



浙江大学  
Zhejiang University

# 第4章 最小二乘法

## Least Squares

任 课 教 师：曹 彦 鹏

caoyp@zju.edu.cn

玉泉校区教1-205

# 问题来源 - 最小二乘法

插值

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = y_2 \end{array} \right.$$

最小二乘法

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = y_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 = y_3 \end{array} \right.$$

约束方程比未知数的个数多！

# 问题来源 - 最小二乘法

我们已经有了  $m$  个观测的值,  $y_i = y(t_i)$  ( $i=1, \dots, m$ ),

用  $n$  个基函数的线性组合来近似  $y(t)$  (注意  $m > n$ )

$$y(t) \approx \beta_1 \phi_1(t) + \dots + \beta_n \phi_n(t)$$

这样我们得到了一个  $m \times n$  的设计矩阵  $X$ :  $x_{i,j} = \phi_j(t_i)$

用向量矩阵的形式来描述这个模型就是:

$$y = X\beta \quad \longrightarrow \quad X\beta = y$$

Over determined  
线性方程组

方程数比未知数的个数多！

# 模型和曲线拟合

## 常用基函数模型

直线模型： $y(t) \approx \beta_1 t + \beta_2.$

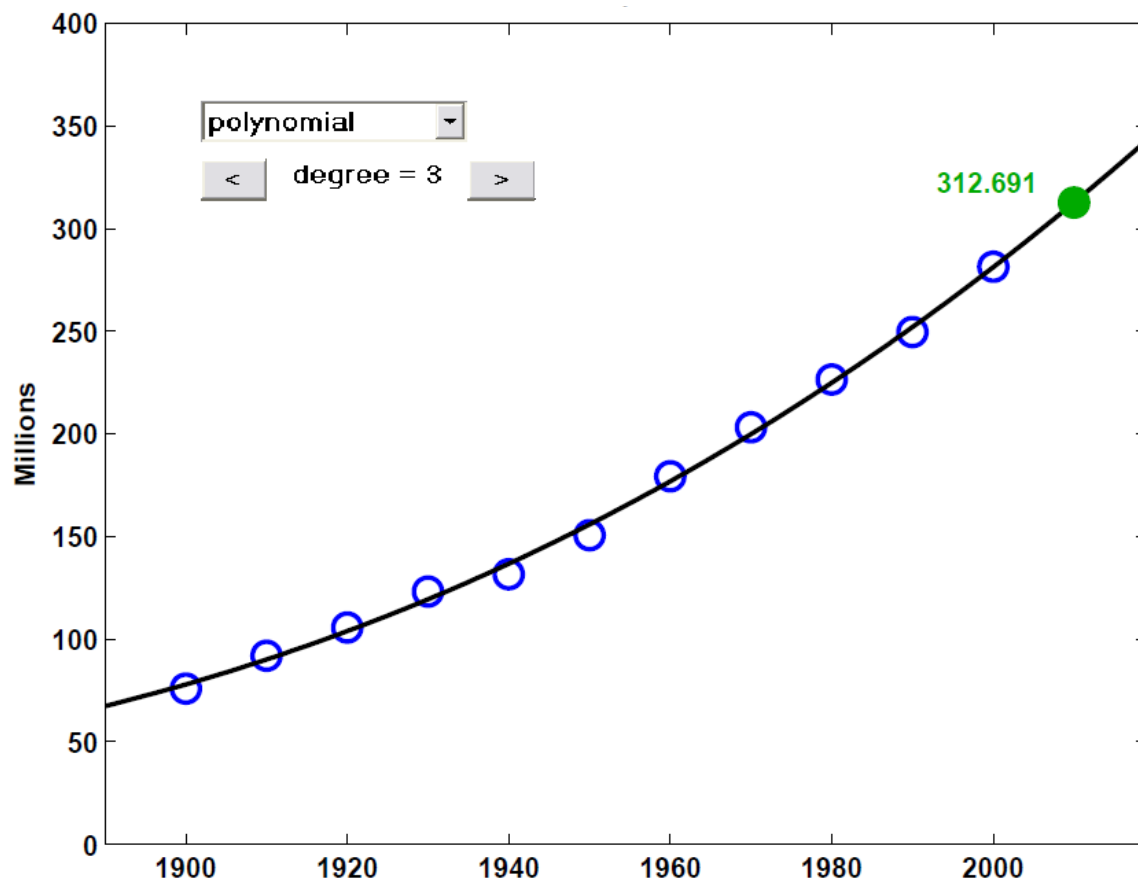
多项式模型： $\phi_j(t) = t^{n-j}, j = 1, \dots, n,$   
 $y(t) \approx \beta_1 t^{n-1} + \dots + \beta_{n-1} t + \beta_n.$

指数模型： $\phi_j(t) = e^{-\lambda_j t},$   
 $y(t) \approx \beta_1 e^{-\lambda_1 t} + \dots + \beta_n e^{-\lambda_n t}.$

高斯模型： $\phi_j(t) = e^{-\left(\frac{t-\mu_j}{\sigma_j}\right)^2},$   
 $y(t) \approx \beta_1 e^{-\left(\frac{t-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2} + \dots + \beta_n e^{-\left(\frac{t-\mu_n}{\sigma_n}\right)^2}.$

# 模型和曲线拟合

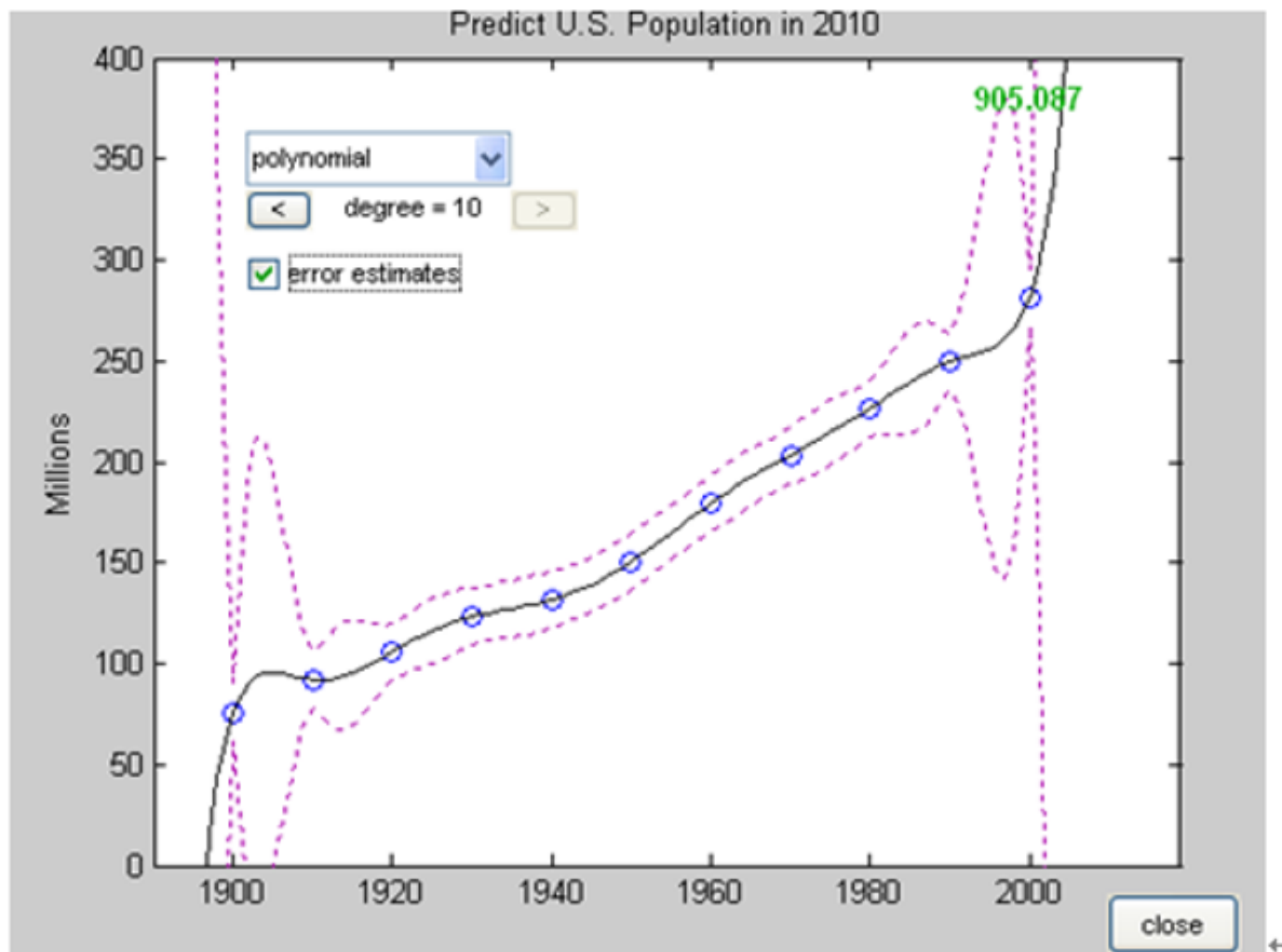
## 美国人口预测



```
%% Example 1 Population  
p = [ 75.995  91.972 105.  
      179.323 203.212 226.  
      250.697 279.625 287.614  
      297.632 309.294 312.691  
      317.099 321.554 326.059  
      330.447 334.741 339.035  
      343.378 347.672 351.966  
      356.259 360.553 364.847  
      368.741 373.035 377.329  
      381.623 385.917 390.211  
      394.505 398.799 403.093  
      406.987 411.281 415.575  
      419.467 423.761 428.055  
      431.947 436.241 440.535  
      444.423 448.717 453.011  
      456.499 460.793 465.087  
      469.379 473.673 477.967  
      481.859 486.153 490.447  
      494.931 499.225 503.519  
      507.811 512.105 516.399  
      520.691 524.985 529.279  
      533.573 537.867 542.161  
      546.455 550.749 555.043  
      559.337 563.631 567.925  
      572.211 576.505 580.799  
      585.087 589.381 593.675  
      597.967 602.261 606.555  
      610.847 615.141 619.435  
      623.727 628.021 632.315  
      636.607 640.901 645.195  
      649.487 653.781 658.075  
      662.367 666.661 670.955  
      675.239 679.533 683.827  
      688.119 692.413 696.707  
      700.999 705.293 709.587  
      713.881 718.175 722.469  
      726.763 731.057 735.351  
      739.645 743.939 748.233  
      752.527 756.821 761.115  
      765.407 769.701 774.0  
      778.293 782.587 786.881  
      791.175 795.469 799.763  
      804.057 808.351 812.645  
      816.939 821.233 825.527  
      829.821 834.115 838.409  
      842.703 846.997 851.291  
      855.585 859.879 864.173  
      868.467 872.761 877.055  
      881.349 885.643 889.937  
      894.231 898.525 902.819  
      907.113 911.407 915.701  
      920.000 924.294 928.588  
      932.882 937.176 941.47  
      945.764 950.058 954.352  
      958.646 962.94 967.234  
      971.528 975.822 980.116  
      984.41 988.704 993.0  
      997.294 1001.588 1005.882  
      1010.176 1014.47 1018.764  
      1023.058 1027.352 1031.646  
      1035.94 1040.234 1044.528  
      1048.822 1053.116 1057.41  
      1061.704 1066.0 1070.294  
      1074.588 1078.882 1083.176  
      1087.47 1091.764 1096.058  
      1100.352 1104.646 1108.94  
      1113.234 1117.528 1121.822  
      1126.116 1130.41 1134.704  
      1139.0 1143.294 1147.588  
      1151.882 1156.176 1160.47  
      1164.764 1169.058 1173.352  
      1177.646 1181.94 1186.234  
      1190.528 1194.822 1199.116  
      1203.41 1207.704 1212.0  
      1216.294 1220.588 1224.882  
      1229.176 1233.47 1237.764  
      1242.058 1246.352 1250.646  
      1254.94 1259.234 1263.528  
      1267.822 1272.116 1276.41  
      1280.704 1285.0 1289.294  
      1293.588 1297.882 1302.176  
      1306.47 1310.764 1315.058  
      1319.352 1323.646 1327.94  
      1332.234 1336.528 1340.822  
      1345.116 1349.41 1353.704  
      1358.0 1362.294 1366.588  
      1370.882 1375.176 1379.47  
      1383.764 1388.058 1392.352  
      1396.646 1400.94 1405.234  
      1409.528 1413.822 1418.116  
      1422.41 1426.704 1431.0  
      1435.294 1439.588 1443.882  
      1448.176 1452.47 1456.764  
      1461.058 1465.352 1469.646  
      1473.94 1478.234 1482.528  
      1486.822 1491.116 1495.41  
      1499.704 1504.0 1508.294  
      1512.588 1516.882 1521.176  
      1525.47 1529.764 1534.058  
      1538.352 1542.646 1546.94  
      1551.234 1555.528 1559.822  
      1564.116 1568.41 1572.704  
      1577.0 1581.294 1585.588  
      1589.882 1594.176 1598.47  
      1602.764 1607.058 1611.352  
      1615.646 1619.94 1624.234  
      1628.528 1632.822 1637.116  
      1641.41 1645.704 1650.0  
      1654.294 1658.588 1662.882  
      1667.176 1671.47 1675.764  
      1680.058 1684.352 1688.646  
      1692.94 1697.234 1701.528  
      1705.822 1710.116 1714.41  
      1718.704 1723.0 1727.294  
      1731.588 1735.882 1740.176  
      1744.47 1748.764 1753.058  
      1757.352 1761.646 1765.94  
      1770.234 1774.528 1778.822  
      1783.116 1787.41 1791.704  
      1796.0 1800.294 1804.588  
      1808.882 1813.176 1817.47  
      1821.764 1826.058 1830.352  
      1834.646 1838.94 1843.234  
      1847.528 1851.822 1856.116  
      1860.41 1864.704 1869.0  
      1873.294 1877.588 1881.882  
      1886.176 1890.47 1894.764  
      1899.058 1903.352 1907.646  
      1911.94 1916.234 1920.528  
      1924.822 1929.116 1933.41  
      1937.704 1942.0 1946.294  
      1950.588 1954.882 1959.176  
      1963.47 1967.764 1972.058  
      1976.352 1980.646 1984.94  
      1989.234 1993.528 1997.822  
      2002.116 2006.41 2010.704  
      2015.0 2019.294 2023.588  
      2027.882 2032.176 2036.47  
      2040.764 2045.058 2049.352  
      2053.646 2057.94 2062.234  
      2066.528 2070.822 2075.116  
      2079.41 2083.704 2088.0  
      2092.294 2096.588 2100.882  
      2105.176 2109.47 2113.764  
      2118.058 2122.352 2126.646  
      2130.94 2135.234 2139.528  
      2143.822 2148.116 2152.41  
      2156.704 2161.0 2165.294  
      2169.588 2173.882 2178.176  
      2182.47 2186.764 2191.058  
      2195.352 2199.646 2203.94  
      2208.234 2212.528 2216.822  
      2221.116 2225.41 2229.704  
      2234.0 2238.294 2242.588  
      2246.882 2251.176 2255.47  
      2259.764 2264.058 2268.352  
      2272.646 2276.94 2281.234  
      2285.528 2289.822 2294.116  
      2298.41 2302.704 2307.0  
      2311.294 2315.588 2319.882  
      2324.176 2328.47 2332.764  
      2337.058 2341.352 2345.646  
      2349.94 2354.234 2358.528  
      2362.822 2367.116 2371.41  
      2375.704 2380.0 2384.294  
      2388.588 2392.882 2397.176  
      2401.47 2405.764 2410.058  
      2414.352 2418.646 2422.94  
      2427.234 2431.528 2435.822  
      2440.116 2444.41 2448.704  
      2453.0 2457.294 2461.588  
      2465.882 2470.176 2474.47  
      2478.764 2483.058 2487.352  
      2491.646 2495.94 2500.234  
      2504.528 2508.822 2513.116  
      2517.41 2521.704 2526.0  
      2530.294 2534.588 2538.882  
      2543.176 2547.47 2551.764  
      2556.058 2560.352 2564.646  
      2568.94 2573.234 2577.528  
      2581.822 2586.116 2590.41  
      2594.704 2599.0 2603.294  
      2607.588 2611.882 2616.176  
      2620.47 2624.764 2629.058  
      2633.352 2637.646 2641.94  
      2646.234 2650.528 2654.822  
      2659.116 2663.41 2667.704  
      2672.0 2676.294 2680.588  
      2684.882 2689.176 2693.47  
      2697.764 2702.058 2706.352  
      2710.646 2714.94 2719.234  
      2723.528 2727.822 2732.116  
      2736.41 2740.704 2745.0  
      2749.294 2753.588 2757.882  
      2762.176 2766.47 2770.764  
      2775.058 2779.352 2783.646  
      2787.94 2792.234 2796.528  
      2800.822 2805.116 2809.41  
      2813.704 2818.0 2822.294  
      2826.588 2830.882 2835.176  
      2839.47 2843.764 2848.058  
      2852.352 2856.646 2860.94  
      2865.234 2869.528 2873.822  
      2878.116 2882.41 2886.704  
      2891.0 2895.294 2899.588  
      2903.882 2908.176 2912.47  
      2916.764 2921.058 2925.352  
      2929.646 2933.94 2938.234  
      2942.528 2946.822 2951.116  
      2955.41 2959.704 2964.0  
      2968.294 2972.588 2976.882  
      2981.176 2985.47 2989.764  
      2994.058 2998.352 3002.646  
      3006.94 3011.234 3015.528  
      3019.822 3024.116 3028.41  
      3032.704 3037.0 3041.294  
      3045.588 3049.882 3054.176  
      3058.47 3062.764 3067.058  
      3071.352 3075.646 3079.94  
      3084.234 3088.528 3092.822  
      3097.116 3101.41 3105.704  
      3110.0 3114.294 3118.588  
      3122.882 3127.176 3131.47  
      3135.764 3140.058 3144.352  
      3148.646 3152.94 3157.234  
      3161.528 3165.822 3170.116  
      3174.41 3178.704 3183.0  
      3187.294 3191.588 3195.882  
      3200.176 3204.47 3208.764  
      3213.058 3217.352 3221.646  
      3225.94 3230.234 3234.528  
      3238.822 3243.116 3247.41  
      3251.704 3256.0 3260.294  
      3264.588 3268.882 3273.176  
      3277.47 3281.764 3286.058  
      3290.352 3294.646 3298.94  
      3303.234 3307.528 3311.822  
      3316.116 3320.41 3324.704  
      3329.0 3333.294 3337.588  
      3341.882 3346.176 3350.47  
      3354.764 3359.058 3363.352  
      3367.646 3371.94 3376.234  
      3380.528 3384.822 3389.116  
      3393.41 3397.704 3402.0  
      3406.294 3410.588 3414.882  
      3419.176 3423.47 3427.764  
      3432.058 3436.352 3440.646  
      3444.94 3449.234 3453.528  
      3457.822 3462.116 3466.41  
      3470.704 3475.0 3479.294  
      3483.588 3487.882 3492.176  
      3496.47 3500.764 3505.058  
      3509.352 3513.646 3517.94  
      3522.234 3526.528 3530.822  
      3535.116 3539.41 3543.704  
      3548.0 3552.294 3556.588  
      3560.882 3565.176 3569.47  
      3573.764 3578.058 3582.352  
      3586.646 3590.94 3595.234  
      3599.528 3603.822 3608.116  
      3612.41 3616.704 3621.0  
      3625.294 3629.588 3633.882  
      3638.176 3642.47 3646.764  
      3651.058 3655.352 3659.646  
      3663.94 3668.234 3672.528  
      3676.822 3681.116 3685.41  
      3689.704 3694.0 3698.294  
      3702.588 3706.882 3711.176  
      3715.47 3719.764 3724.058  
      3728.352 3732.646 3736.94  
      3741.234 3745.528 3749.822  
      3754.116 3758.41 3762.704  
      3767.0 3771.294 3775.588  
      3779.882 3784.176 3788.47  
      3792.764 3797.058 3801.352  
      3805.646 3809.94 3814.234  
      3818.528 3822.822 3827.116  
      3831.41 3835.704 3840.0  
      3844.294 3848.588 3852.882  
      3857.176 3861.47 3865.764  
      3870.058 3874.352 3878.646  
      3882.94 3887.234 3891.528  
      3895.822 3900.116 3904.41  
      3908.704 3913.0 3917.294  
      3921.588 3925.882 3930.176  
      3934.47 3938.764 3943.058  
      3947.352 3951.646 3955.94  
      3960.234 3964.528 3968.822  
      3973.116 3977.41 3981.704  
      3986.0 3990.294 3994.588  
      3998.882 4003.176 4007.47  
      4011.764 4016.058 4020.352  
      4024.646 4028.94 4033.234  
      4037.528 4041.822 4046.116  
      4050.41 4054.704 4059.0  
      4063.294 4067.588 4071.882  
      4076.176 4080.47 4084.764  
      4089.058 4093.352 4097.646  
      4101.94 4106.234 4110.528  
      4114.822 4119.116 4123.41  
      4127.704 4132.0 4136.294  
      4140.588 4144.882 4149.176  
      4153.47 4157.764 4162.058  
      4166.352 4170.646 4174.94  
      4179.234 4183.528 4187.822  
      4192.116 4196.41 4200.704  
      4205.0 4209.294 4213.588  
      4217.882 4222.176 4226.47  
      4230.764 4235.058 4239.352  
      4243.646 4247.94 4252.234  
      4256.528 4260.822 4265.116  
      4269.41 4273.704 4278.0  
      4282.294 4286.588 4290.882  
      4295.176 4299.47 4303.764  
      4308.058 4312.352 4316.646  
      4320.94 4325.234 4329.528  
      4333.822 4338.116 4342.41  
      4346.704 4351.0 4355.294  
      4359.588 4363.882 4368.176  
      4372.47 4376.764 4381.058  
      4385.352 4389.646 4393.94  
      4398.234 4402.528 4406.822  
      4411.116 4415.41 4419.704  
      4424.0 4428.294 4432.588  
      4436.882 4441.176 4445.47  
      4449.764 4454.058 4458.352  
      4462.646 4466.94 4471.234  
      4475.528 4479.822 4484.116  
      4488.41 4492.704 4497.0  
      4501.294 4505.588 4509.882  
      4514.176 4518.47 4522.764  
      4527.058 4531.352 4535.646  
      4539.94 4544.234 4548.528  
      4552.822 4557.116 4561.41  
      4565.704 4570.0 4574.294  
      4578.588 4582.882 4587.176  
      4591.47 4595.764 4600.058  
      4604.352 4608.646 4612.94  
      4617.234 4621.528 4625.822  
      4630.116 4634.41 4638.704  
      4643.0 4647.294 4651.588  
      4655.882 4660.176 4664.47  
      4668.764 4673.058 4677.352  
      4681.646 4685.94 4690.234  
      4694.528 4698.822 4703.116  
      4707.41 4711.704 4716.0  
      4720.294 4724.588 4728.882  
      4733.176 4737.47 4741.764  
      4746.058 4750.352 4754.646  
      4758.94 4763.234 4767.528  
      4771.822 4776.116 4780.41  
      4784.704 4789.0 4793.294  
      4797.588 4801.882 4806.176  
      4810.47 4814.764 4819.058  
      4823.352 4827.646 4831.94  
      4836.234 4840.528 4844.822  
      4849.116 4853.41 4857.704  
      4862.0 4866.294 4870.588  
      4874.882 4879.176 4883.47  
      4887.764 4892.058 4896.352  
      4900.646 4904.94 4909.234  
      4913.528 4917.822 4922.116  
      4926.41 4930.704 4935.0  
      4939.294 4943.588 4947.882  
      4952.176 4956.47 4960.764  
      4965.058 4969.352 4973.646  
      4977.94 4982.234 4986.528  
      4990.822 4995.116 4999.41  
      5003.704 5008.0 5012.294  
      5016.588 5020.882 5025.176  
      5029.47 5033.764 5038.058  
      5042.352 5046.646 5050.94  
      5055.234 5059.528 5063.822  
      5068.116 5072.41 5076.704  
      5081.0 5085.294 5089.588  
      5093.882 5098.176 5102.47  
      5106.764 5111.058 5115.352  
      5119.646 5123.94 5128.234  
      5132.528 5136.822 5141.116  
      5145.41 5149.704 5154.0  
      5158.294 5162.588 5166.882  
      5171.176 5175.47 5179.764  
      5184.058 5188.352 5192.646  
      5196.94 5201.234 5205.528  
      5209.822 5214.116 5218.41  
      5222.704 5227.0 5231.294  
      5235.588 5239.882 5244.176  
      5248.47 5252.764 5257.058  
      5261.352 5265.646 5269.94  
      5274.234 5278.528 5282.822  
      5287.116 5291.41 5295.704  
      5300.0 5304.294 5308.588  
      5312.882 5317.176 5321.47  
      5325.764 5330.058 5334.352  
      5338.646 5342.94 5347.234  
      5351.528 5355.822 5360.116  
      5364.41 5368.704 5373.0  
      5377.294 5381.588 5385.882  
      5390.176 5394.47 5398.764  
      5403.058 5407.352 5411.646  
      5415.94 5420.234 5424.528  
      5428.822 5433.116 5437.41  
      5441.704 5446.0 5450.294  
      5454.588 5458.882 5463.176  
      5467.47 5471.764 5476.058  
      5480.352 5484.646 5488.94  
      5493.234 5497.528 5501.822  
      5506.116 5510.41 5514.704  
      5519.0 5523.294 5527.588  
      5531.882 5536.176 5540.47  
      5544.764 5549.058 5553.352  
      5557.646 5561.94 5566.234  
      5570.528 5574.822 5579.116  
      5583.41 5587.704 5592.0  
      5596.294 5600.588 5604.882  
      5609.176 5613.47 5617.764  
      5622.058 5626.352 5630.646  
      5634.94 5639.234 56
```

# 模型和曲线拟合

假设是 9 次多项式，幂次越高，拟合越精确，在拟合点上的误差越小，但这种精确意义不大，可能在拟合点间曲线的变化剧烈，不能反映出变化趋势。



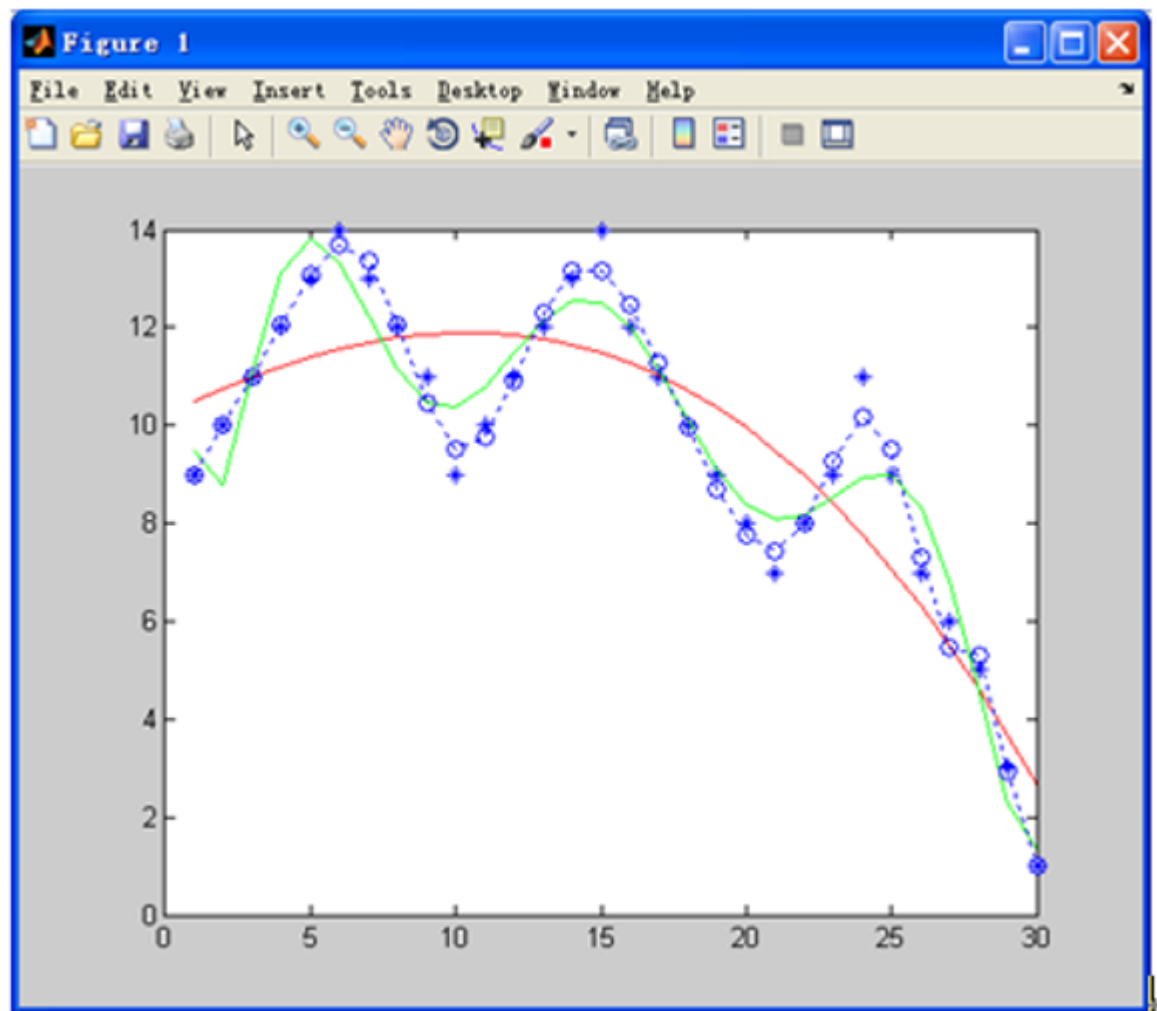


# 模型和曲线拟合

## 天气预测

```
x=[1:1:30];  
y=[9,10,11,12,13,14,13,12,11,9,10,11,12,13,14,12,11,10,9,8,7,8,9,11,9,7,6,5,3,1];  
a1=polyfit(x,y,3)           %三次多项式拟合%  
a2= polyfit(x,y,9)          %九次多项式拟合%  
a3= polyfit(x,y,15)         %十五次多项式拟合%  
b1= polyval(a1,x)  
b2= polyval(a2,x)  
b3= polyval(a3,x)  
r1= sum((y-b1).^2)           %三次多项式误差平方和%  
r2= sum((y-b2).^2)           %九次多项式误差平方和%  
r3= sum((y-b3).^2)           %十五次多项式误差平方和%  
plot(x,y,'*')               %用*画出 x,y 图像%  
hold on  
plot(x,b1, 'r')              %用红色线画出 x,b1 图像%  
hold on  
plot(x,b2, 'g')              %用绿色线画出 x,b2 图像%  
hold on  
plot(x,b3, 'b:o')            %用蓝色 o 线画出 x,b3 图像%  
%
```

# 模型和曲线拟合



对于剧烈变化的数据应用幂次高的模型进行拟合



# 范数 - 残差

( residuals )

要求余值是观测值和模型值间的差值：↵

$$r_i = y_i - \sum_1^n \beta_j \phi_j(t_i, a), i = 1, \dots, m \quad \text{残差和公式}$$

---

注意这里的 $r_i$ 表示的是 $i$ 这个点的测量值 $y_i$ 与最小二乘表示的值间的差。而最小二乘要的是总的差最小，这个总的差就有几种衡量标准：↵

# 一范数：即 $r_i$ 的绝对值的和最小， $\|r\|_1 = \sum_1^m |r_i|$ ↵

比最小二乘问题求解，且对误差点（outliers 不敏感）

这个是正常逻辑，直接加起来，所有的影响值都是线性的。↵

# 无穷范数：即 $r_i$ 的绝对值的最大那个值最小， $\|r\|_\infty = \max_1^m |r_i|$ ，即误差最大的那个值

最小，在测量这样使用是不合适的，可能被一个很大的误差值误导了。↵

---

# 最小二乘法：即 $r_i$ 的平方和最小， $\|r\|^2 = \sum_1^m r_i^2$ ↵

常用的衡量指标

# 范数 - 残差 ( residuals )

这样的话，影响值就不是线性的了，偏离越大的被平方了，也就是要求偏离越大的那个值更靠近真实的值。

↵

几种范数下的判断情况：

↵

对于最简单的三个点的拟合  $(0,1)$ ,  $(2,1)$ ,  $(1,2)$  这三个点的拟合

↵

↵

↵

↵

↵

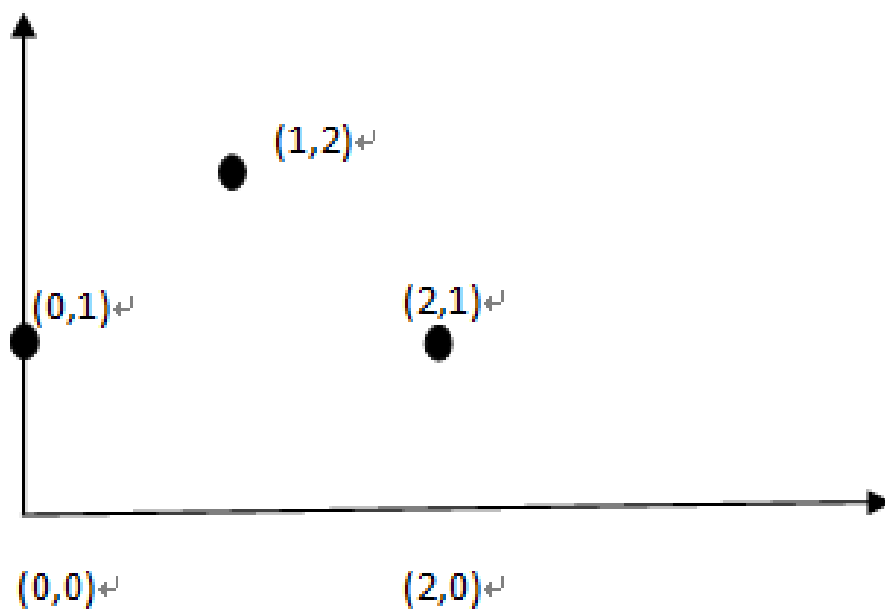
↵

↵

↵

↵

↵



# 范数 - 残差 ( residuals )

# 一范数：即  $r_i$  的绝对值的和最小， $\|r\|_1 = \sum_1^m |r_i|$

假设是  $y = A$ , 肯定有  $1 \leq A \leq 2$

这样  $\|r\|_1 = \sum_1^m |r_i| = (A-1) \cdot 2 + (2-A) = A$

↵

A 肯定最小最好，即为  $y=1$  这个直线

↵

↵

↵

↵

↵

↵

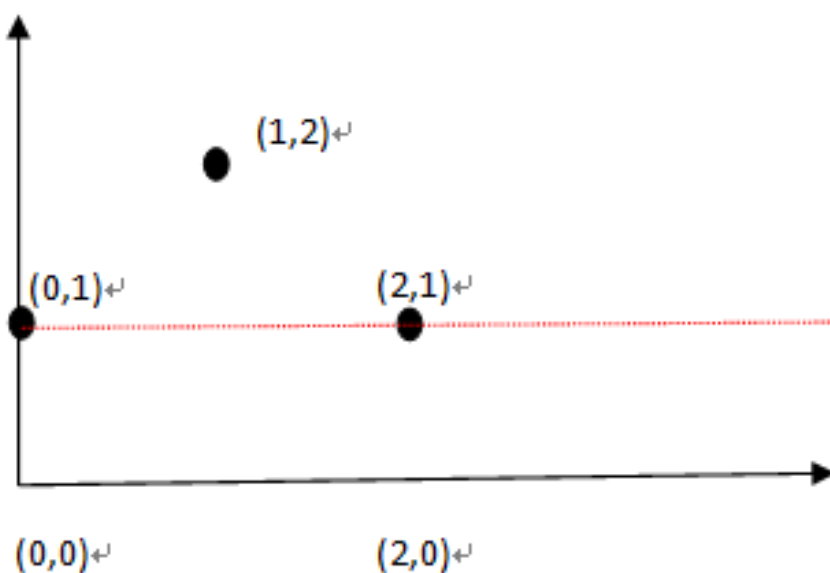
↵

↵

↵

↵

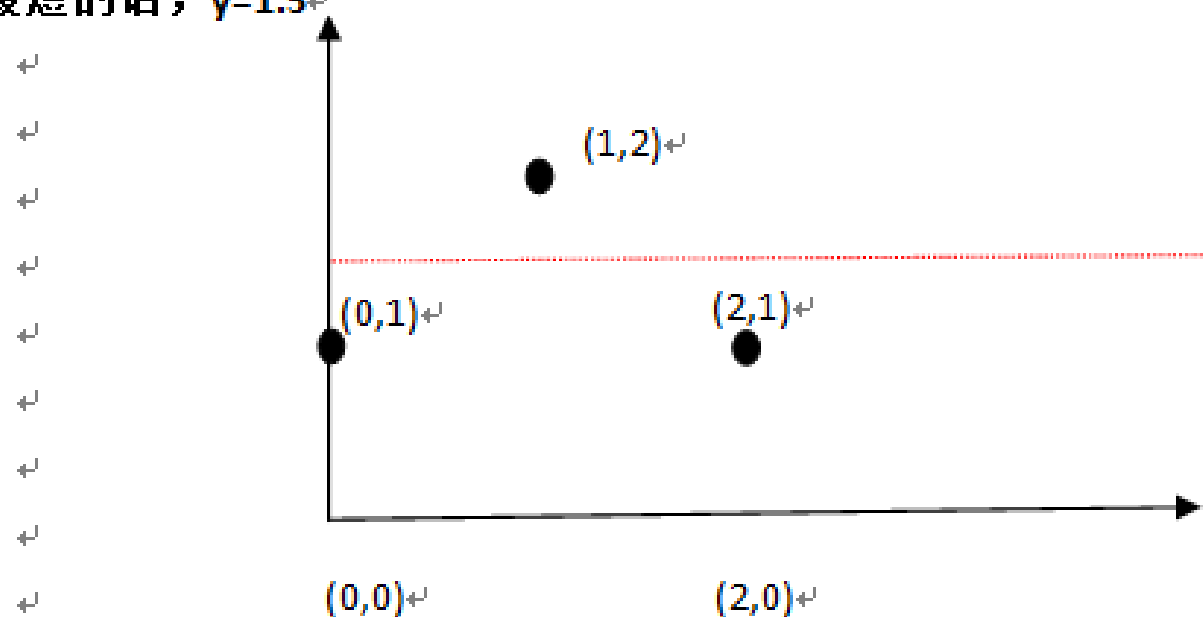
↵



# 范数 - 残差 ( residuals )

# 无穷范数：即  $r_i$  的绝对值的最大那个值最小， $\|r\|_{\infty} = \max_1^M |r_i|$ ，要求最大的那个距离

最短的话， $y=1.5$

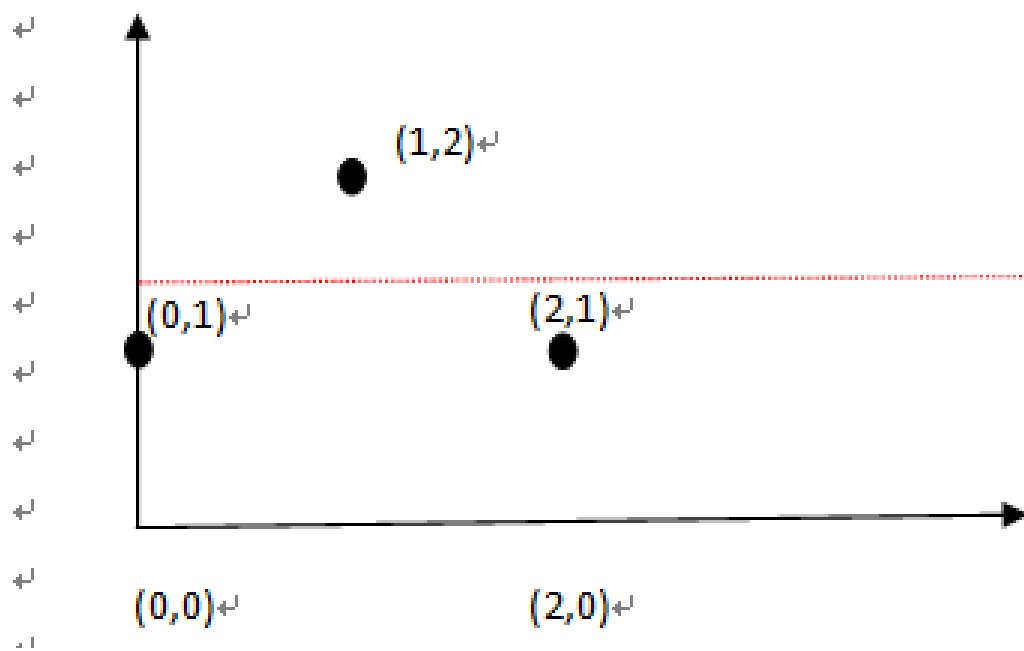


# 范数 - 残差 ( residuals )

# 最小二乘法判断：即  $r_i$  的平方和最小， $\|r\|^2 = \sum_1^m r_i^2$

要求的是  $\|r\|^2 = \sum_1^m |r_i|^2 = (A-1)^2 + (A-1)^2 + (2-A)^2 = 3A^2 - 8A + 6$

求  $3A^2 - 8A + 6$  的极值，对  $A$  的导数为 0 时是极值：  $6A - 8 = 0, A = 4/3 = 1.33$



最小二乘法综合考虑最大误差的影响，又考虑到误差的加权叠加。是综合、折中（well-balanced）的衡量指标。


# 最小二乘直线拟合

**定理 5.1(最小二乘拟合曲线)** 设  $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^N$  有  $N$  个点, 其中横坐标  $\{x_k\}_{k=1}^N$  是确定的。最小二乘拟合曲线:

$$y = Ax + B$$

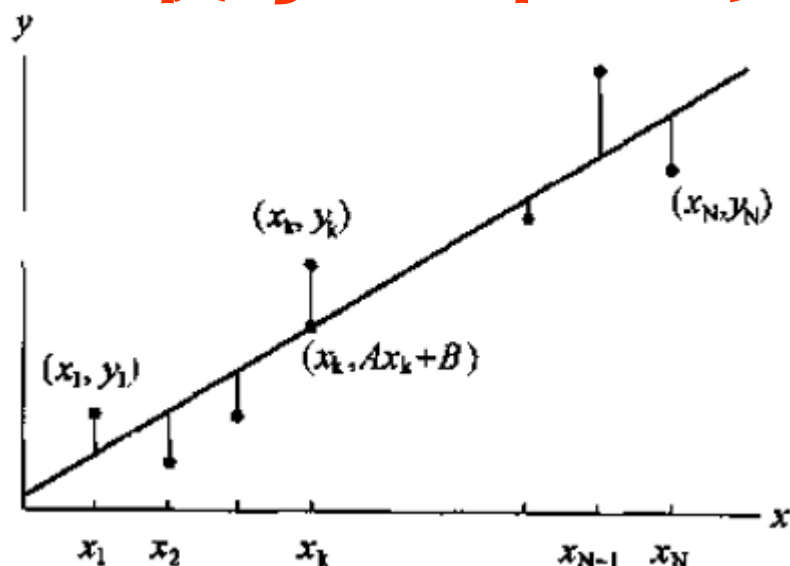
的系数是下列线性方程组的解, 称为正规方程:

$$\begin{aligned} \left( \sum_{k=1}^N x_k^2 \right) A + \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) B &= \sum_{k=1}^N x_k y_k \\ \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) A + NB &= \sum_{k=1}^N y_k \end{aligned}$$


$$\begin{pmatrix} \left( \sum_{k=1}^N x_k^2 \right) & \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) \\ \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^N x_k y_k \\ \sum_{k=1}^N y_k \end{pmatrix}$$



# 最小二乘直线拟合



$$E(A, B) = \sum_{k=1}^N (Ax_k + B - y_k)^2 = \sum_{k=1}^N d_k^2$$

---

$$\frac{\partial E(A, B)}{\partial A} = \sum_{k=1}^N 2(Ax_k + B - y_k)(x_k) = 2 \sum_{k=1}^N (Ax_k^2 + Bx_k - x_k y_k)$$

现在将  $A$  固定, 对  $B$  求导可得:

$$\frac{\partial E(A, B)}{\partial B} = \sum_{k=1}^N 2(Ax_k + B - y_k) = 2 \sum_{k=1}^N (Ax_k + B - y_k)$$

令式(12)和式(13)等于零, 利用求和的分配律可得:

$$0 = \sum_{k=1}^N (Ax_k^2 + Bx_k - x_k y_k) = A \sum_{k=1}^N x_k^2 + B \sum_{k=1}^N x_k - \sum_{k=1}^N x_k y_k$$

$$0 = \sum_{k=1}^N (Ax_k + B - y_k) = A \sum_{k=1}^N x_k + NB - \sum_{k=1}^N y_k$$

# 最小二乘直线拟合

例5 使电流  $i$  通过  $2\Omega$  的电阻, 用伏特表测量电阻两端的电压  $V$ , 得到如下数据:

| $i/\text{A}$ | 1   | 2   | 4   | 6    | 8    | 10   |
|--------------|-----|-----|-----|------|------|------|
| $V/\text{V}$ | 1.8 | 3.7 | 8.2 | 12.0 | 15.8 | 20.2 |

试用最小二乘法建立  $i$  与  $V$  之间的经验公式(这一公式对于校正测量所用的伏特表有用).

$$\begin{aligned} \left( \sum_{k=1}^N x_k^2 \right) A + \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) B &= \sum_{k=1}^N x_k y_k \\ \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) A + NB &= \sum_{k=1}^N y_k \end{aligned}$$

# 最小二乘直线拟合

1° 确定  $V = \varphi(i)$  的形式. 将表中给出的数据点  $(i_k, V_k)$  ( $k = 1, 2, \dots, 6$ ) 描绘在坐标纸上 (见图 4-10), 可以看出这些点位于一条直线的附近, 故可选择线性函数来拟合这组实验数据, 即取

$$V = a_0 + a_1 i$$

2° 建立法方程组. 因为问题已归结为一次多项式拟合, 且

$$\begin{aligned} m = 6, \quad \sum_{k=1}^6 i_k &= 31, \\ \sum_{k=1}^6 i_k^2 &= 221, \\ \sum_{k=1}^6 V_k &= 61.7, \\ \sum_{k=1}^6 i_k V_k &= 442.4, \end{aligned}$$

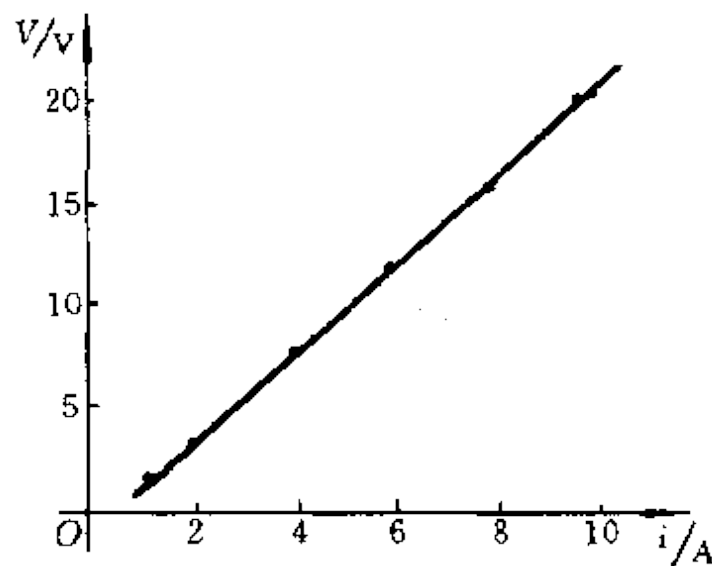


图 4-10

$$\begin{aligned} \left( \sum_{k=1}^N x_k^2 \right) A + \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) B &= \sum_{k=1}^N x_k y_k \\ \left( \sum_{k=1}^N x_k \right) A + NB &= \sum_{k=1}^N y_k \end{aligned}$$

# 最小二乘直线拟合

故由(4.61)知,法方程组为

$$\begin{bmatrix} 6 & 31 \\ 31 & 221 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 61.7 \\ 442.4 \end{bmatrix}$$

3° 求经验公式.解所得法方程组得

$$a_0 = -0.215, \quad a_1 = 2.032.$$

故所求经验公式为

$$V = -0.215 + 2.032i$$

4° 检验所得经验公式是否可取.为此,算出经验公式在各点函数值(称为**拟合值**)

$$\tilde{V}_k = -0.215 + 2.032i_k \quad (k = 1, 2, \dots, 6)$$

它与实测值  $V_k$  之间有一定偏差  $\delta_k (= \tilde{V}_k - V_k)$ .由表 4-5 可以看出,  $\sqrt{\sum \delta_k^2} = 0.4153$ (称为**均**

**方误差**),  $\max_k |\delta_k| = 0.287$ (称为**最大偏差**).它们在一定程度上反映了经验公式的好坏.如果认为这样的误差都允许的话,我们就认为所得经验公式是可取的,否则就要用改变函数类型或者增加实验数据等办法来求取新的经验公式.

# 最小二乘直线拟合

表 4-5

| $k$                        | 1     | 2     | 3                                 | 4      | 5      | 6      |
|----------------------------|-------|-------|-----------------------------------|--------|--------|--------|
| $i_k/A$                    | 1     | 2     | 4                                 | 6      | 8      | 10     |
| $\tilde{V}_k/V$            | 1.817 | 3.849 | 7.913                             | 11.977 | 16.041 | 20.105 |
| $V_k/V$                    | 1.8   | 3.7   | 8.2                               | 12.0   | 15.8   | 20.2   |
| $\delta_k/V$               | 0.017 | 0.149 | -0.287                            | -0.023 | 0.241  | -0.095 |
| $\sum \delta_k^2 = 0.1725$ |       |       | $\sqrt{\sum \delta_k^2} = 0.4153$ |        |        |        |

# 最小二乘直线拟合

程序 5.1(最小二乘拟合曲线) 根据  $N$  个数据点  $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$  构造最小二乘拟合曲线  $y = Ax + B$

```
function [A,B] = lsline(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;
```

$$\left(\sum_{k=1}^N x_k^2\right)A + \left(\sum_{k=1}^N x_k\right)B = \sum_{k=1}^N x_k y_k$$
$$\left(\sum_{k=1}^N x_k\right)A + NB = \sum_{k=1}^N y_k$$



# 最小二乘算法的一般形式

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$$

$$S(a_0, a_1, \cdots, a_n) = \sum_{i=1}^m [a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + \cdots + a_n\varphi_n(x_i) - y_i]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0 \quad (k = 0, 1, \cdots, n)$$

求导

$$\sum_{i=1}^m \varphi_k(x_i) [a_0\varphi_0(x_i) + a_1\varphi_1(x_i) + \cdots + a_n\varphi_n(x_i) - y_i] = 0$$

# 最小二乘算法的一般形式

$$\sum_{i=1}^m \varphi_k(x_i) [a_0 \varphi_0(x_i) + a_1 \varphi_1(x_i) + \cdots + a_n \varphi_n(x_i) - y_i] = 0$$

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=1}^m \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i), \quad (\varphi_k, f) = \sum_{i=1}^m \varphi_k(x_i) y_i$$

$$a_0(\varphi_k, \varphi_0) + a_1(\varphi_k, \varphi_1) + \cdots + a_n(\varphi_k, \varphi_n) = (\varphi_k, f) \quad (k=0, 1, \cdots, n)$$

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \\ \vdots \\ (\varphi_n, f) \end{bmatrix}$$

$$a_k = a_k^* \quad (k=0, 1, \cdots, n)$$

$$\varphi^*(x) = a_0^* \varphi_0(x) + a_1^* \varphi_1(x) + \cdots + a_n^* \varphi_n(x)$$

# 最小二乘算法的一般形式

作为曲线拟合的一种常见情况,若讨论的是代数多项式拟合,即

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n \quad (4.60)$$

此时,只要将(4.57)中的函数  $\varphi_0(x)$ 、 $\varphi_1(x)$ 、 $\cdots$ 、 $\varphi_n(x)$  依次看成函数  $1$ 、 $x$ 、 $\cdots$ 、 $x^n$ ,则由(4.58)与(4.59)立即可得相应的法方程组

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^n y_i \end{bmatrix} \quad (4.61)$$

$$a_0(\varphi_k, \varphi_0) + a_1(\varphi_k, \varphi_1) + \cdots + a_n(\varphi_k, \varphi_n) = (\varphi_k, f) \quad (k=0, 1, \cdots, n)$$

综上所述,求最小二乘解的步骤可以归结为:先根据  $\varphi(x)$  的特点,建立确定  $a_k$  ( $k=0, 1, \cdots, n$ ) 的法方程组;然后通过解法方程组求取最小二乘解  $\varphi^*(x)$  对应的参数  $a_k^*$  ( $k=0, 1, \cdots, n$ ).

# 最小二乘指数拟合

$$y = Ax^M$$

**定理 5.2(幂函数拟合)** 设  $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^N$  为  $N$  个点, 其中横坐标是确定的。最小二乘幂函数拟合曲线  $y = Ax^M$  的系数  $A$  为:

$$A = \left( \sum_{k=1}^N x_k^M y_k \right) / \left( \sum_{k=1}^N x_k^{2M} \right) \quad (16)$$

使用最小二乘技术, 需要求函数  $E(A)$  的最小值:

$$E(A) = \sum_{k=1}^N (Ax_k^M - y_k)^2 \quad (17)$$

在这种情况下, 只需求解  $E'(A) = 0$ 。导数表示为:

$$E'(A) = 2 \sum_{k=1}^N (Ax_k^M - y_k)(x_k^M) = 2 \sum_{k=1}^N (Ax_k^{2M} - x_k^M y_k)$$

因此, 系数  $A$  是下面方程的解:

$$0 = A \sum_{k=1}^N x_k^{2M} - \sum_{k=1}^N x_k^M y_k$$

上式可化简为式(16)。

# 最小二乘指数拟合

$$y = Ax^M$$

$$0 = A \sum_{k=1}^N x_k^{2M} - \sum_{k=1}^N x_k^M y_k$$

例 5.3 试验数据如表 5.3 所示。关系式为  $d = \frac{1}{2}gt^2$ ,  $d$  表示单位为米的距离,  $t$  表示单位为秒的时间。求重力常数  $g$ 。

表 5.3 求解幂函数拟合的系数

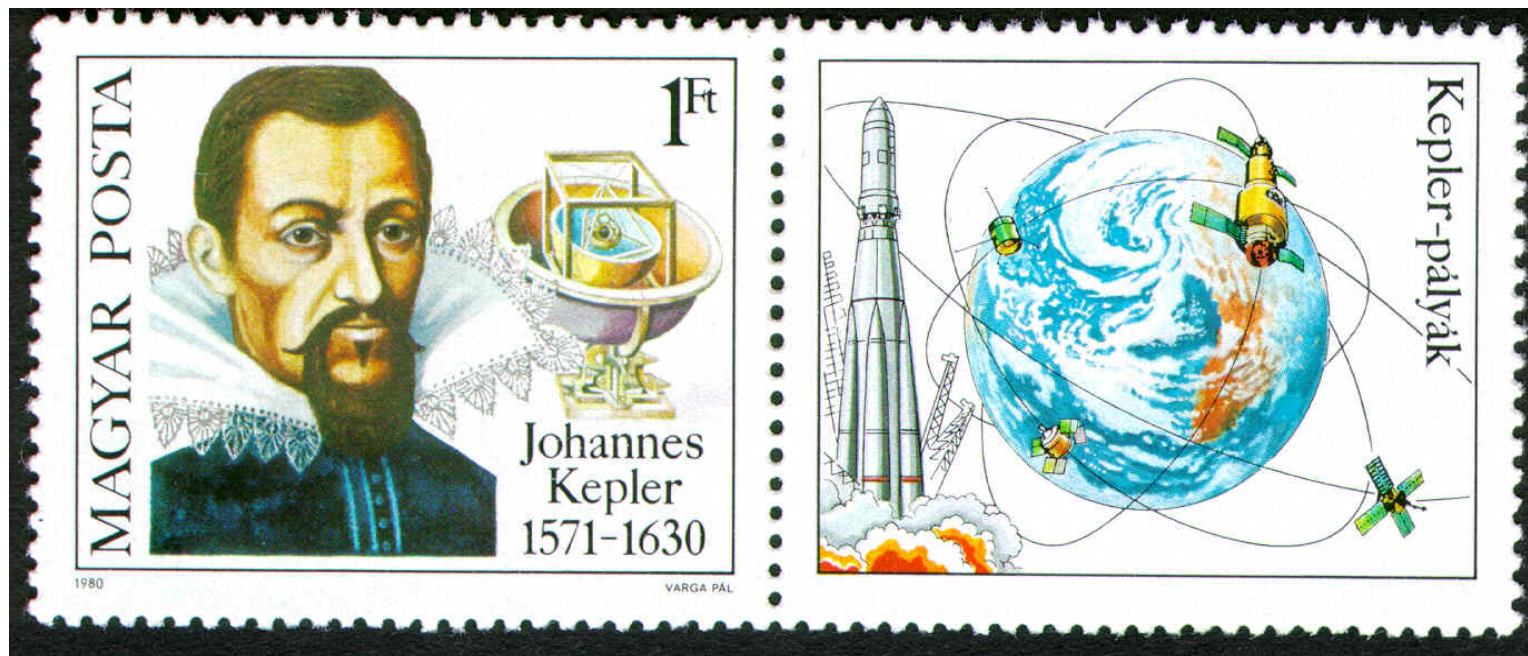
| 时间, $t_k$ | 距离, $d_k$ | $d_k t_k^2$    | $t_k^4$       |
|-----------|-----------|----------------|---------------|
| 0.20 0    | 0.196 0   | 0.0078 4       | 0.001 6       |
| 0.40 0    | 0.785 0   | 0.1256 0       | 0.023 6       |
| 0.60 0    | 1.766 5   | 0.6359 4       | 0.129 6       |
| 0.80 0    | 3.140 5   | 2.0099 2       | 0.409 6       |
| 1.00 0    | 4.907 5   | 4.9075 0       | 1.000 0       |
|           |           | <hr/> 7.6868 0 | <hr/> 1.566 4 |

解:

可用表 5.3 中的值求出公式(16)需要的和, 这里幂  $M=2$ 。

系数  $A = 7.68680/1.5664 = 4.9073$ , 而且可得  $d = 4.9073t^2$  和  $g = 2A = 9.7146\text{m/s}^2$ 。

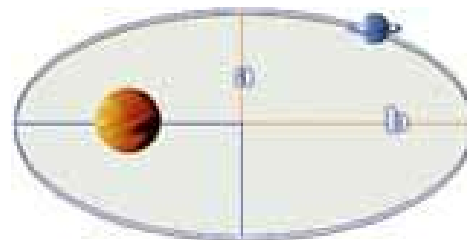
# 最小二乘指数拟合



• 开普勒第三定律（调和定律）：行星绕日一圈时间的平方和行星各自离日的平均距离的立方成正比。

用公式表示为： $a^3/T^2=K$

- $a$  = 行星公转轨道半长轴
- $T$  = 行星公转周期
- $K$  = 常数





$$T=Cx^{3/2}$$

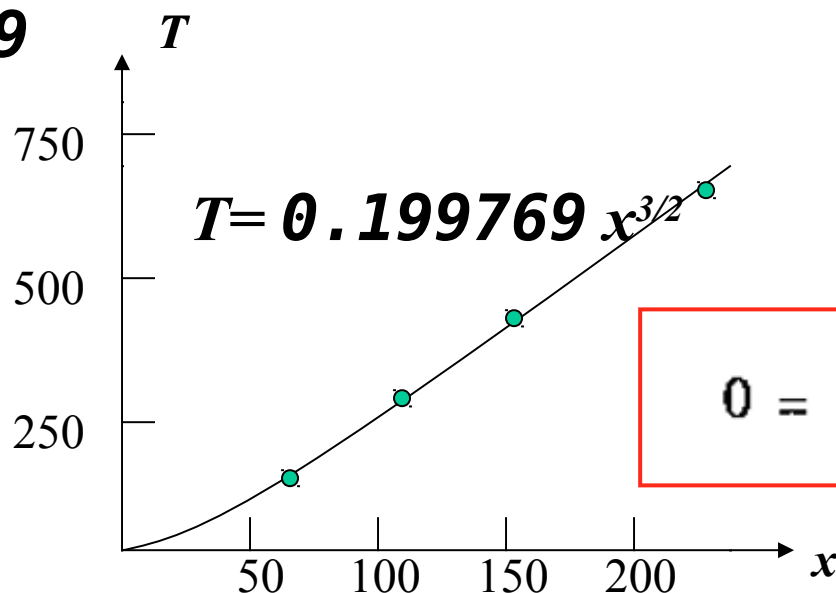
$x$  是行星离太阳的距离 (  $MKm$  ),  $T$  是行星绕太阳一周所需的时间 ( Days),  $C$  是常数。

起初观察到的四颗行星的 (  $x$  ,  $T$  ) 数据分别为：

| 行星名              | 水星              | 金星                | 地球            | 火星                |
|------------------|-----------------|-------------------|---------------|-------------------|
| ( $x$ ,<br>$T$ ) | ( 58 , 8<br>8 ) | ( 108 , 22<br>5 ) | ( 150 , 365 ) | ( 228 , 68<br>7 ) |

通过最小二乘法获得常数

**$C=0.199769$**



$$0 = A \sum_{k=1}^N x_k^{2M} - \sum_{k=1}^N x_k^M y_k$$

# 非线性最小二乘指数拟合

$$y = Ce^{Ax}$$

设给定点集  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ , 求指数函数的曲线拟合:

$$y = Ce^{Ax} \quad (1)$$

第一步是对式(1)两边取对数:

$$\ln(y) = Ax + \ln(C) \quad (2)$$

然后引入变量变换:

$$Y = \ln(y), X = x, B = \ln(C) \quad (3)$$

变量变换形成线性关系式:

$$Y = AX + B \quad (4)$$

在  $xy$  平面上的初始点集  $(x_k, y_k) = (x_k, \ln(y_k))$  变换成在  $XY$  平面上的点集  $(X_k, Y_k)$ 。这个过程称为数据线性化。这样可用最小二乘曲线式(4)拟合点集  $\{X_k, Y_k\}$ 。求解  $A$  和  $B$  的正规方程为:

$$\begin{aligned} \left( \sum_{k=1}^N X_k^2 \right) A + \left( \sum_{k=1}^N X_k \right) B &= \sum_{k=1}^N X_k Y_k \\ \left( \sum_{k=1}^N X_k \right) A + NB &= \sum_{k=1}^N Y_k \end{aligned} \quad (5)$$

求出  $A$  和  $B$  后, 式(1)中的参数  $C$  可用下式计算:

$$C = e^B \quad (6)$$

# 非线性最小二乘指数拟合

$$y = Ce^{Ax}$$

例 5.4 根据 5 个点  $(0, 1.5), (1, 2.5), (2, 3.5), (3, 5.0), (4, 7.5)$ , 使用数据线性化方法求解指数曲线拟合  $y = Ce^{Ax}$ 。

使用变换公式(3)将初始点变换成:

$$\begin{aligned} \{(X_k, Y_k)\} &= \{0, \ln(1.5), (1, \ln(2.5)), (2, \ln(3.5)), (3, \ln(5.0)), (4, \ln(7.5))\} \\ &= \{(0, 0.40547), (1, 0.91629), (2, 1.25276), (3, 1.60944), (4, 2.01490)\} \end{aligned} \quad (7)$$

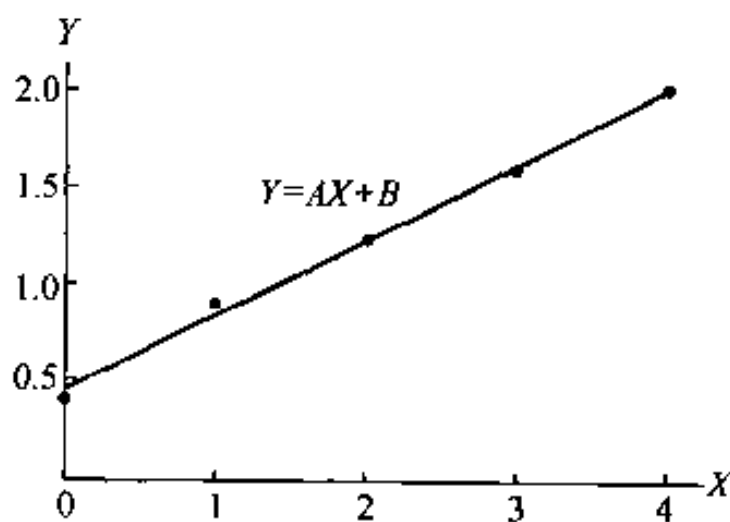


图 5.4 变换后的点集  $\{(X_k, Y_k)\}$

这些变换后的点如图 5.4 所示, 并具有直线形式。在图 5.4 中, 拟合式(7)中的点的最小二乘曲线  $Y = AX + B$  为:

$$Y = 0.391202X + 0.457367 \quad (8)$$

# 非线性最小二乘指数拟合

例 5.5 根据 5 个数据点  $(0, 1.5), (1, 2.5), (2, 3.5), (3, 5.0), (4, 7.5)$ , 利用最小二乘法求解指数拟合  $y = Ce^{Ax}$ 。

解:

首先求解  $E(A, C)$  的最小值,  $E(A, C)$  为:

$$\begin{aligned} E(A, C) = & (C - 1.5)^2 + (Ce^A - 2.5)^2 + (Ce^{2A} - 3.5)^2 \\ & + (Ce^{3A} - 5.0)^2 + (Ce^{4A} - 7.5)^2 \end{aligned} \quad (16)$$

使用 MATLAB 中的 `fmins` 命令求解最小化  $E(A, C)$  后的  $A$  和  $C$  的近似值。首先在 MATLAB 中将  $E(A, C)$  定义为一个 M 文件:

```
function z = E(u)
A = u(1);
C = u(2);
z = (C - 1.5).^2 + (C * exp(A) - 2.5).^2 + (C * exp(2 * A) - 3.5).^2 + ...
    (C * exp(3 * A) - 5.0).^2 + (C * exp(4 * A) - 7.5).^2;
```

在 MATLAB 的命令窗口, 使用 `fmins` 命令和初始值  $A = 1.0, C = 1.0$ , 可得:

```
> > fmins('E', [1 1])
ans =
    0.38357046980073    1.61089952247928
```

则 5 个数据点的曲线拟合为:

$$y = 1.610899e^{0.3835705x} \quad (\text{非线性最小二乘拟合}) \quad (17)$$

# 最小二乘拟合

例6 在某化学反应里,测得生成物浓度  $y$  与时间  $t$  的数据见表 4-6,试用最小二乘法建立  $t$  与  $y$  之间的经验公式.

表 4-6

|                |       |       |       |       |       |       |       |       |
|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $t/\text{min}$ | 1     | 2     | 3     | 4     | 5     | 6     | 7     | 8     |
| $y/\%$         | 4.00  | 6.40  | 8.00  | 8.80  | 9.22  | 9.50  | 9.70  | 9.86  |
| $t/\text{min}$ | 9     | 10    | 11    | 12    | 13    | 14    | 15    | 16    |
| $y/\%$         | 10.00 | 10.20 | 10.32 | 10.42 | 10.50 | 10.55 | 10.58 | 10.60 |

# 最小二乘拟合

**解** 将已知数据点 $(t_i, y_i)$  ( $i=1, 2, \dots, 16$ )描绘在坐标纸上(见图 4-11), 根据点的分布规律和问题的物理背景, 拟合曲线 $y = \varphi(t)$ 应具有下列特点:

(1) 曲线随着 $t$ 的增加而上升, 但上升速度由快到慢;

(2) 当 $t=0$ 时, 反应尚未开始, 即 $y=0$ , 故曲线应经过原点, 或者当 $t \rightarrow 0$ 时以原点为极限点;

(3) 当 $t \rightarrow \infty$ 时,  $y$ 趋于某个常数, 故曲线有一水平渐近线.

具有上述特点的曲线很多. 选用不同的数学模型, 可以获得不同的拟合曲线与经验公式.

下面提供两种方案.

方案 1: 设想 $y = \varphi(t)$ 是双曲线型的, 并且具有下面形式

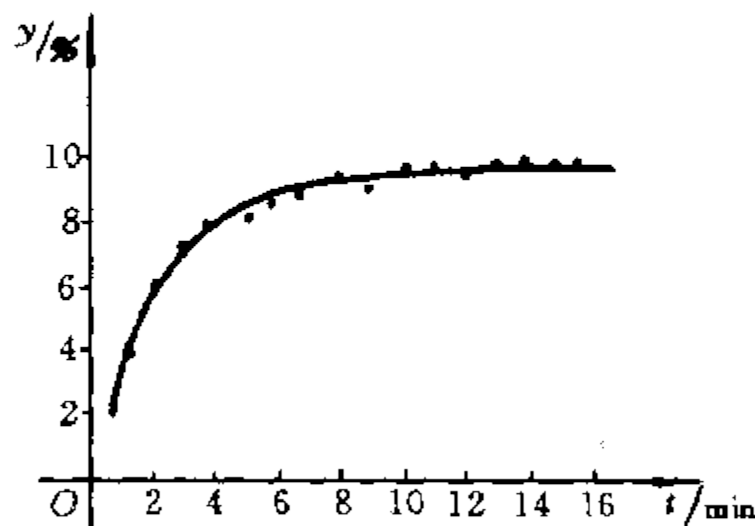


图 4-11



# 最小二乘拟合

方案 1: 设想  $y = \varphi(t)$  是双曲线型的, 并且具有下面形式

$$y = \frac{t}{at + b} \quad (4.62)$$

此时, 若直接按最小二乘原则(使偏差平方和最小)去确定参数  $a$  和  $b$ , 则问题归结为求二元函数

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^{16} \left( \frac{t_i}{at_i + b} - y_i \right)^2$$

的极小点, 相应的法方程组

# 最小二乘拟合

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^{16} \frac{t_i^2}{(at_i + b)^2} \left( \frac{t_i}{at_i + b} - y_i \right) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^{16} \frac{t_i}{(at_i + b)^2} \left( \frac{t_i}{at_i + b} - y_i \right) = 0 \end{cases}$$

是一个非线性方程组, 给计算带来了麻烦. 在这里, 我们通过变量替换将它转化为关于待定参数的线性函数. 为此, 将(4.62)改写为

$$\frac{1}{y} = a + \frac{b}{t}$$

于是, 若引入新变量

$$y^{(1)} = \frac{1}{y}, \quad t^{(1)} = \frac{1}{t}$$

则(4.62)式就是

$$y^{(1)} = a + bt^{(1)} \quad (4.63)$$

同时, 由题中所给数据表 4-6 可以算出新的数据表 4-7 (为节省篇幅, 仅列出部分数据). 这样, 问题就归结为: 根据数据表 4-7, 求形如(4.63)的最小二乘解.

# 最小二乘拟合

表 4-7

| $i$                         | 1       | 2       | 3       | ... | 16      |
|-----------------------------|---------|---------|---------|-----|---------|
| $t_i^{(1)} = \frac{1}{t_i}$ | 1.00000 | 0.50000 | 0.33333 | ... | 0.06250 |
| $y_i^{(1)} = \frac{1}{y_i}$ | 0.25000 | 0.15625 | 0.12500 | ... | 0.09434 |

于是,参照例 5 求解过程中的第 2°、3°两步,可得

$$a = 80.6621, \quad b = 161.6822$$

代入(4.62),即得经验公式

$$y = \frac{t}{80.6621t + 161.6822} \quad (4.64)$$

方案 2:设想  $y = \varphi(t)$  具有指数形式

$$y = ae^{\frac{b}{t}} \quad (a > 0, b < 0) \quad (4.65)$$

在求取参数  $a$  和  $b$  时,为了避免求解非线性方程组,对上式两边取对数,得

$$\ln y = \ln a + b \cdot \frac{1}{t}$$

此时,若记  $A = \ln a$ ,  $B = b$ , 并引入新变量

# 最小二乘拟合

$$y^{(2)} = \ln y, \quad t^{(2)} = \frac{1}{t}$$

则(4.65)式就是

$$y^{(2)} = A + Bt^{(2)} \quad (4.66)$$

这样,问题可归结为:根据数据表 4-8(由表 4-6 算得)求形如(4.66)的最小二乘解.

表 4-8

| $t$                         | 1       | 2       | 3       | ... | 16      |
|-----------------------------|---------|---------|---------|-----|---------|
| $t_i^{(2)} = \frac{1}{t_i}$ | 1.00000 | 0.50000 | 0.33333 | ... | 0.06250 |
| $y_i^{(2)} = \ln y_i$       | 1.38629 | 1.85630 | 2.07944 | ... | 2.36085 |

参照方案 1,可得

$$A = -4.4807, \quad B = -1.0567$$

从而

$$a = e^A = 0.011325, \quad b = B = -1.0567$$

代入(4.65),即得另一经验公式

$$y = 0.011325e^{-\frac{1.0567}{t}} \quad (4.67)$$

# 最小二乘拟合

我们把所得到的两个不同的经验公式(4.64)和(4.67)进行了比较(见表4-9),从均方误差与最大偏差这两个指标看,后一经验公式均优于前一经验公式.因此,在解决实际问题时,往往需要经过反复分析,多次选择、计算与比较,才能获得较好的数学模型.

表 4-9

| 经验公式    | 均方误差                  | 最大偏差                   |
|---------|-----------------------|------------------------|
| (4.64)式 | $1.19 \times 10^{-3}$ | $0.568 \times 10^{-3}$ |
| (4.67)式 | $0.34 \times 10^{-3}$ | $0.277 \times 10^{-3}$ |

# QR 分解

待求解

$$X\beta \approx y.$$

Overdetermined

无法精确求解

求解

$$\min_{\beta} \|X\beta - y\|.$$

建立法方程

$$X^T X \beta = X^T y.$$

建法方程的过程复杂

矩阵求拟

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

对比高斯消元求解，矩阵求拟求解代价高，精度低，且稳定性差

$$\kappa(X^T X) = \kappa(X)^2.$$

条件数平方

# QR 分解

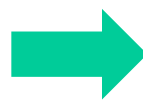
$$X\beta \approx y.$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1.0000 \\ 0.0400 & 0.2000 & 1.0000 \\ 0.1600 & 0.4000 & 1.0000 \\ 0.3600 & 0.6000 & 1.0000 \\ 0.6400 & 0.8000 & 1.0000 \\ 1.0000 & 1.0000 & 1.0000 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 150.6970 \\ 179.3230 \\ 203.2120 \\ 226.5050 \\ 249.6330 \\ 281.4220 \end{bmatrix}$$

Householder  
Reflections

$$H_n \cdots H_2 H_1 X = R.$$

$$H_n \cdots H_2 H_1 y = z.$$


$$\begin{bmatrix} -1.2516 & -1.4382 & -1.7578 \\ 0 & -0.3627 & -1.3010 \\ 0 & 0 & 1.1034 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -449.3721 \\ -242.3136 \\ 168.2334 \\ -1.3202 \\ -3.0801 \\ 4.0048 \end{bmatrix}$$

$$R\beta \approx z,$$

# 最小二乘拟合的 Matlab 实现

MATLAB 软件提供了基本的曲线拟合函数的命令.

多项式函数拟合:  $a = \text{polyfit}(\text{xdata}, \text{ydata}, n)$

其中  $n$  表示多项式的最高阶数,  $\text{xdata}, \text{ydata}$  为将要拟合的数据, 它是用数组的方式输入. 输出参数  $a$  为拟合多项式  $y = a_1 x^n + \cdots + a_n x + a_{n+1}$  的系数  $a = [a_1, \cdots, a_n, a_{n+1}]$ .

多项式在  $x$  处的值  $y$  可用下面程序计算.

$$y = \text{polyval}(a, x)$$

Use the new  
**lsqcurvefit.m** function

一般的曲线拟合:  $p = \text{curvefit}('Fun', p0, \text{xdata}, \text{ydata})$

其中  $Fun$  表示函数  $Fun(p, \text{xdata})$  的 M 函数文件,  $p0$  表示函数的初值.  $\text{curvefit}()$  命令的求解问题形式是

$$\min_{\{p\}} \sum \{ (Fun(p, \text{xdata}) - \text{ydata}) .^2 \}$$

若要求解点  $x$  处的函数值可用程序  $f = Fun(p, x)$  计算.



# 最小二乘拟合的 Matlab 实现

例如已知函数形式  $y = ae^{-bx} + ce^{-dx}$ , 并且已知数据点  $(x_i, y_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , 要确定四个未知参数  $a, b, c, d$ .

使用 `curvefit` 命令, 数据输入 `xdata = [x1, x2, ..., xn]`; `ydata = [y1, y2, ..., yn]`; 初值输入 `p0 = [a0, b0, c0, d0]`; 并且建立函数  $y = ae^{-bx} + ce^{-dx}$  的 M 文件(Fun.m). 若定义  $p_1 = a$ ,  $p_2 = b$ ,  $p_3 = c$ ,  $p_4 = d$ , 则输出  $p = [p_1, p_2, p_3, p_4]$ .

## 范例：薄膜透射率的测定

某种医用薄膜有允许一种物质的分子穿透它,从高浓度的溶液向低浓度的溶液扩散的功能,在试制时需测定薄膜被这种分子穿透的能力.测定方法如下:用面积为  $S$  的薄膜将容器分成体积分别为  $V_A$ 、 $V_B$  的两部分,在两部分中分别注满该物质的两种不同浓度的溶液.此时该物质分子就会从高浓度溶液穿过薄膜向低浓度溶液中扩散.通过单位面积膜分子扩散的速度与膜两侧溶液的浓度差成正比,比例系数  $K$  表征了薄膜被该物质分子穿透的能力,称为渗透率.定时测量容器中薄膜某一侧的溶液浓度值,以此确定  $K$  的数值.

## 1 数学模型的建立

这是一个综合性的应用实例,主要涉及微分方程和数据拟合参数(即参数辨识)的数学知识.

### 1. 假设

1) 薄膜两侧的溶液始终是均匀的,即在任何时刻膜两侧的每一处溶液的浓度都是相同的.

2) 当两容器浓度不一致时,物质的分子穿透薄膜总是从高浓度溶液向低浓度溶液扩散.

3) 通过单位面积膜分子扩散的速度与膜两侧溶液的浓度差成正比.

4) 薄膜是双向同性的即物质从膜的任何一侧向另一侧渗透的性能是相同的.

不同的假设应该具有不同形式的数学模型.

## 2. 符号说明

1)  $C_A(t)$ 、 $C_B(t)$  表示  $t$  时刻膜两侧溶液的浓度;

2)  $\alpha_A$ 、 $\alpha_B$  表示初始时刻两侧溶液的浓度 (单位: 毫克/立方厘米);

3)  $K$  表示渗透率;

4)  $V_A$ 、 $V_B$  表示由薄膜阻隔的容器两侧的体积.

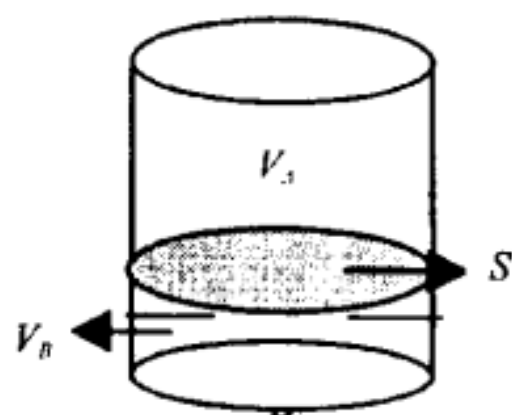
## 3. 分析

考察时段  $[t, t + \Delta t]$  薄膜两侧容器中该物质质量的变化. 以容器  $A$  侧为例, 在该时段物质质量的增加量为  $V_A C_A(t + \Delta t) - V_A C_A(t)$ , 另一方面从  $B$  侧渗透至  $A$  侧的该物质的质量为  $SK(C_B - C_A)\Delta t$ . 由质量守恒定律, 两者应该相等, 于是有

$$V_A C_A(t + \Delta t) - V_A C_A(t) = SK(C_B - C_A)\Delta t.$$

两边除以  $\Delta t$ , 令  $\Delta t \rightarrow 0$  并整理得

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{SK}{V_A}(C_B - C_A). \quad (5.1)$$



且注意到整个容器的溶液中含有该物质的质量应该不变,即有下式成立

$$V_A C_A(t) + V_B C_B(t) = V_A \alpha_A + V_B \alpha_B,$$

$$C_A(t) = \alpha_A + \frac{V_B}{V_A} \alpha_B - \frac{V_B}{V_A} C_B(t).$$

代入(5.1)得

$$\frac{dC_B}{dt} + SK \left( \frac{1}{V_A} + \frac{1}{V_B} \right) C_B = SK \left( \frac{\alpha_A}{V_B} + \frac{\alpha_B}{V_A} \right).$$

再利用初始条件  $C_B(0) = \alpha_B$ , 解出

$$C_B(t) = \frac{\alpha_A V_A + \alpha_B V_B}{V_A + V_B} + \frac{V_A(\alpha_B - \alpha_A)}{V_A + V_B} e^{-SK \left( \frac{1}{V_A} + \frac{1}{V_B} \right) t}.$$

至此,问题归结为利用  $C_B$  在时刻  $t_j$  的测量数据  $C_j (j=1,2,\cdots,N)$  来辨识参数  $K$  和  $\alpha_A, \alpha_B$ , 对应的数学模型变为求函数

$$E(K, \alpha_A, \alpha_B) = \sum_{j=1}^N (C_B(t_j) - C_j)^2 \Rightarrow \min.$$

$$a = \frac{\alpha_A V_A + \alpha_B V_B}{V_A + V_B}, b = \frac{V_A(\alpha_B - \alpha_A)}{V_A + V_B},$$

问题转化为求函数

$$E(K, a, b) = \sum [a + b e^{-SK(\frac{1}{V_A} + \frac{1}{V_B})t_j} - C_j]^2$$

的最小值点  $(K, a, b)$ .

## 2 求解参数

例如, 设  $V_A = V_B = 1000$  立方厘米,  $S = 10$  平方厘米, 对容器的  $B$  部分溶液浓度的测试结果如表 5.2.

表 5.2

| $t_j$ (秒)             | 100  | 200  | 300  | 400  | 500  | 600  | 700  | 800  | 900  | 1000 |
|-----------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $C_j(\times 10^{-5})$ | 4.54 | 4.99 | 5.35 | 5.65 | 5.90 | 6.10 | 6.26 | 6.39 | 6.50 | 6.59 |

其中  $C_j$  的单位为毫克/立方厘米.

此时极小化的函数

$$E(K, a, b) = \sum_{j=1}^{10} [a + be^{-20K \cdot t_j} - C_j]^2.$$

用 MATLAB 软件进行计算.

1) 编写 M 文件 curvefun.m

```
function f = curvefun(x, tdata)
```

```
f = x(1) + x(2) * exp((0.02 * x(3) * tdata);
```

其中  $x(1) = a; x(2) = b; x(3) = k;$

2) 编写程序(test1.m)

```
tdata = linspace(100,1000,10);
```

```
cdata = 1e-05.*[454 499 535 565 590 610 626 639 650 659];
```

```
x0 = [0.2,0.05,0.05];
```

```
x = curvefit('curvefun', x0, tdata, cdata)
```

3) 输出结果

```
x = 0.007    -0.003    0.1012
```

即表示  $k = 0.1012, a = 0.007, b = -0.003.$

进一步求出  $\alpha_B = 0.004$ (毫克/立方厘米),  $\alpha_A = 0.01$ (毫克/立方厘米).

Use the new  
lsqcurvefit.m function

# 思考题

## 1、旧车价格

某年美国旧车价格的调查资料如表 5.4, 其中  $x_i$  表示轿车的使用年数,  $y_i$  表示相应的平均价格. 试分析用什么形式的曲线来拟合上述的数据, 并预测使用 4.5 年后轿车的平均价格大致为多少.

表 5.4

| $x_i$ | 1    | 2    | 3    | 4    | 5   | 6   | 7   | 8   | 9   | 10  |
|-------|------|------|------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $y_i$ | 2615 | 1943 | 1494 | 1087 | 765 | 538 | 484 | 290 | 226 | 204 |



## 2 经济增长模型

增加生产、发展经济所依靠的主要因素有增加投资、增加劳动力以及技术革新等,在研究国民经济产值与这些因素的数量关系时,由于技术水平不像资金、劳动力那样容易定量化,作为初步的模型,可认为技术水平不变,只讨论产值和资金、劳动力之间的关系.在科学技术发展不快时,如资本主义经济发展的前期,这种模型是有意义的.

用  $Q, K, L$  分别表示产值、资金、劳动力,要寻求的数量关系  $Q(K, L)$ . 经过简化假设与分析,在经济学中,推导出一个著名的 Cobb-Douglas 生产函数

$$Q(K, L) = aK^\alpha L^\beta, \quad 0 < \alpha, \beta < 1 \quad (*)$$

式中  $\alpha, \beta, a$  要由经济统计数据确定. 现有美国马萨诸塞州 1900—1926 年上述三个经济指数的统计数据, 如表 5.5, 试用数据拟合的方法, 求出 (\*) 式中的参数  $\alpha, \beta, a$ .

表 5.5

| $t$  | $Q$  | $K$  | $L$  | $t$  | $Q$  | $K$  | $L$  |
|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 1900 | 1.05 | 1.04 | 1.05 | 1914 | 2.01 | 3.24 | 1.65 |
| 1901 | 1.18 | 1.06 | 1.08 | 1915 | 2.00 | 3.24 | 1.62 |
| 1902 | 1.29 | 1.16 | 1.18 | 1916 | 2.09 | 3.61 | 1.86 |
| 1903 | 1.30 | 1.22 | 1.22 | 1917 | 1.96 | 4.10 | 1.93 |
| 1904 | 1.30 | 1.27 | 1.17 | 1918 | 2.20 | 4.36 | 1.96 |
| 1905 | 1.42 | 1.37 | 1.30 | 1919 | 2.12 | 4.77 | 1.95 |
| 1906 | 1.50 | 1.44 | 1.39 | 1920 | 2.16 | 4.75 | 1.90 |
| 1907 | 1.52 | 1.53 | 1.47 | 1921 | 2.08 | 4.54 | 1.58 |
| 1908 | 1.46 | 1.57 | 1.31 | 1922 | 2.24 | 4.54 | 1.67 |
| 1909 | 1.60 | 2.05 | 1.43 | 1923 | 2.56 | 4.58 | 1.82 |
| 1910 | 1.69 | 2.51 | 1.58 | 1924 | 2.34 | 4.58 | 1.60 |
| 1911 | 1.81 | 2.63 | 1.59 | 1925 | 2.45 | 4.58 | 1.61 |
| 1912 | 1.93 | 2.74 | 1.66 | 1926 | 2.58 | 4.54 | 1.64 |
| 1913 | 1.95 | 2.82 | 1.68 |      |      |      |      |



浙江大学  
Zhejiang University

**Thanks for Your Attention!**

