拟合：1、不要求通过所有数据点，

2. 尽可能表现离散数据的趋势，尽最大可能地靠近那些数据点，

向量范数：

定义：映射 $\|\cdot\|: R^n \to R^+ \cup \{0\}$ 如满足

- 非负性：$\|X\| \geq 0$ 且 $\|X\| = 0 \iff X = 0$
- 齐次性：$\forall a \in R \quad \|aX\| = |a| \cdot \|X\|$
- 三角不等式：$\|X+Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$

则称该映射为向量范数

几种常见的范数：

1-范数：$\|X\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$

2-范数：$\|X\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$

∞-范数：$\|X\|_\infty = \max\{|x_i|\}$

1、最小二乘问题 — 在2-范数意义下距离最小

设拟合直线为 $p(x) = ax + b$　各点坐标为 (x_i, y_i)　$i = 1, 2 \dots m$

则系数 a, b 满足方程组

$$\begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} 1 & x \end{array} \\ \begin{array}{c} 1 \\ x \end{array} & \begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \end{pmatrix} \end{array} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{array}{c} y \\ \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{pmatrix} \end{array}$$

多项式拟合：设拟合多项式为 $\phi(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$

则系数 a_j 满足　(法方程)

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{m} x_i^3 & \sum_{i=1}^{m} x_i^4 & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+1} & \sum_{i=1}^{m} x_i^{n+2} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{2n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^2 y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} x_i^n y_i \end{pmatrix}$$

矛盾方程组：线性方程组 $Ax = b$ $(A \in R_{m\times n})$　当 $\mathrm{rank}(A) \neq \mathrm{rank}(A, b)$ 时无解，称为矛盾方程组。

通常当方程个数多于未知数个数时为矛盾方程组，

定理：1、设 $m > n$　$A \in R_{m\times n}$　$b \in R_{m\times 1}$　$\mathrm{rank}(A) = n$　$A^T A x = A^T b$ 称为矛盾方程组的法方程。

法方程有唯一解

2. x 为 $\min \|Ax - b\|_2$ 的解 $\iff A^T A x = A^T b$　即 x 为法方程的解

求最小二乘问题的多项式拟合：先假定拟合(多项式)函数 $\phi(x)$ 通过所有的数据点，$\{(x_i, y_i)\}$ 即得到关于 $\phi(x)$ 多项式系数的矛盾方程组，再解矛盾方程组，

例 1：对以下数据作形如 $a + bx^3$ 的曲线拟合.

x_i	-3	-2	-1	2	4
y_i	14.3	8.3	4.7	8.3	22.7

解：设 $\phi(x) = a + bx^3$ 通过所有给定的数据点，则得矛盾方程组

$$\begin{cases} a + b(-3)^3 = 14.3 \\ a + b(-2)^3 = 8.3 \\ a + b(-1)^3 = 4.7 \\ a + b \times 2^3 = 8.3 \\ a + b \times 4^3 = 22.7 \end{cases}，即 \begin{pmatrix} 1 & (-3)^3 \\ 1 & (-2)^3 \\ 1 & (-1)^3 \\ 1 & 2^3 \\ 1 & 4^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14.3 \\ 8.3 \\ 4.7 \\ 8.3 \\ 22.7 \end{pmatrix}.$$

其法方程为

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ (-3)^3 & (-2)^3 & (-1)^3 & 2^3 & 4^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & (-3)^3 \\ 1 & (-2)^3 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 4^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 58.3 \\ 1062 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow a = 10.6751,\ b = 0.1368.$

例 2：对以下数据作形如$a+bx^2$的曲线拟合.

x_i	-3	-2	-1	2	4
y_i	14.3	8.3	4.7	8.3	22.7

解：设$\phi(x)=a+bx^2$通过所有给定的数据点，则得矛盾方程组

$$\begin{cases} a+b(-3)^2=14.3 \\ a+b(-2)^2=8.3 \\ a+b(-1)^2=4.7 \\ a+b\times 2^2=8.3 \\ a+b\times 4^2=22.7 \end{cases}，即 \begin{pmatrix} 1 & (-3)^2 \\ 1 & (-2)^2 \\ 1 & (-1)^2 \\ 1 & 2^2 \\ 1 & 4^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 14.3 \\ 8.3 \\ 4.7 \\ 8.3 \\ 22.7 \end{pmatrix}.$$

其法方程为

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ (-3)^2 & (-2)^2 & (-1)^2 & 2^2 & 4^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & (-3)^2 \\ 1 & (-2)^2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 4^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 58.3 \\ 563 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow a=3.5,\ b=1.2$. 故拟合函数$\phi(x)=3.5+1.2x^2$.

例 3：对以下数据作形如ae^{bx}的曲线拟合.

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：$y=ae^{bx}\iff lny=lna+bx$. 令$z_i=lny_i$，可得离散数据$\{(x_i,z_i)\}_{i=1}^{8}$：

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
z_i	2.7279	3.0204	3.3105	3.6000	3.8939	4.1836	4.4751	4.7673

对数组$\{(x_i,z_i)\}_{i=1}^{8}$进行线性拟合$z=A+Bx$，可得法方程为：

$$\begin{pmatrix} 8 & 36 \\ 36 & 204 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 29.9787 \\ 147.1350 \end{pmatrix}$$

$\Longrightarrow A\approx 2.4369,\ B\approx 0.29122$. 于是 $a=e^A\approx 11.4371,\ b=B\approx 0.29122$.
所求拟合曲线为

$$y=11.4371\times e^{0.29122x}$$