数据拟合作业报告

秦超 22373405@buaa.edu.cn

摘要

此报告为PRML第一次作业，旨在完成对所给数据的拟合和分析。

引入

在科学研究和数据分析中，数据拟合是探索数据规律、建立模型的关键步骤。它不仅帮助我们理解复杂现象背后的数学关系，还能为预测和决策提供有力支持。本次作业将通过数据拟合，深入挖掘数据特征，构建精准模型，旨在提升对数据驱动方法的理解与应用能力。

研究方法

此次作业使用三种方法对所给数据进行线性拟合，以及两种不同的非线性函数模型进行拟合。

最小二乘法

最小二乘法是一种数学优化技术，它通过最小化误差的平方和来寻找一组数据的最佳函数匹配。对于线性函数$y = ax + b$的拟合，最小二乘法的目标是最小化误差平方和：

$$E(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2$$

通过求解 $E(a, b)$ 关于 a 和 b 的偏导数，并令其为零，可以得到a和b的解析解：

$$a = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}, \quad b = \frac{\sum y_i - a \sum x_i}{n}$$

梯度下降法

梯度下降法是一种迭代的优化算法，用于求解函数的最小值。对于线性函数 $y = ax + b$ 的拟合，梯度下降法的目标是最小化误差平方和 $E(a, b)$。梯度下降法的迭代公式是：

$$a_{k+1} = a_k - \eta \frac{\partial E}{\partial a}, \quad b_{k+1} = b_k - \eta \frac{\partial E}{\partial b}$$

其中 η *是学习率，* $\frac{\partial E}{\partial a}$ 和 $\frac{\partial E}{\partial b}$ 分别是 $E(a, b)$ 关于 a 和 b 的偏导数。

牛顿法

牛顿法是一种求解函数极值的迭代方法，它利用函数的一阶和二阶导数来逼近极值点。对于线性函数 $y = ax + b$ 的拟合，牛顿法的目标是最小化误差平方和 $E(a, b)$。牛顿法的迭代公式是：

$$\begin{bmatrix} a_{k+1} \\ b_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_k \\ b_k \end{bmatrix} - \mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k) \nabla E(\mathbf{x}_k)$$

其中 $\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}_k)$ 是 $E(a, b)$ 的海森矩阵的逆矩阵，$\nabla E(\mathbf{x}_k)$ 是 $E(a, b)$ 的梯度。

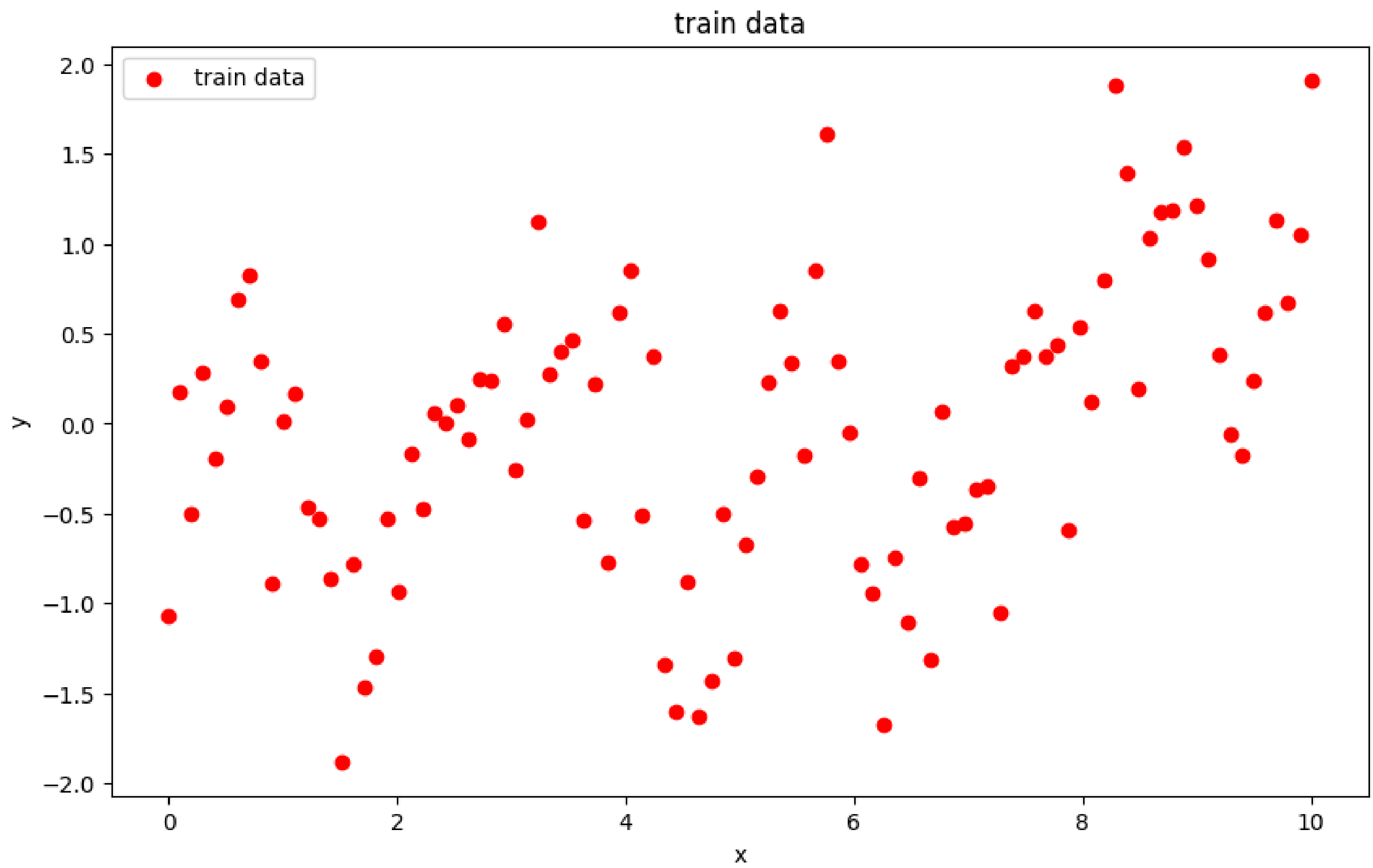
非线性拟合

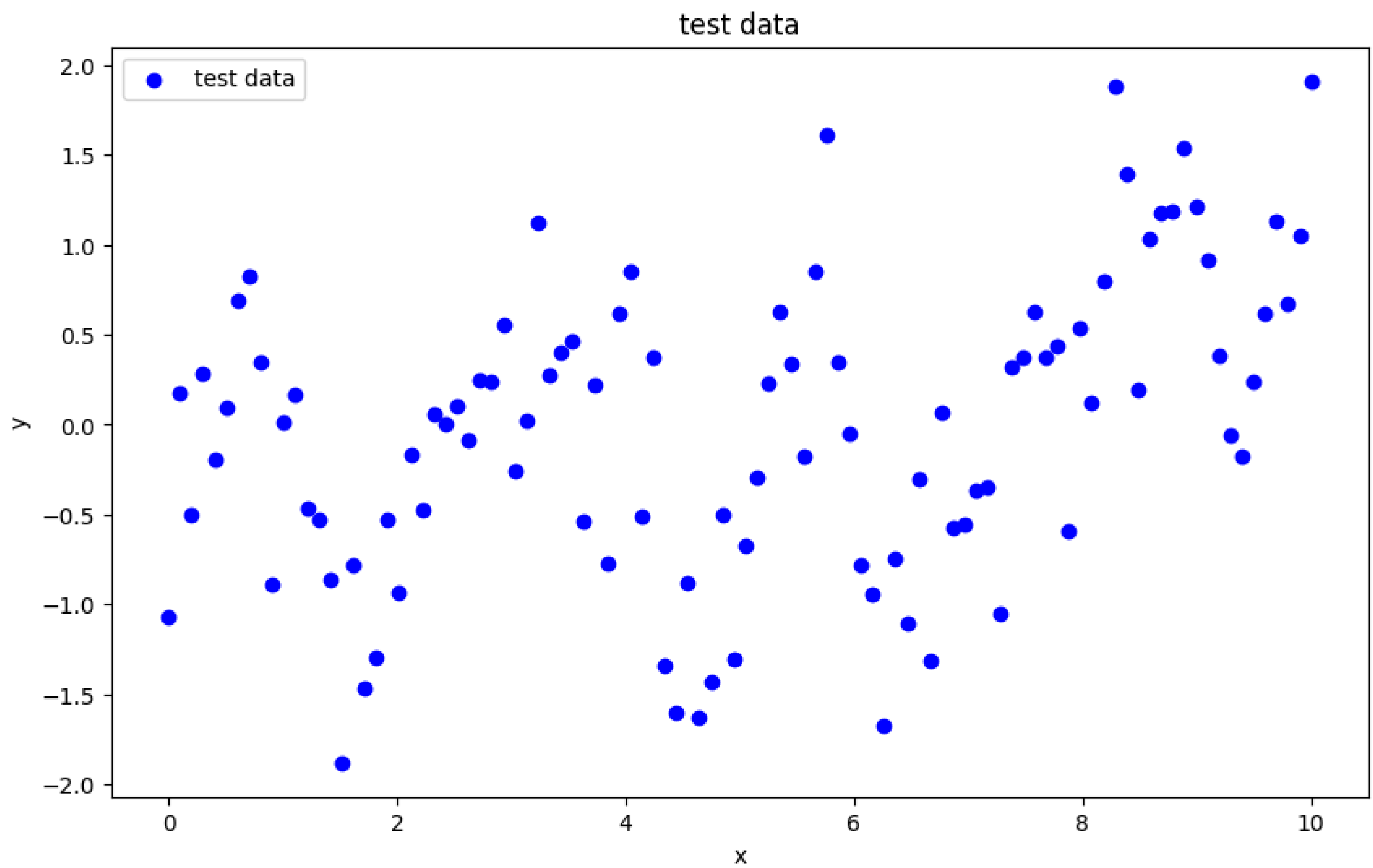
非线性拟合是指使用非线性模型来拟合数据的过程。与线性拟合不同，非线性拟合中的模型参数与自变量之间的关系是非线性的。非线性拟合通常用于描述复杂的数据关系。

实验内容

对所给的一组二维数据（分为训练数据和测试数据），使用最小二乘法、梯度下降法和牛顿法三种方法分别进行线性拟合，并计算训练误差和测试误差。之后，使用两种非线性函数模型对所给数据进行拟合。

下给出训练数据和测试数据的散点图：


train data
train data
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
y
0
2
4
6
8
10
x


test data
test data
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
y
0
2
4
6
8
10
x

实验数据

线性拟合

根据三种不同的拟合方法，得到的拟合线性函数 $y = ax + b$ 的参数如下：

	最小二乘法	梯度下降法	牛顿法
a	0.1089473868580371	0.10827265618339714	0.10894738685803708
b	-0.6487466967301857	-0.6442592675352024	-0.6487466967301854

误差计算使用均方误差，计算公式为：

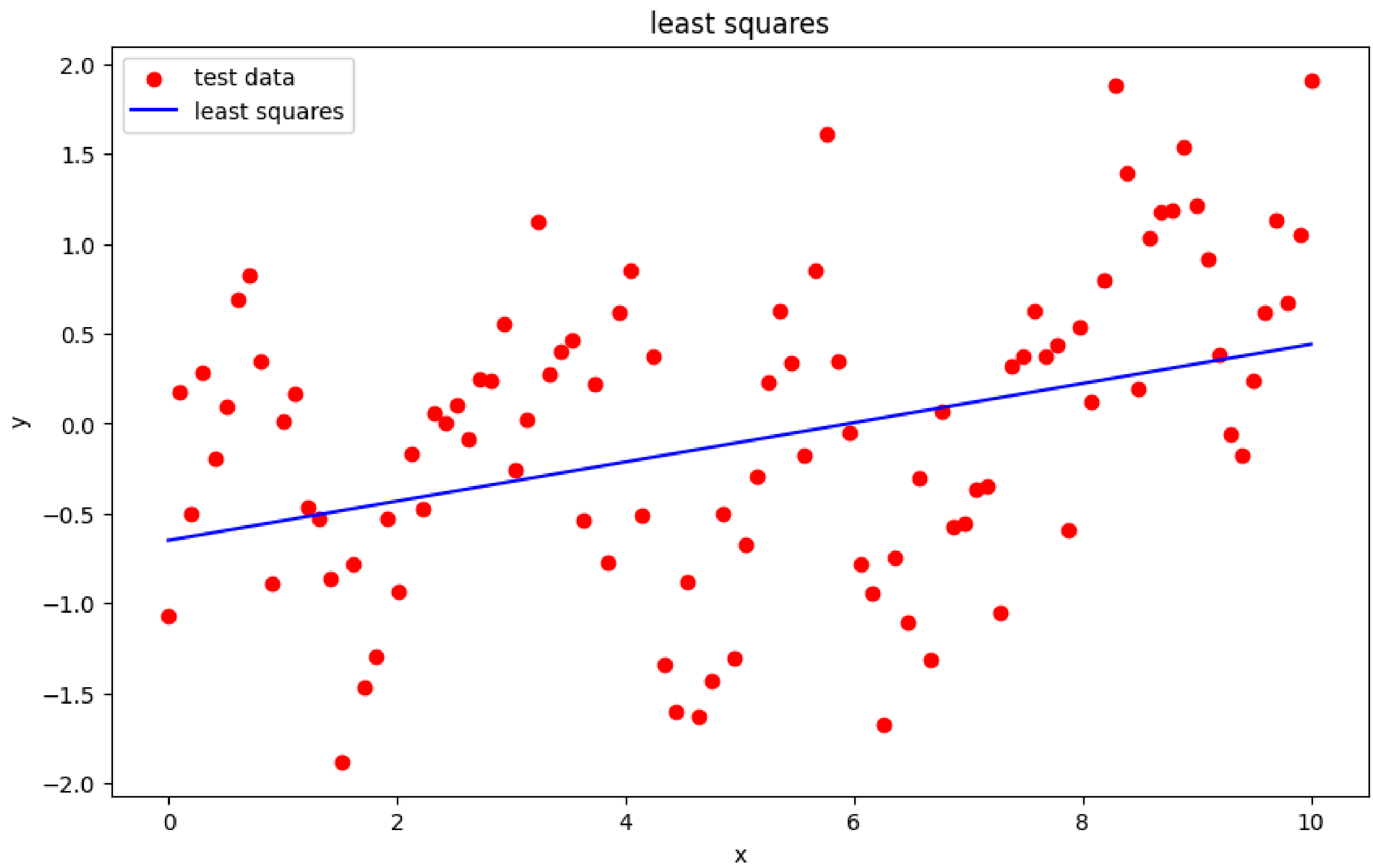
$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

三种线性拟合的误差计算如下表：

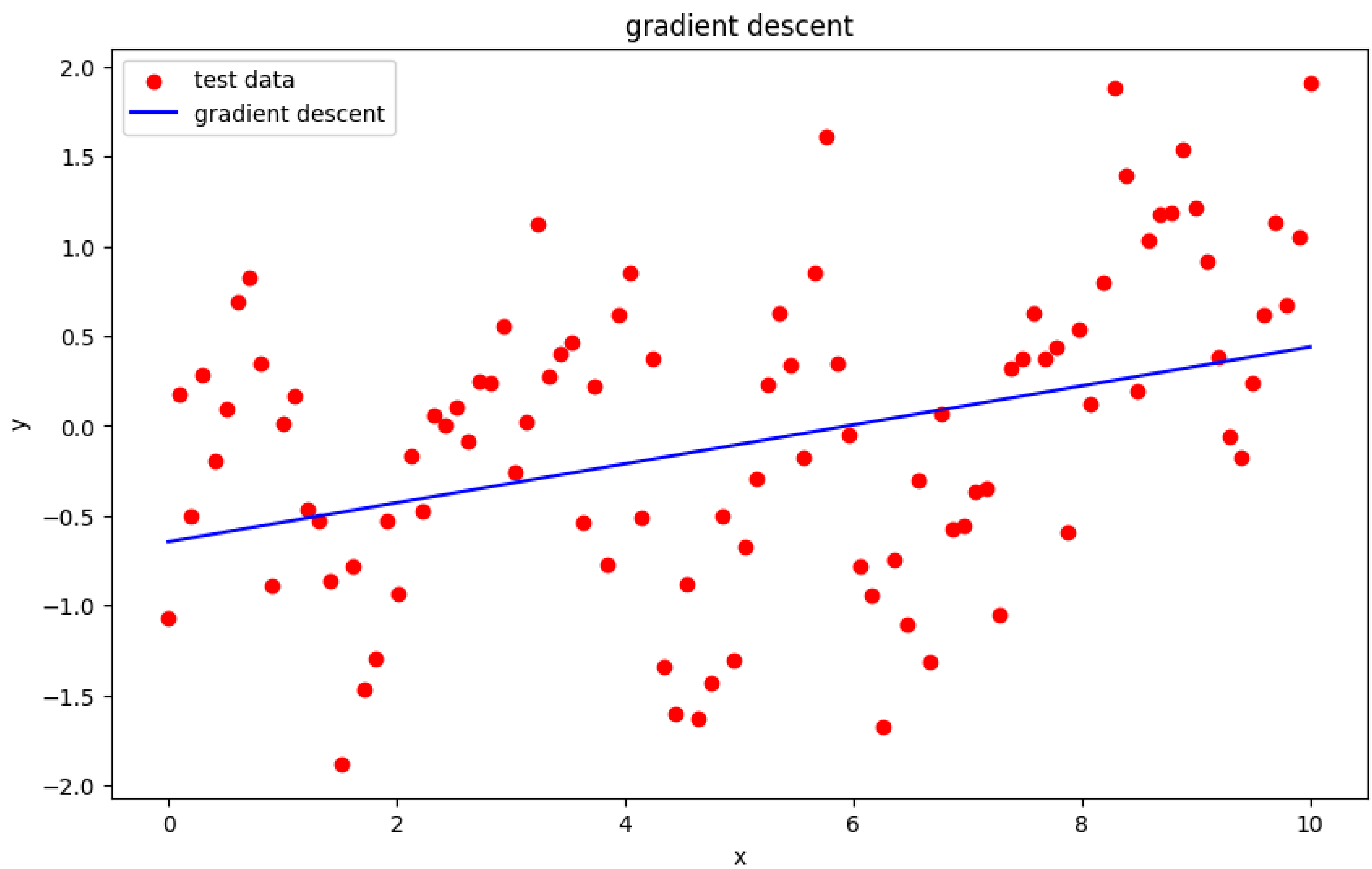
	最小二乘法	梯度下降法	牛顿法
训练误差	0.6134024281450051	0.6134075391306283	0.6134024281450051
测试误差	0.593273429404795	0.5930801995104871	0.5932734294047949

下给出三种线性拟合的函数图像：

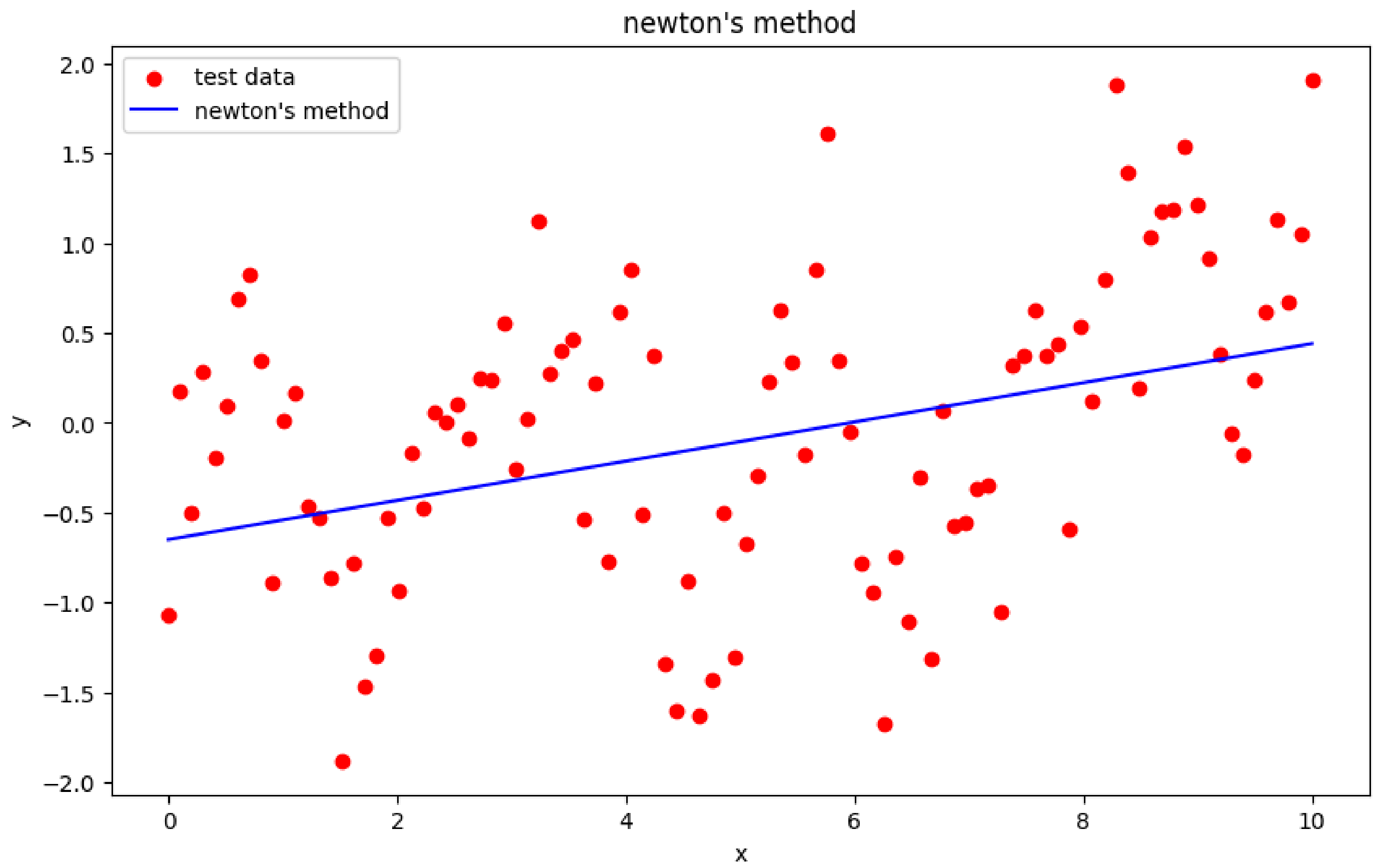
最小二乘法：


least squares
test data
least squares
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
y
0
2
4
6
8
10
x

梯度下降法:


gradient descent
test data
gradient descent
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.5
−2.0
y
0
2
4
6
8
10
x

牛顿法：



非线性拟合

由于从图像中观察到一定的周期性，考虑到出现波峰波谷以及多次穿过x轴，现考虑使用两种非线性模型进行拟合：（1）正弦型函数（2）高次多项式型函数。

正弦型函数

拟合函数模型为 $y = a\sin(bx + c) + d$，使用python中的lmfit库进行非线性函数拟合。

首先确定模型初始参数，振幅 a 可以通过数据的最大值和最小值的差的一半来估计，偏移量 d 可以通过数据的平均值来估计，角频率 b 通过估计数据的周期性或进行快速傅里叶变换求得，相位 c 初始设为 0 。

实验结果如下表：

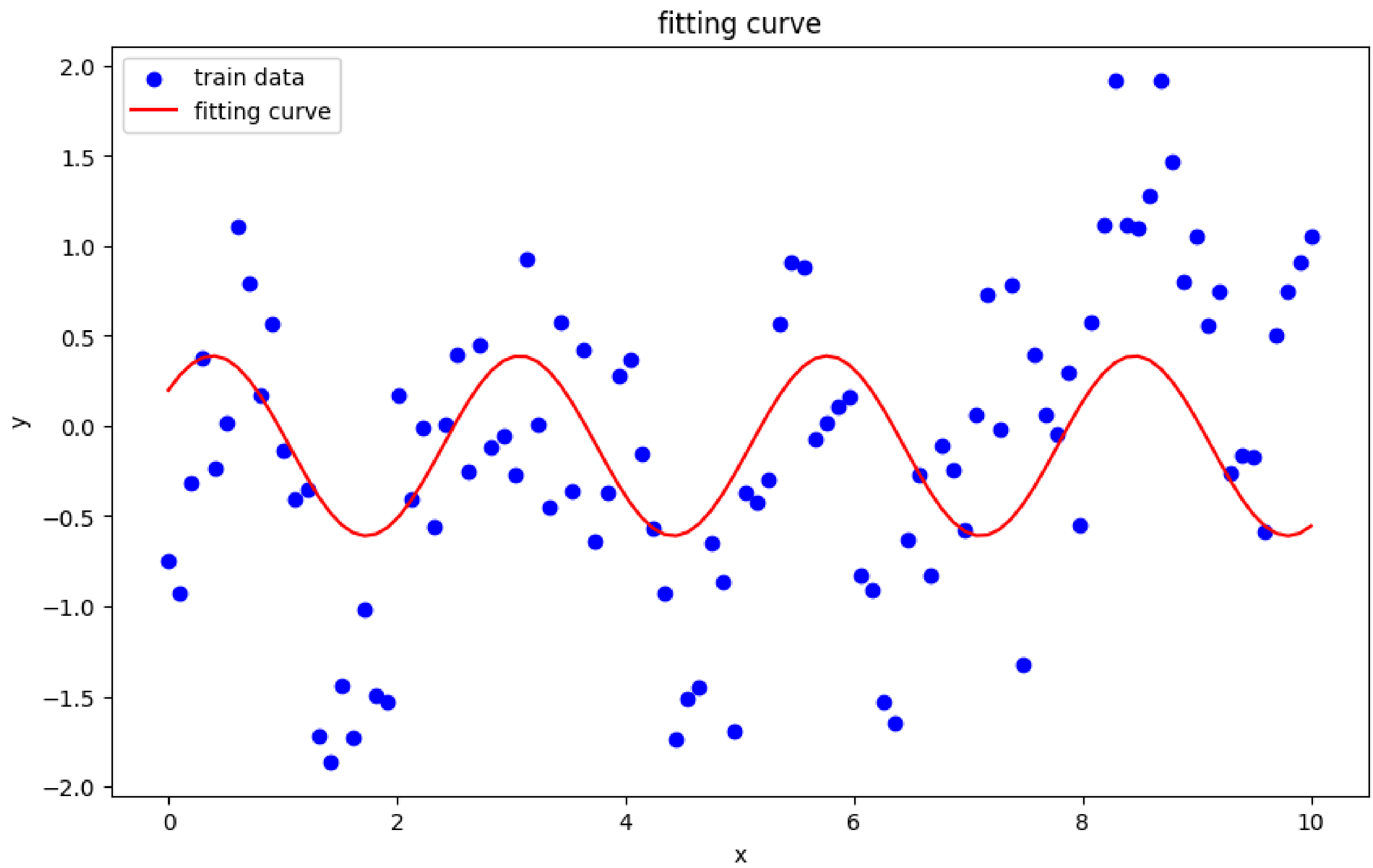
	a	b	c	d
初始值	1.891195	2.488141	0	-0.1040098

	a	b	c	d
最终值	0.49968014 +/- 0.10888744	2.33694160 +/- 0.08060947	0.66665082 +/- 0.44646512	-0.11027065 +/- 0.07837673

计算误差得：

训练误差	**0.5846680250226861**
计算误差	0.5851237799921417

正弦型函数拟合图像为：



高次多项式函数

拟合函数模型为 $y=\sum_{i=0}^{n}a_ix^i$ ，根据观察确定最高次项次数为 $n=9$ 。

使用10个随机数随机初始化参数（保证最高次项系数不为0）。

实验结果如下：

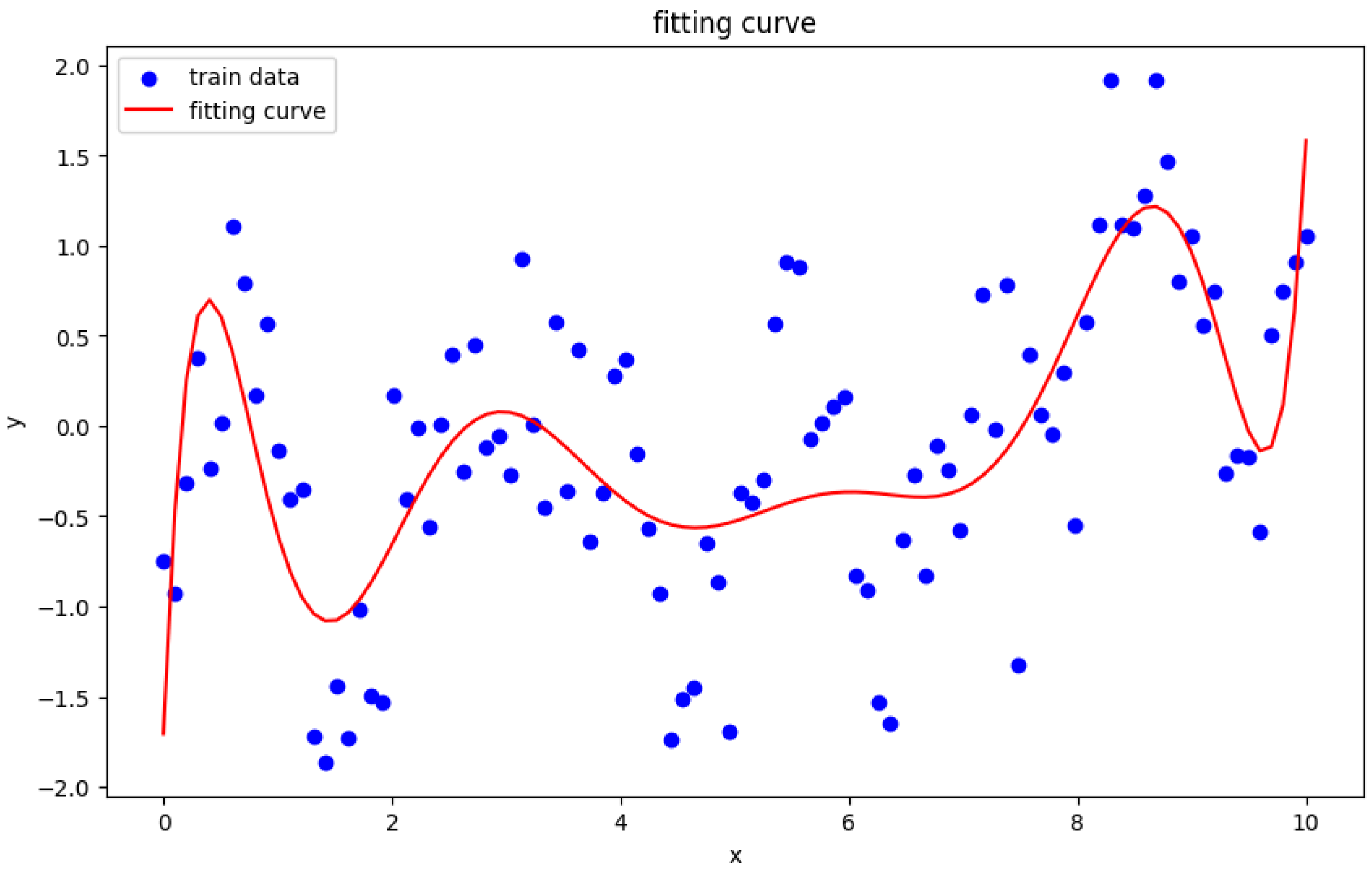
	参数值
a_0	-1.70592428 +/- 0.49967938

	参数值
a_1	15.3019246 +/- 3.01806072
a_2	-32.9413226 +/- 5.85752672
a_3	29.1502638 +/- 5.12406487
a_4	-13.4947866 +/- 2.40460838
a_5	3.62130812 +/- 0.65773324
a_6	-0.58437270 +/- 0.10806182
a_7	0.05593193 +/- 0.01049688
a_8	-0.00292459 +/- 5.5520e-04
a_9	6.4324e-05 +/- 1.2319e-05

计算误差如下：

训练误差	**0.3541092055662051**
测试误差	0.3816864470810575

高次多项式函数拟合图像为：



分析与结论

在线性拟合实验中，三种拟合方法所得的结果相差不大，但是由于训练数据表现出明显的非线性，导致线性拟合效果不佳，由误差和拟合图像明显可得。

在非线性拟合实验中，正弦型函数确实很好的描述了其表现出的某种周期性，但是由计算误差和拟合图像明显可知，此次正弦型函数的拟合效果不佳，其计算误差甚至与线性拟合相当。可能是由初始参数的设定有关，有待之后实验改进。

高次多项式函数则表现出更好的拟合效果，无论是最低的计算误差还是较为贴合的函数图像都表示这一点，但是相对误差达到30%左右，还有待优化的空间。