现代数值计算方法

第四章 插值法与最小二乘拟合

第四章 插值法与最小二乘拟合

§4.4 最小二乘拟合

§4.4.1 最小二乘法

前面介绍的插值法, 要求插值函数和被插函数在节点处的函数值甚至导数值完全相同, 这实际上是假定了已知数据相当准确. 但在实际问题中, 数据由观测得到, 难免带有误差. 此时采用高阶插值多项式, 近似程度不一定很好, 有时还会出现 Runge 现象. 所以最好采用最小二乘法.

假定通过观测得到函数 $y = f(x)$ 的 m 个函数值：

$$y_i \approx f(x_i), \quad i = 1, 2, \cdots, m.$$

所谓最小二乘法就是求 $f(x)$ 的简单近似式 $\varphi(x)$, 使 $\varphi(x_i)$ 与 y_i 的差（称为残差或偏差）

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

的平方和最小, 即使

$$S = \sum_{i=1}^{m} e_i^2 = \sum_{i=1}^{m} [\varphi(x_i) - y_i]^2 \tag{4.37}$$

最小. $\varphi(x)$ 称为 m 个数据 (x_i, y_i), $i = 1, 2, \cdots, m$, 的最小二乘拟合函数, $f(x)$ 称为被拟合函数. $y \approx \varphi(x)$ 近似反映了变量 x 与 y 之间的函数关系 $y = f(x)$, 称为经验公式或数学模型.

例 4.8（线性拟合） 已知 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 及 $y_i = f(x_i)\,(i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n)$, 由最小二乘法求 $f(x)$ 的拟合直线 $\varphi(x) = a + bx$.

Back
Close

解 记

$$S(a,b)=\sum_{i=1}^{n}[y_i-\varphi(x_i)]^2=\sum_{i=1}^{n}[y_i-(a+bx_i)]^2.$$

由取极值的必要条件

$$\frac{\partial S}{\partial a}=\frac{\partial S}{\partial b}=0,$$

得

$$\begin{cases} -2\sum\limits_{i=1}^{n}[y_i-(a+bx_i)]=0, \\ -2\sum\limits_{i=1}^{n}x_i[y_i-(a+bx_i)]=0, \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} na+\left(\sum\limits_{i=1}^{n}x_i\right)b=\sum\limits_{i=1}^{n}y_i, \\ \left(\sum\limits_{i=1}^{n}x_i\right)a+\left(\sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2\right)b=\sum\limits_{i=1}^{n}x_iy_i. \end{cases} \tag{4.38}$$

Back
Close

当 $n>1$ 时, (4.38) 的系数行列式

$$D=\begin{vmatrix} n & \sum\limits_{i=1}^{n}x_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n}x_i & \sum\limits_{i=1}^{n}x_i^2 \end{vmatrix}=n\sum_{i=1}^{n}x_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2=n\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2\neq 0,$$

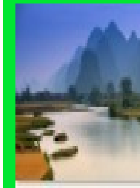
其中

$$\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i.$$

从而 (4.38) 有唯一解.

例 4.9 (线性化拟合) 已知 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 及 $y_i=f(x_i)\,(i=1,2,\cdots,n)$, 由最小二乘法求 $f(x)$ 的拟合曲线 $\varphi(x)=a\mathrm{e}^{bx}$.

解 这里若与例 4.8 一样, 记 $S(a,b)=\sum_{i=1}^{n}[y_i-\varphi(x_i)]^2$, 则由取极值的必要条件 $S_a'(a,b)=S_b'(a,b)=0$ 得到一个非线性方程组, 难以求



Back
Close

解. 为此, 考虑用对数将“曲线拉直”. 记

$$z_i = \ln y_i \,(i = 1, \cdots, n), \quad \psi(x) = \ln \varphi(x) = \bar{a} + bx \ (\bar{a} = \ln a),$$

则可用 (4.38) 求得 $\bar{a}$ 及 b, 从而

$$\varphi(x) = \mathrm{e}^{\psi(x)} = a\mathrm{e}^{bx}, \ (a = \mathrm{e}^{\bar{a}}).$$

例 4.10 当线性方程组未知数的个数少于方程的个数时, 称之为超定方程组. 用最小二乘法求下列超定方程组的数值解:

$$\begin{cases} 4x_1 + 2x_2 = 2, \\ 3x_1 - x_2 = 10, \\ 11x_1 + 3x_2 = 8. \end{cases}$$

解 由最小二乘原理, 即求 x_1, x_2 使下列函数

$$S(x_1, x_2) = (4x_1 + 2x_2 - 2)^2 + (3x_1 - x_2 - 10)^2 + (11x_1 + 3x_2 - 8)^2$$

Back
Close

取极小值. 由

$$\frac{\partial S}{\partial x_1} = \frac{\partial S}{\partial x_2} = 0 \Rightarrow \begin{cases} 73x_1 + 19x_2 = 63, \\ 19x_1 + 7x_2 = 9, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 1.8, \\ x_2 = -3.6. \end{cases}$$

这里, 所得 x_1, x_2 虽非方程组的解, 但却是最小二乘意义下的最佳近似解.

值得说明的是, 上述例子都只是通过取极值的必要条件求出了误差函数的稳定点, 并没有证明它们就是就是所求的最小值点. 下面我们建立最小二乘拟合的一般理论.

§4.4.2 法方程组

首先我们给出函数线性无关的概念.

定义 4.1 设有函数列 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_m(x)$, 如果

$$l_0\varphi_0(x_i) + l_1\varphi_1(x_i) + \cdots + l_m\varphi_m(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{4.39}$$

当且仅当 $l_0 = l_1 = \cdots = l_m = 0$ 时成立, 则称函数 $\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$, $\cdots$, $\varphi_m(x)$ 关于节点 x_1, x_2, $\cdots$, x_n 是线性无关的.

线性无关函数 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_m$ 的线性组合全体 Φ 称为由 φ_0, φ_1, $\cdots$, φ_m 张成的函数空间, 记为

$$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_m\} = \left\{\varphi(x) = \sum_{i=0}^{m} a_i\varphi_i \middle| a_0, a_1, \cdots, a_m \in R\right\}.$$

并称 $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_m$ 为 Φ 的基函数.

最小二乘拟合用数学语言表述为: 已知数据 x_i, $y_i = f(x_i)\,(i = 1, 2, \cdots, n)$ 和函数空间

$$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_m\},$$

Back
Close

求一函数 φ^*, 使

$$\|f-\varphi^*\|_2=\min_{\varphi\in\Phi}\|f-\varphi\|_2.$$

令

$$\varphi(x)=\sum_{j=0}^{m}a_j\varphi_j(x),\quad \varphi^*(x)=\sum_{j=0}^{m}a_j^*\varphi_j(x),$$

那么

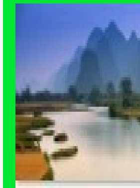
$$S(a_0,a_1,\cdots,a_m)=\|f-\varphi\|_2^2=\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-\sum_{j=0}^{m}a_j\varphi_j(x_i)\right]^2. \qquad (4.40)$$

于是, 问题等价于求 $a_0^*,a_1^*,\cdots,a_m^*\in R$, 使

$$S(a_0^*,a_1^*,\cdots,a_m^*)=\min_{a_0,a_1,\cdots,a_m\in R}S(a_0,a_1,\cdots,a_m). \qquad (4.41)$$

根据函数极值的必要条件, 对 $a_0,a_1,\cdots,a_m$ 求偏导数并令其等于零:

$$\frac{\partial S}{\partial a_k}=0,\quad k=0,1,\cdots,m,$$



Back
Close

得

$$-2\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-\sum_{j=0}^{m}a_j\varphi_j(x_i)\right]\varphi_k(x_i)=0,$$

即

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

用内积表示为线性方程组

$$\sum_{j=0}^{m}(\varphi_j,\varphi_k)a_j=(f,\varphi_k),\quad k=0,1,\cdots,m,\tag{4.42}$$

其矩阵形式为

$$\begin{pmatrix}(\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_m)\\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_m)\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ (\varphi_m,\varphi_0) & (\varphi_m,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_m,\varphi_m)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_0\\ a_1\\ \vdots\\ a_m\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(f,\varphi_0)\\ (f,\varphi_1)\\ \vdots\\ (f,\varphi_m)\end{pmatrix}\tag{4.43}$$

方程组 (4.43) 称为法方程组或正规方程组.

定理 4.2 如果函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_m(x)$ 关于节点 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 线性无关, 则法方程组 (4.43) 的解存在唯一, 且是 (4.41) 的唯一最优解.

证 用 $\varphi_k(x_i)$ 乘 (4.39) 的两边并求和得

$$l_0(\varphi_0, \varphi_k) + l_1(\varphi_1, \varphi_k) + \cdots + l_m(\varphi_m, \varphi_k) = 0, \quad k = 0, 1, \cdots, m. \quad (4.44)$$

由于函数 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots, \varphi_m(x)$ 关于节点 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 线性无关, 故 (4.44) 只有零解, 那么必有

$$\begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_m) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_m) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ (\varphi_m, \varphi_0) & (\varphi_m, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_m, \varphi_m) \end{vmatrix} \neq 0,$$

这样, 法方程组 (4.43)的解存在唯一.

下面证明 (4.41). 设 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_m^*$ 是法方程组的解:

$$\sum_{j=0}^{m}(\varphi_j, \varphi_k)a_j^* = (f, \varphi_k), \quad k = 0, 1, \cdots, m,$$

即

$$(\varphi^*, \varphi_k) = (f, \varphi_k), \quad k = 0, 1, \cdots, m,$$

或

$$(f - \varphi^*, \varphi_k) = 0, \quad k = 0, 1, \cdots, m,$$

根据内积的性质, 对任意的 $\varphi \in \Phi$ 有

$$(f - \varphi^*, \varphi) = 0.$$

于是, 对任意的 $a_0, a_1, \cdots, a_m$, 有

$$
\begin{aligned}
S(a_0, a_1, \cdots, a_m) &= \|f - \varphi\|_2^2 \\
&= (f-\varphi, f-\varphi) = (f-\varphi^* + \varphi^* - \varphi, f - \varphi^* + \varphi^* - \varphi) \\
&= (f-\varphi^*, f-\varphi^*) + 2(f-\varphi^*, \varphi^*-\varphi) + (\varphi^*-\varphi, \varphi^*-\varphi) \\
&= S(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_m^*) + 2(f-\varphi^*, \varphi^*-\varphi) + \|\varphi^*-\varphi\|_2^2,
\end{aligned}
$$

由于 $\varphi^* - \varphi \in \Phi$, 因此, 上面最后一个等式的右边第二项为零, 而第三项非负, 故

$$
S(a_0, a_1, \cdots, a_m) \geq S(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_m^*),
$$

即 $a_0^*, a_1^*, \cdots, a_m^*$ 是 (4.41) 的唯一最优解. $\square$

例 4.11 已知 $\sin 0 = 0$, $\sin\dfrac{\pi}{6} = \dfrac{1}{2}$, $\sin\dfrac{\pi}{3} = \dfrac{\sqrt{3}}{2}$, $\sin\dfrac{\pi}{2} = 1$, 由最小二乘法求 $\sin x$ 的拟合曲线 $\varphi(x) = ax + bx^3$.

Back
Close

解　这里, $f(x) = \sin x$, $\varphi_0(x) = x$, $\varphi_1 = x^3$, 计算得

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{4} [\varphi_0(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^{4} x_i^2 = 3.8382,$$

$$(\varphi_0, \varphi_1) = (\varphi_1, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{4} \varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i) = \sum_{i=1}^{4} x_i^4 = 7.3658,$$

$$(\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{4} [\varphi_1(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^{4} x_i^6 = 16.3611,$$

$$(f, \varphi_0) = \sum_{i=1}^{4} x_i \sin x_i = 2.7395, \quad (f, \varphi_1) = \sum_{i=1}^{4} x_i^3 \sin x_i = 4.9421.$$

得法方程组

$$\begin{cases} 3.8382a + 7.3685b = 2.7395, \\ 7.3658a + 16.3611b = 4.9421, \end{cases}$$

解得 $a = 0.9856$, $b = -0.1417$. 从而对应已知数据的 $\sin x$ 的最小二乘

14/15

Back

Close

拟合曲线为

$$\varphi(x) = 0.9856x - 0.1417x^3.$$

作业： P92: 4.23; 4.24(2).