【文章编号】1002－3410(2000)03－00879－04

最小二乘法在曲线拟合中的实现

聂　翔[1]，　张瑞林[2]

(1.陕西工学院 基础课部,陕西 汉中　723003； 2.汉中师范学院 数学与计算机科学系,陕西 汉中　723000)

【摘　要】 给出了最小二乘法在多元正交基函数拟合中的计算机实现方法。以常见的二次曲线拟合为例说明了程序编制的要点,在实验的数据处理中具有实用价值。

【关 键 词】 最小二乘法； 曲线拟合； 正交基函数

【中图分类号】 O4　　【文献标识码】 A

1　引言

在物理实验中,经常要把离散的测量数据转化为直观的便于研究的曲线方程,即曲线拟合。正交基函数因涵盖了幂函数,切比雪夫多项式,拉盖尔函数,多元正交函数系列等而常被采用为拟合函数。如在曲线拟合中最常见的二次曲线,采用二元正交基函数系列：$1, x, y, x^2, y^2, xy, \cdots$进行拟合。最小二乘法在确定各拟合函数的系数时,尽管拟合的次数不是很高,但它可使误差较大的测量点对拟合曲线的精度影响较小,而且实现简单,便于物理分析和研究,故成为最常用的方法之一。本文从最小二乘法的基本原理出发,给出了多元正交函数拟合的实现方法,并结合实例给出了最常用的二次曲线拟合的程序流程图。

2　最小二乘法

令待求的未知量为 $a_1, a_2, \cdots\cdots, a_t$,它们可由 $n\,(n. \geqslant t)$个直接测量量 $y_1, y_2, \cdots\cdots, y_n$,通过下列函数关系求得：

$$\begin{aligned} y_1 &= f_1(a_1, a_2, \cdots\cdots, a_t) \\ y_2 &= f_2(a_1, a_2, \cdots\cdots, a_t) \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ y_n &= f_n(a_1, a_2, \cdots\cdots, a_t) \end{aligned}$$

若 a_j 为真值,由上述已知函数求出真值 y_j,若其测量值为 y_j^*,则对应的误差为 $\sigma_j = y_j - y_j^*$,$(j = 1, 2, \cdots\cdots, n)$。最小二乘法可定量表示为：

$$\sum_{j=1}^{n} \sigma_j^2 = \min$$

对不等精度测量,应加上各测量值的权重因子 p_j,即：

收稿日期：2000－04－03

作者简介：聂翔(1968－),男,陕西商南人,陕西工学院讲师,从事基础物理和实验教学、计算物理方面的研究。

$$\sum_{j=1}^{n} p_j \sigma_j^2 = \min$$

最小二乘法是在随机误差为正态分布时,由最大似然法推出的一个结论。它可使测量误差的平方和最小,因此被视为从一组测量值中求出一组未知量的最可信赖的方法。在本文中为突出曲线拟合的主题,重点讨论等精度测量。

3 多元正交基函数拟合的实现

对 m 元正交基函数,其拟合函数的形式为:

$$y = \sum_{j=1}^{l} a_j g_j(x_1, x_2, \cdots, x_m)$$

g_j 为由 m 个自变量构成的一个正交基函数。如 $m=3$,对应函数系列为 $1, x_1, x_2, x_3, x_1^2, x_2^2, x_3^2, x_1x_2, \cdots\cdots, x_1x_2x_3, \cdots\cdots, g_j$ 亦可能是三角函数,分段函数等。a_j 是待求的系数。

令在 n 次测量中第 i 次的测量值为$(x_{1i}, x_{2i}, \cdots\cdots, x_{mi}, y_i)$,则对应的测量误差为:

$$\sigma_i = \sum_{j=1}^{l} a_j g_j(x_{1i}, x_{2i}, \cdots, x_{mi}) - y_i$$

为便于表达,令

$$g_{ji} = g_j(x_{1i}, x_{2i}, \cdots\cdots, x_{mi})$$

这样,用最小二乘法可建立误差的目标函数

$$O(a_1, a_2, \cdots\cdots, a_l) = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{l} a_j g_{ji} - y_i\right)^2$$

上式取最小值的必要条件是其一阶偏导数等于零。即

$$\frac{\partial O}{\partial a_k} = 2\sum_{i=1}^{n} \left(g_{ki}\left(\sum_{j=1}^{l} a_j g_{ji} - y_i\right)\right) = 0 \qquad (k = 1, 2, \cdots\cdots, l)$$

可整理为

$$\sum_{j=1}^{l} S_{k,j} a_j = T_k \qquad (k = 1, 2, \cdots\cdots, l) \tag{1}$$

$$S_{k,j} = \sum_{i=1}^{n} g_{ki} g_{ji}, \qquad T_k = \sum_{i=1}^{n} y_i g_{ki} \tag{2}$$

进一步可把(1)式写为矩阵形式

$$Sa = T \tag{3}$$

S 为 l 阶对称方阵,a,T 分别为含有 l 个元素的列向量。

4 举例

对大多数测量,因测量次数较大和测量量的多元使得求解方程组(1)离开了计算机就无法进行。下面结合一个常见的二次曲线拟合的实例,进行计算机求解,并给出符合精度的结果。

在传统的齿轮加工中,要求齿侧的表面形状是渐开线,其方程为:

$$\begin{cases} x = a(\cos t + t\sin t), t \in [0.1, 0.6] \\ y = a(\sin t - t\cos t), a = 10 \sim 100 \end{cases}$$

但渐开线形不易加工,故要找一条便于加工的二次曲线来逼近。二次曲线的一般方程为:

$$F(x,y) = a_1x^2 + a_2xy + a_3y^2 + a_4x + a_5y + 10 = 0$$

注意到 a 是决定齿轮整体大小的参数,问题便归结为对应已知的 a,如何确定二次曲线的系数。由于 x^2,xy,y^2,x,y 是一个二元正交基函数系列,故该问题为二元正交基函数的拟合问题。可转化为一个五元线性方程组的求解问题。

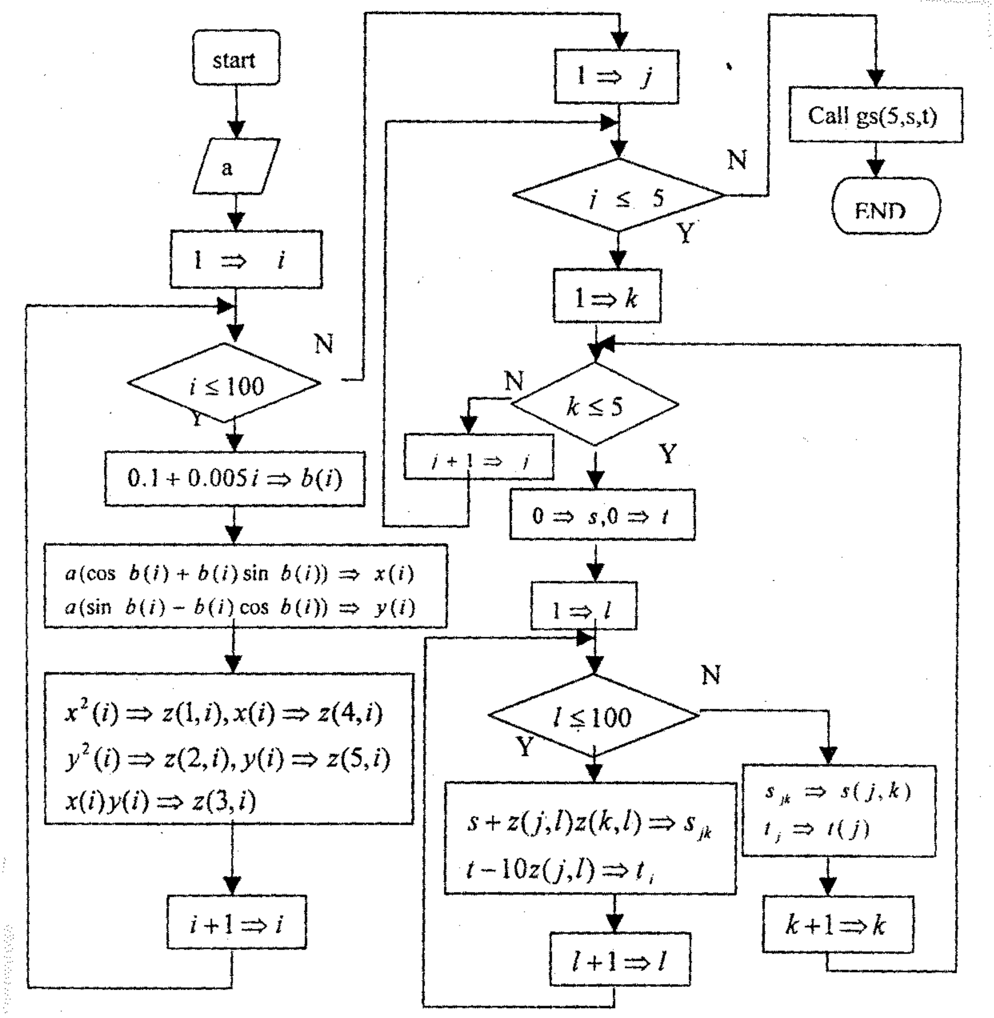

图 1　主程序流程图

首先建立目标函数:

$$O(a_1,a_2,\cdots,a_5) = \sum_{i=1}^{n}\sigma_i^2 = \sum_{i=1}^{n}F^2(x(t_i),y(t_i))$$

其次由目标函数求(3)式中 S 和 T 的各个元素,为保证精度取 $n=100$,采用双精度数进行运算,且在 t 的定义域内均匀取点。在本例中:

$$g_1 = x^2, g_2 = xy, g_3 = y^2, g_4 = x, g_5 = y$$

由此按(2)就可求出 $S_{k,j}$ 和 T_k。

运行结果为，对任何的 a 值都立即输出了 5 个双精度系数。以下分别是 $a = 10.0$，$a = 50.0$ 的结果

1.019734702339660E－001，－1.992420638592079E－001，1.836078139316973E－001，
－2.019786155966250，1.750715434475203；4.078963496823357E－003，
－7.968469471715164E－003，7.342648072037741E－003，－4.039584718828269E－001，
3.500749173058432E－001

最后，用列主元高斯消去法求解方程组，一般而言，随着拟合函数个数的增加，S 的阶数会增大，$|S|$ 的值易变小。因此用软件实现时，要求正交基函数的个数不能高于 6，以免使 $|S|$ 的值低于舍入误差而求解失败。

本程序采用 FORTRAN 语言，调用成熟的列主元高斯消去法子程序。通过调试、运行，得到了符合精度的结果。主程序流程如图 1 所示。

5 结束语

在通常的数据处理中，不论是一元线性拟合，还是多元线性拟合，甚至相当一部分经变换可转变为线性拟合的非线性拟合，如可用对数转换成线性函数的幂次拟合，都是正交基函数拟合的特例。而用最小二乘法来实现，原理简单明了，且易于编程。因此，无论在实验的数据处理中，还是在工程中曲线间的拟合方面，必将有着广泛的应用。

【参 考 文 献】

[1] 林抒，龚镇雄．普通物理实验[M]．北京：人民教育出版社，1982．37－42．
[2] 丁丽娟．数值计算方法[M]．北京：北京京理工大学出版社，1997．127－143．
[3] 许士良．FORTRAN 常用算法程序集[M]．第 2 版．北京：清华大学出版社，1995．1－4，341．

How to realize of minimum square estimation in curve-fitting

NIE Xiang[1]， ZHANG Rui-lin[2]
(1. Dept. of B.C. of Shaanxi Institute of Technology，Hanzhong 723003，China； 2. Dept. of Mathematics of Hanzhong Teachers College，Hanzhong 723000，China)

Abstract： This paper presents a method of how to realize the minimum square estimation in multivariable orthogonal basis functions fitting of a curve，then takes the general square curve fitting as an example to explain the key points in programming，which is of a wide range of practical values in data proccessing.

Key words： minimum square estimation； curve-fitting； orthogonal basis function