深 圳 大 学 实 验 报 告

实验课程名称：　　　　　最优化方法　　　　　　　　　　

实验项目名称：　　　　　数据拟合　　　　　　　　　　

学院：　计算机与软件学院　　专业：　软件工程（腾班）

报告人：　**黄亮铭**　学号：　**2022155028**　班级：　**腾班**

同组人：

指导教师：　　　　　　　李炎然　　　　　　　　　　

实验时间：　　**2024 年 12 月 6 日 - 2024 年 12 月 27 日**

实验报告提交时间：　　**2024 年 12 月 27 日**

教务处制

实验报告包含内容

1 实验目的与要求

1） 掌握求解最小二乘法约束问题思路；

2） 掌握建立数据拟合的优化模型；

3） 掌握数学符号描述问题，设计算法求解模型。

2 问题

附件“FittingData”的样本数据如下表 1 所示，(x_i, y_i)分别表示输入与输出数据之间的对应关系。用函数 $f(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$ 拟合表 1 数据，并要求拟合曲线经过点$(1,4)$，用最小二乘法估计拟合函数 $f(x)$。

表 1 样本数据

i	1	2	3	…
（x_i，y_i）	(0， 1.0930)	(0.25， 1.5865)	(0.5， 2.1810)	…

(1) 建立优化模型，构造求解算法。

(2) 根据附件 FittingData.mat 的数据，求出拟合函数 $f(x)$。

3 模型建立及求解

3.1 多项式拟合

输入的样本数据如下：

$$x=[x_1,x_2,\dots,x_m]^T$$

$$y=[y_1,y_2,\dots,y_m]^T$$

我们可以构建方程组：

$$y_1=a_0+a_1x_1+a_2x_1^2+\cdots+a_nx_1^n$$

$$y_2=a_0+a_1x_2+a_2x_2^2+\cdots+a_nx_2^n$$

$$\vdots$$

$$y_m=a_0+a_1x_m+a_2x_m^2+\cdots+a_nx_m^n$$

令

$$X=\begin{bmatrix}1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n\end{bmatrix}$$

$$y=[y_1,y_2,\dots,y_m]^T$$

$$a=[a_0,a_1,\dots,a_n]^T$$

则上面的方程组可以写为

$$Xa=y$$

也就是说，我们将多项式拟合的过程转化为求解a的过程。

3.2 带约束的最小二乘法问题

$$\min_x \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2$$

$$s.t.\ Cx=d$$

其中，$A\in R^{m\times n},C\in R^{p\times n},b\in R^m,d\in R^p$。在多数情况下，$p<n,Cx=d$是一个欠定方程，在直线$Cx=d$中，寻找$\frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2$的最优解。

求解过程如下：

1） 首先引入拉格朗日函数：$L(x,\lambda)=\frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2-\lambda^T(d-Cx)$。

2） 然后对拉格朗日函数求偏导，同时令偏导等于 0 得到：

$$\nabla_x L(x,\lambda)=A^T(Ax-b)+C^T\lambda=0$$

$$\nabla_\lambda L(x,\lambda)=Cx-d=0$$

3） 进而，我们可以得到：

$$\begin{pmatrix}A^TA & C^T \\ C & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{x} \\ z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A^Tb \\ d\end{pmatrix}$$

其中的$\hat{x}$就是所求的解。

具体的求解方法与实验 4 中的最小二乘法问题相同，都是使用 QR 分解进行求解。

令$w=\lambda-d$，则$\begin{pmatrix}A^TA+C^TC & C^T \\ C & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{x} \\ w\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A^Tb \\ d\end{pmatrix}$。

$$\begin{pmatrix}A \\ C\end{pmatrix}=QR=\begin{pmatrix}Q_1 \\ Q_2\end{pmatrix}R=\begin{pmatrix}Q_1R \\ Q_2R\end{pmatrix}$$

代入 QR 分解，得：

$$\begin{pmatrix} R^TR & R^TQ_2^T \\ Q_2R & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{x} \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^TQ_1^Tb \\ d \end{pmatrix}$$

将第一个方程的两边乘以R^{-T}和令变量$y = R\hat{x}$，可以得到

$$\begin{pmatrix} I & Q_2^T \\ Q_2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_1^Tb \\ d \end{pmatrix}$$

方程的第一行可以得到$y = Q_1^Tb - Q_2^Tw$，然后代入第二行可以得到$Q_1Q_2^Tw = Q_2Q_1^Tb - d$。

利用 QR 分解对Q_2进行分解$Q_2 = \tilde{Q}\tilde{R}$，进而得到：

$$\tilde{R}^T\tilde{R}w = \tilde{R}^T\tilde{Q}^TQ_1^Tb - d$$

上述式子可以简化为

$$\tilde{R}w = \tilde{Q}^TQ_1^Tb - \tilde{R}^{-T}d$$

然后求解$\tilde{R}^Tu = d$，计算$c = \tilde{Q}^TQ_1^Tb - u$；求解$\tilde{R}w = c$，计算$y = Q_1^Tb - Q_2^Tw$；计算$R\hat{x} = y$。

3.3 模型建立

根据题目要求以及附件中的样本数据，我们可以构造矩阵$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{41} & x_{41}^2 \end{pmatrix}$、向量$a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$和$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$，其中$n = 41$。用函数 $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 拟合样本数据，并且要求拟合的曲线需要经过点(1,4)，我们可以构造一个带约束条件的最小二乘法问题：

$$\hat{a} = \underset{a \in R^3}{\operatorname{argmin}} \|Xa - y\|_2^2$$

$$s.t.\ C^Ta = d$$

其中，$C = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$，$d = 4$。

3.4 模型求解

根据 3.2 带约束的最小二乘法问题一节中，我们已经知道了求解的方法。以下是具体的求解步骤：

1） 计算两个 QR 分解：$\begin{pmatrix} X \\ C^T \end{pmatrix} = QR = \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix} R = \begin{pmatrix} Q_1 R \\ Q_2 R \end{pmatrix}$。

2） 使用前代法求解$\tilde{R}^T u = d$，计算$c = \tilde{Q}^T Q_1^T y - u$。

3） 使用回代法求解$\tilde{R} w = c$，计算$z = Q_1^T y - Q_2^T w$。

4） 最后使用回代法计算$R\hat{a} = z$。

3.5 求解结果

由求解结果（图 1）得到$\hat{a} = \begin{pmatrix} 1.0122 \\ 1.9865 \\ 1.0013 \end{pmatrix}$。显然，这个解满足$C^T a = d$的约束条件。

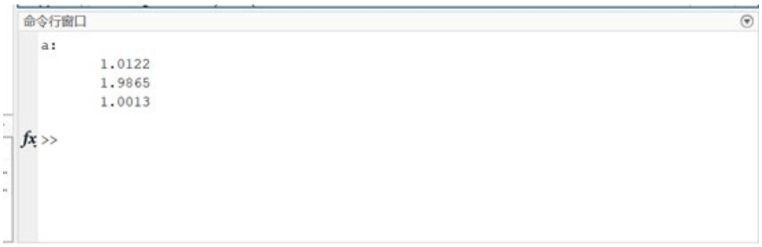

图 1 求解结果

拟合的结果如图 2 所示。红色的曲线是拟合的曲线，蓝色的点是样本数据点。可以看到，曲线较好地拟合了样本数据。

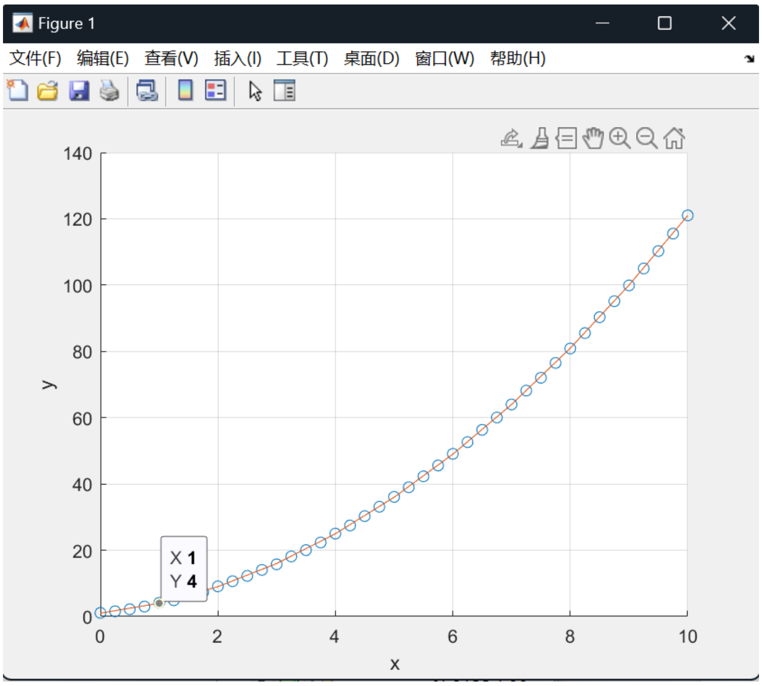

图 2 拟合结果

4 小结（可含个人心得体会）

1) 按照 PPT 上的求解步骤对模型进行求解，发现无法满足约束条件，即$C^T a = d$，其中，$C = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $d = 4$。经过排查，发现问题出在 matlab 自带的 qr 函数。更换为实验 3 中自己编写的 QR 分解函数，问题解决。
2) 通过本次实验，我掌握了求解最小二乘法约束问题思路。
3) 通过本次实验，我学会了如何建立优化模型，然后对模型进行求解。

指导教师批阅意见：   成绩评定：   指导教师签字：李炎然 2024 年 12 月 27 日
备注：

注：1、报告内的项目或内容设置，可根据实际情况加以调整和补充。

2、教师批改学生实验报告时间应在学生提交实验报告时间后 10 日内。