第五章 曲线拟合的最小二乘法

§1 矛盾方程组求解的最小二乘法

§2 曲线最小二乘拟合

§3 移动最小二乘近似*

§1 矛盾方程组求解的最小二乘法

一 矛盾方程组的定义

设 $\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1m}x_m = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2m}x_m = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nm}x_m = b_n \end{cases}$ （$n>m$ ）

或写为 $\sum_{j=1}^{m} a_{ij}x_j = b_i \quad (i=1,2,\cdots,n)$ 其矩阵形式为**Ax=b**。

当方程组系数矩阵与增广矩阵的秩不相等，方程组无常规意义的解，此时方程组称为矛盾方程组。

如 $\begin{cases} x+y=1 \\ x-2y=4 \\ x+3y=2 \end{cases}$

二 矛盾方程组求解的最小二乘法

对于rankA＝m（A的秩为m）的矛盾方程组（$n> m$），我们寻求其**最小二乘意义下的解**。

1 最小二乘解的定义

令**偏差（残差）**

$$\delta_i = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{im}x_m - b_i = \sum_{j=1}^{m} a_{ij}x_j - b_i \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

求矛盾方程组的解，即求一组 $x_1, x_2, \cdots, x_m$，使

$$F(x_1, x_2, \cdots, x_m) = \sum_{i=1}^{n} \delta_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{m} a_{ij}x_j - b_i\right)^2$$

达到最小值。

符合该条件的$x_1, x_2, \cdots, x_m$称为矛盾方程组的**(最小二乘)解**。

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

如： 求解矛盾方程组 $\begin{cases} x+y=1 \\ x-2y=4 \\ x+3y=2 \end{cases}$ 即求

$F(x,y)=(x+y-1)^2+(x-2y-4)^2+(x+3y-2)^2$ 达到最小值的x,y。

令 $\dfrac{\partial F}{\partial x}=0, \dfrac{\partial F}{\partial y}=0$，得 $\begin{cases} 2(x+y-1)+2(x-2y-4)+2(x+3y-2)=0 \\ 2(x+y-1)-4(x-2y-4)+6(x+3y-2)=0 \end{cases}$

整理、求解后，可得到$F(x,y)$的驻点x_0,y_0。

可证明$F(x,y)$的驻点唯一，且$F(x,y)$在驻点处达到最小值。故上述矛盾方程组的解即为x_0, y_0。

2 最小二乘解的存在唯一性

设 $F(x_1,x_2,\cdots,x_m)=(\sum_{j=1}^{m} a_{1j}x_j-b_1)^2+\cdots+(\sum_{j=1}^{m} a_{nj}x_j-b_n)^2$

则 $F(x_1,x_2,\ldots,x_m)$是$x_1,x_2,\ldots,x_m$的二次连续函数，且有连续的一阶及二阶偏导数。

由 $\frac{\partial F}{\partial x_k}=2a_{1k}(\sum_{j=1}^{m}a_{1j}x_j-b_1)+2a_{2k}(\sum_{j=1}^{m}a_{2j}x_j-b_2)+\cdots+2a_{nk}(\sum_{j=1}^{m}a_{nj}x_j-b_n)$

$$=2\begin{pmatrix}a_{1k} & a_{2k} & \cdots & a_{nk}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sum_{j=1}^{m}a_{1j}x_j-b_1\\ \sum_{j=1}^{m}a_{2j}x_j-b_2\\ \vdots\\ \sum_{j=1}^{m}a_{nj}x_j-b_n\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}a_{1k} & a_{2k} & \cdots & a_{nk}\end{pmatrix}(\mathbf{Ax}-\mathbf{b})$$

$$k=1,2,\cdots\cdots,m$$

令 $\begin{pmatrix}\frac{\partial F}{\partial x_1}\\ \frac{\partial F}{\partial x_2}\\ \vdots\\ \frac{\partial F}{\partial x_m}\end{pmatrix}=2\begin{bmatrix}a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1}\\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{1m} & a_{2m} & \cdots & a_{nm}\end{bmatrix}(\mathbf{Ax}-\mathbf{b})=2\mathbf{A}^T(\mathbf{Ax}-\mathbf{b})=\mathbf{0}$

法方程组

F的驻点$x_1,x_2,\ldots,x_m$满足 $\boxed{\mathbf{A}^T\mathbf{Ax}-\mathbf{A}^T\mathbf{b}=\mathbf{0}\text{（}\mathbf{A}^T\mathbf{A}\text{ 为}m\text{阶方阵）}}$

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_m)=(\sum_{j=1}^{m}a_{1j}x_j-b_1)^2+\cdots+(\sum_{j=1}^{m}a_{nj}x_j-b_n)^2$$

若rank**A**=m，可证$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$为正定矩阵。

故 $\boxed{\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{A}^T\mathbf{b}=\mathbf{0}\text{有唯一解(函数}F\text{存在唯一驻点)}}$。

并且，可证二次函数F在唯一驻点处取极小值，

且F的极小值就是最小值。

定理 设矛盾方程组系数矩阵的秩为m，则线性方程组$\boxed{\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}}$的解使函数

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_m)=\sum_{i=1}^{n}(\sum_{j=1}^{m}a_{ij}x_j-b_i)^2$$

达到唯一的最小值。

3 矛盾方程组的最小二乘法求解步骤

（1）判断矛盾方程组**Ax**=**b**的秩是否满足rank**A**=m？

（2）写出法（正规）方程组 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$；

（3）求解法方程组$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$，其解就是矛盾方程组**Ax**=**b**的最小二乘解。

$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{A}^T\mathbf{b}=\mathbf{0}$（$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ 为m阶方阵）

例 $\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 - x_2 = 1 \\ x_1 + 2x_2 = -1 \end{cases}$ 与 $\begin{cases} 2x_1 + 2x_2 = 2 \\ x_1 - x_2 = 1 \\ x_1 + 2x_2 = -1 \end{cases}$ 的最小二乘解是否相同？

解 法方程组 $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$

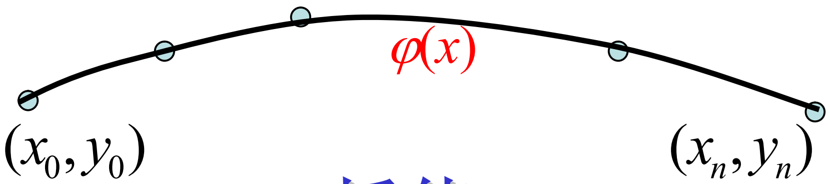
与法方程组 $\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$ 的解不同。

所以，上述矛盾方程组的最小二乘解并不相同。

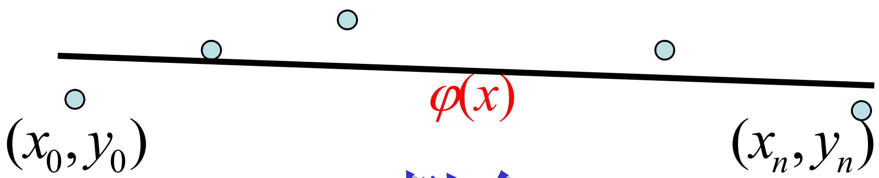
§2 曲线拟合的最小二乘法

一 曲线拟合的最小二乘法

曲线拟合问题



插值



拟合

给定数据 $\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^{n}$ ，要求建立一个"最好的"连续函数 $y=\varphi(x)$，反映该组数据的基本特征（但并非要求$\varphi(x)$通过给定节点）。

使$\varphi(x)$"最好"地拟合这组数据，即使$\varphi(x)$在x_i的偏差

$$\delta_i=\varphi(x_i)-y_i \quad (i=0,1,2,\cdots,n)$$

的平方和$\sum_{i=0}^{n}\delta_i^2=\sum_{i=0}^{n}[\varphi(x_i)-y_i]^2$最小。

设$\varphi(x)=\sum_{i=0}^{m}c_i\varphi_i(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_m\varphi_m(x)$

线性模型：
关于待定常数为线性

$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^{m}$是线性无关的已知函数组，$c_0,c_1,\ldots,c_m$待定。

求曲线拟合问题，即确定$\varphi(x)$中$c_0,c_1,\ldots,c_m$，使$\varphi(x)$在x_i的偏差平方和$F(c_1,c_2,\cdots,c_n)=\sum_{i=0}^{n}\delta_i^2=\sum_{i=0}^{n}[\varphi(x_i)-y_i]^2$最小。

将点(x_i,y_i)，$i=0,\ldots,n$ $(n>m)$带入$y=\varphi(x)$，得到以$c_0,c_1,\ldots,c_m$为未知量的**矛盾方程组** **矩阵形式**为$\mathbf{Ax=b}$

$$\begin{cases} c_0\varphi_0(x_0)+c_1\varphi_1(x_0)+\cdots+c_m\varphi_m(x_0)=y_0 \\ c_0\varphi_0(x_1)+c_1\varphi_1(x_1)+\cdots+c_m\varphi_m(x_1)=y_1 \\ \vdots \\ c_0\varphi_0(x_n)+c_1\varphi_1(x_n)+\cdots+c_m\varphi_m(x_n)=y_n \end{cases}$$

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \cdots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \cdots & \varphi_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \cdots & \varphi_m(x_n) \end{bmatrix}, \mathbf{x}=\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix}, \mathbf{b}=\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

上述矛盾方程组$\mathbf{Ax=b}$的最小二乘解$c_0,c_1,\ldots,c_m$，将使得偏差平方和$\sum_{i=0}^{n}\delta_i^2=\sum_{i=0}^{n}[\varphi(x_i)-y_i]^2$达到最小值。

求曲线拟合函数$\varphi(x)$中的$c_0,c_1,\ldots,c_m$等价于求矛盾方程组的最小二乘解。

当φ线性依赖于所有参数$\{c_i\}_{i=0}^m$时，即φ可表示为

$$\varphi(x)=\sum_{i=0}^m c_i\varphi_i(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_m\varphi_m(x)$$

式中$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^m$是线性无关的已知函数组，这时称$\varphi(x)$是**线性拟合模型**。如：$\varphi(x)=c_0+c_1x+c_2\dfrac{1}{x}$

当φ关于某个或某些参数是非线性的，则称之为**非线性拟合模型**。如：

$$\varphi(x)=\frac{x}{c_0+c_1x}\qquad \varphi(x)=c_0e^{c_1x}\qquad \varphi(x)=c_0\sin(c_1+c_2x)$$

求解非线性拟合模型时，需将其关于参数的非线性关系线性化。解决实际问题时，需选择多个函数类型进行计算、比较，最终获得较好的数学模型。

二 最小二乘法拟合曲线的步骤

① 通过分析，确定拟合曲线的数学模型。

② 将拟合曲线的数学模型转换为关于待定参数的线性模型。 $\varphi(x)=c_0\varphi_0(x)+c_1\varphi_1(x)+\cdots+c_m\varphi_m(x)$

③ 写出矛盾方程组 $c_0\varphi_0(x_i)+c_1\varphi_1(x_i)+\cdots+c_m\varphi_m(x_i)=y_i, i=0,1,\cdots,n$

④ 写出法方程组。

⑤ 求解法方程组，得到拟合曲线的待定系数。

⑥ 由法方程组的解得到拟合曲线。

⑦ 计算拟合曲线的均方误差（误差的平方和）

$$\sum_{i=0}^{n}\delta_i^2=\sum_{i=0}^{n}[\varphi(x_i)-y_i]^2=\sum_{i=0}^{n}[c_0\varphi_0(x_i)+c_1\varphi_1(x_i)+\cdots+c_m\varphi_m(x_i)-y_i]^2$$

均方误差较小的拟合曲线为较优的拟合曲线。

例1 写出用 $\varphi(x)=a+bx+cx^2$ 与 $\varphi(x)=a+bx^2$ 拟合 $\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^n$ 的法方程组。

① 设 $\varphi(x)=a+bx+cx^2$，将 $\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^n$ 带入 $y=\varphi(x)$，便得到以 a, b, c 为未知量的矛盾方程组 $\mathbf{Ax=b}$，即

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

法方程组为

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

即

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n 1 & \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 \\ \sum_{i=0}^n x_i & \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^N x_i^3 \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 & \sum_{i=0}^n x^3 & \sum_{i=0}^n x_i^4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

② 设 $\varphi(x)=a+bx^2$，将$\{(x_i,y_i)\}_{i=0}^{n}$带入$y=\varphi(x)$，便得到以a,b为未知量的矛盾方程组**Ax=b**，即

$$\begin{bmatrix}1 & x_0^2\\ 1 & x_1^2\\ \vdots & \vdots\\ 1 & x_n^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}y_0\\ y_1\\ \vdots\\ y_n\end{bmatrix}$$

即

$$\begin{bmatrix}\sum_{i=0}^{n}1 & \sum_{i=0}^{n}x_i^2\\ \sum_{i=0}^{n}x_i^2 & \sum_{i=0}^{n}x_i^4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sum_{i=0}^{n}y_i\\ \sum_{i=0}^{n}x_i^2y_i\end{bmatrix}$$

法方程组为

$$\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & x_0^2\\ 1 & x_1^2\\ \vdots & \vdots\\ 1 & x_n^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}y_0\\ y_1\\ \vdots\\ y_n\end{bmatrix}$$

例2 **写出**用下列函数拟合$\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{n}$的法方程组。

① $y=\varphi(x)=ae^{bx}$　　② $y=\varphi(x)=\dfrac{a}{x}+b$

解 ① 由 $\ln y=\ln a+bx$ 设 $Y=\ln y,\ A=\ln a,\ B=b$

问题转化为 $Y=A+Bx$

矛盾方程组为
$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \ln y_0 \\ \ln y_1 \\ \vdots \\ \ln y_n \end{bmatrix}$$

法方程组为
$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} 1 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} \ln y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i \ln y_i \end{bmatrix}$$

原始问题 $a=e^{A},\ b=B$

② 矛盾方程组为
$$\begin{bmatrix} \frac{1}{x_0} & 1 \\ \frac{1}{x_1} & 1 \\ \vdots & \vdots \\ \frac{1}{x_n} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

法方程组为
$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{x_i^2} & \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{x_i} \\ \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{x_i} & \sum_{i=0}^{n} 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} \frac{y_i}{x_i} \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \end{bmatrix}$$

② $y = \varphi(x) = \dfrac{a}{x} + b$

总结

1. 离散数据的曲线拟合

- 线性与非线性拟合模型的求解
- 均方误差的计算

2. 矛盾方程组的求解