第三章　曲线拟合的最小二乘法

§1 引言

一、　曲线拟合的概念

根据给定的m个点(x_i, y_i)，在不要求它一定要精确地经过这些给定的点的条件下，求曲线$y = f(x)$的一条近似曲线$y = \varphi(x)$。

二、 研究曲线拟合的原因

插值方法的缺陷：

- 由实验提供的数据通常带有量测等各种误差，如要求 $y=\varphi(x)$ 严格通过所有给定点 (x_i, y_i)，就保留了原有的误差。
- 由实验提供的数据往往较多，用插值法得到的近似表达式，缺乏实用价值。
- 插值方法的鲁棒性差。

§2 最小二乘法

一、 曲线拟合的方法

1． 曲线拟合的提法：

给定数据点$(x_i, y_i)(i=1,2,\cdots,m)$，求曲线$y=f(x)$的一条近似曲线$y=\varphi(x)$使得偏差（残差）

$$\delta_i=\varphi(x_i)-y_i, i=1,2,\cdots,m$$

较小（不要求$\delta_i=0$）。

注：当$\delta_i = 0$就是插值问题，所以曲线拟合是个更一般的问题，具有更多的应用领域，它是插值问题的一般化，插值问题是它的一种特殊情况。

2．常见的曲线拟合方法

（1）使偏差绝对值之和最小，即

$$\min_{\varphi} \sum_{i=1}^{m} |\delta_i| = \sum_{i=1}^{m} |\varphi(x_i) - y_i| \qquad (2.1)$$

（2）使偏差绝对值最大的最小，即

$$\min_{\varphi} \max_{i} |\delta_i| = |\varphi(x_i) - y_i| \qquad (2.2)$$

（3）使偏差平方和最小，即

$$\min_{\varphi} \sum_{i=1}^{m} \delta_i^2 = \sum_{i=1}^{m} (\varphi(x_i) - y_i)^2 \qquad (2.3)$$

按偏差平方和最小的原则选取拟合曲线的方法，称为最小二乘法。

二、 最小二乘问题的提法

对于给定的数据表$(x_i, y_i)(i=1,2,\cdots,m)$，要求在某个函数类$\Phi = Span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ $(n<m)$ 中寻求一个函数

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x) \qquad (2.4)$$

使得

$$\sum_{i=1}^{m}(\varphi^*(x_i) - y_i)^2 = \min_{\varphi\in\Phi}\sum_{i=1}^{m}(\varphi(x_i) - y_i)^2 \qquad (2.5)$$

式中$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$是函数类$\Phi$中

的任一函数。称满足(2.5)的函数$\varphi^*(x)$为该最小二乘问题的最小二乘解。

§2 最小二乘解的求法

一、最小二乘解的求法

1. 推导

最小二乘问题可写为无约束的最优化问题

$$\min_{a_0,a_1,\cdots,a_n}\sum_{i=1}^{m}\left(\sum_{k=0}^{n}a_k\varphi_k(x_i)-y_i\right)^2=\min_{a_0,a_1,\cdots,a_n}s(a_0,a_1,\cdots,a_n),$$

从而将它转化为求多元函数$s(a_0,a_1,\cdots,a_n)$的最小值问题。

2．步骤

（1）令$\frac{\partial s}{\partial a_k}=0, k=0,1,\cdots,n$

（2）解法方程组

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \\ \vdots \\ (\varphi_n, f) \end{bmatrix} \tag{3.1}$$

得到$s(a_0,a_1,\cdots,a_n)$的最小点$(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_n^*)$，这里$(h,g)=\sum_{i=1}^{m} h(x_i)g(x_i)$。

3．相关结论

定 理 1： 对 于 给 定 的 一 组 实 验 数 据 $(x_i, y_i)(i=1,2,\cdots,m)$， x_i 互异，在函数类

$\Phi = Span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ ($n<m$， $\varphi_i(x)$线性无关)

中，存在唯一的函数

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x)$$

使得关系式(2.5)成立，且其系数 $a_k^*(k=0,1,\cdots,n)$ 可由(3.1)得到。

当 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x,\cdots,\varphi_n(x)=x^n$, 即代数多项式拟合时，有

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=1}^{m}x_i^{j+k},(j,k=0,1,\cdots,n)$$

$$(\varphi_j,f)=\sum_{i=1}^{m}x_i^{j}y_i,(j=0,1,\cdots,n)$$

故法方程组为

$$
\begin{bmatrix}
m & \sum_{i=1}^{m} x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{\,n} \\
\sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^{\,2} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{\,n+1} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\sum_{i=1}^{m} x_i^{\,n} & \sum_{i=1}^{m} x_i^{\,n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} x_i^{\,2n}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\sum_{i=1}^{m} x_i \\
\sum_{i=1}^{m} x_i y_i \\
\vdots \\
\sum_{i=1}^{m} x_i^{\,n} y_i
\end{bmatrix}
$$

二、例子

例 1

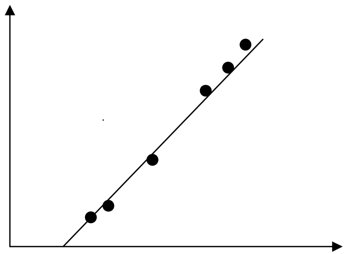

图 3.1

(1) 函数类： $\varphi(x) = a + bx$

(2) 求二元函数的最小值问题

$$\min_{a,b} s(a,b)=\sum_{i=1}^{6}(a+bx_i-y_i)^2$$

得

$$\begin{cases}6a+396.6b=1458\\396.6a+28365.28b=101176.3\end{cases},$$

解此方程组，得 $a=95.3524, b=2.2337$，故所求拟合直线为

$$y=95.3524+2.2337x$$

例 2

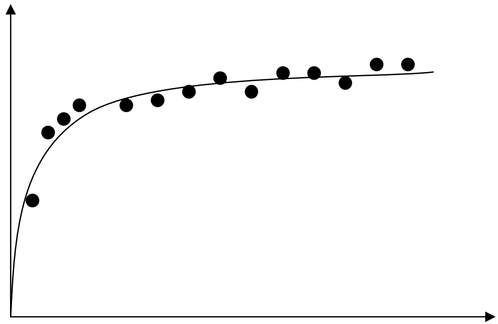

图 3.2

解：

- 函数类的选择：

方案 **1**：双曲线形式 $y=\dfrac{t}{at+b}$

方案 **2**：指数形式 $y=ae^{b/t}(a>0,b<0)$

注：在该两种函数类中都将得到非线性的最小二乘问题，因为其函数类都没有表达为某些基函数的线性组合形式

● 转化为线性最小二乘问题：

方案 1： 作变换 $\frac{1}{y}=a+\frac{b}{t}$,引入新变量

$$y^{(1)}=\frac{1}{y}, t^{(1)}=\frac{1}{t},$$

则

$$y^{(1)}=a+bt^{(1)}$$

转化为关于数据表 $(t_i^{(1)}, y_i^{(1)})$，求 a,b 的线性最小二乘问题。

方案 2： 作变换 $\ln y = \ln a + \frac{b}{t}$，引入新变量

$$y^{(2)} = \ln y, t^{(2)} = \frac{1}{t},$$

并记 $A = \ln a, B = b$，则

$$y^{(2)} = A + Bt^{(2)}$$

转化为关于数据表 $(t_i^{(2)}, y_i^{(2)})$，求 A, B 的最小二乘问题； A, B 求出后，利用关系式 $A = \ln a, B = b$ 即可求得 a, b。

注：

■如何选择变换是个关键的问题;

■数据表应改为关于新变量的数据表;

■求得的解可能还需通过关系式转化，得到原问题的解.

§4 加权最小二乘问题

一、加权最小二乘问题

对于给定的一组实验数据$(x_i, y_i)(i=1,2,\cdots,m)$，要求在某个函数类 $\Phi = Span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)\}$ $(n<m)$ 中寻求一个函数

$$\varphi^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \cdots + a_n^*\varphi_n(x)$$

使得

$$\sum_{i=1}^{m} w_i(\varphi^*(x_i) - y_i)^2 = \min_{\varphi\in\Phi} \sum_{i=1}^{m} w_i(\varphi(x_i) - y_i)^2$$

式中 $\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)$ 是函数类 Φ 中的任一函数，$w_i(i=1,2,\cdots,m)$ 是一列正数，称为权，它的大小反映了数据 (x_i,y_i) 地位的强弱。

二、加权最小二乘问题的解法

同最小二乘问题的解法，其中

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=1}^{m}w_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i),(j,k=0,1,\cdots,n)$$

$$(\varphi_j,f)=\sum_{i=1}^{m}w_i\varphi_j(x_i)f(x_i),(j=0,1,\cdots,n)$$

当 $\varphi_0(x)=1, \varphi_1(x)=x, \cdots, \varphi_n(x)=x^n$, 即代数多项式拟合时，有

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} w_i x_i & \cdots & \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,n} \\ \sum_{i=1}^{m} w_i x_i & \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,2} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,n+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,n} & \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,n+1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} w_i x_i \\ \sum_{i=1}^{m} w_i x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} w_i x_i^{\,n} y_i \end{bmatrix}$$

§5 利用正交函数作最小小二拟合

一、利用正交函数作最小二乘拟合的原理

1. 正交函数

对于点集$\{x_i\}$和权$\{w_i\}$ $(i=1,2,\cdots,m)$,若一组函数$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)(n<m)$，满足

$$(\varphi_j,\varphi_k)=\sum_{i=1}^{m}w_i\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)=\begin{cases}0 & j\neq k\\ A_k & j=k\end{cases},\quad j,k=0,1,\cdots,n$$

则称$\varphi_0(x),\varphi_1(x),\cdots,\varphi_n(x)$关于点集$\{x_i\}$和权$\{w_i\}$的正

交函数族，特别当$\varphi_k(x)$都是多项式时，称之为正交多项式。

2．利用正交函数作最小二乘拟合的原理

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \\ \vdots \\ (\varphi_n, f) \end{bmatrix} \tag{5.2}$$

$$a_k^* = \frac{(\varphi_k, f)}{(\varphi_k,\varphi_k)} = \frac{\sum_{i=1}^{m} w_i \varphi_k(x_i) y_i}{\sum_{i=1}^{m} w_i [\varphi_k(x_i)]^2} \tag{5.3}$$

二、利用正交多项式作多项式拟合

关键：构造正交函数族（正交多项式）

定理 2： 对于给定的点集 $\{x_i\}$ 和权 $\{w_i\}$ $(i=1,2,\cdots,m)$，利用递推公式

$$\begin{cases} \varphi_0(x)=1 \\ \varphi_1(x)=x-a_1 \\ \cdots\cdots \\ \varphi_{k+1}(x)=(x-a_{k+1})\varphi_k(x)-\beta_k\varphi_{k-1}(x) \end{cases} \tag{5.4}$$

$$a_{k+1} = \frac{\sum_{i=1}^{m} w_i x_i [\varphi_k(x_i)]^2}{\sum_{i=1}^{m} w_i [\varphi_k(x_i)]^2} \tag{5.5}$$

$$\beta_k = \frac{\sum_{i=1}^{m} w_i [\varphi_k(x_i)]^2}{\sum_{i=1}^{m} w_i [\varphi_{k-1}(x_i)]^2} \tag{5.6}$$

构造的函数族$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_n(x)$是关于点集$\{x_i\}$和权$\{w_i\}$的一组正交多项式,且$\varphi_k(x)(k=1,2,\cdots,n)$是$k$次多项式，其最高项$x^k$系数为 1。