第二章

插 值 方 法

—— 曲线拟合的最小二乘法

内容提要

- **曲线拟合**
  - **什么是曲线拟合**
  - **曲线拟合的最小二乘法**
  - **最小二乘拟合多项式**

什么是曲线拟合

给定数据：

x_0	x_1	x_2	…	x_m
y_0	y_1	y_2	…	y_m

在函数族 Φ 中寻找函数 $S^*(x)$，使得

$$\sum_{i=0}^{m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|^2=\min_{S(x)\in\Phi}\sum_{i=0}^{m}\left|S(x_i)-y_i\right|^2$$

$\Rightarrow$ 曲线拟合的最小二乘法

若 $\Phi=H_n$，则称 $g^*(x)$ 为 n 次最小二乘拟合多项式

$$\Phi=\operatorname{span}\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$$

$$m>>n$$

其他拟合方法

- 使得 $\max\limits_{0\le i\le m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|$ 最小

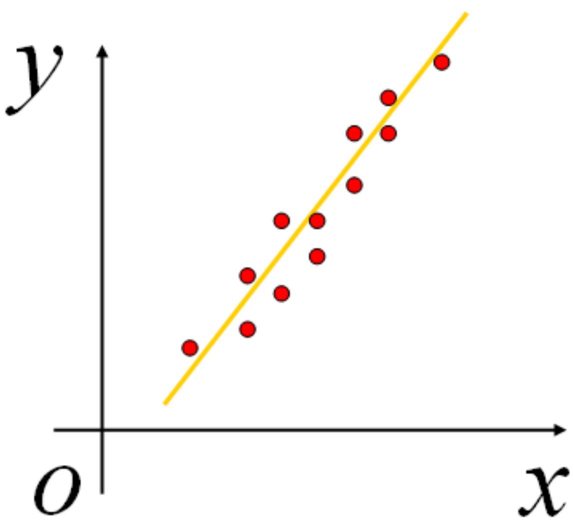
→ 求解复杂 ☹

- 使得 $\sum\limits_{k=0}^{m}\left|S^*(x_i)-y_i\right|$ 最小

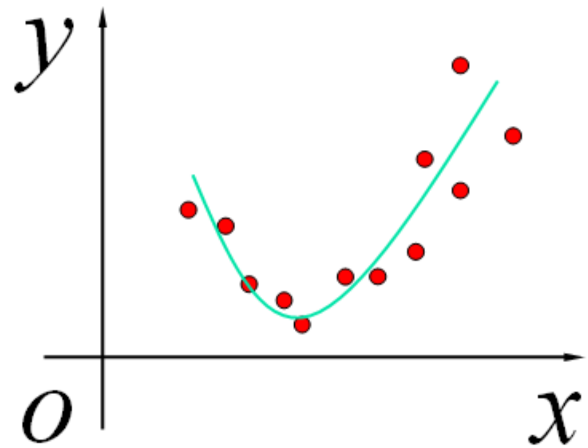
→ 不可导，求解困难 ☹

举例

最小二乘问题中，如何选择数学模型很重要，即如何选取函数空间 $\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$，通常需要根据物理意义，或所给数据的分布情况来选取合适的数学模型。



$y = ax + b$



$y = ax^2 + bx + c$

2 直线拟合（一次函数）

a）问题的提法

通过观测、测量或试验得到某一函数在 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的函数值 $y_1, y_2, \cdots, y_n$，即得到 n 组数据 (x_1, y_1)，$(x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ 如果这些数据在直角坐标系中近似地分布在一条直线上，我们可以用直线拟合的方法。

问题:已知数据 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$，求一个一次多项式 $\varphi(x) = a + bx$（实际上，就是求 a, b），使得

$$Q(a,b) = \sum_{k=1}^{n} \left(y_k - \varphi(x_k)\right)^2 = \sum_{k=1}^{n} \left(y_k - a - bx_k\right)^2$$

达到最小

注意到 $Q(a,b)$ 中，x_k, y_k 均是已知的，而 a, b 是未知量，$Q(a,b)$ 是未知量 a, b 的二元函数，利用高等数学中求二元函数极小值（最小值）的方法，因此，上述问题转化为求解下列方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial b} = 0 \end{cases}$$

b） **正则方程组**

由 $Q(a,b)=\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)^2$ 得：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial a}=-2\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)=0\\ \dfrac{\partial Q(a,b)}{\partial b}=-2\sum_{k=1}^{n}(y_k-a-bx_k)x_k=0\end{cases}$$

因为

$\sum_{k=1}^{n}a=na$，$\sum_{k=1}^{n}bx_k=b\sum_{k=1}^{n}x_k$，

得到如下的正则方程组

$$\begin{cases}na+\left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)b=\sum_{k=1}^{n}y_k\\ \left(\sum_{k=1}^{n}x_k\right)a+\left(\sum_{k=1}^{n}x_k^2\right)b=\sum_{k=1}^{n}x_ky_k\end{cases}$$

这是个关于 a，b 的二元一次方程组，称其为最小二乘问题的正则方程组。解得 a，b，便得到最小二乘问题的拟合函数 $y=a+bx$。

例：已知10对数据如下表，利用最小二乘法求拟合直线 $y = a + bx$ 。

x_k	2	4	4	4.6	5	5.2	5.6	6	6.6	7
y_k	5	3.5	3	2.7	2.4	2.5	2	1.5	1.2	1.2

demo_2_10.m

解：先列表来计算四个 $\sum$ ： $\sum x_k$, $\sum y_k$, $\sum x_k^2$, $\sum x_k y_k$

	x_k	y_k	x_k^2	$x_k y_k$
	2	5	4	10
	4	3.5	16	14
	4	3	16	12
	4.6	2.7	21.16	12.46
	5	2.4	25	12
	5.2	2.5	27.04	13
	5.6	2	31.36	11.2
	6	1.5	36	9
	6.6	1.2	43.56	7.92
	7	1.2	49	8.4
$\sum$	50	25	269.12	109.94

形成正则方程组

$$\begin{cases} 10a + 50b = 25 \\ 50a + 269.12b = 109.94 \end{cases}$$

解得

$$a = 6.4383 \qquad b = -0.7877$$

于是，最小二乘拟合一次函数为

$$y = 6.4383 - 0.7877x$$

最小二乘求解

对任意 $S(x) \in \Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$，可设

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$$

则求 $S^*(x)$ 等价于求下面的多元函数的最小值点

$$I(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[S(x_i) - y_i\right]^2$$

$$= \sum_{i=0}^{m} \omega_i \left[\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x_i) - y_i\right]^2$$

最小值点 $\Leftrightarrow$ $\boxed{\dfrac{\partial I}{\partial a_k} = 0}$ $\quad k = 0, 1, \ldots, n$

多项式最小二乘曲线拟合

$\Phi = H_n = \mathrm{span}\{1, x, ..., x^n\}$, 即 $\varphi_i = x^i$, 则相应的法方程为

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^2 & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{n+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{m}\omega_i f_i \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i f_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{m}\omega_i x_i^n f_i \end{bmatrix}$$

此时 $S^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* x^k$ 为 $f(x)$ 的 n 次最小二乘拟合多项式

举例

例： 求下面数据表的二次最小二乘拟合多项式

x_i	0	0.25	0.50	0.75	1.00
$f(x_i)$	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

解： 设二次拟合多项式为 $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$

demo32.m

得法方程

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{bmatrix}$$

解得 $a_0 = 1.0052, a_1 = 0.8641, a_2 = 0.8437$

所以此组数据的二次最小二乘拟合多项式为

$$p_2(x) = 1.0052 + 0.8641x + 0.8437x^2$$

编制程序

- 为了便于编程并减少工作量，引入矩阵

$$C=\begin{bmatrix}1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \cdots & x_m^n\end{bmatrix}, Y=\begin{bmatrix}y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m\end{bmatrix},$$

- 法方程的系数矩阵A和右端的向量b可分别表示为

$$A=C^TC \qquad b=C^TY .$$

非线性最小二乘拟合

有时需要非线性函数，如 $S(x)=ae^{bx}$，拟合给定的数据，这时建立的法方程是一个非线性方程组，这类拟合问题称为**非线性最小二乘拟合**。

demo33.m

例： 用指数函数 $y(x)=ae^{bx}$ 拟合下面的数据

x_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46

其他非线性拟合方法

- 对数拟合： $S(x) = a + b\ln x$

- 幂函数拟合： $S(x) = ax^b$

- 双曲拟合： $\dfrac{1}{S(x)} = a + \dfrac{b}{x}$