数值分析 Numerical Analysis

Lecture 10：最小二乘法Least Square Method

骞微著

苏州大学，计算机科学与技术学院

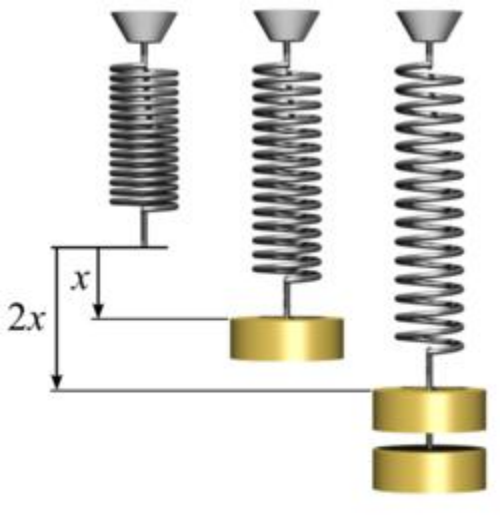
邮箱：wzqian@suda.edu.cn
办公室：理工楼543

最小二乘法

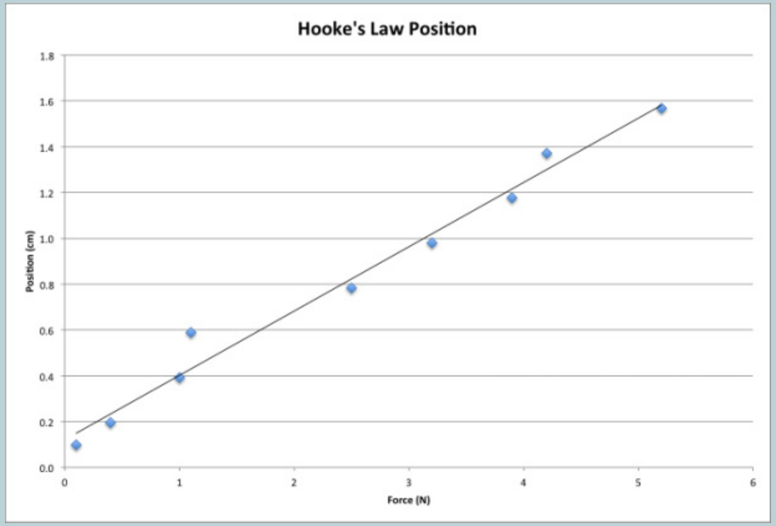
1. 最小二乘法
2. 最小二乘法的多项式拟合
3. 最小二乘法求解超正定方程

曲线拟合Curve Fitting

胡克定律 Hooke’s Law



Mass (g)	Position (cm)	Force (N)
30	0.2	0.3
60	1.5	0.6
90	2.5	0.9
120	3.6	1.2
150	4.7	1.5
180	5.9	1.8
210	6.7	2.1
240	7.9	2.4
270	8.9	2.6



思考：为什么会产生这种现象？

最小二乘法的提出

已知目标函数形式为： $y = ax + b$,及多组不同的数据点 $(x_i, y_i)(i = 1,2,..,n)$ ，可得

$$\begin{cases} y_1 = ax_1 + b \\ y_2 = ax_2 + b \\ \qquad \vdots \\ y_n = ax_n + b \end{cases}$$

以上方程组无解！

多项式最小二乘拟合

给定n组数据$(x_i, y_i)(i=1,2,\cdots,n)$，求$m$次多项式（这里不考虑每个点的权重）

$$P_m^*(x)=\sum_{k=0}^{m} a_k^* x^k \quad (m<n) \qquad (4-27)$$

使 $$F(a_0^*, a_1^*, \cdots, a_m^*)=\min F(a_0, a_1, \cdots, a_m) \qquad (4-28)$$

这里$F(a_0, a_1, \cdots, a_m)=\sum_{i=1}^{n}(\sum_{k=0}^{m} a_k x_i^k - y_i)^2$称为**方差**。

问题：

其它范数目标函数是否可行？

解 由驻点方程

$$\frac{\partial F}{\partial a_l}=\sum_{i=1}^{n} 2[\sum_{k=0}^{m} a_k x_i^k - y_i] x_i^l = 0 \quad (l=0,1,2,\cdots,m) \qquad (4-29)$$

整理得 $$\sum_{k=0}^{m}\sum_{i=1}^{n} x_i^{k+l} a_k = \sum_{i=1}^{n} x_i^l y_i \ (l=0,1,\cdots,m)$$

最小二乘法

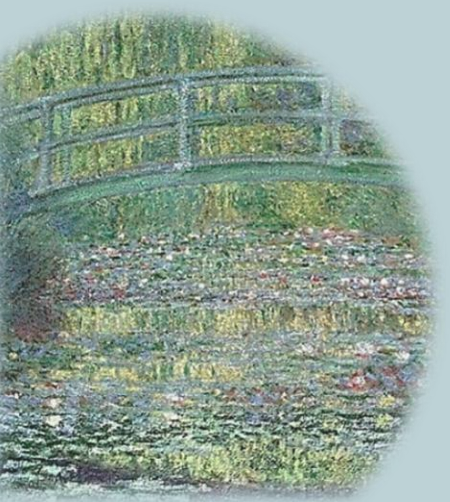
$$
\text{即}\begin{cases}
na_0 + (\sum_{i=1}^{n} x_i)a_1 + \cdots + (\sum_{i=1}^{n} x_i^m)a_m = \sum_{i=1}^{n} y_i \\
(\sum_{i=1}^{n} x_i)a_0 + (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)a_1 + \cdots + (\sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1})a_m = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
(\sum_{i=1}^{n} x_i^m)a_0 + (\sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1})a_1 + \cdots + (\sum_{i=1}^{n} x_i^{2m})a_m = \sum_{i=1}^{n} x_i^m y_i
\end{cases}
$$

引进记号

$$
\begin{cases}
S_k = \sum_{i=1}^{n} x_i^k & (k = 0,1,\cdots,2m) \\
T_k = \sum_{i=1}^{n} x_i^k y_i & (k = 0,1,\cdots,m)
\end{cases} \qquad (4-30)
$$

可简写成

$$
\begin{pmatrix}
S_0 & S_1 & \cdots & S_m \\
S_1 & S_2 & \cdots & S_{m+1} \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
S_m & S_{m+1} & \cdots & S_{2m}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_m \end{pmatrix} \qquad (4-31)
$$



它称为**法方程组（或正规方程组）**。

最小二乘法解的唯一性

$$\underbrace{\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & \cdots & S_m \\ S_1 & S_2 & \cdots & S_{m+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ S_m & S_{m+1} & \cdots & S_{2m} \end{pmatrix}}_{\mathrm{G}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}}_{a} = \underbrace{\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ \vdots \\ T_m \end{pmatrix}}_{d}$$

为保证最小二乘法解的唯一性，我们需要系数矩阵可逆。然而，引入的记号 (S_m) 并不构成 C[a, b] 或S中的内积. 因此仅仅凭借 $S_0, S_1, \ldots, S_m$的线性无关并不能推出 G 是非奇异的.

定理 $S_0, S_1, \ldots, S_m \in$ C[a, b] 线性无关. $S_0, S_1, \ldots, S_m$ 的任意（非零）线性组合在点集 $\{x_0, x_1, \ldots, x_m\}$ 上至多只有 n 个不同的零点, 则 G 非奇异, 此时法方程存在唯一解.

上述定理中的条件称为 Haar 条件, 显然, 如果取 S_i(x) = x_i, 则 Haar 条件成立.

最小二乘法的多项式拟合

当拟合多项式中x的某些幂次不出现时，相应的法方程组即等于从原法方程（4−31）去掉相应的行列后所得到的方程组。例如，当拟合函数为$Q_3(x)=a_1^*x+a_3^*x^3$时，可从不缺项的法方程组

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & S_3 \\ S_1 & S_2 & S_3 & S_4 \\ S_2 & S_3 & S_4 & S_5 \\ S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix}$$

去掉第一，三行和一，三列得到方程组

$$\begin{pmatrix} S_2 & S_4 \\ S_4 & S_6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} T_1 \\ T_3 \end{pmatrix} \qquad (4-32)$$

最小二乘法的多项式拟合

当拟合函数为 $Q_2(x)=a_0^*+a_2^*x^2$ 时，相应的法方程组为

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix}$$

即

$$\begin{pmatrix} S_0 & S_2 \\ S_2 & S_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} T_0 \\ T_2 \end{pmatrix} \qquad (4-33)$$

当拟合函数为 $\tilde{Q}_2=a^*x+b^*x^2$ 时，相应的法方程组为

$$\begin{pmatrix} S_2 & S_3 \\ S_3 & S_4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} \qquad (4-34)$$

最小二乘法的多项式拟合

例 4.5 试对以下数据进行多项式拟合

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	1.1	3.8	8.7	15.6	24.6	37.4	49.6	64.2

解 描点，确定$m=2.$

令 $P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$,计算得

$S_0=8,\ S_1=36,\ S_2=204,\ S_3=1296,\ S_4=8772,$

$T_0=205,\ T_1=1305.4,\ T_2=8844.8$

从而建立法方程组

$$\begin{pmatrix} 8 & 36 & 204 \\ 36 & 204 & 1296 \\ 204 & 1296 & 8772 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 205 \\ 1305.4 \\ 8844.8 \end{pmatrix}$$

解得 $a_0=-0.1143$，$a_1=-0.0548$，$a_2=1.0190$

故 $P(x)=-0.1143-0.0548x+1.0190x^2$

最小二乘求解超定方程组

对于线性方程组

$$\sum_{j}^{n} a_{ij}x_j = b_i, (i = 1,2,\dots,m)$$

当方程个数m大于未知数个数n时，我们称方程组为超正定方程组Overdetermined System。

这类方程组没有通常意义下的解，我们只能求其最小二乘解。即求$x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$， 使得

$$R(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*) = \min R(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

这里$R(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{m} r_i^2$，$r_i = \sum_{j=1}^{n} a_i x_i - b_i \, (i = 1,2,\dots,m)$。

最小二乘求解超定方程组

方程组的矩阵形式为：

$$Ax = b, A = \left(a_{ij}\right)_{m\times n}, x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

可证其法方程组的形式为

$$\left(A^{\mathrm{T}}A\right)x = A^{\mathrm{T}}b$$

当$A^{\mathrm{T}}A$可逆时，其最小二乘解存在且唯一。

注意：求最小二乘解时不能预先对方程进行约化运算，否则方程解会改变。

最小二乘法的应用举例

例 4.6 用最小二乘法求形如 $y = ax + bx^2$ 的多项式，使与下列数据拟合（得数保留三位小数）

x	-2	0	1	2
y	1.9	0	5.1	13.8

解 $\because S_2 = 9$，$S_3 = 1$，$S_4 = 33$，$T_1 = 28.9$，$T_2 = 67.9$

$\therefore$ 相应的法方程组为 $\begin{pmatrix} 9 & 1 \\ 1 & 33 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 28.9 \\ 67.9 \end{pmatrix}$

解得 $a \approx 2.993$，$b = 1.967$

故所求拟合多项式为 $y = 2.993x + 1.967x^2$

最小二乘法的应用举例

例 4.7 给定数据

x	-5	0	1	2
y	52.6	3.4	5.5	10.5

试求形如 $y = a + bx^2$ 的拟合多项式（得数保留三位小数）。

解 $\because S_0 = 4$，$S_2 = 30$，$S_4 = 642$，$T_0 = 72$，$T_2 = 1362.5$,

$\therefore$ 相应的法方程组为

$$\begin{pmatrix} 4 & 30 \\ 30 & 642 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 72 \\ 1362.5 \end{pmatrix}$$

解得 $a \approx 3.207$，$b \approx 1.972$

因此，所求拟合多项式为 $y = 3.207 + 1.972x^2$

最小二乘法的应用举例

例 数据的指数拟合

$$y = ae^{bx}$$

$$z = \ln y = \ln a + bx$$

例 4.8 试对下表数据进行指数拟合

x_i	1	2	3	4	5	6
y_i	15.4	20.4	26.8	37.2	48.8	63.3

解 首先根据 y_i 的值算出 $z_i = \ln y_i$（$i = 1,2,\cdots,6$），列出下表。

x_i	1	2	3	4	5	6
$z_i=\ln y_i$	2.7344	3.0155	3.2884	3.6163	3.8877	4.1479

令 $z(x) = a_0 + a_1 x$, 对数据（x_i, z_i) ($i = 1,2,\cdots,6$) 进行线性拟合

建立法方程组 $\begin{pmatrix} 6 & 21 \\ 21 & 91 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20.6902 \\ 77.4217 \end{pmatrix}$

解出 $a_0 = 2.44717, a_1 = 0.286061$

所以 $z(x) = 2.44717 + 0.28606x$

$$y(x) = e^{z(x)} = 11.55556e^{0.28606x}$$

最小二乘法的应用举例

例 超定方程组的最小二乘解

$Ax=b$的法方程的形式为

$$(A^T A)x = A^T b \qquad (4-39)$$

例 4.9 试求以下超定方程组的最小二乘解。

$$\begin{cases} x_1 + 1.2x_2 = 1.6 \\ 2.1x_1 + 2x_2 = 2.4 \\ 3x_1 + x_2 = 2 \\ 1.5x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

解 因为

$$A^T A = \begin{pmatrix} 16.6 & 9.9 \\ 9.9 & 7.44 \end{pmatrix}, \quad A^T b = \begin{pmatrix} 15.64 \\ 10.73 \end{pmatrix}$$

所以法方程为$\begin{pmatrix} 16.6 & 9.9 \\ 9.9 & 7.44 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15.64 \\ 10.72 \end{pmatrix}$

解得 $x_1 = 0.4014$，$x_2 = 0.9067$。

作业10

12. 用最小二乘法求形如 $y=ax+bx^2$ 的多项式，使与下列数据拟合（得数保留四位小数）。

x	-3	-1	0	2	4
y	-8.2	-9.2	0	38.1	102.1

15. 试求以下超定方程组的最小二乘解（得数保留三位小数）。

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = 1 \\ -2x_1 + x_2 = 2 \\ 2x_1 - 2x_2 = 3 \\ -3x_1 + x_2 = 4 \end{cases}$$

14. 测得单摆振动的振幅随时间 t 变化的数据表如下：

t	0	1	2	3	4	5	6
y	9.00	4.47	2.22	1.10	0.55	0.27	0.13

试用指数拟合求解衰减变化规律 $y=ae^{bt}$（得数保留三位小数）。

作业以word格式将推导，代码，（可视化）运行结果等（控制文件大小，不要粘贴代码图片，文件名：学号_姓名_作业10）发到助教（小王）邮箱：20245227027 @stu.suda.edu.cn 。


Thanks