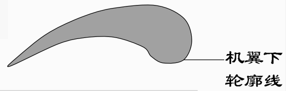
用n=11个节点，m=21个插值点，三种方法作插值，画图。



chazhi1

x	y	y1	y2	y3
0	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
0.5000	0.8000	0.8434	0.7500	0.8205
1.0000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
1.5000	0.3077	0.2353	0.3500	0.2973
2.0000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
2.5000	0.1379	0.2538	0.1500	0.1401
3.0000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000
3.5000	0.0755	-0.2262	0.0794	0.0745
4.0000	0.0588	0.0588	0.0588	0.0588
4.5000	0.0471	1.5787	0.0486	0.0484
5.0000	0.0385	0.0385	0.0385	0.0385

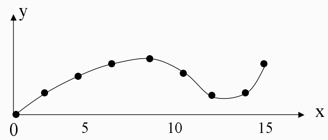
插值的应用



已知机翼下轮廓线上数据如下

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

加工时需要**x**每改变**0.1**时的**y**值



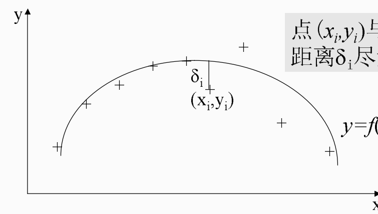
MATLAB 5.3.lnk

chazhi2

拟合的基本原理

曲线拟合问题的提法

已知一组（二维）数据，即平面上 n个点(x_i,y_i), i=1,…n, 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。



点(x_i,y_i)与曲线 $y=f(x)$的距离δ_i尽量小, i=1,…n

曲线拟合常用解法——线性最小二乘法的基本思路

先选定一组函数 $r_1(x), r_2(x), \dots r_m(x)$, m<n, 令

$$f(x)=a_1r_1(x)+a_2r_2(x)+\dots+a_mr_m(x) \qquad (1)$$

其中 $a_1,a_2, \dots a_m$ 为待定系数。

确定$\boldsymbol{a_1,a_2, \dots a_m}$ 的准则（最小二乘准则）：

使**n**个点（$\boldsymbol{x_i,y_i}$）与曲线 $\boldsymbol{y=f(x)}$ 的距离δ_i 的平方和最小 。

记 $$J(a_1,a_2,\cdots a_m)=\sum_{i=1}^{n}\delta_i^2=\sum_{i=1}^{n}[f(x_i)-y_i]^2$$

$$=\sum_{i=1}^{n}[\sum_{k=1}^{m}a_kr_k(x_i)-y_i]^2 \qquad (2)$$

问题归结为：求 $\boldsymbol{a_1,a_2, \dots a_m}$ 使 $\boldsymbol{J(a_1,a_2, \dots a_m)}$ 最小。

线性最小二乘法的求解

$$J(a_1,a_2,\cdots a_m)=\sum_{i=1}^{n}[\sum_{k=1}^{m}a_kr_k(x_i)-y_i]^2 \qquad (2)$$

$$\frac{\partial J}{\partial a_k}=0 \quad (k=1,\cdots m) \Rightarrow \begin{cases}\sum_{i=1}^{n}r_1(x_i)[\sum_{k=1}^{m}a_kr_k(x_i)-y_i]=0\\ \cdots\cdots\\ \sum_{i=1}^{n}r_m(x_i)[\sum_{k=1}^{m}a_kr_k(x_i)-y_i]=0\end{cases} \qquad (3)$$

记 $$R=\begin{bmatrix}r_1(x_1)\cdots r_m(x_1)\\ \cdots\cdots\\ r_1(x_n)\cdots r_m(x_n)\end{bmatrix},\quad a=\begin{bmatrix}a_1\\ \vdots\\ a_m\end{bmatrix},\quad y=\begin{bmatrix}y_1\\ \vdots\\ y_n\end{bmatrix}$$

$$(3) \Rightarrow (R^TR)a=R^Ty \qquad (4)$$

线性最小二乘法的求解

$$(R^TR)a=R^Ty \qquad (4)$$

当 $\boldsymbol{R^TR}$ 可逆时(4)有唯一解

$$a=(R^TR)^{-1}R^Ty \qquad (5)$$

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

问题 1. 怎样选择 $\{\boldsymbol{r_1(x), \dots r_m(x)}\}$，以保证系数$\{\boldsymbol{a_1,\dots a_m}\}$有唯一解？

分析 $\{\boldsymbol{a_1,\dots a_m}\}$有唯一解 ← $\boldsymbol{R^TR}$可逆 ←**Rank($\boldsymbol{R^TR}$)=m**

← **Rank($\boldsymbol{R}$)=m** ← $\boldsymbol{R}$列满秩

← $\{\boldsymbol{r_1(x), \dots r_m(x)}\}$在$\boldsymbol{x_i}$点线性无关 (**$\boldsymbol{i}$**=1, …n)

问题 2. 为什么要规定**m<n**?若**m=n**或**m>n**, 会如何?

分析 强令$f(x_i)=a_1r_1(x_i)+\dots+a_mr_m(x_i)=y_i$ (i=1, …n)（即曲线 $f(x)$过全部数据点，此时J=0）得

$$Ra=y,\quad R=\begin{bmatrix}r_1(x_1)\cdots r_m(x_1)\\ \cdots\cdots\\ r_1(x_n)\cdots r_m(x_n)\end{bmatrix}_{n\times m}\quad \begin{aligned}a&=[a_1,\cdots a_m]^T\\ y&=[y_1,\cdots y_n]^T\end{aligned}$$

若**m>n**，$\boldsymbol{a}$有无穷多解　若**m=n**，**R**可逆时$\boldsymbol{a}$有唯一解

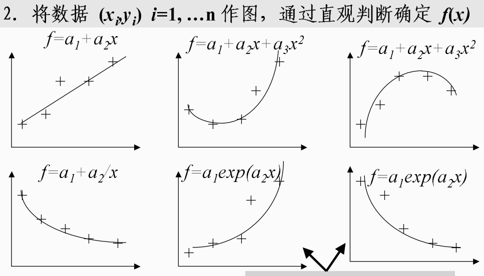
若**m<n**，超定方程组, $\boldsymbol{a}$无解；求最小二乘解

问题 3. 线性最小二乘中的“线性”指的是什么

$f(x)$对$\boldsymbol{a}$线性，于是求解线性方程组 $(R^TR)a=R^Ty$

线性最小二乘拟合中函数 $\{r_1(x), \ldots r_m(x)\}$的选取

1. 通过机理分析建立数学模型来确定$f(x)$
2. 将数据 (x_i,y_i) i=1, …n 作图，通过直观判断确定 $f(x)$



f对a非线性，怎么办

用MATLAB作线性最小二乘拟合

1. 作多项式 $f(x)=a_1x^m+\ldots+a_mx+a_{m+1}$拟合, 可利用已有程序： `a=polyfit(x,y,m)`

输入:数据`x,y` （同长度数组）;`m` （拟合多项式次数）

输出:系数`a=[a1, …am , am+1]` (数组)。

多项式在`x`点的值: `y=polyval(a,x)`

2. 对超定方程组 $R_{n\times m}a_{m\times 1}=y_{n\times 1}\ (m<n)$

仍用 $a=R\backslash y$ 可得最小二乘意义下的解

用MATLAB作线性最小二乘拟合

例. 由数据

温度t(⁰C)	20.5	32.7	51.0	73.0	95.7
电阻R(Ω)	765	826	873	942	1032

拟合 **R=a_1t+a_2**

MATLAB 5.3.lnk dianzu2

1. 用命令 `polyfit(x,y,1)`

得到 a_1=3.3940, a_2=702.4918

2. 直接用$a=R\backslash y$,结果相同。

给药方案 —— 拟合问题实例

问题

1. 在快速静脉注射的给药方式下，研究血药浓度（单位体积血液中的药物含量）的变化规律。

2. 给定药物的最小有效浓度和最大治疗浓度，设计给药方案 (每次注射剂量, 间隔时间) 。

分析

实验：血药浓度数据 **c(t) (t=0注射300mg)**

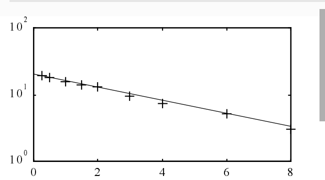
t (h)	0.25	0.5	1	1.5	2	3	4	6	8
c (μg/ml)	19.21	18.15	15.36	14.10	12.89	9.32	7.45	5.24	3.01

给药方案 —— 拟合问题实例

实验数据作图

MATLAB 5.3.lnk xueyao1

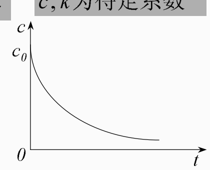
半对数坐标系 (semilogy) 下$c(t)$的图形



实验数据 ⇒ 负指数规律

$c(t)=c_0e^{-kt}$

c,k为待定系数



理论：用一室模型研究血药浓度变化规律

模型假设

1. 机体看作一个房室，室内血药浓度均匀——一室模型
2. 药物排除速率与血药浓度成正比，比例系数k(>0)
3. 血液容积v, t=0注射剂量d, 血药浓度立即为d/v

模型建立

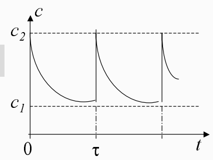
由假设2 $\dfrac{dc}{dt}=-kc$

由假设3 $c(0)=d/v$

$$\Rightarrow\quad c(t)=\frac{d}{v}e^{-kt}$$

给药方案 设计

- 设每次注射剂量D，间隔时间τ
- 血药浓度$c(t)$ 应$c_1 \le c(t) \le c_2$
- 初次剂量D_0 应加大



给药方案记作 $\{D_0, D, \tau\}$ $\quad D_0 = vc_2,\ D = v(c_2 - c_1)$

$$c_1 = c_2 e^{-k\tau} \Rightarrow \tau = \frac{1}{k}\ln\frac{c_2}{c_1}$$

给定c_1=10, c_2=25, 为确定 $\{D_0, D, \tau\}$ 只需确定参数 k,v

参数估计

由实验数据拟合曲线$c(t)$以估计k,v

参数线性化

$$c(t) = \frac{d}{v}e^{-kt} \Rightarrow \ln c = \ln(d/v) - kt$$

$$y = \ln c,\ a_1 = -k,\ a_2 = \ln(d/v) \Rightarrow y = a_1 t + a_2$$

用实验数据作线性最小二乘拟合

MATLAB 5.3.lnk xueyao2

$$a_1 = -0.2347,\ a_2 = 2.9943$$

$$(d = 300) \Rightarrow k = 0.2347\ (1/h),\ \ v = 15.02\ (l)$$

给药方案 设计

$k = 0.2347\ (1/h),\ \ v = 15.02\ (l)$ $\quad c_1$=10, c_2=25

$$D_0 = vc_2,\ D = v(c_2 - c_1) \qquad \tau = \frac{1}{k}\ln\frac{c_2}{c_1}$$

$$\Rightarrow D_0 = 375.5,\ D = 225.3,\ \tau = 3.9$$

$$D_0 = 375\ (mg),\ \ D = 225\ (mg),\ \ \tau = 4\ (h)$$

$$c(t) = \frac{d}{v}e^{-kt} \Rightarrow \ln c = \ln(d/v) - kt$$

思考：取对数化为线性最小二乘, 对结果有影响吗？

布置“插值与拟合”实验

目的

1. 掌握用MATLAB计算三种插值的方法，并对结果作初步分析；
2. 掌握用MATLAB作线性最小二乘的方法；
3. 用插值或拟合方法解决实际问题，注意二者的联系和区别。

内容

1. d； 8； 9。