最小二乘法

非线性拟合

胡建芳

中山大学　数据科学与计算机学院

课程回顾

- **拟合---最小二乘：**

$$
\begin{pmatrix}
(\phi_0,\phi_0) & (\phi_1,\phi_0) & \cdots & (\phi_m,\phi_0) \\
(\phi_0,\phi_1) & (\phi_1,\phi_1) & \cdots & (\phi_m,\phi_1) \\
\vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
(\phi_0,\phi_m) & (\phi_1,\phi_m) & \cdots & (\phi_m,\phi_m)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} (f,\phi_0) \\ (f,\phi_1) \\ \vdots \\ (f,\phi_m) \end{pmatrix}
$$

称为*法方程*。

定理 2.
x满足$\min\limits_{y\in\mathbb{R}^n}\|Ay-b\|_2^2$的充要条件是$x$满足$A^TAx=A^Tb$。

非线性拟合

周期性数据

例 4.6 把在下表中列出的华盛顿地区在 2001 年 1 月 1 日的温度记录与周期模型拟合：

一天中的时间	t	温度 (°C)
午夜 12 时	0	−2.2
上午 3 时	$\frac{1}{8}$	−2.8
上午 6 时	$\frac{1}{4}$	−6.1
上午 9 时	$\frac{3}{8}$	−3.9
正午 12 时	$\frac{1}{2}$	0.0
下午 3 时	$\frac{5}{8}$	1.1
下午 6 时	$\frac{3}{4}$	−0.6
下午 9 时	$\frac{7}{8}$	−1.1

模型 $y = c_1 + c_2 \cos 2\pi t + c_3 \sin 2\pi t$

非线性拟合

周期性数据

模型 $y = c_1 + c_2 \cos 2\pi t + c_3 \sin 2\pi t$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 \cos 2\pi(0) + c_3 \sin \pi(0) = -2.2, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{1}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{1}{8}\right) = -2.8, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{1}{4}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{1}{4}\right) = -6.1, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{3}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{3}{8}\right) = -3.9, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{1}{2}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{1}{2}\right) = 0.0, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{5}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{5}{8}\right) = 1.1, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{3}{4}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{3}{4}\right) = -0.6, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{7}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{7}{8}\right) = -1.1. \end{cases}$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & \cos 0 & \sin 0 \\ 1 & \cos\frac{\pi}{4} & \sin\frac{\pi}{4} \\ 1 & \cos\frac{\pi}{2} & \sin\frac{\pi}{2} \\ 1 & \cos\frac{3\pi}{4} & \sin\frac{3\pi}{4} \\ 1 & \cos\pi & \sin\pi \\ 1 & \cos\frac{5\pi}{4} & \sin\frac{5\pi}{4} \\ 1 & \cos\frac{3\pi}{2} & \sin\frac{3\pi}{2} \\ 1 & \cos\frac{7\pi}{4} & \sin\frac{7\pi}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -2.2 \\ -2.8 \\ -6.1 \\ -3.9 \\ 0.0 \\ 1.1 \\ -0.6 \\ -1.1 \end{bmatrix}$$

正规方程 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 是

$$\begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -15.6 \\ -2.977\,8 \\ -10.237\,6 \end{bmatrix}$$

$$c_1 = -1.95, c_2 = -0.744\,5, \ c_3 = -2.559\,4.$$

非线性拟合

周期性数据

$$y = c_1 + c_2 \cos 2\pi t + c_3 \sin 2\pi t + c_4 \cos 4\pi t$$

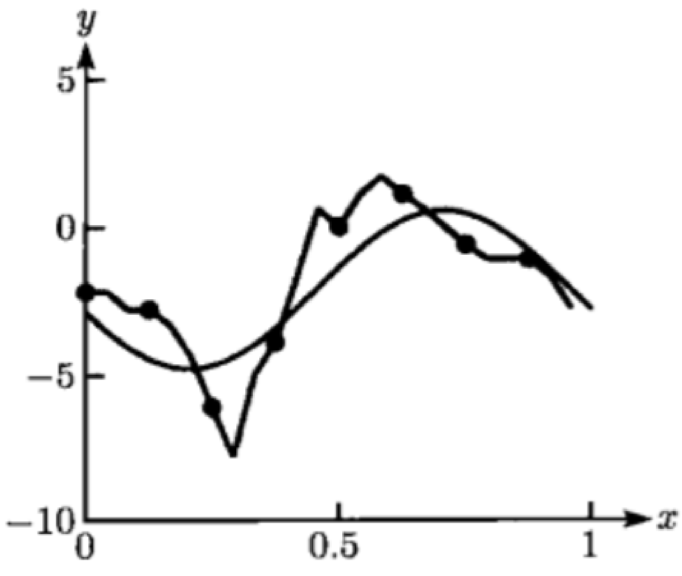
$$\begin{cases} c_1 + c_2 \cos 2\pi(0) + c_3 \sin \pi(0) + c_4 \cos 4\pi(0) = -2.2, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{1}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{1}{8}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{1}{8}\right) = -2.8, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{1}{4}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{1}{4}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{1}{4}\right) = -6.1, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{3}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{3}{8}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{3}{8}\right) = -3.9, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{1}{2}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{1}{2}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{1}{2}\right) = 0.0, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{5}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{5}{8}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{5}{8}\right) = 1.1, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{3}{4}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{3}{4}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{3}{4}\right) = -0.6, \\ c_1 + c_2 \cos 2\pi\left(\frac{7}{8}\right) + c_3 \sin 2\pi\left(\frac{7}{8}\right) + c_4 \cos 4\pi\left(\frac{7}{8}\right) = -1.1, \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -15.6 \\ -2.977\,8 \\ -10.237\,6 \\ 4.5 \end{bmatrix}$$

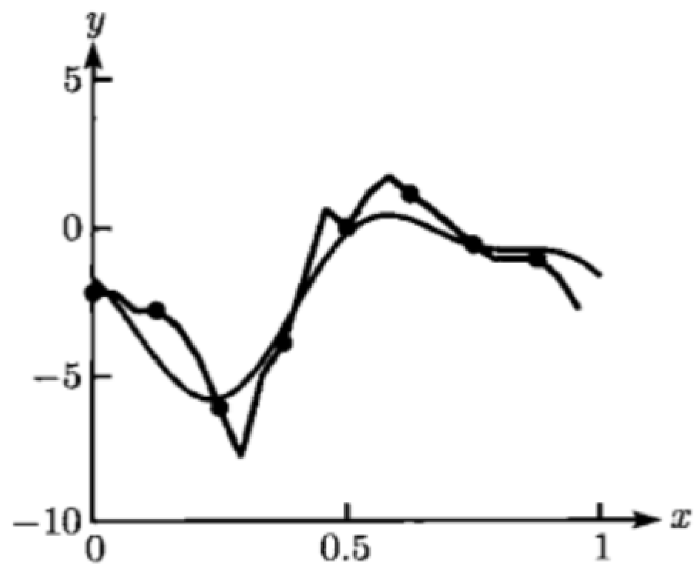
$$c_1 = -1.95, c_2 = -0.744\,5, c_3 = -2.559\,4,\ c_4 = 1.125$$

非线性拟合

■ **周期性数据**



(a)



(b)

$$y = -1.950\,0 - 0.744\,5\cos 2\pi t - 2.559\,4\sin 2\pi t,\ \text{RMSE} \approx 1.063.$$

$$y = -1.95 - 0.744\,5\cos 2\pi t - 2.589\,4\sin 2\pi t + 1.125\cos 4\pi t$$

非线性拟合

数据线性化：参数分离

指数型模型(exponential model)

$$y = c_1 e^{c_2 t},$$

$$\ln y = \ln(c_1 e^{c_2 t}) = \ln c_1 + c_2 t.$$

$$\ln y = k + c_2 t.$$

模型 $y = c_1 t^{c_2}$

$$\ln y = \ln c_1 + c_2 \ln t = k + c_2 \ln t.$$

$$y = c_1 t e^{c_2 t}.$$

$$\ln y = \ln c_1 + \ln t + c_2 t,$$

$$k + c_2 t = \ln y - \ln t,$$

非线性拟合

数据线性化：参数分离

例 4.9 从 20 世纪 70 年代早期开始，英特尔公司的 CPU 上的晶体管数量在表 4-3 中给出. 对这些数据进行模型 $y = c_1 e^{c_2 t}$ 的拟合.

表 4-3

CPU	年	晶体管数	CPU	年	晶体管数
4 004	1971	2 250	奔腾	1993	3 100 000
8 008	1972	2 500	奔腾 II	1997	7 500 000
8 080	1974	5 000	奔腾 III	1999	24 000 000
8 086	1978	29 000	奔腾 4	2000	42 000 000
286	1982	120 000	安腾	2002	220 000 000
386	1985	275 000	安腾 2	2003	410 000 000
486	1989	1 180 000			

$$\ln y = k + c_2 t.$$

非线性拟合

数据线性化：参数分离

令 $t=0$ 对应于 1970 年. 把这些数据代入线性化模型得到

$$\begin{aligned}
k+c_2(1)&=\ln 2\ 250,\\
k+c_2(2)&=\ln 2\ 500,\\
k+c_2(4)&=\ln 5\ 000,\\
k+c_2(8)&=\ln 29\ 000,
\end{aligned}$$

如此等等. 矩阵方程是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$, 其中 $\boldsymbol{x}=(k,c_2)$,

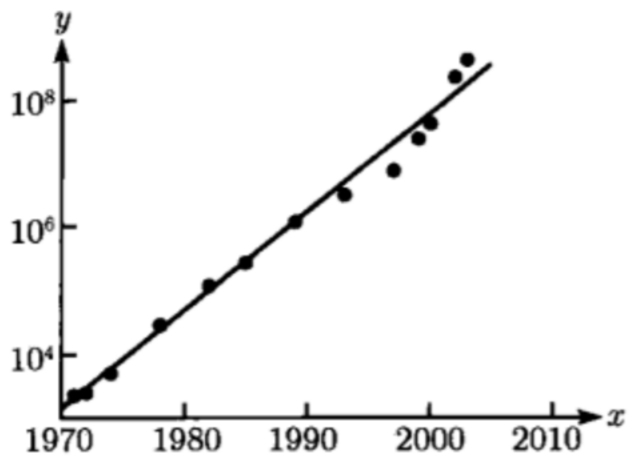
$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 2\\ 1 & 4\\ 1 & 8\\ \vdots & \vdots\\ 1 & 33\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}\ln 2\ 250\\ \ln 2\ 500\\ \ln 5\ 000\\ \ln 29\ 000\\ \vdots\\ \ln 410\ 000\ 000\end{bmatrix}.$$

正规方程 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 是

$$\begin{bmatrix}13 & 235\\ 235 & 5\ 927\end{bmatrix}\begin{bmatrix}k\\ c_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}176.90\\ 3\ 793.23\end{bmatrix}$$

非线性拟合

- **数据线性化：参数分离**



Moore 定律的半对数图：CPU 芯片的晶体管数量与年份的关系曲线

Moore定律：每两年计算效率将加倍，持续了**40**年
2000年开始，加快

非线性拟合

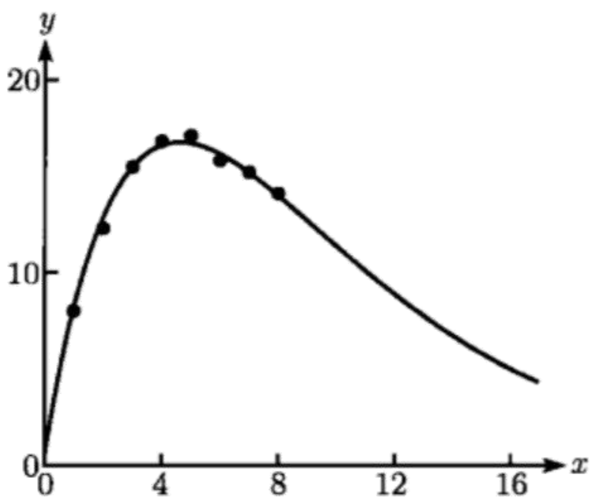
数据线性化：参数分离

例 4.11 把模型 (4.21) 与表 4-5 中给出的病人血液中药物诺氟西汀 (norflu-oxetine) 的测量水平 (ng/ml) 进行拟合.

表 4-5

小时	1	2	3	4	5	6	7	8
浓度 (ng/ml)	8.0	12.3	15.5	16.8	17.1	15.8	15.2	14.0

解正规方程得到 $k \approx 2.28$ 以及 $c_2 \approx -0.215$, 并且 $c_1 \approx e^{2.28} \approx 9.77$.

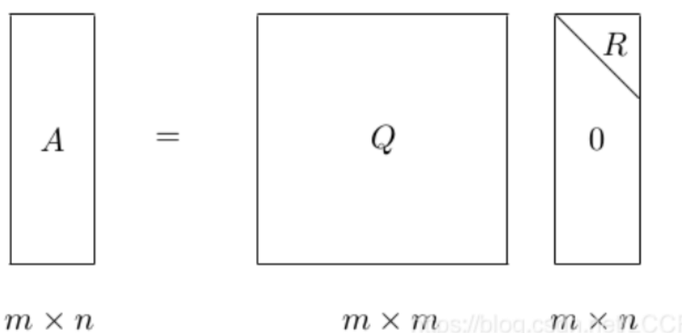


血液中药物浓度的曲线：模型 (4.21) 表明在初始高峰之后呈指数型衰减

非线性拟合

QR分解与最小二乘

$$\boldsymbol{X} = QR$$



$$
\begin{aligned}
& \hat{\boldsymbol{w}}^* = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y} \\
\Rightarrow\quad & \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{w}}^* = \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y} \\
\Rightarrow\quad & R^TQ^TQR\hat{\boldsymbol{w}}^* = R^TQ^T\boldsymbol{y} \\
\Rightarrow\quad & R^TR\hat{\boldsymbol{w}}^* = R^TQ^T\boldsymbol{y} \\
\Rightarrow\quad & R\hat{\boldsymbol{w}}^* = Q^T\boldsymbol{y} \\
\Rightarrow\quad & \hat{\boldsymbol{w}}^* = R^{-1}Q^T\boldsymbol{y}
\end{aligned}
$$

$$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{X}) = \left\|\boldsymbol{X}^{-1}\right\| \cdot \|\boldsymbol{X}\|$$ 条件数

$$\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{\kappa}(V\Sigma^TU^TU\Sigma V^H) = \boldsymbol{\kappa}(V\Sigma^2V^H) = \boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{X})^2$$ 条件数变大

QR分解可以有效控制条件数变大，使得线性方程组解更加稳定

作业

- **作业：**

  分别用2,3,4,6阶多项式拟合函数y=cos(x)，并将拟合曲线与函数曲线y=cos(x)进行比较

最小二乘的概率解释（自主学习）：

https://www.zybuluo.com/Duanxx/note/399359

群名称：数值计算方法
群　号：1132838842

矩阵特征值

THE END