重庆大学数学与统计学院

国家级精品课程数学实验课件

数学实验之—数据拟合

SHUXUESHIYANZHISHUJUNIHE

课件制作：数学实验课程组

你可以自由地访问网站math.cqu.edu.cn/查看重庆大学数学实验与数学建模的最新信息，资源共享课的拓展资源及相关资料，以便相互学习.

实验目的

[1] 了解最小二乘拟合的原理，掌握用MATLAB作最小二乘拟合的方法。

[2] 通过实例学习如何用拟合方法解决实际问题，注意与插值方法的区别；通过实例理解参数辨识的方法。

[3] 通过实验体验用函数拟合解决实际问题的全过程。

引 例

机械零件的设计与加工

数学实验之
－－数据拟合

实验目的

引　例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范　例

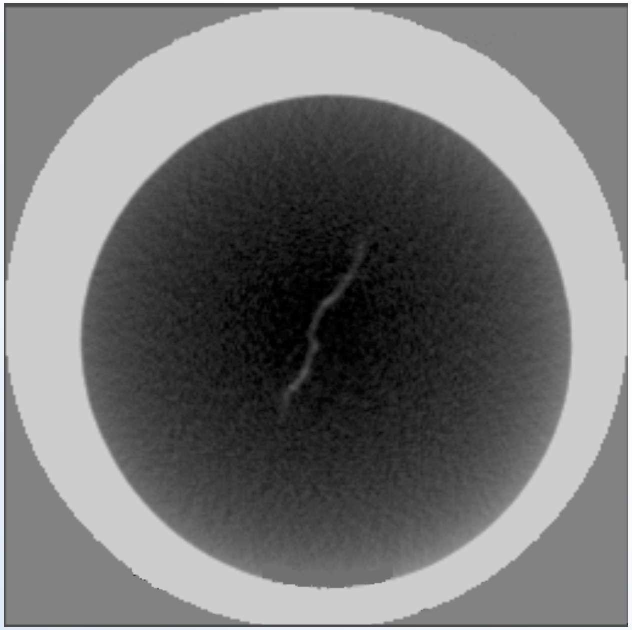
课堂延伸

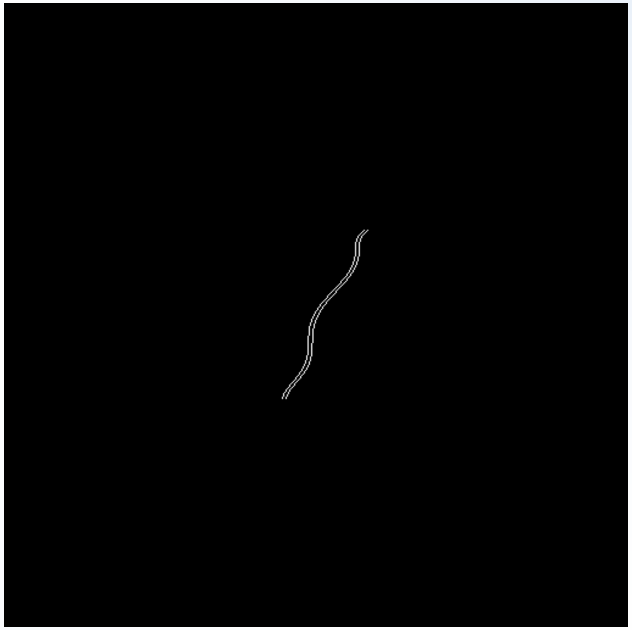
布置实验

结　束

引 例

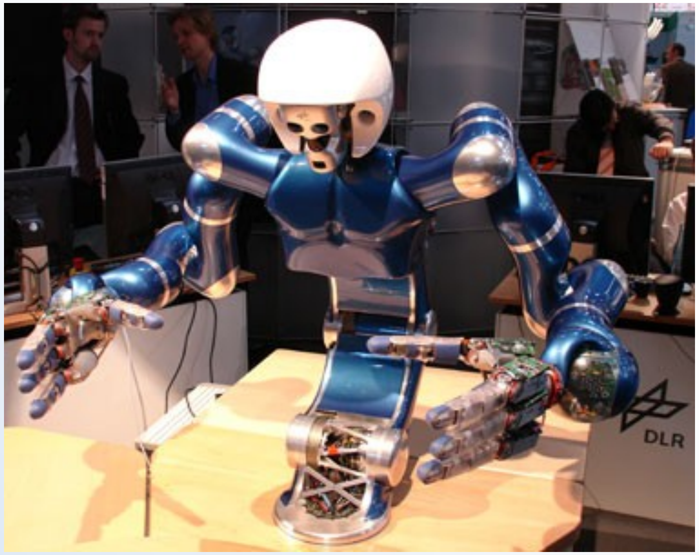
工业CT图像裂纹边缘检测与识别





引 例

机器人识别定形工具柄

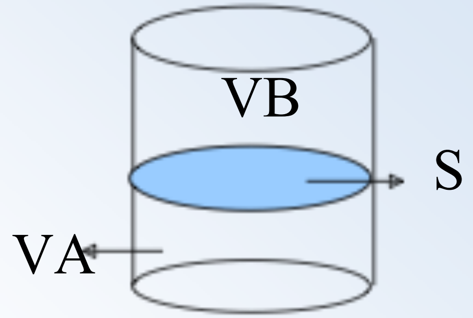


数学实验之
——数据拟合

实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

引 例

医用薄膜的渗透率



问题背景:某种医用薄膜在试制时需测定其被物质分子穿透的能力。

测定方法：用面积为S的薄膜将容器分成两部份，在两部分中分别注满该物质的两种不同浓度的溶液。此时该物质分子就会从一侧向另一侧扩散。平均每单位时间通过单位面积薄膜的物质分子量与膜两侧溶液的浓度差成正比，比例系数K称为渗透率。定时测量容器中薄膜某一侧的溶液浓度，以此确定K。

引 例

假设

1）薄膜两侧的溶液始终是均匀的；

2）在单位时间内通过单位面积薄膜的物质分子量与膜两侧溶液的浓度差成正比。

3）薄膜是双向同性的即物质从膜的任何一侧向另一侧渗透的性能是相同的。

引 例

解决问题的思路

第一步：通过机理分析确定容器一侧的浓度随时间的变化规律：

C=CB(t)

第二步：利用实验数据(tj,CB(tj))，求出其中的未知参数，包括渗透率K.

引 例

求浓度随时间的变化规律

考察时段[t， t+Δt]薄膜的一侧容器中该物质质量的变化。

1）以容器A侧为例，在时段[t， t+Δt]物质质量的增量为：

$$V_A C_A(t+\Delta t) - V_A C_A(t)$$

由假设2,在时段[t， t+Δt]，从B侧渗透至A侧的该物质的质量为：

$$K(C_B - C_A)S\Delta t$$

引 例

求浓度随时间的变化规律

于是有

$$V_A C_A(t+\Delta t) - V_A C_A(t) = K(C_B - C_A)S\Delta t$$

两边除以Δt，并令Δt→0取极限再稍加整理即得：

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{SK}{V_A}(C_B - C_A) \qquad (1)$$

数学实验之

——数据拟合

实验目的

引 例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范 例

课堂延伸

布置实验

结 束

引 例

求浓度随时间的变化规律

2) 注意到任意时刻，整个溶液中含有该 物质的质量,与初始时刻该物质的含量相同，因此

$$V_A C_A(t) + V_B C_B(t) = V_A \alpha_A + V_B \alpha_B$$

其中 α_A、α_B 分别表示在初始时刻两侧溶液的浓度.

引 例

求浓度随时间的变化规律

从而：
$$C_A(t)=\alpha_A+\frac{V_B}{V_A}\alpha_B-\frac{V_B}{V_A}C_B(t)$$

代入式（1）：
$$\frac{dC_A}{dt}=\frac{SK}{V_A}(C_B-C_A)$$

$$\frac{dC_B}{dt}+SK\left(\frac{1}{V_A}+\frac{1}{V_B}\right)C_B=SK\left(\frac{\alpha_A}{V_B}+\frac{\alpha_B}{V_A}\right)$$

加上初值条件： $C_B(0)=\alpha_B.$

解之得：
$$C_B(t)=\frac{\alpha_A V_A+\alpha_B V_B}{V_A+V_B}+\frac{V_A(\alpha_B-\alpha_A)}{V_A+V_B}e^{-SK\left(\frac{1}{V_A}+\frac{1}{V_B}\right)t}$$

引 例

待定参数的确定

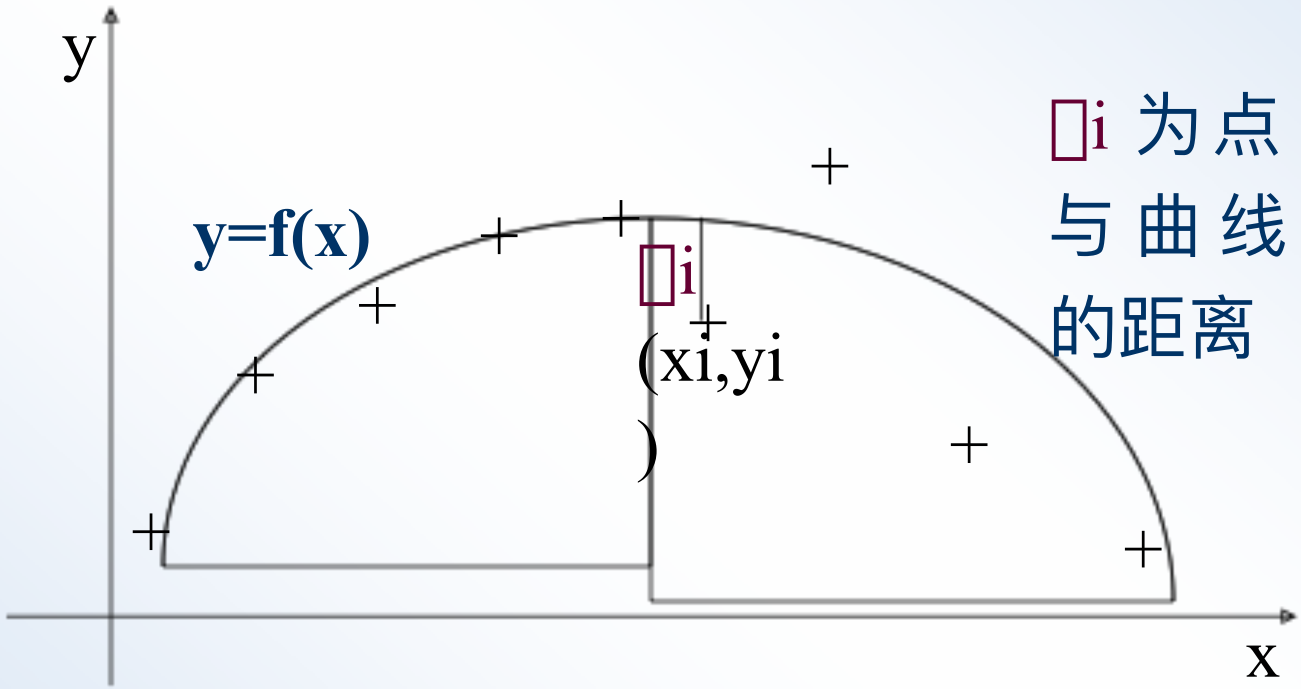
$$C_B(t)=\frac{\alpha_A V_A+\alpha_B V_B}{V_A+V_B}+\frac{V_A(\alpha_B-\alpha_A)}{V_A+V_B}e^{-SK(\frac{1}{V_A}+\frac{1}{V_B})t}$$

问题归结为利用CB在时刻tj的测量数据Cj(j=1,2,...,N)来确定（辨识）K 和 α_A、α_B

容器的B部分溶液浓度的测量数据

Tj (秒)	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
Cj (×10□5)	4.54	4.99	5.35	5.65	5.90	6.10	6.26	6.39	6.50	6.59

曲线拟合的基本原理



□i 为点（xi,yi) 与曲线 y=f(x) 的距离

已知一组（二维）数据，即平面上 n个点（xi,yi) 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。

数学实验之
——数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

曲线拟合的基本原理

问题的数学模型

步骤：1) 选定一类函数

f(x，a1，a2，…，am)　(1)

其中 a1,a2, …am 为待定常数。

2) 确定参数a1,a2, …am

准则(最小二乘准则)：使n个点（xi,yi)与曲线 y=f(x，a1，a2，…，am) 的距离 i 的平方和最小。

曲线拟合的基本原理

问题的数学模型

记 $$J(a_1, a_2, \boxed{?} a_m) = \sum_{i=1}^{n} \delta_i^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} [f(x_i, a_1, \boxed{?}, a_m) - y_i]^2 \qquad (2)$$

问题归结为：求 a1,a2, …am 使 J(a1,a2, …am) 最小。这样的拟合称为最小二乘拟合。

数学实验之
－－数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

曲线拟合的基本原理

问题的解法——线性最小二乘法

特别，若选定一组函数

r1(x), r2(x), …rm(x), m<n,

令 f(x,a1,a2, …am)=a1r1(x)+ …+amrm(x)

其中 a1,a2, …am 为待定系数。

当f具有上述形式，且按最小二乘准则确定待定系数时，称这样的拟合为线性最小二乘拟合，称对应的函数f(x,a1,a2, …am) 为已知数据点的线性最小二乘拟合函数。

曲线拟合的基本原理

想

1) 除了最小二乘准则（即各点误差的平方和最小），你认为还可以用怎样的拟合准则?

2) 比较起来，最小二乘准则有什么优点?

数学实验之
——数据拟合

实验目的

引　例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范　例

课堂延伸

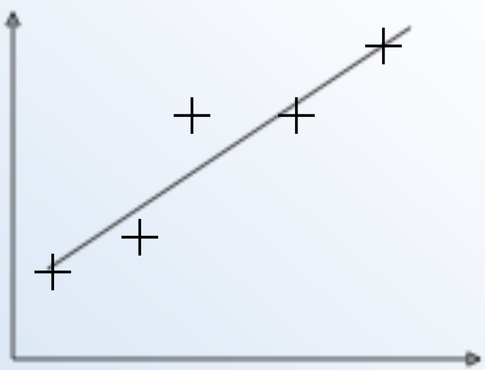
布置实验

结　束

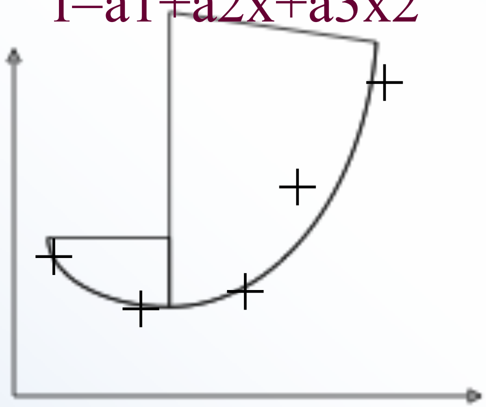
最小二乘拟合函数的选取

1. 将数据 (xi,yi) i=1, …n 作图，通过直观判断确定 f:

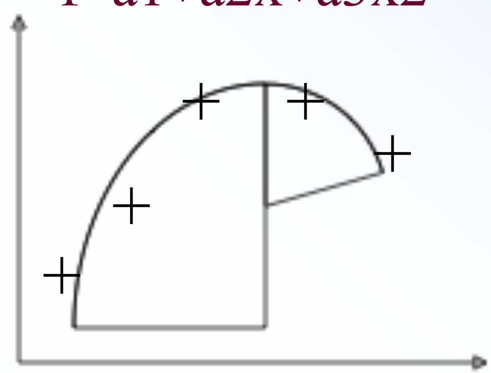
f=a1+a2x



f=a1+a2x+a3x2

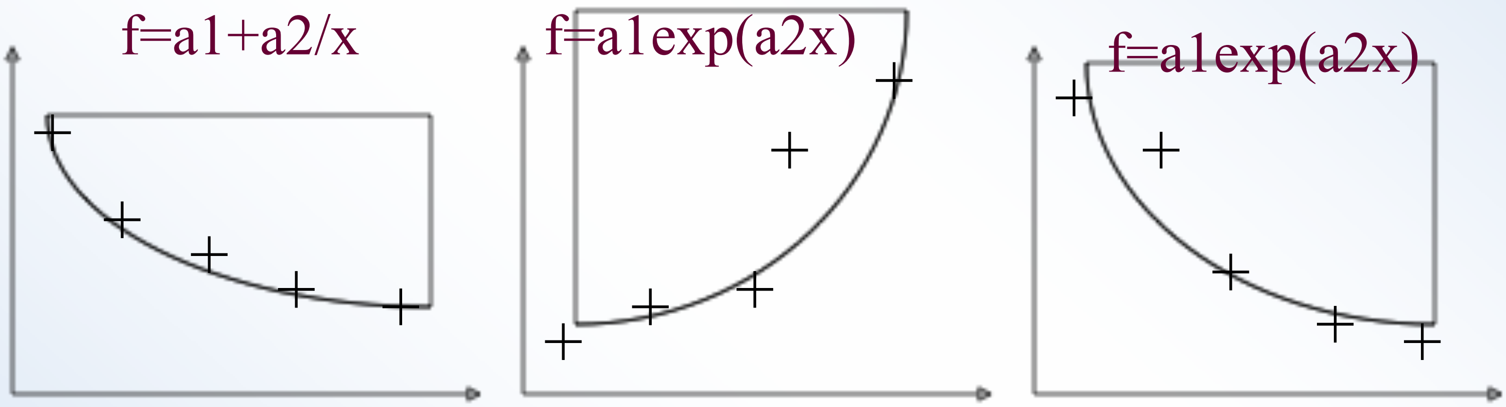


f=a1+a2x+a3x2



数学实验之
－－数据拟合
实验目的
引 例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范 例
课堂延伸
布置实验
结 束

最小二乘拟合函数的选取



2. 通过机理分析建立数学模型来确定 f。

用MATLAB作最小二乘拟合

1. 多项式拟合（一元） **polyfit**

2. 显函数的拟合(一元或多元非线性) **lsqcurvefit**

3. 隐函数的拟合(一元) **lsqnonlin或fsolve**

解非线性函数最小平方和问题

4. 非线性回归(多元) **nlinfit**

5. 小结

用MATLAB作最小二乘拟合

1. **多项式拟合：**

作多项式f(x)=a1xm+…+amx+am+1函数拟合，可利用已有程序polyfit,其调用格式为:

```
a=polyfit(x,y,m)
```

系数　　数据点　　拟合多项式次数

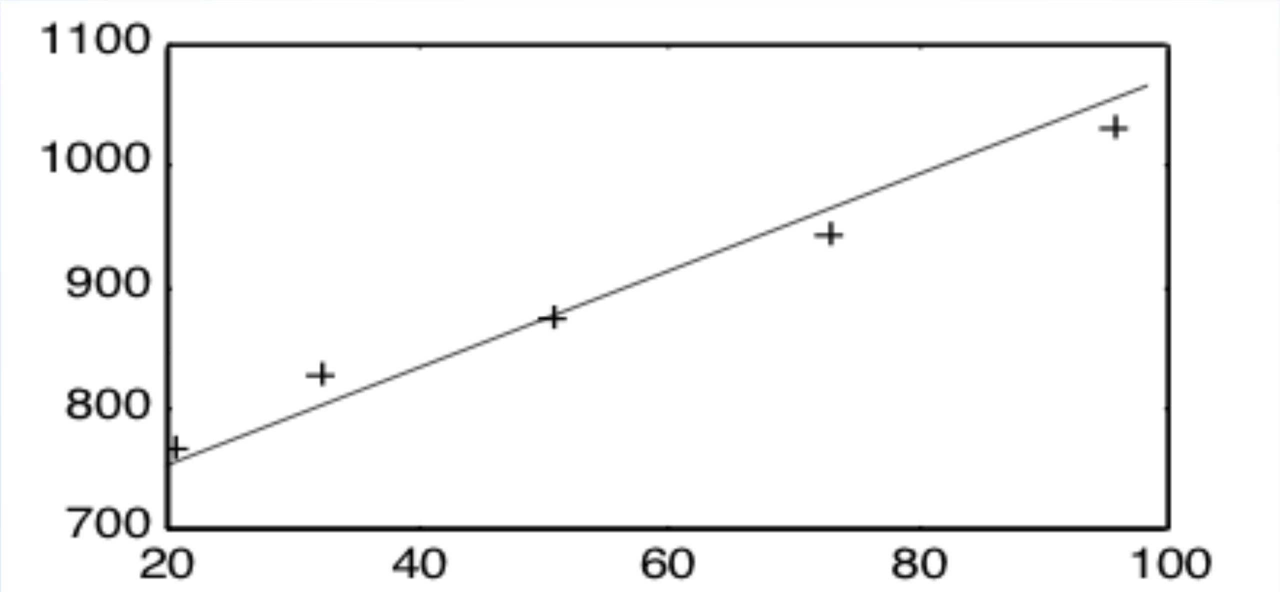
用MATLAB作最小二乘拟合

1.多项式拟合

例.已知热敏电阻数据：

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

求电阻R随温度t的变化规律。



数学实验之
——数据拟合

实验目的

引　例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范　例

课堂延伸

布置实验

结　束

用MATLAB作最小二乘拟合

1.多项式拟合

1) 选取拟合函数 R= a1t+a2

2) 用命令polyfit(x,y,m)作最小二乘拟合

3) 编写MATLAB程序dianzu.m，并运行得到：

a1=3.3940，a2=702.4918

用MATLAB作最小二乘拟合

1.多项式拟合(一元)

```
t=[20.5 32.5 51 73 95.7];
r=[765 826 873 942 1032];
aa=polyfit(t,r,1);
a=aa(1)
b=aa(2)
y=polyval(aa,t);
plot(t,r,'k+',t,y,'r')
```

M文件
dianzu.m

用MATLAB作最小二乘拟合

2. 显函数的拟合(非线性):

作一般的最小二乘曲线拟合，用函数非线性函数f(a,x)去拟合数据（xdatai,ydatai) (i=1,…,n), 可利用已有程序lsqcurvefit,它是用来求解下述问题中的参数向量a的，即最小化最小二乘误差。

$$\min_a \sum_i [f(a, xdata_i) - ydata_i]^2$$

用MATLAB作最小二乘拟合

2. 显函数的拟合(一元或多元非线性):

函数lsqcurvefit的调用格式为:

[a, resnorm, residual]=lsqcurvefit('f', a0, xdata,ydata)

待定常数

误差平方和

各数据点处的误差

函数M文件

拟合函数y=f(a,x)的函数M—文件

a 的初值

数据点坐标向量或矩阵

实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

用MATLAB作最小二乘拟合

2. 显函数的拟合(非线性)

例：用函数

$y(x)=a1*exp(-a2*x)+a3*exp(-a4*x)$

拟合下列数据点：

xdata=[0:.1:2]

ydata=[5.8955 3.5639 2.5173 1.9790 1.8990 1.3938 1.1359 1.0096 1.0343 0.8435 0.6856 0.6100 0.5392 0.3946 0.3903 0.5474 0.3459 0.1370 0.2211 0.1704 0.2636]

1. 用命令 lsqcurvefit('fun',a0,x,y)

用MATLAB作最小二乘拟合

2. 显函数的拟合(非线性)

M文件excurfit.m

```
a0=[1,1,1,0];
xdata=[0:.1:2];      %ydata省略;
[a,resnorm,residual,flag,output]=lsqcurvefit('fitfu1',
a0,xdata,ydata)
xi=linspace(0,2,200);
yi=fitfu1(a,xi);
plot(xdata,ydata,'ro',xi,yi)
xlabel('x'),ylabel('y=f(x)'),
title('nonlinear curve fitting')
```

用MATLAB作最小二乘拟合

3. 隐函数的拟合(一元)

例：已知隐函数F(x,y,a,b)=sin(ax)+xeby-y=0,其中a和b是参数,用该函数拟合下列数据

x=0:0.5:5;

y=[0 -0.8227 -1.0390 -1.0562

-0.9014 -0.7325 -0.5280 -0.5246 -0.5403

-0.7066 -0.8348];

求参数a和b的值。

用MATLAB作最小二乘拟合

3. 隐函数的拟合(一元)

解决的途径：现有数据点(xi,yi),i=1,…,n,分别代入上面的方程F(xi,yi,a,b)=0，得到一个超定方程组，其中a和b是未知量，可以使用命令fsolve或lsqnonlin(解非线性最小二乘问题)求解该超定方程组。

用MATLAB作最小二乘拟合

3. 隐函数的拟合(一元)

解决的途径：现有数据点(xi,yi),i=1,…n,分别代入上面的方程F(xi,yi,a,b)=0，得到一个超定方程组，其中a和b是未知量，可以使用命令fsolve或lsqnonlin(解非线性最小二乘问题)求解该超定方程组。

用MATLAB作最小二乘拟合

3. 隐函数的拟合(一元)

lsqnonlin 解非线性最小平方问题，即

$$\min_{a}[F_1(a)^2+F_2(a)^2+\boxed{?}+F_n(a)^2]$$

其调用格式为 a=lsqnonlin(FUN,a0),从a0开始,寻求FUN中函数的平方和的极小值. FUN以a为输入,返回n个函数Fk(a)(k=1,2,…,n)在a的函数值F=[F1(a),F2(a),…,Fn(a)],一个向量.

```
[x,resnorm,res,exitf,out]=
lsqnonlin(@fun,x0,lb,ub,options,P1,…
)
```

用MATLAB作最小二乘拟合

3. 隐函数的拟合(一元)

函数M文件

```
function F=impex1(A)
x=0:0.5:5;
y=[0   -0.8227   -1.0390   -1.0562   -0.9014 -0.7325
  -0.5280   -0.5246   -0.5403   -0.7066  -0.8348];
for i=1:11
   F(i)=sin(A(1)*x(i))+x(i)*exp(A(2)*y(i))-y(i)^2;
end
```

用MATLAB作最小二乘拟合

3. 隐函数的拟合(一元)

脚本M文件

[A, rn, res, flag, out]= lsqnonlin('impex1',[1 2])

输出结果： **A =1.2551 2.1595,   rn=0.0511**

res =0 -0.0050 -0.0229 -0.0105 0.0632 -0.0188 0.0963 -0.0972 0.0007 -0.1141 0.1199

f lag=3

out : firstorderopt: 3.0076e-005, iterations: 5, funcCount: 18, cgiterations: 5,

algorithm: 'large-scale: trust-region reflective Newton', message: [1x87 char]

用MATLAB作最小二乘拟合

4.多元非线性回归

[b,R,J]=nlinfit(x,y,'model',b0)

用最小二乘法估计非线性回归函数的中的参数

x__自变量数据矩阵（每列一个变量），

y__因变量向量,

model__模型的函数名,

m文件: y =f(b,x),b为待估系数▯,

b0__▯ 的初值.

输出：b__▯的估计，R__残差，J__估计误差的Jacobi矩阵

数学实验之
——数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

用MATLAB作最小二乘拟合

4.多元非线性回归

例如：用一个三元非线性函数hougen去拟合数据X,y

文件函数hougen.m

```
function y= hougen(beta,x)
b1 = beta(1);b2 = beta(2);b3 = beta(3);b4 = beta(4);b5 = beta(5);
x1 = x(:,1);x2 = x(:,2);x3 = x(:,3);
y = (b1*x2 - x3/b5)./(1+b2*x1+b3*x2+b4*x3);
```

脚本文件 huigui.m

```
S = load('reaction');
X = S.reactants; y = S.rate; beta0 = S.beta;
[beta,R,J] = nlinfit(X,y,@hougen,beta0)
```

用MATLAB作最小二乘拟合

4.多元非线性回归

运行脚本文件 huigui.m，得到

beta = 1.2526 0.0628 0.0400 0.1124 1.1914

R = 0.1321 -0.1642 -0.0909 0.0310 0.1142 0.0498 -0.0262 0.3115 -0.0292 0.1096 0.0716 -0.1501 -0.3026

J =6.8739 -90.6525 -57.8634 -1.9288 0.1614

3.4454 -48.5350 -13.6239 -1.7030 0.3034

5.3563 -41.2094 -26.3039 -10.5216 1.5095

1.6950 0.1091 0.0186 0.0278 1.7913

2.2967 -35.5653 -6.0537 -0.7567 0.2023

11.8669 -89.5648 -170.1730 -8.9565 0.4400

……

实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

用MATLAB作最小二乘拟合

想

1.参数方程中参数的辩识问题

2.积分函数中参数的辩识问题

3.微分方程中参数的辩识问题

用MATLAB作最小二乘拟合（小结）

1. 多项式拟合（一元）polyfit，polyval

P=polyfit(xdata,ydata,n)

2. 显函数的拟合(一元或多元非线性)

[a,resnorm]=lsqcurvefit('fun',a0,xdata,ydata)

3. 隐函数的拟合(一元) lsqnonlin或fsolve

解一组非线性函数最小平方和问题

[x,resnorm]=lsqnonlin('fun',x0)

4. 非线性回归(多元) nlinfit

[b,residual]=nlinfit(xdata,ydata,'model',b0)

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

问题回顾

求解方法

1. 函数拟合法
2. 非线性规划法
3. 导函数拟合法
4. 线性化迭代法

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

问题回顾

前面得到的容器B侧的浓度函数为：

$$C_B(t)=\frac{\alpha_A V_A+\alpha_B V_B}{V_A+V_B}+\frac{V_A(\alpha_B-\alpha_A)}{V_A+V_B}e^{-SK\left(\frac{1}{V_A}+\frac{1}{V_B}\right)t}$$

问题归结为利用曲线拟合方法和测量数据(tj ,Cj)(j=1,2,...,N)来确定（辨识）CB中的参数 K 和 α_A、α_B。

容器的B部分溶液浓度的测量数据

Tj (秒)	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000
Cj (×10[illegible]5)	4.54	4.99	5.35	5.65	5.90	6.10	6.26	6.39	6.50	6.59

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

1. 函数拟合法

拟合函数化简

引入 $$a=\frac{\alpha_A V_A+\alpha_B V_B}{V_A+V_B},\quad b=\frac{V_A(\alpha_B-\alpha_A)}{V_A+V_B}$$

从而 $$C_B(t)=a+be^{-SK\left(\frac{1}{V_A}+\frac{1}{V_B}\right)t}$$

若 $V_A=V_B=1000\,cm^3, S=10cm^2$

将其代入上式有：

$$C_B(t)=a+be^{-0.02Kt}$$

用函数CB(t)来拟合所给的实验数据，从而估计出其中的参数a,b,K。

数学实验之
——数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

编写MATLAB程序

1）编写函数M-文件 nongdu.m

```
function f = nongdu(x,tdata)
f = x(1)+x(2)*exp(-0.02*x(3)*tdata);
```

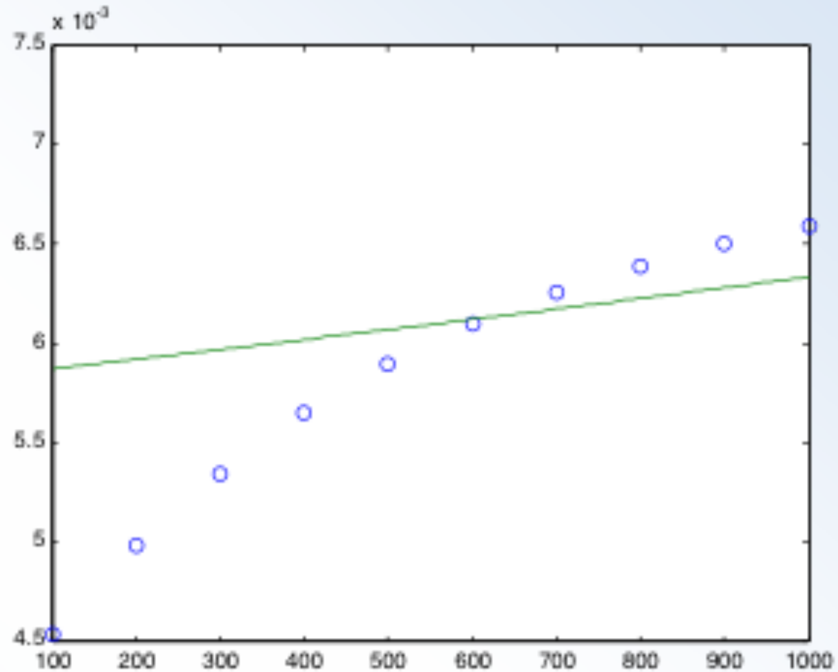
其中 x(1) = a; x(2) = b; x(3) = k;

2) 编写M文件 (baomo.m)

```
tdata = linspace(100,1000,10);
cdata = 1e-05.*[454 499 535 565 590 610 626 639 650 659];
x0 = [0,0,0];
[x,resnorm,residual] = lsqcurvefit('nongdu',x0,tdata,cdata)
t=linspace(100,1000,100);
c=nongdu(x,t);
plot(tdata,cdata,'o',t,c)
```

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

X0=[0,0,0]时的结果



结果不合理

x = 0.0029 0.0029 -0.0081

resnorm = 3.3490e-006

residual =

0.0013 0.0009 0.0006 0.0004 0.0002 0.0000 -0.0001

-0.0002 -0.0002 -0.0003

数学实验之

－－数据拟合

实验目的

引 例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范 例

课堂延伸

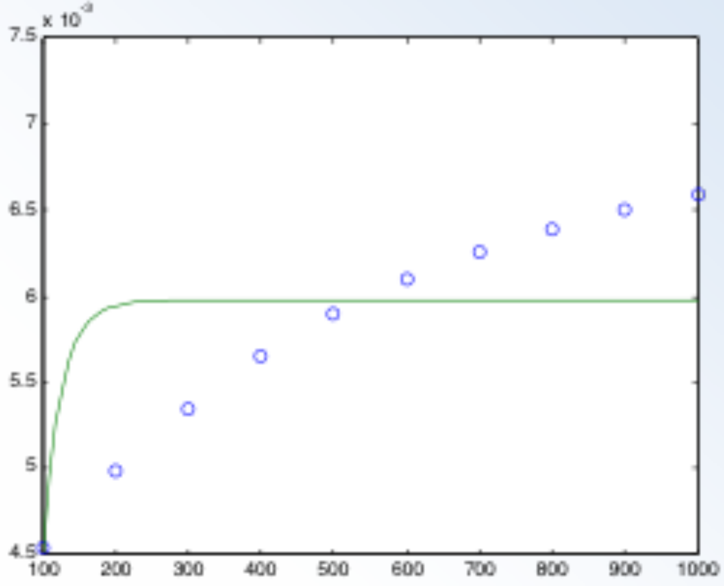
布置实验

结 束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

X0=[1,1,1]时的结果

结果也不合理



x =0.0060   -0.0727   1.9545

resnorm = 2.3380e-006

residual =1.0e-003 *

-0.0228   0.9565   0.6252   0.3257   0.0757   -0.1243   -0.2843

-0.4143   -0.5243   -0.6143

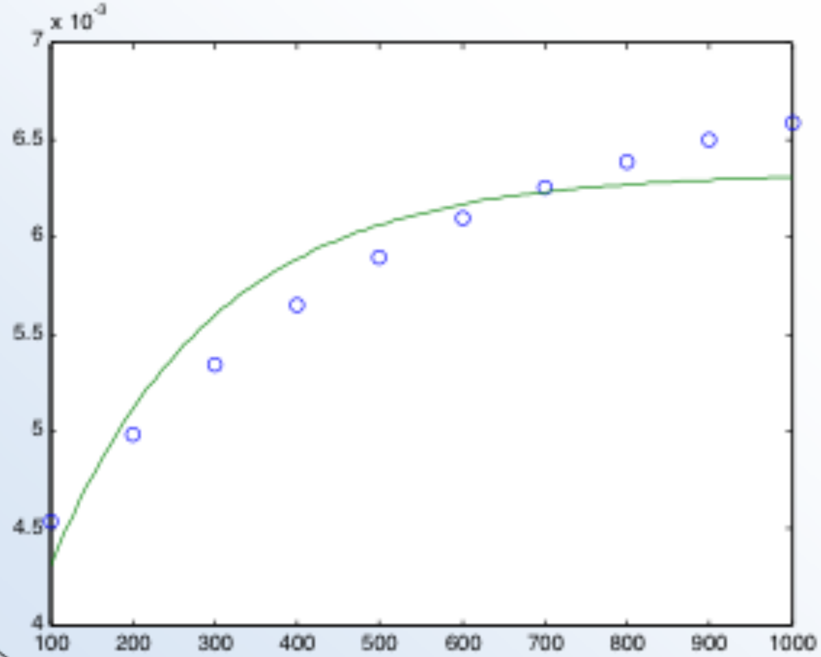
用拟合方法确定医用薄膜渗透率

改变初值， x0 = [0.2,0.05,0.05]的结果

x = 0.0063 -0.0034 0.2542

resnorm = 3.5604e-007 %（平方和误差）

residual = 1.0e-003 *[-0.2322 0.1243 0.2495 0.2413 0.1668 0.0724 -0.0241 -0.1159 -0.2030 -0.2792] %（残差）



比较合理，
是否还可以
改进？

数学实验之
——数据拟合

实验目的

引 例

拟合原理

拟合函数

软件求解

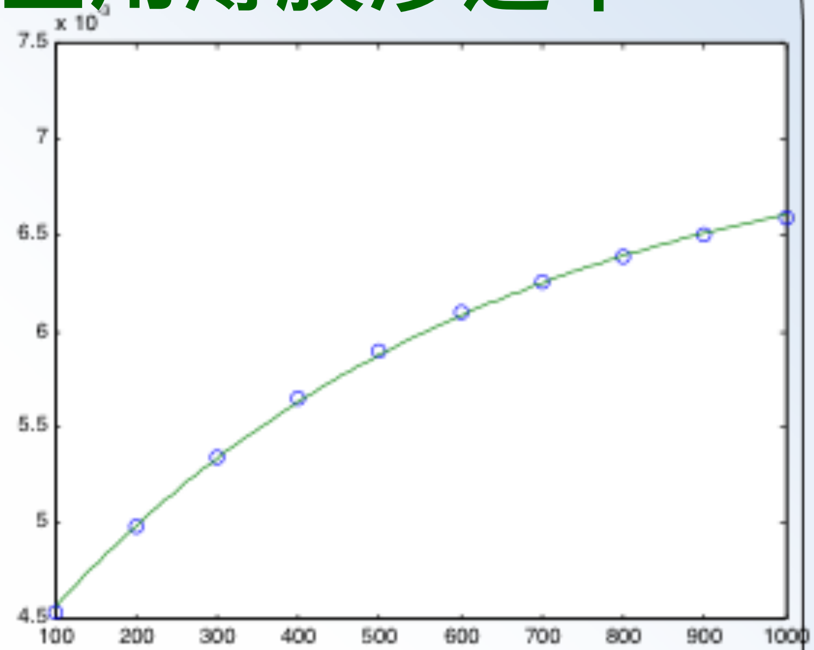
范 例

课堂延伸

布置实验

结 束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率



改变初值，再运行

令　x0 = [0.2,0.05,0.1];

再运行刚才程序，得到

x = 0.0071　-0.0030　0.0911

resnorm = 2.3850e-009

residual = 1.0e-004 *

0.2616　-0.0101　-0.0863　-0.1496　-0.2021　-0.1624　-0.0625

0.0542　0.1348　0.2188

对初值x0特别敏感，不容易选到合适的x0。一般x0越接近参数的真值，效果越好，即越容易收敛到全局最优。

数学实验之
——数据拟合

实验目的

引　例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范　例

课堂延伸

布置实验

结　束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

随机产生初值，筛选出最佳的初值及对应的解

```
tdata = linspace(100,1000,10);
cdata = 1e-05.*[454 499 535 565 590 610 626 639 650 659];
for k=1:1000
  x0 =rand(1,3);
  [x1,resnorm0,residual0] = lsqcurvefit('nongdu',x0,tdata,cdata);
  if resnorm0<resnorm
     x=x1; resnorm=resnorm0; residual=residual0; x00=x0;
  end,end
x00,x,resnorm,residual
t=linspace(100,1000,100); c=nongdu(x,t);
plot(tdata,cdata,'o',t,c)
```

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

结果

3) 输出结果: x = 0.0070   -0.0030   0.1008

resnorm = 6.0045e-011

即 k =0.1008, a =0.0070, b= -0.0030,

由于

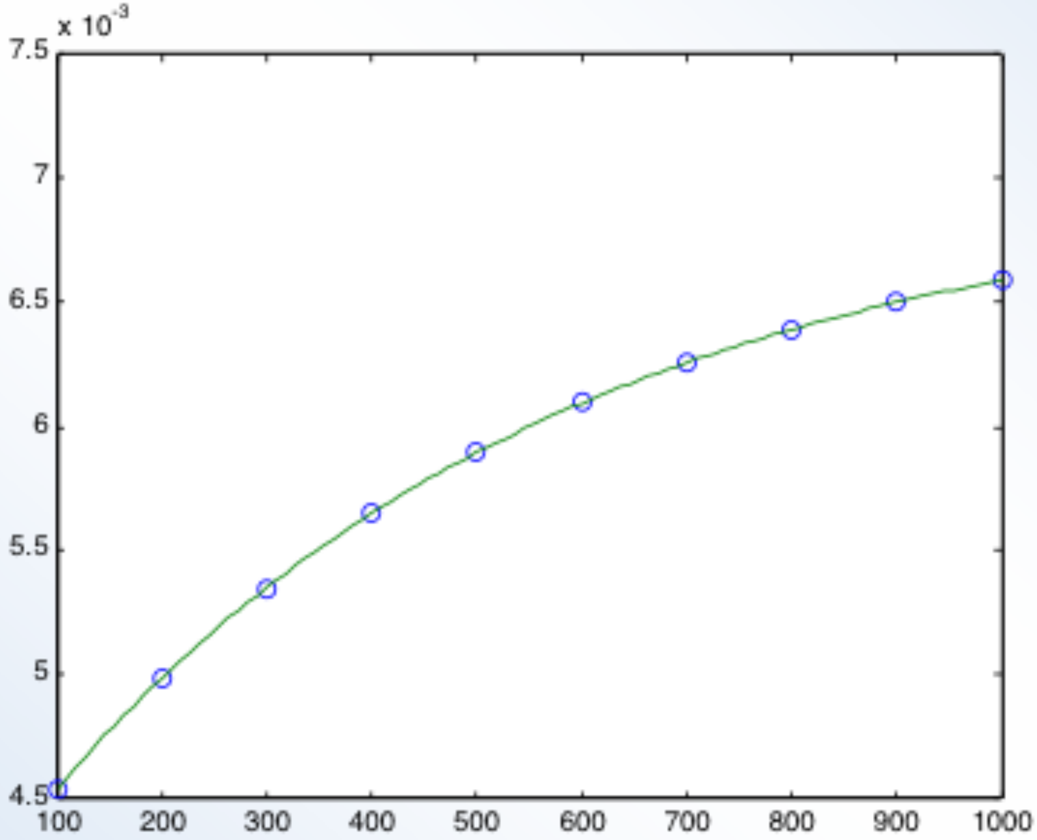
$$a=\frac{\alpha_A V_A+\alpha_B V_B}{V_A+V_B},\quad b=\frac{V_A(\alpha_B-\alpha_A)}{V_A+V_B}$$

进一步求得:

$$\alpha_B=0.004(mg/cm^3),$$

$$\alpha_A=0.01(mg/cm^3)$$

函数拟合法的拟合效果



数学实验之
——数据拟合

实验目的

引　例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范　例

课堂延伸

布置实验

结　束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

结果及误差分析

得出的结果及相应的误差总结于下表，误差为计算数据与实验数据之差的平方和。

方法	a	b	k	误差E
函数拟合	0.007	-0.0030	0.1008	6.0045e-01 1

想

1)如果拟合出来的误差很大，结果明显不合理，即解最小二乘拟合问题的函数lsqcurvefit没有收敛到最优解，该怎么办?

2)如果微分方程没有解析解，又该怎么办?

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

提示

如果拟合不收敛或误差很大，有哪些方法改进?

1）如果拟合出来的误差很大，结果明显不合理，可以随机改变参数的初值，筛选出最优初值。

2）通过变量代换，使拟合函数关于待求参数是线性的，这样的最小二乘拟合问题是二次规划问题，很容易收敛。

3)利用导函数进行拟合，导函数值可用差商近似。

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

2. 非线性规划法

利用CB在时刻tj的测量数据Cj(j=1,2,...,N)来辨识K和 α_A, α_B。

问题可转化为求函数

$$E(K,\alpha_A,\alpha_B)=\sum_{j=1}^{N}(C_B(t_j)-C_j)^2 \Rightarrow \min$$

即求函数

$$E(K,a,b)=\sum[a+be^{-0.02Kt_j}-C_j]^2$$

的最小值点（K，a，b）。

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

2. 非线性规划法

MATLAB编程

```
function f = errorfun(x)
global tdata cdata
f = sum((x(1)+x(2)*exp(-0.02*x(3)*tdata)-cdata).^2);
```

误差平方和的文件函数errorfun.m

```
tdata = linspace(100,1000,10);
cdata = 1e-05.*[454 499 535 565 590 610 626 639 650 659];
global tdata cdata
x0 = [0.2,0.05,0.05];
[x, error]=fminunc('errorfun',x0)
t=linspace(100,1000,100);c=nongdu(x,t
plot(tdata,cdata,'o', t,c,'r')
```

优化脚本文件
baomnlinprog.m

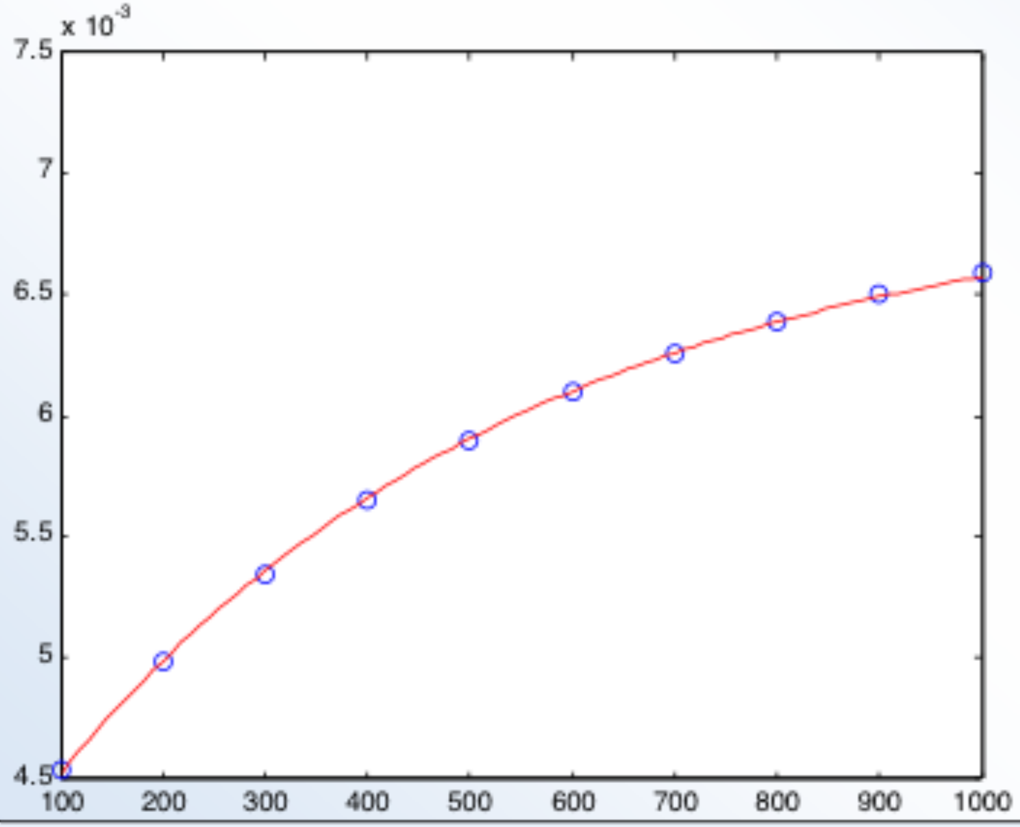
用拟合方法确定医用薄膜渗透率

2. 非线性规划法

结果

x = 0.0069   -0.0030   0.1076

error =9.4424e-10



用拟合方法确定医用薄膜渗透率

3. 导函数拟合法

$$\frac{dC_B}{dt} = k[0.01(\alpha_A + \alpha_B) - 0.02C_B]$$

令 $h = \alpha_A + \alpha_B$

上式变为：$$\frac{dC_B}{dt} = k(0.01h - 0.02C_B)$$

这可以看作 $\frac{dC_B}{dt}$ **随CB的变化规律**

若知道一组数据 $[C_j, (\frac{dC_B}{dt})_j]$ (j=1,2,...,N)

则可用最小二乘拟合的方法来求出函数 $\frac{dC_B}{dt}$

中的未知参数K和h。

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

3. 导函数拟合法

即为求参数K, a使下列误差函数达到最小：

$$J(K,a)=\sum_{j=1}^{N}[(\frac{dC_B}{dt})_j-K(0.01a-0.02C_j)]^2$$

该问题等价于用函数 f(K,a,CB)=K(0.01a-0.02CB)来拟合数据

$$[C_j,(\frac{dC_B}{dt})_j] \qquad (j=1, 2,...,N)$$

用上述方法求出参数K, a.

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

前面带初始条件的一阶线性微分方程的解为

$$C_B(t) = a + be^{-0.02Kt}$$

其中： $a = 0.5(\alpha_A + \alpha_B),\ \ b = 0.5(\alpha_B - \alpha_A)$

如果得到了参数K的一个较好的近似值K*，则将CB(t)关于K在K*处展开，略去□□K的二次及以上的项得CB(t)的一个近似式

$$C_B(t) \approx a + be^{-0.02K^*t} + 0.02b \cdot \Delta K \cdot e^{-0.02K^*t} \cdot t$$

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

通过极小化

$$E(a,b,K) = \sum_{j=1}^{n} \left[C_j - \left(a + be^{-0.02K^* t_j} + d \cdot e^{-0.02K^* t_j} \cdot t_j \right) \right]^2$$

其中 $d = b \cdot \Delta K$

确定a, b, d, 再由□K=d/b得到K*的修正值□K。K*□K*-□K, 得到K的一个新的近似值，用同样的方法再求新的修正值□K。这个过程可以不断重复，直到修正值足够小为止。

数学实验之
——数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

文件函数baomofun.m

```
function f=baomofun(a,tdata)
global K
f=a(1)+a(2)*exp(-0.02*K*tdata)+a(3)*0.02*tdata.*exp(-0.02*K*tdata);
```

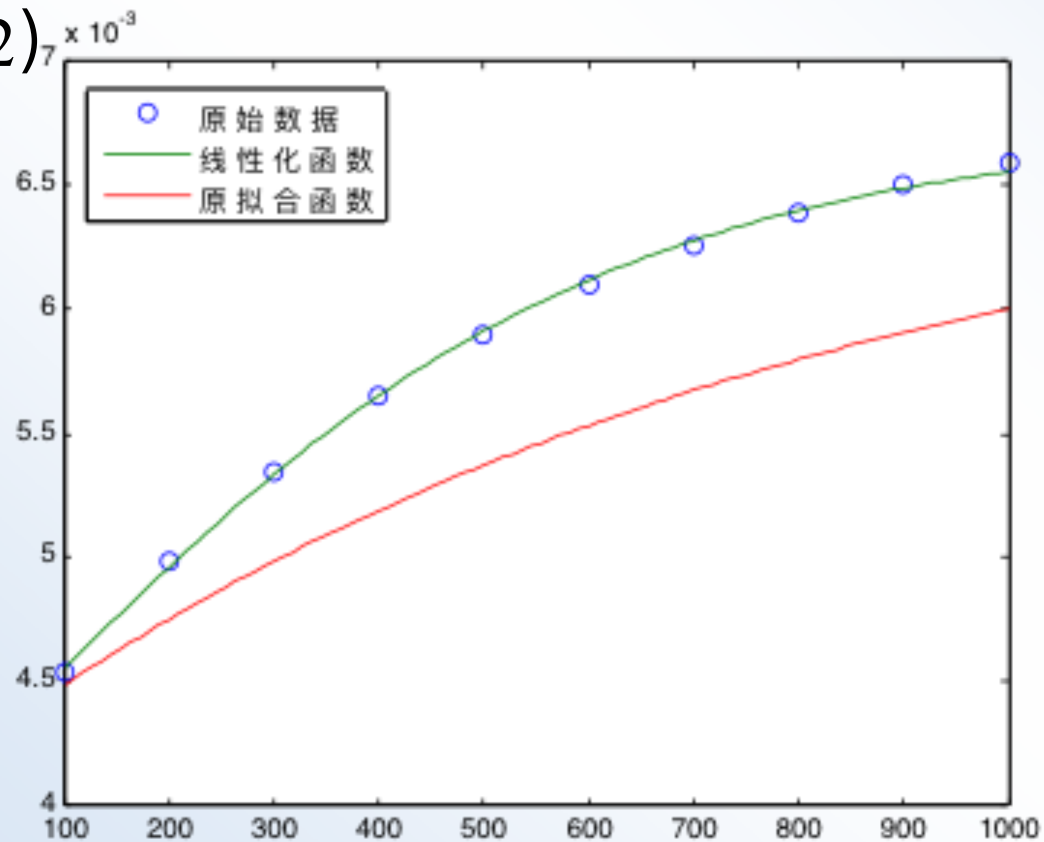
脚本文件baomolin.m

```
tdata = linspace(100,1000,10);
cdata = 1e-05.*[454 499 535 565 590 610 626 639 650
659];
a0=[0.2,0.1,0.3];   global K
a=lsqcurvefit('baomofx',a0,tdata,cdata)
t=linspace(100,1000,100); c=baomofx(a,t);
K=K-a(3)/a(2),a(3)=K;  c1=nongdu(a,t);
plot(tdata,cdata,'o',t,c,t,c1,'r')
e=nongdu(a,tdata)-cdata;   renorm=sum(e.*e)
```

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

第1次迭代的误差图（取k的初值为0.2）

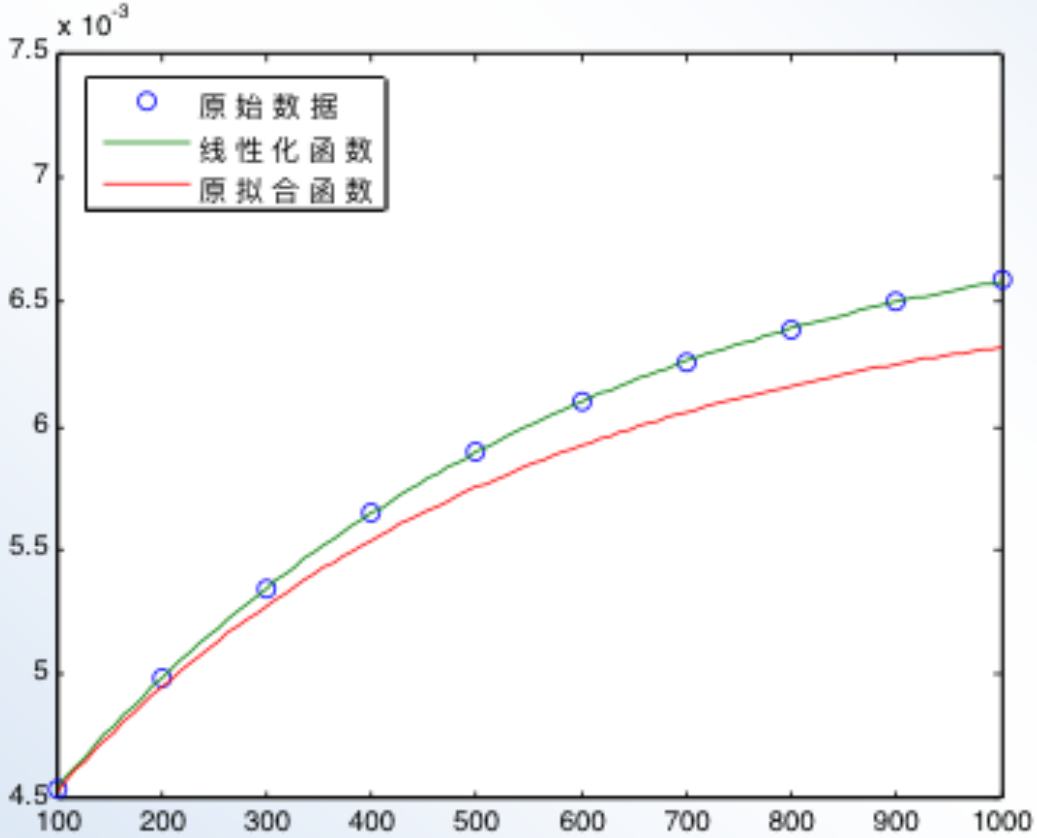


数学实验之
——数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

第2次迭代的误差图



数学实验之
——数据拟合

实验目的

引 例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范 例

课堂延伸

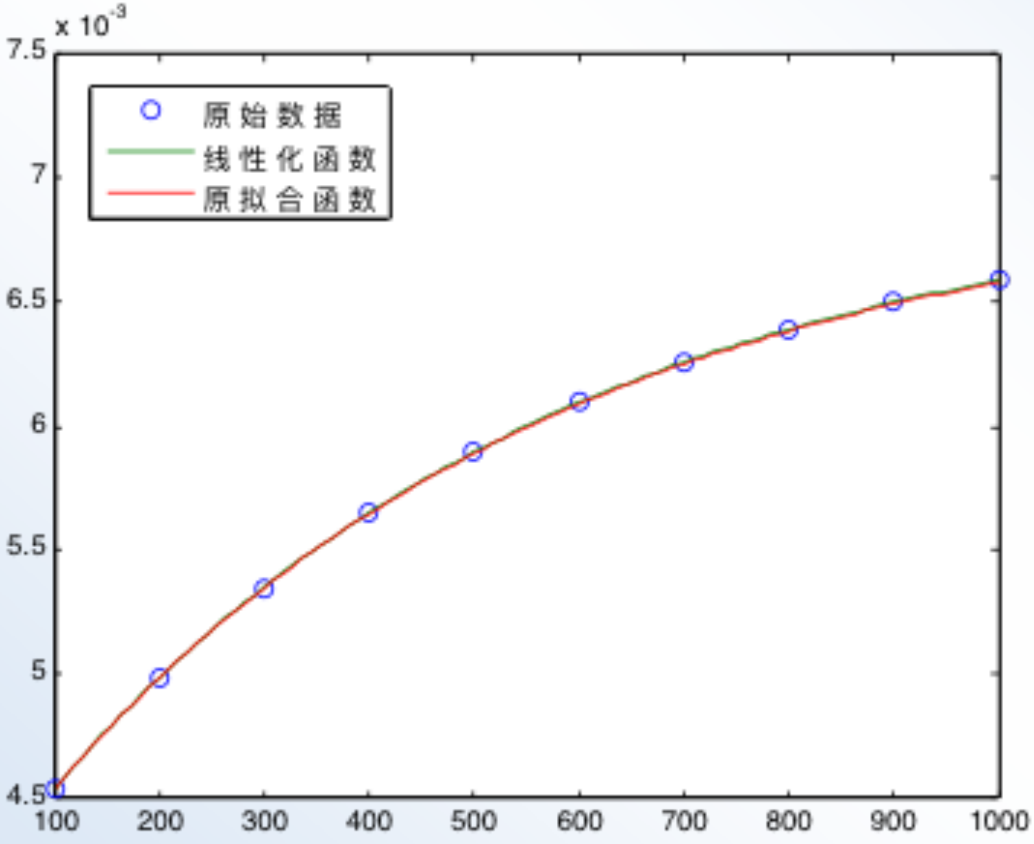
布置实验

结 束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

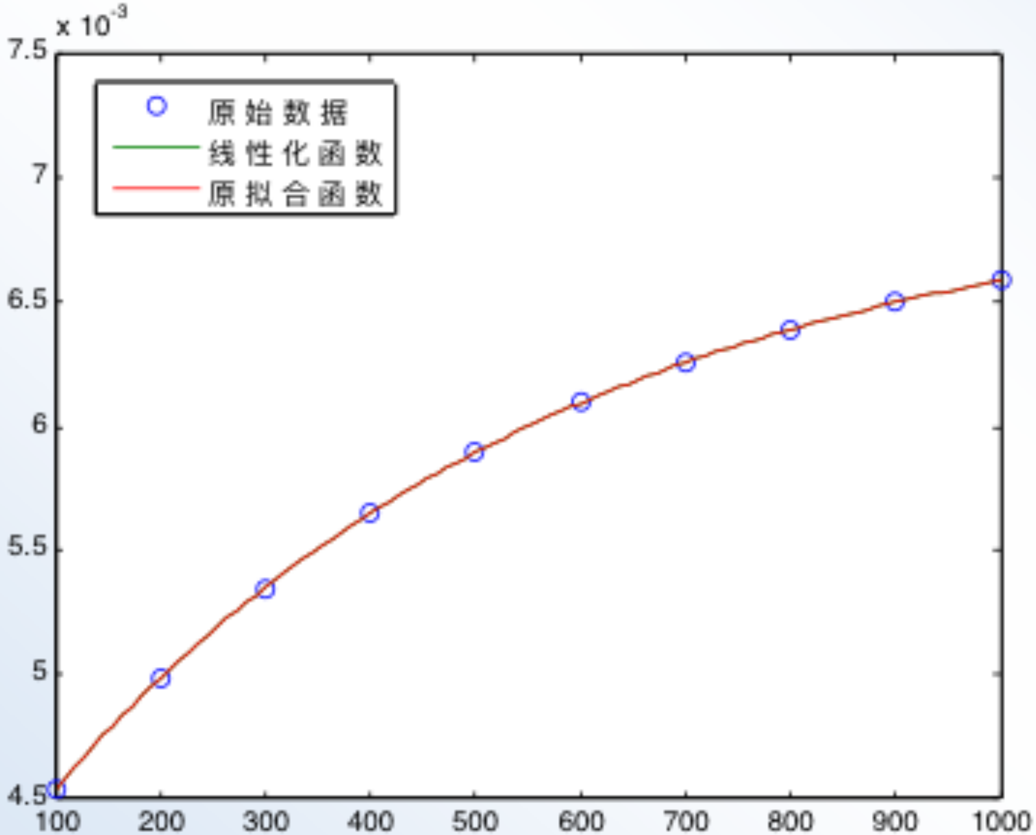
第3次迭代的误差图



用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

第4次迭代的误差图



数学实验之

——数据拟合

实验目的

引　例

拟合原理

拟合函数

软件求解

范　例

课堂延伸

布置实验

结　束

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

1）当K的初值取为k=0.3时， 收敛到k=0.0024, a=0.0521,b=-0.0475,结果不合理；

2）当K的初值取为k=0.2时，经四次迭代，已经收敛到一个很好的解。迭代结果如下表。

迭代次数	a	b	k	误 差E
一	0.0067	-0.0025	0.0628	2.3763e-006
二	0.0068	-0.0027	0.1067	1.0432e-007
三	0.0070	-0.0030	0.1012	8.2904e-011
四	0.0070	-0.0030	0.1012	5.6575e-011

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

4. 线性化迭代法

3）取K的初值为0.1009,只一次迭代就得到2）中的最后结果。

提示

导函数拟合法得出的参数值精度有限，线性化迭代法要求参数的初值比较接近精确值。可将导函数拟合法和线性化迭代法结合起来，把前者得到的参数K的值作为迭代法中K的初值，可使其收敛或收敛更快。

用拟合方法确定医用薄膜渗透率

结果及误差分析

几种方法得出的结果及相应的误差总结于下表，误差为计算数据与实验数据之差的平方和。

方法	a	b	k	误 差E
函数拟合	0.0070	–0.0030	0.1008	6.0045e–011
非线性规划	0.0069	–0.0030	0.1076	9.4424e–10
导函数拟合			0.1009	
线性化迭代法	0.0070	–0.0030	0.1012	5.6605e–011

范例：静脉注射的给药方案

问题背景

一种新药用于临床之前，必须设计给药方案。在快速静脉注射下，所谓给药方案是指，每次注射量多大，间隔时间多长。

药物进入肌体后随血液输送到全身，在这过程中不断被吸收、分解、代谢，最终排出体外。药物向体外排出的速率与血药浓度成正比。单位体积血液中的药物含量，称血药浓度。临床上，每种药物有一个最小有效浓度c1和最大治疗浓度c2。

范例：静脉注射的给药方案

模型假设

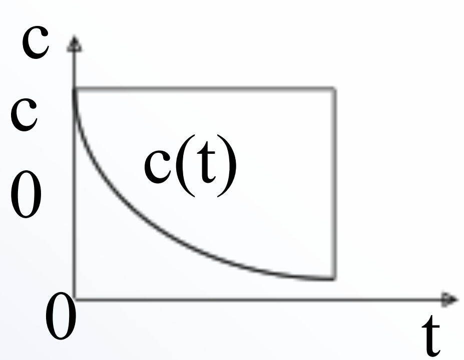
1. 药物排除速率与血药浓度成正比，比例系数 $k(>0)$;

2. 血液容积 v, $t=0$ 瞬时注射剂量 d, 血药浓度立即为 d/v.

3.快速静脉注射下一室模型的血药浓度：$c(t)$

范例：静脉注射的给药方案

建立模型



由假设1， $$\frac{dc}{dt}=-kc \Rightarrow c(t)=\frac{d}{v}e^{-kt}$$

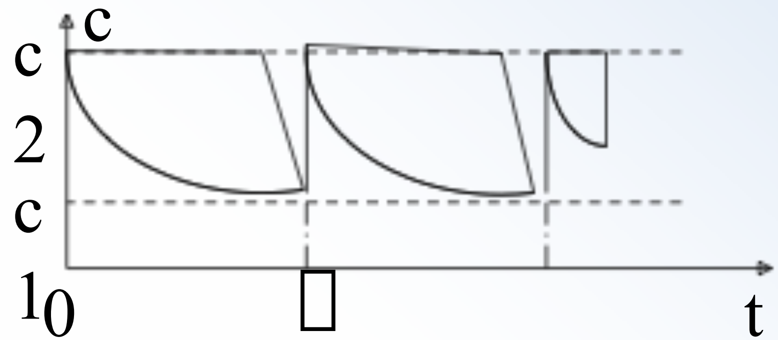
由假设2， $$c(0)=d/v$$

数学实验之
－－数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
t
结　束

范例：静脉注射的给药方案

给药方案设计

$\{D_0, D, \tau\}$



D0:初次剂量；□ :注射时间间隔；D:重复注射剂量。

$$D_0 = vc_2,\ \ D = v(c_2 - c_1),$$

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

数学实验之
－－数据拟合
实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

范例：静脉注射的给药方案

一个实例

若c1=10, c2=25(□g/ml), 给药方案设计归结为根据数据(ti,ci) i=1,…n (d 给定）拟合曲线c(t), 以确定系数k, v.

血药浓度数据(t=0注射300mg)

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

实验目的
引　例
拟合原理
拟合函数
软件求解
范　例
课堂延伸
布置实验
结　束

范例：静脉注射的给药方案

一个实例

给药方案

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

记 $y=\ln c,\ a_1=-k,\ a_2=\ln(d/v)$

则 $y=a_1t+a_2$

范例：静脉注射的给药方案

一个实例

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

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

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

想

取对数化为线性最小二乘,对结果有什么影响?