

第五章 曲线拟合

5.1 引言

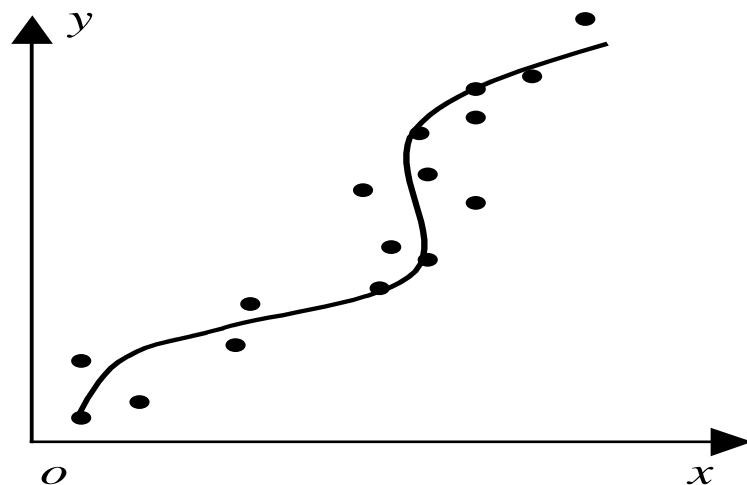
5.2 最小二乘拟合曲线

5.3 其他曲线拟合方法

回顾

5.1 引言

实际上，就是求出一条曲线，使数据点均在离此曲线的上方或下方不远处，所求的曲线称为**拟合曲线**，它既能反映数据的总体分布，又不至于出现局部较大的波动，更能反映被逼近函数的特性，使求得的逼近函数与已知函数从总体上来说，其偏差按某种方法度量达到最小。



拟合与插值的区别

➤ 插值: 过点; (适合精确数据)

➤ 拟合: 不过点, 整体近似; (适合有经验公式或有误差的数据)

**反映数据的基本关系,
更具有实用价值。**



5.2 最小二乘拟合曲线

通过观测、测量或试验得到如右数值表

x	x_1	x_2	\dots	x_n
y	y_1	y_2	\dots	y_n

函数插值是插值函数 $P(x)$ 与被插函数 $f(x)$ 在节点处函数值相同，即 $P(x_i)=f(x_i)(i=0,1,\dots,n)$ ，而曲线拟合函数 $\varphi(x)$ 不要求严格地通过所有数据点 (x_i, y_i) ，也就是说拟合函数 (x_i, y_i) 在 x_i 处的偏差(亦称残差)

$$\varepsilon_i = \varphi(x_i) - f(x_i) \quad i=0,1,\dots,n$$

不都严格地等于零。

回顾

但是,为了使近似曲线能尽量反映出所给数据点的变化趋势,要求 $|\varepsilon_i|$ 按某种度量标准最小。若记向量 $\varepsilon=[\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n]$,即要求向量 ε 的某种范数 $\|\varepsilon\|$ 最小。

向量范数

5.2 最小二乘拟合曲线

回顾



常见做法:

$$\|e\|_1 = \sum_{i=0}^n |\varepsilon_i| = \sum_{i=0}^n |\varphi(x_i) - f(x_i)| \text{ 最小}$$

太复杂☹

$$\|e\|_\infty = \max_i |\varepsilon_i| = \max_i |\varphi(x_i) - f(x_i)| \text{ 最小}$$

不可导,
求解困难☹

$$\|e\|_2 = \left(\sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left\{ \sum_{i=0}^n [\varphi(x_i) - f(x_i)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \text{ 最小}$$

即 $\|e\|_2^2 = \sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=0}^n [\varphi(x_i) - f(x_i)]^2 \text{ 最小}$

非常非常重要!

最小二乘法

5.2 最小二乘拟合曲线

回顾

(1) 直线拟合

问题 对于给定的数据点 (x_i, y_i) ($i=1,2,\dots,m$), 求拟合直线

$$y(x)=a_0+a_1x$$

使总误差为最小, 即在二元函数式中

$$F(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i - y_i)^2 \text{ 最小}$$

这里 F 是关于未知数 a_0 和 a_1 的二元函数, 这一问题就是要确定 a_0 和 a_1 取何值时, 二元函数 $F(a_0, a_1)$ 的值最小?

5.2 最小二乘拟合曲线

回顾

故 a_0 、 a_1 应满足下列条件：

$$\begin{cases} \frac{\partial F(a_0, a_1)}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \\ \frac{\partial F(a_0, a_1)}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i - y_i) x_i = 0 \end{cases}$$

即得如下正规方程组

$$\begin{cases} a_0 m + a_1 \sum_{i=1}^m x_i = \sum_{i=1}^m y_i \\ a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 + a_0 \sum_{i=1}^m x_i = \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{cases}$$

要求：会推导或者背过这个公式

求解此正规方程组，得 a_0 和 a_1 ，即可求出直线拟合方程： $y(x) = a_0 + a_1 x$

(2) 多项式拟合

有时所给数据点的分布并不一定近似地呈一条直线，这时仍用直线拟合显然是不合适的，可用多项式拟合。对于给定的一组数据 $(x_i, y_i) (i=1, 2, \dots, n)$ ，寻求次数不超过 $m (m \ll n)$ 的多项式 $y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m$ ，来拟合所给定的数据，与线性拟合类似，使偏差的平方和

$$Q = \sum_{i=1}^N (y_i - \sum_{j=0}^m a_j x_i^j)^2 \quad \text{最小}$$

(2) 多项式拟合

回顾

由于 Q 可以看作是关于 $(j=0,1,2,\cdots,m)$ 的多元函数,故上述拟合多项式的构造问题可归结为多元函数的极值问题。令

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 0 \quad k = 0,1,2,\cdots,m$$

得

$$\sum_{i=1}^N (y_i - \sum_{j=0}^m a_j x_i^j) x_i^k = 0 \quad k = 0,1,\cdots,m$$

即有

$$\begin{cases} a_0 N + a_1 \sum x_i + \cdots + a_m \sum x_i^m = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + \cdots + a_m \sum x_i^{m+1} = \sum x_i y_i \\ \cdots \\ a_0 \sum x_i^m + a_1 \sum x_i^{m+1} + \cdots + a_m \sum x_i^{2m} = \sum x_i^m y_i \end{cases} \quad (5.46)$$

这是关于系数 a_j 的线性方程组,通常称为正规方程组。可以证明,正规方程组有唯一解。

5.2 最小二乘拟合曲线

(3) 可化为线性拟合的非线性拟合

有些非线性拟合曲线可以通过适当的变量替换转化为线性曲线，从而用线性拟合进行处理。

对于一个实际的曲线拟合问题，一般先按观测值在直角坐标平面上描出散点图，看一看散点的分布同哪类曲线图形接近，然后选用相接近的曲线拟合方程。

再通过适当的变量替换转化为线性拟合问题，按线性拟合解出后再还原为原变量所表示的曲线拟合方程。

其它类型拟合问题

最小二乘法并不只限于多项式，也可用于任何具体给出的函数形式。特别重要的是有些非线性最小二乘拟合问题通过适当的变换可以转化为线性最小二乘问题求解。

非常非常重要

(3) 可化为多项式拟合的非线性拟合

下表列举了几类经适当变换后化为线性拟合求解的曲线拟合方程及变换关系。

曲线拟合方程	变换关系	变换后的线性拟合方程
$y = ax^b$	$\bar{y} = \ln y, \bar{x} = \ln x$	$\bar{y} = \bar{a} + b\bar{x} (\bar{a} = \ln a)$
$y = ax^\mu + c$	$\bar{x} = x^\mu$	$y = a\bar{x} + c$
$y = \frac{x}{ax + b}$	$\bar{y} = \frac{1}{y}, \bar{x} = \frac{1}{x}$	$\bar{y} = a + b\bar{x}$
$y = \frac{1}{ax + b}$	$\bar{y} = \frac{1}{y}$	$\bar{y} = b + ax$
$y = \frac{1}{ax^2 + bx + c}$	$\bar{y} = \frac{1}{y}$	$\bar{y} = ax^2 + bx + c$
$y = \frac{x}{ax^2 + bx + c}$	$\bar{y} = \frac{x}{y}$	$\bar{y} = ax^2 + bx + c$

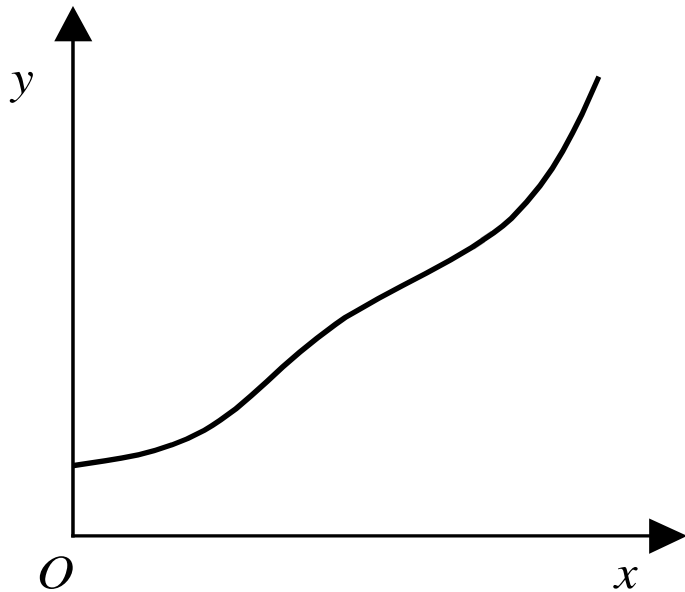
上述表格非常重要，为方便大家记忆，
特增加该页PPT,大家默写填一下

非常
重要

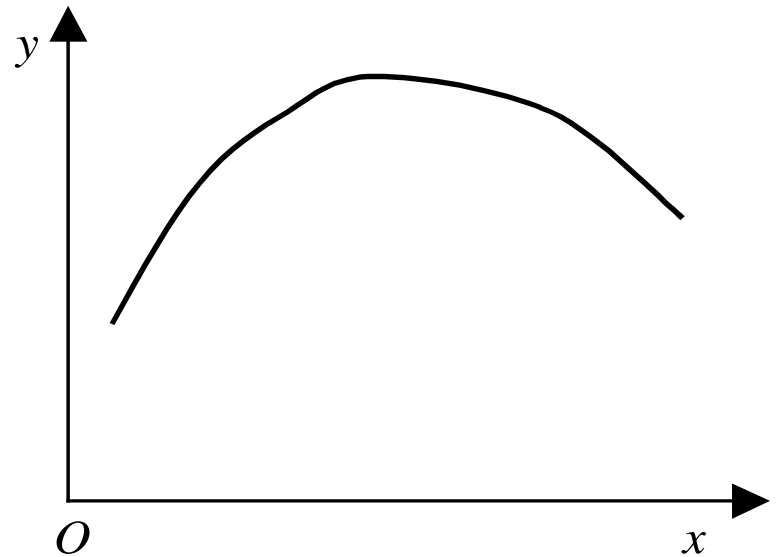
曲线拟合方程	变换关系	变换后的线性拟合方程
$y = ax^b$		
$y = ax^\mu + c$		
$y = \frac{x}{ax + b}$		
$y = \frac{1}{ax + b}$		
$y = \frac{1}{ax^2 + bx + c}$		
$y = \frac{x}{ax^2 + bx + c}$		

(3) 可化为线性拟合的非线性拟合

下图是几种常见的数据拟合情况。



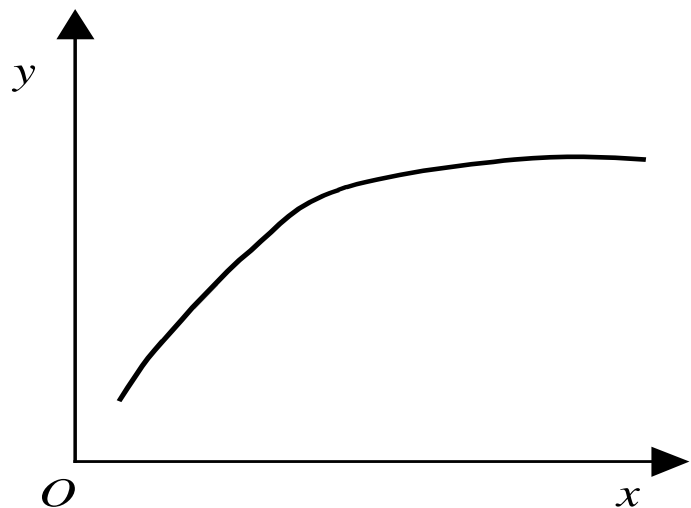
数据接近于直线，
宜采用线性函数
 $y(x) = a_0 + a_1x$ 拟合



数据接近于抛物线，
宜采用二次多项式
 $y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 拟合

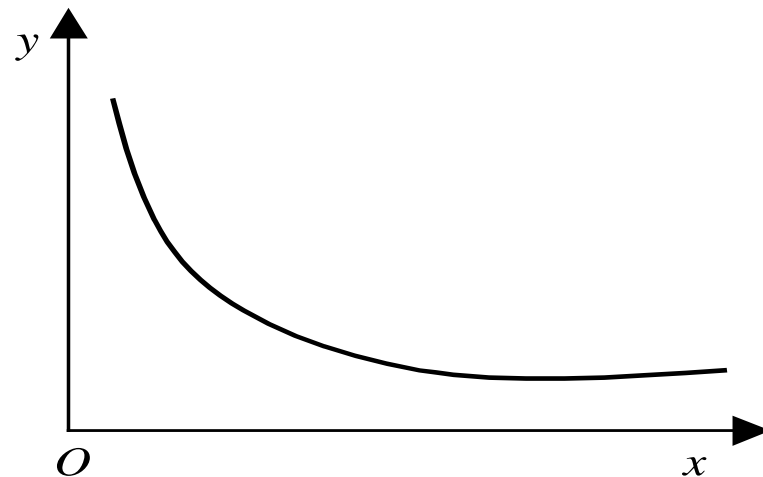
(3) 可化为线性拟合的非线性拟合

下图是几种常见的数据拟合情况。



数据分布特点是开始曲线上升较快随后逐渐变慢，宜采用双曲线型函数 $y = \frac{x}{a + bx}$ 或指数型函

数 $y = ae^{-\frac{b}{x}}$

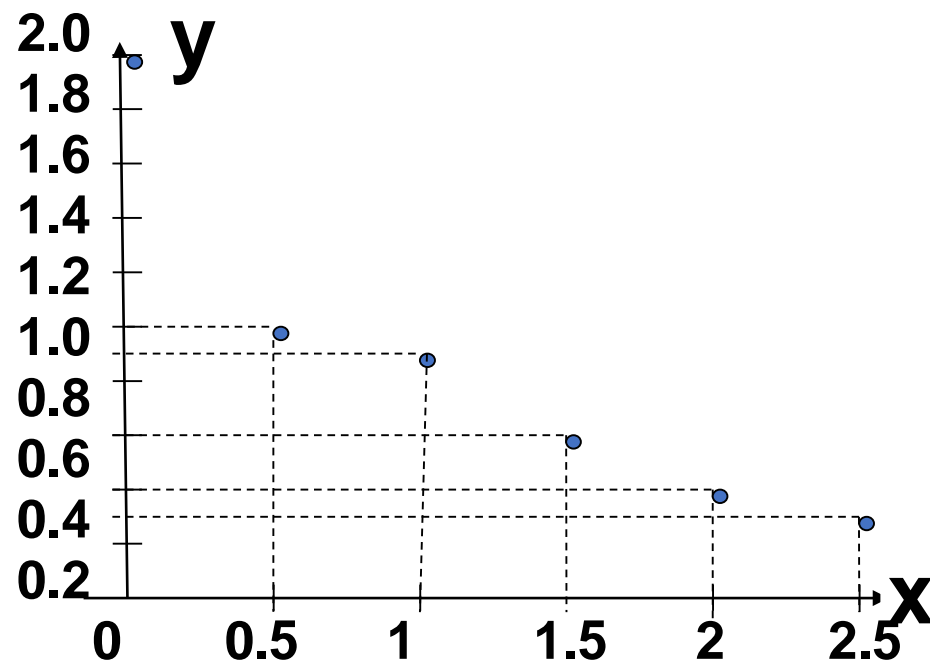


数据分布特点是开始曲线下降快，随后逐渐变慢，宜采用 $y = \frac{x}{a + bx}$ 或 $y = \frac{x}{a + bx^2}$ 或 $y = ae^{-bx}$

(3) 可化为线性拟合的非线性拟合

例5.3 设某实验数据为：

i	1	2	3	4	5	6
x_i	0	0.5	1	1.5	2	2.5
y_i	2.0	1.0	0.9	0.6	0.4	0.3



用最小二乘法求拟合曲线。

解 将已给数据点描在坐标系中，可以看出这些点接近指数曲线。因而可取指数函数 $y = ae^{-bx}$ 作为拟合函数。

对函数 $y=ae^{-bx}$ 两边取对数得 $\ln y=\ln a-bx$

则就得到线性模型用最小二乘法求拟合曲线。

令 $a_0=\ln a$, $a_1=-b$, 可得到线性模型

$$\bar{y} = a_0 + a_1 x$$

由 $N=6$, $m=1$, 则正规方程组为

其中 $\sum_{i=1}^6 x_i = 7.5, \sum_{i=1}^6 x_i^2 = 13.75,$

$$\sum_{i=1}^6 \ln y_i = -2.043302, \sum_{i=1}^6 x_i \ln y_i = -5.714112$$

$$\begin{cases} 6a_0 + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i = \sum_{i=1}^6 y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^6 x_i + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i^2 = \sum_{i=1}^6 x_i y_i \end{cases}$$

代入, 则其正规方程组变为

$$\begin{cases} 6a_0 + 7.5a_1 = -2.43302 \\ 7.5a_0 + 13.75a_1 = -5.714112 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 6a_0 + 7.5a_1 = -2.43302 \\ 7.5a_0 + 13.75a_1 = -5.714112 \end{cases}$$

解之，得 $a_0=0.562302$, $a_1=-0.772282$

由 $a_0=\ln a$, $a_1=-b$ 得

$$a=e^{0.562302}=1.754708, b=0.772282$$

则得其拟合指数函数为

$$y=1.754708e^{-0.772282x}$$

直线拟合程序 **LineNihe.m**

多项式拟合程序 **PolyNihe.m**

function [A,B]=LineNihe(X,Y)

%Input - X is the 1xn abscissa vector

% - Y is the 1xn ordinate vector

%Output - A is the coefficient of x in $Ax + B$

% - B is the constant coefficient in $Ax + B$

xmean=mean(X);

ymean=mean(Y);

sumx2=(X-xmean)*(X-xmean)';

sumxy=(Y-ymean)*(X-xmean)';

A=sumxy/sumx2;

B=ymean-A*xmean;

命令行窗口

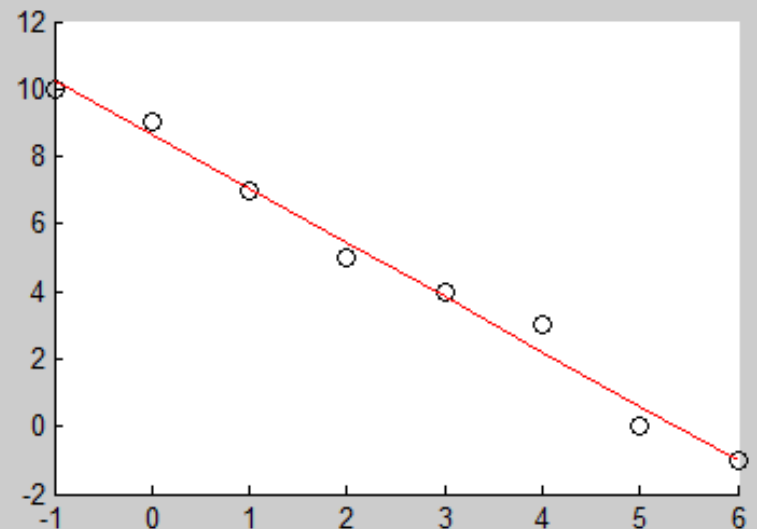
```
>> x=[-1, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6];  
y=[10, 9, 7, 5, 4, 3, 0, -1];  
scatter(x, y, 'k');  
hold on  
[a, b]=LineNihe(x, y);  
c=-1:1:6;  
z=a*c+b;  
plot(c, z, 'r')
```

fx >>



Figure 1

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 插入(I) 工具(T) 桌面(D) 窗口(W) 帮助(H)



```

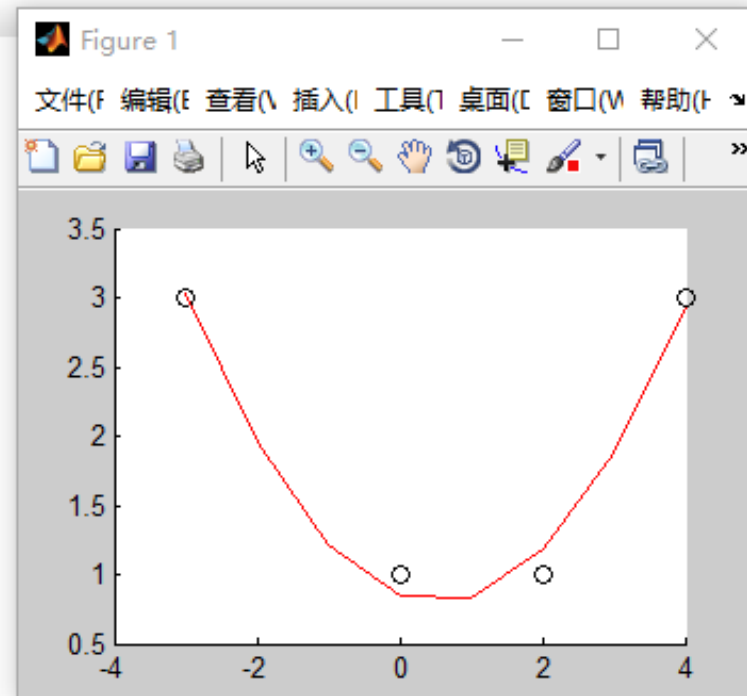
function C = PolyNihe(X,Y,M)
%Input   - X is the 1xn abscissa vector
%         - Y is the 1xn ordinate vector
%         - M is the degree of the least-squares
polynomial
% Output - C is the coefficient list for the polynomial
%
n=length(X);
B=zeros(1:M+1);
F=zeros(n,M+1);
%Fill the columns of F with the powers of X
for k=1:M+1
    F(:,k)=X'.^(k-1);
end
%Solve the linear system from (25)
A=F'*F;
B=F'*Y';
C=A\B;
C=flipud(C);

```

```

命令窗口
>>
x=[-3, 0, 2, 4];
y=[3, 1, 1, 3];
scatter(x,y,'k');
hold on
M=2;
a=PolyNihe(x,y,M);
t=-3:1:4;
z=0;
for i=1:1:M+1
    z=z+a(i).*t.^(M-i+1);
end
plot(t,z,'r')
fx >>

```



作业 5.1

2. 对下列数据集, 求解最小二乘抛物线 $f(x) = Ax^2 + Bx + C$ 。

(a)

x_k	y_k
-2	-5.8
-1	1.1
0	3.8
1	3.3
2	-1.5

(b)

x_k	y_k
-2	2.8
-1	2.1
0	3.25
1	6.0
2	11.5

(c)

x_k	y_k
-2	10
-1	1
0	0
1	2
2	9

算法与程序

1. 洛杉矶(美国城市)郊区在 11 月 8 日的温度记录如下表所示。共有 24 个数据点。

(a) 根据例 5.5 中的处理过程(使用 `fmins` 命令), 对给定的数据集求解最小二乘曲线

$$f(x) = A \cos(Bx) + C \sin(Dx) + E。$$

(b) 求 $E_2(f)$ 。

(c) 在同一坐标系下画出这些点集和
(a)得出的最小二乘曲线。

时间, p.m.	温度	时间, a.m.	温度
1	66	1	58
2	66	2	58
3	65	3	58
4	64	4	58
5	63	5	57
6	63	6	57
7	62	7	57
8	61	8	58
9	60	9	60
10	60	10	64
11	59	11	67
午夜	58	正午	68

重要!

5.3 其他曲线拟合方法

最小二乘意义下的曲线拟合问题，由于方程比较简单，实际中应用广泛，特别是因为任何连续函数至少在一个较小的邻域内可以用多项式任意逼近，因此用多项式作数据拟合，有它的特殊重要性。

在许多实际问题中，不论具体函数关系如何，都可用多项式作近似拟合，**但用多项式拟合时，当 n 较大时($n \geq 7$)，其方程的系数矩阵的条件数一般较大，所以往往是病态的，因而给求解工作带来了困难。**

5.3 其他曲线拟合方法

近年来，产生一些直接解线性最小二乘问题的新方法，例如正交三角化方法。

另外，如果能选取基函数 $\varphi_j(X)$ ($j=1, 2, \dots, M$)，如果

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ r_i(>0) & i = j \end{cases}$$

则称 $\varphi_j(x)$ ($j=0, 1, \dots, n$) 为区间 $[a, b]$ 上关于权函数 $W(x)$ 的正交（直交）函数系。

特别，若 $r_i = 1$ 称之为标准（规范）正交函数系

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \int_a^b \varphi_i(x) \varphi_j(x) W(x) dx \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, n$$

如果取正交函数系： $(\varphi_i, \varphi_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ r_i (> 0) & i = j \end{cases}$

则法方程组的系数矩阵变为对角矩阵。

所以方程组的解为：

$$a_j = \frac{(\varphi_j, f)}{(\varphi_j, \varphi_j)} \quad j = 0, 1, 2, \dots, n$$

$$= \frac{\int_a^b \varphi_j(x) f(x) W(x) dx}{\int_a^b [\varphi_j(x)]^2 W(x) dx}$$

►常用的几种正交函数系

1、三角（Trigonometric）函数系 (Fourier变换):

$$1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \cdots, \cos nx, \sin nx$$

正交性质

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \text{ (或 } \cos kx) dx = 0 \quad k = 1, 2, \cdots$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \cos kx dx = 0 \quad m, k = 1, 2, \cdots$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin mx \sin kx dx = \begin{cases} 0 & m \neq k \\ \pi & m = k \end{cases}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos mx \cos kx dx = \begin{cases} 0 & m \neq k \\ \pi & m = k \end{cases}$$

2、勒让德 (Legendre) 多项式系:

$$\text{Def} \begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad n = 1, 2, \dots \end{cases}$$

$$P_1(x) = x \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

性质1 (递推公式)

证明 略

$$\begin{cases} P_0(x) = 1, P_1(x) = x \\ P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x) \quad n = 1, 2, \dots \end{cases}$$

性质2 (正交性质)

$$\int_{-1}^1 P_i(x)P_j(x)dx = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \frac{2}{2j+1} & i = j \end{cases}$$

性质3 (最佳逼近性质)

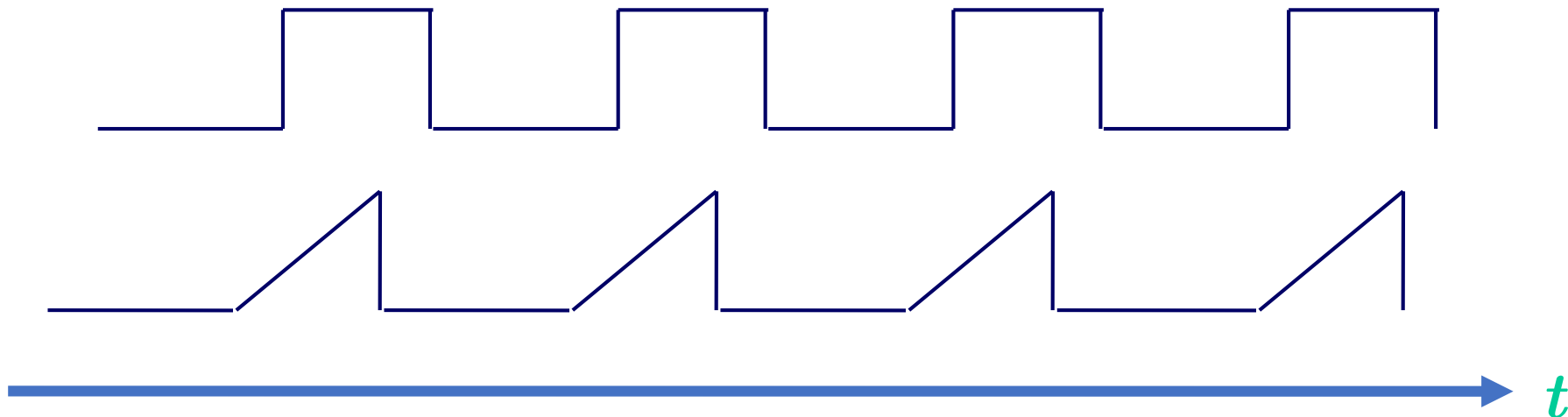
$$\Phi = \left\{ x^n + \sum_{i=0}^{n-1} c_i x^i \right\}$$

$$\int_{-1}^1 [\bar{P}_n(x)]^2 dx \leq \int_{-1}^1 [f(x)]^2 dx \text{ 或者 } \|\bar{P}_n(x)\|_2^2 \leq \|f(x)\|_2^2$$

说明:在区间 $[-1,1]$ 上, n 次首1的Legendre多项式是零函数的最佳平方逼近多项式

三角函数系 (Fourier变换)

在工程计算中, 无论是电学还是力学, 经常要和随时间变化的周期函数 $f_T(t)$ 打交道. 例如:



具有性质 $f_T(t+T)=f_T(t)$, 其中 T 称作周期, 而 $1/T$ 代表单位时间振动的次数, 单位时间通常取秒, 即每秒重复多少次, 单位是赫兹(Hz).

研究周期函数实际上只须研究其中的一个周期内的情况即可, 通常研究在闭区间 $[-T/2, T/2]$ 内函数变化的情况.

$f_T(t)$ 是以 T 为周期的函数，在 $\left[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right]$ 上满足Dirichlet条件：

$f_T(t)$ 连续或只有有限个第一类间断点； $f_T(t)$ 只有有限个极值点；

$f_T(t)$ 可展开成Fourier级数，且在连续点 t 处成立：

$$f_T(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\omega t + b_n \sin n\omega t)$$

其中 $\omega = 2\pi/T$,

$$a_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f_T(t) \cos n\omega t dt \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$b_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f_T(t) \sin n\omega t dt \quad (n = 1, 2, \dots)$$

在间断点 t 处成立：

$$\frac{f_T(t+0) + f_T(t-0)}{2} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\omega t + b_n \sin n\omega t) \quad \lim_{T \rightarrow +\infty} f_T(t) = f(t)$$

下面是傅里叶级数的一些一般性质。相关证明留给读者作为练习。

定理 5.6 (余弦级数) 设 $f(x)$ 是偶函数, 即对所有的 x 有 $f(-x) = f(x)$ 。如果 $f(x)$ 的周期为 2π , 而且 $f(x)$ 和 $f'(x)$ 是分段连续的, 则 $f(x)$ 的傅里叶级数只包含余弦项:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} a_j \cos(jx) \quad (8)$$

其中

$$a_j = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \cos(jx) dx, \quad \text{其中 } j = 0, 1, \dots \quad (9)$$

定理 5.7 (正弦级数) 设 $f(x)$ 是奇函数, 即对所有的 x 有 $f(-x) = -f(x)$ 。如果 $f(x)$ 的周期为 2π , 而且 $f(x)$ 和 $f'(x)$ 是分段连续的, 则 $f(x)$ 的傅里叶级数只包含正弦项

$$f(x) = \sum_{j=1}^{\infty} b_j \sin(jx) \quad (10)$$

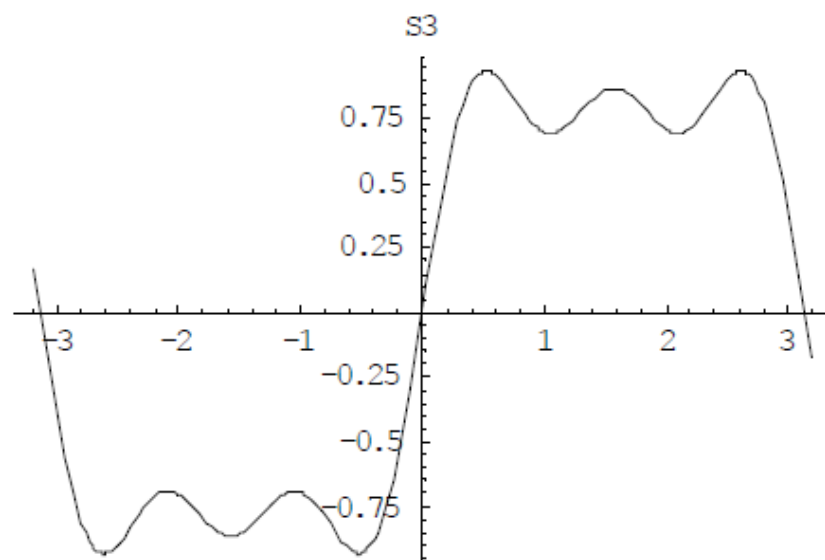
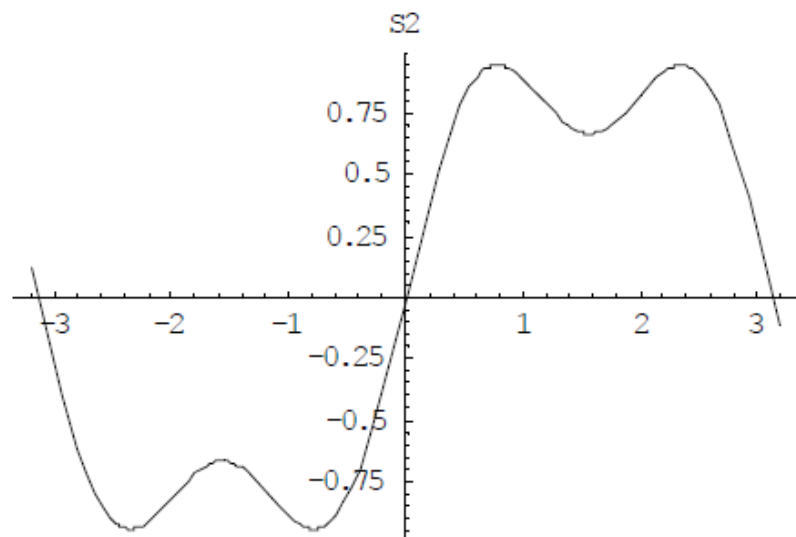
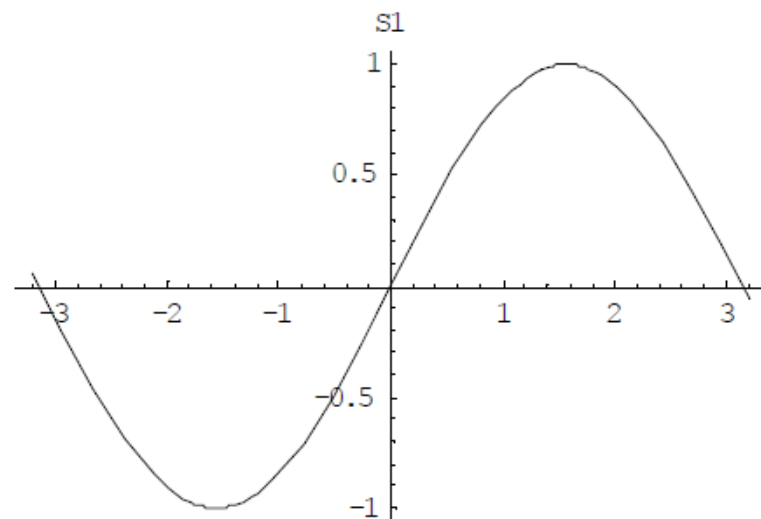
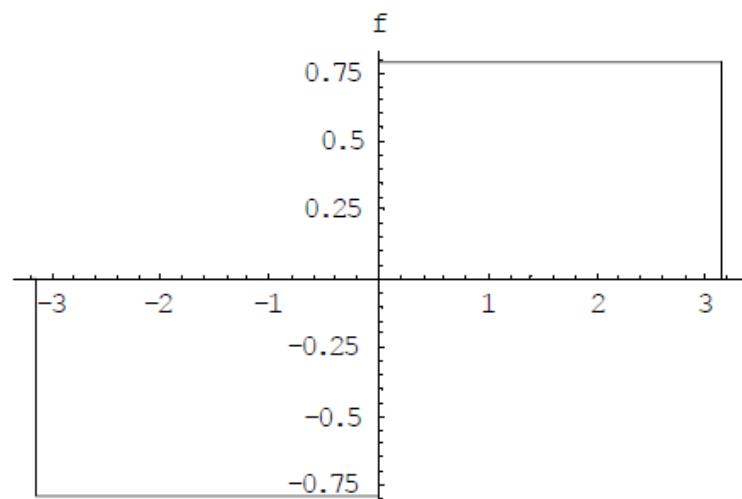
其中

$$b_j = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin(jx) dx, \quad \text{其中 } j = 1, 2, \dots \quad (11)$$

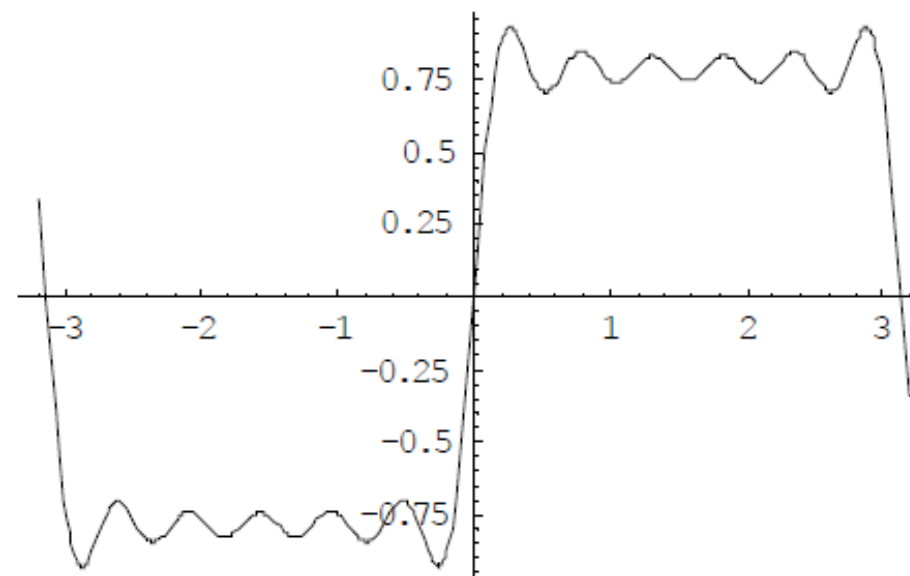
考察函数

$$f(x) = \begin{cases} +\pi/4, & 0 < x < +\pi \\ -\pi/4, & -\pi < x < 0 \end{cases}$$

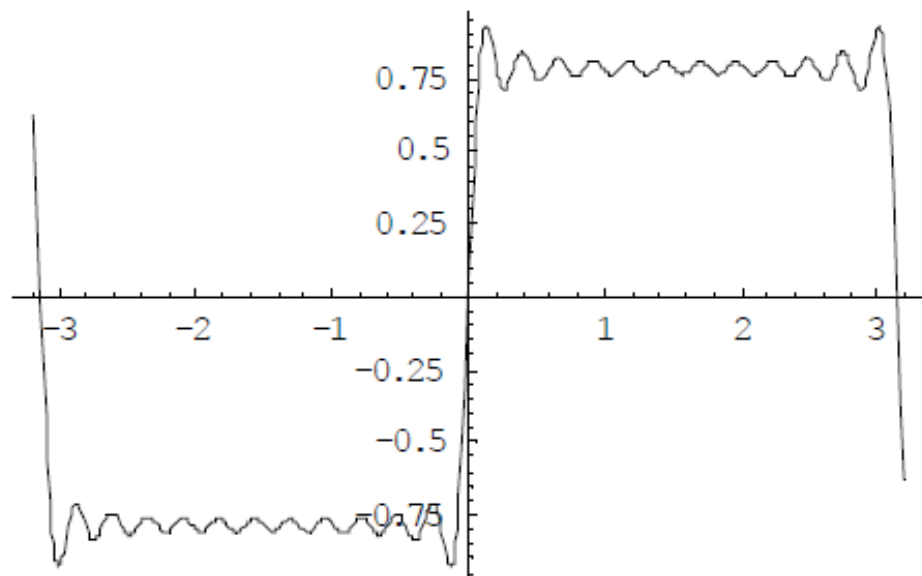
运用正弦级数逼近



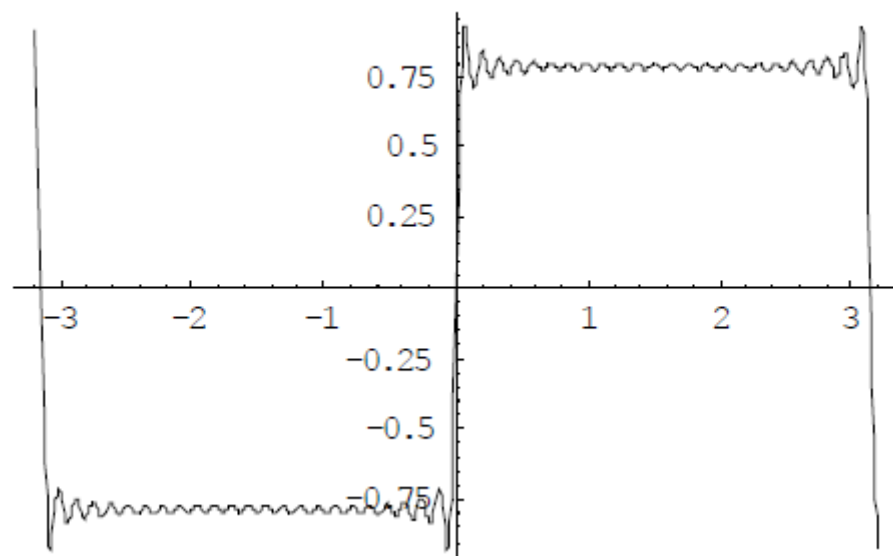
S6

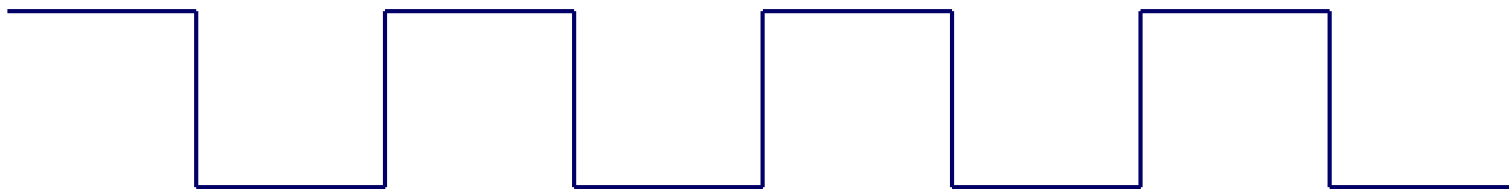


S12

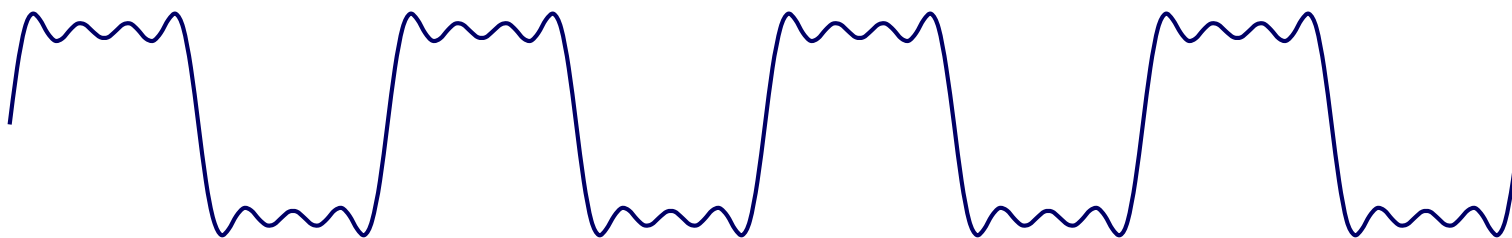


S24

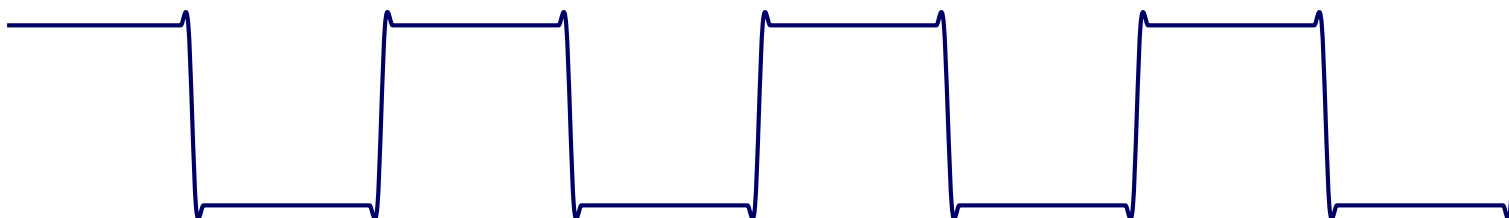




方波



4个正弦波的逼近



100个正弦波的逼近

应用举例

例5.6：利用Legendre多项式系，求函数 $f(x) = e^x$ 在 $[-1, 1]$ 上的三次最佳平方逼近多项式。

解：

$$(P_j, P_j) = \int_{-1}^1 P_j(x) P_j(x) dx = \frac{2}{2j+1}$$

$$a_j = \frac{(P_j, f)}{(P_j, P_j)}$$

$$(P_0, f) = \int_{-1}^1 e^x dx \approx 2.3504 \quad (P_1, f) = \int_{-1}^1 x e^x dx \approx 0.7358$$

$$(P_2, f) = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} (3x^2 - 1) e^x dx \approx 0.1431$$

$$(P_3, f) = \int_{-1}^1 \frac{1}{2} (5x^3 - 3x) e^x dx \approx 0.02013$$

$$a_0 = (P_0, f) / (P_0, P_0) \approx 1.1752$$

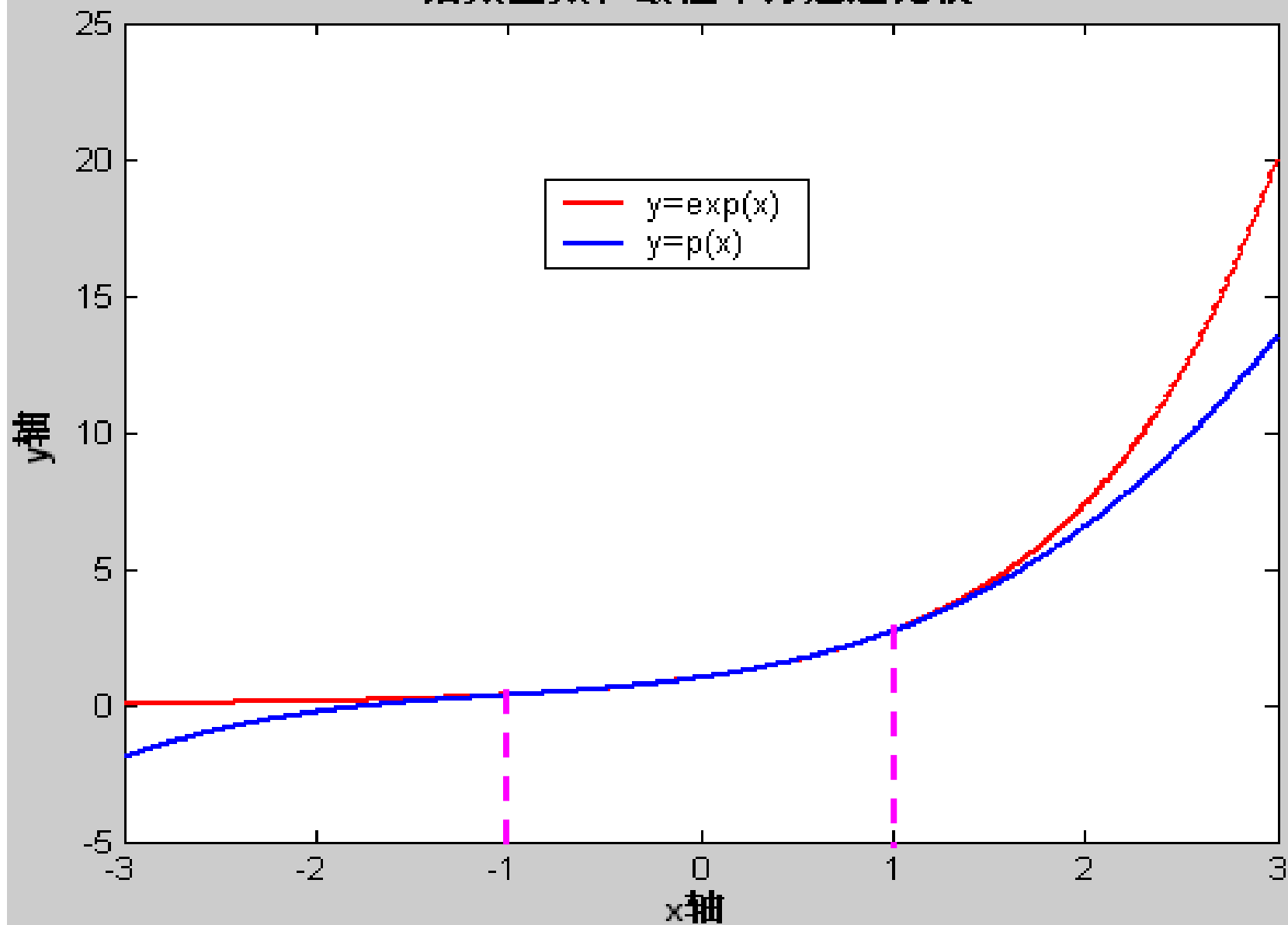
$$a_1 = (P_1, f) / (P_1, P_1) \approx 1.1036$$

$$a_2 = (P_2, f) / (P_2, P_2) \approx 0.3857$$

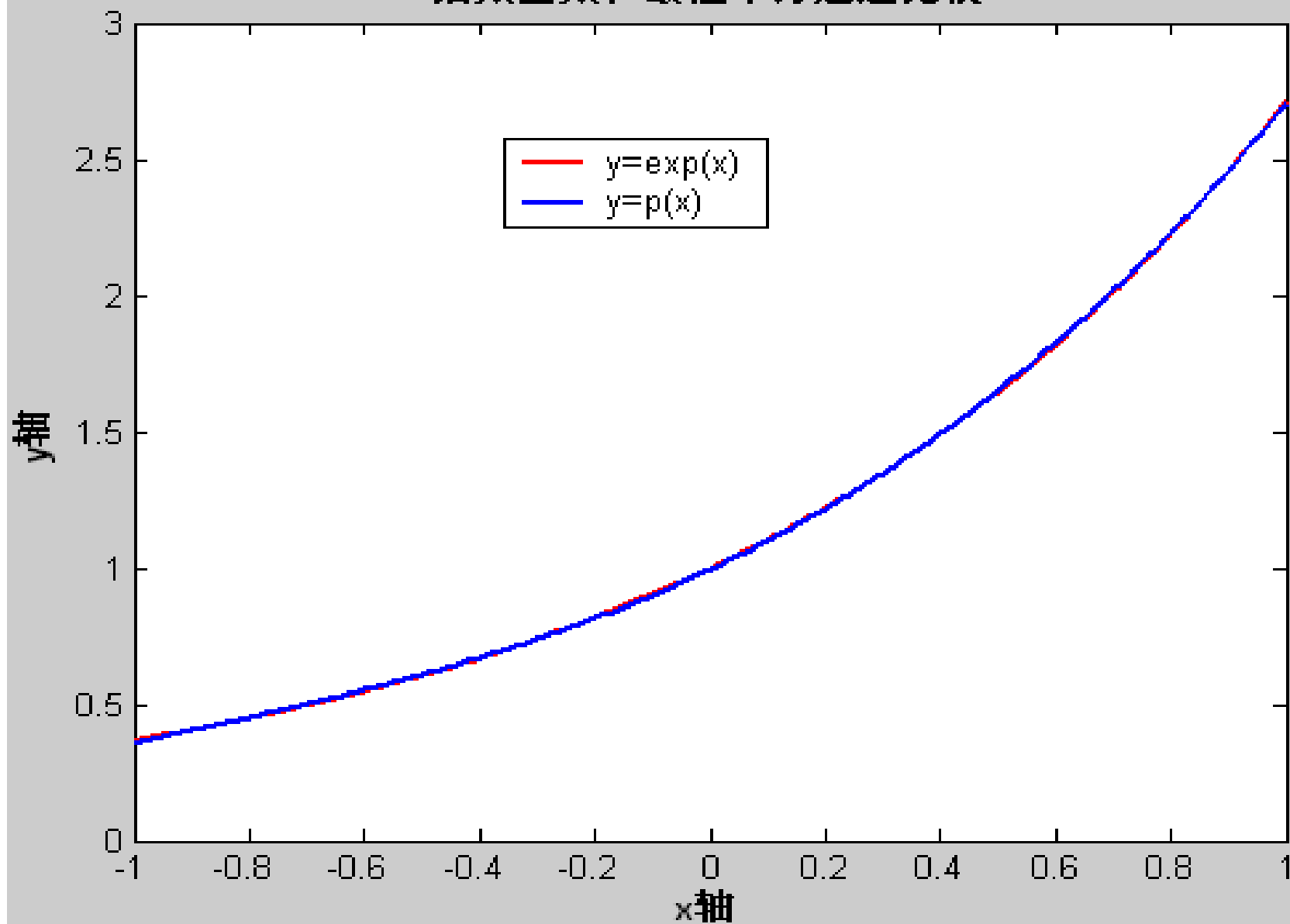
$$a_3 = (P_3, f) / (P_3, P_3) \approx 0.07046$$

$$\begin{aligned} \varphi(x) = & 1.1752P_0(x) + 1.1036P_1(x) \\ & + 0.3578P_2(x) + 0.07046P_3(x) \end{aligned}$$

指数函数和最佳平方逼近比较



指数函数和最佳平方逼近比较



本章教学要求及重点难点

- 理解曲线拟合的基本概念
- 掌握最小二乘曲线拟合、三角函数曲线拟合以及勒让德 (Legendre) 多项式曲线拟合的基本方法
- 掌握最小二乘曲线拟合、三角函数曲线拟合以及勒让德 (Legendre) 多项式曲线拟合的算法设计思想
- 重点：最小二乘曲线拟合、三角函数曲线拟合以及勒让德 (Legendre) 多项式曲线拟合的系数计算方法