第4章 最小二乘法
Least Squares

苏 芮
srhello@zju.edu.cn
开物苑4-202

问题来源-最小二乘法

未知量 未知量

插值

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b2 \end{cases}$$

最小二乘法

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 = b3 \end{cases}$$

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,...m），

用 n 个基函数的线性组合来近似 y(t)(注意 m>n)

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

这样我们得到了一个 mxn 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：

$$y = X\beta \quad \Rightarrow \quad X\beta = y$$

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：

$$\phi_j(t) = t^{n-j},\ \ j = 1, \ldots, n,$$

$$y(t) \approx \beta_1 t^{n-1} + \cdots + \beta_{n-1} t + \beta_n.$$

指数模型：

$$\phi_j(t) = e^{-\lambda_j t},$$

$$y(t) \approx \beta_1 e^{-\lambda_1 t} + \cdots + \beta_n e^{-\lambda_n t}.$$

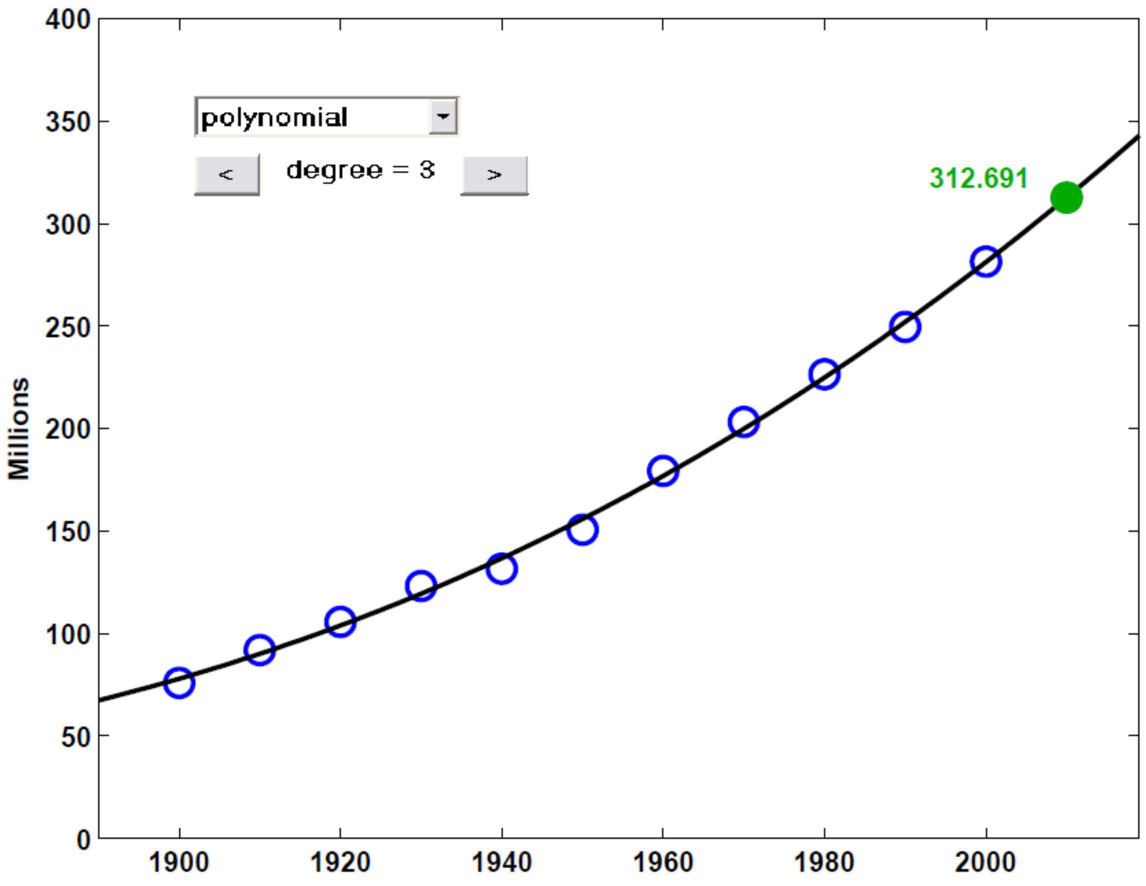
高斯模型：

$$\phi_j(t) = e^{-\left(\frac{t-\mu_j}{\sigma_j}\right)^2},$$

$$y(t) \approx \beta_1 e^{-\left(\frac{t-\mu_1}{\sigma_1}\right)^2} + \cdots + \beta_n e^{-\left(\frac{t-\mu_n}{\sigma_n}\right)^2}.$$

模型和曲线拟合

美国人口预测

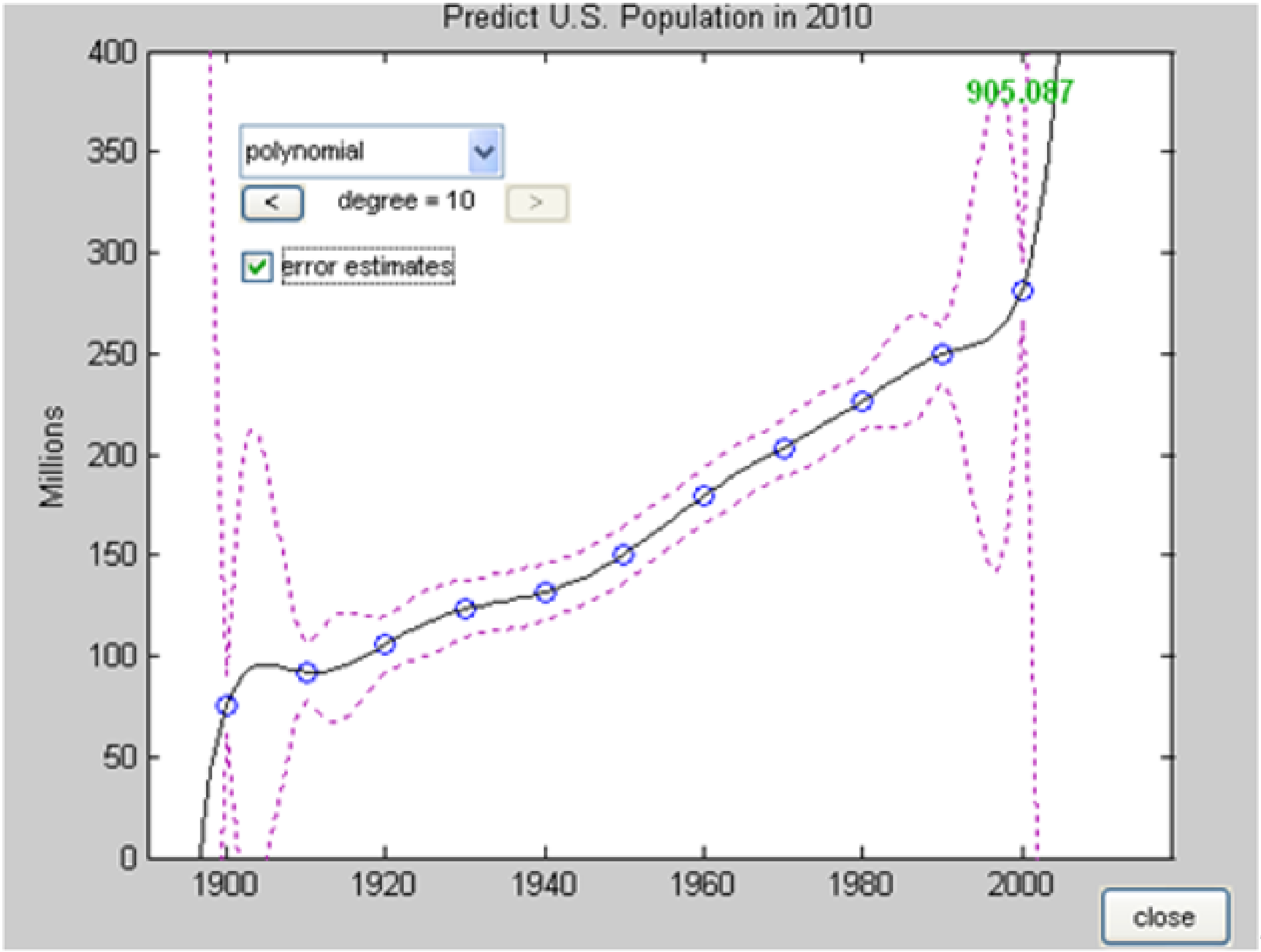



```
%% Example 1 Population prediction for year 2010
p = [ 75.995  91.972 105.711 123.203 131.669 150.697 ...
      179.323 203.212 226.505 249.633 281.422]’;
t = (1900:10:2000)’;
x = (1890:1:2019)’;
w = 2010;
d = 2;
c = polyfit((t-1950)/50,p,d); %% compute coefficients
y = polyval(c,(x-1950)/50); %% compute predicitions
z = polyval(c,(w-1950)/50);
figure(1)
h = plot(t,p,’.’,x,y,’-’,w,z,’.’);
axis([1870 2039 0 1000])
```

最小二乘法拟合和插值的区别?

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。

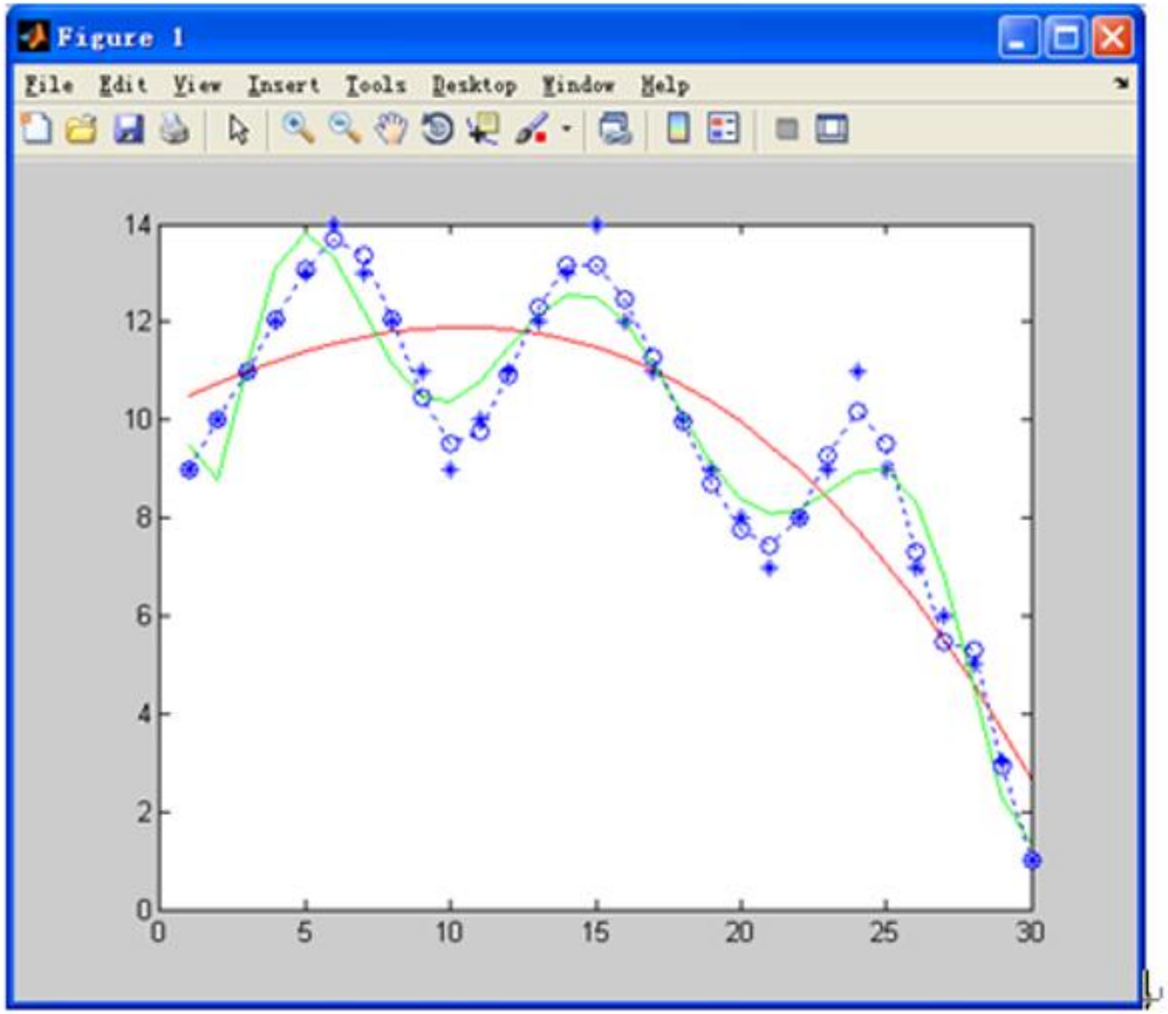


模型和曲线拟合

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：

$$r_i = y_i - \sum_{1}^{n} \beta_j \phi_j(t_i, a), i = 1, \ldots, m$$

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，$\|r\|^2 = \sum_{1}^{m} r_i^2$

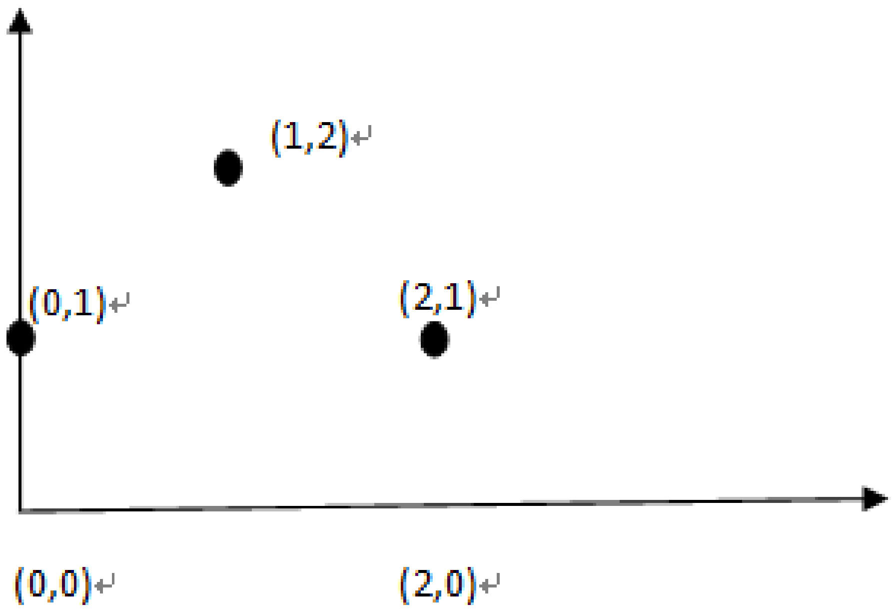
常用的衡量指标

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



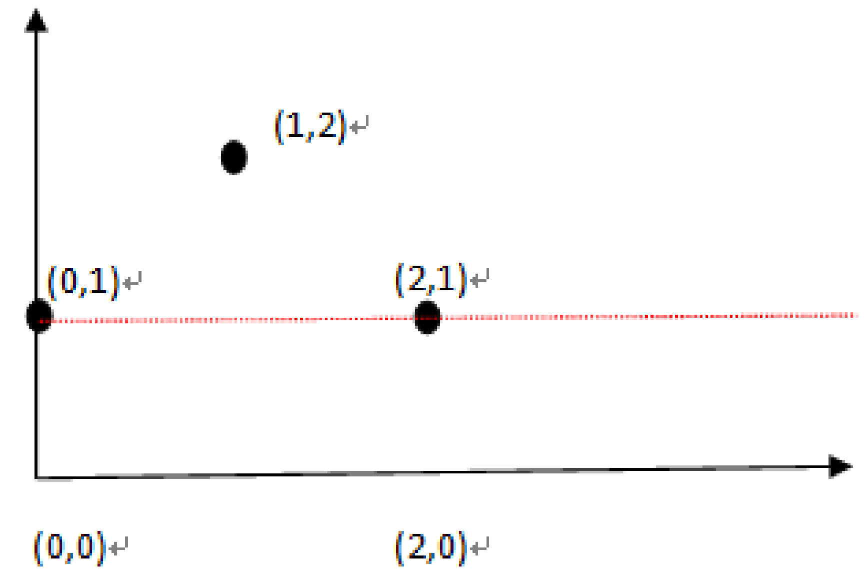
范数-残差（residuals）

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 $1\le A\le 2$

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

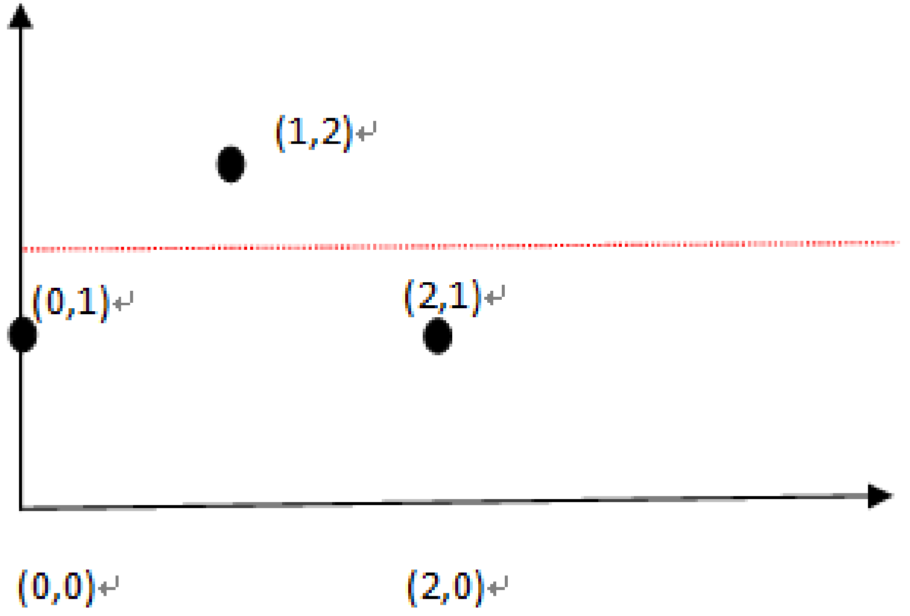
A 肯定最小最好，即为 y=1 这个直线



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

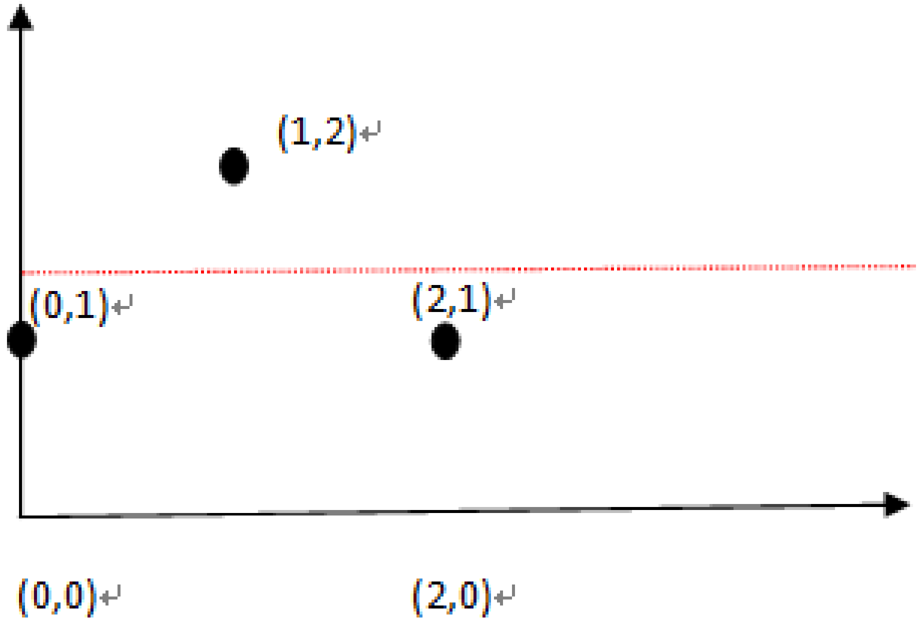


范数-残差（residuals）

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

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。

上节课知识回顾

1.插值

- 全阶多项式插值（牛顿插值法-优点是什么？如何构建差商表？如何用差商表征插值误差？）
- 分段插值法（基本思路？分段保形插值和分段样条插值的设计思路？关键区别是什么？）

2.最小二乘法

- 和插值的区别是什么？ （约束>未知量？约束=未知量？约束<未知量?)
- 如何评价模型预测的准确性？ （残差向量，范数，1范数、2范数、∞范数，哪个好？）
- 如何求解最小二乘法?

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:

$$y = Ax + B$$

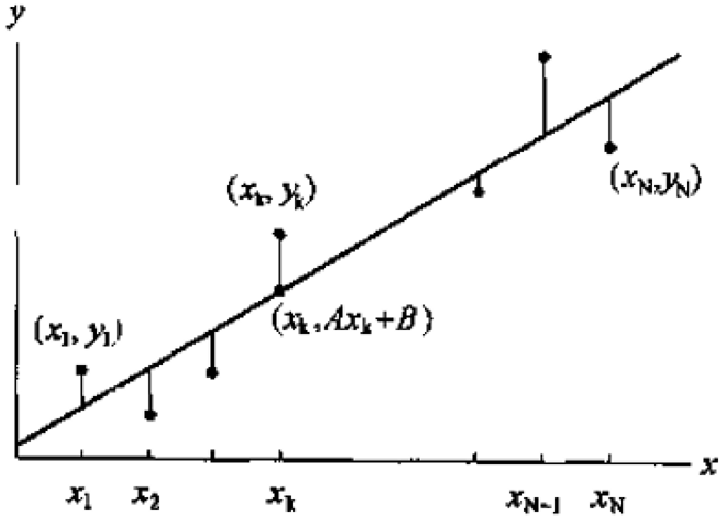
的系数是下列线性方程组的解,称为正规方程:

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

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

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

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 2Ω 的电阻，用伏特表测量电阻两端的电压 V，得到如下数据：

i/A	1	2	4	6	8	10
V/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).

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

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 $(i_k, V_k)(k=1,2,\cdots,6)$ 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

$$m=6,\quad \sum_{k=1}^{6} i_k=31,$$

$$\sum_{k=1}^{6} i_k^2=221,$$

$$\sum_{k=1}^{6} V_k=61.7,$$

$$\sum_{k=1}^{6} i_k V_k=442.4,$$

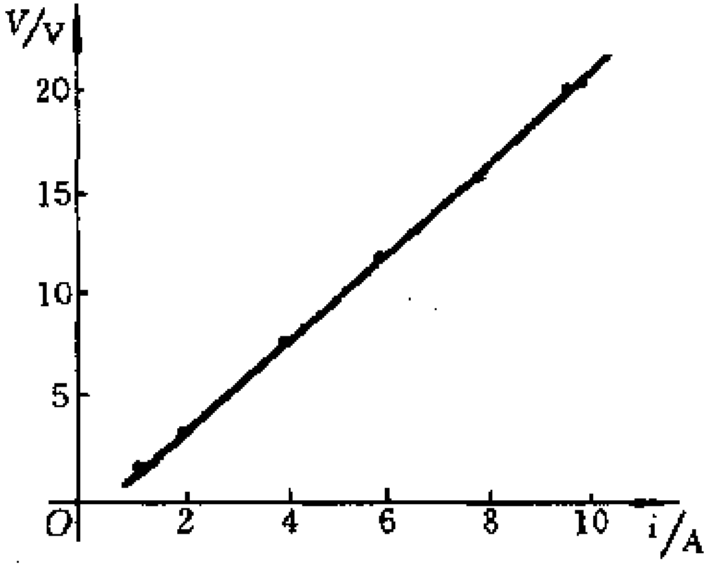


图 4－10

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

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

最小二乘直线拟合

故由(4.61)知,法方程组为

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

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**)

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

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**),$\max\limits_k|\delta_k| = 0.287$(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
δ_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 $(x_1, y_1), \cdots, (x_N, y_N)$ 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;
```

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

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

最小二乘算法的一般形式

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

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

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

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

最小二乘算法的一般形式

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

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

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

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

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

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

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

$$\varphi(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n \tag{4.60}$$

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

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

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

综上分析，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

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:

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

使用最小二乘技术,需要求函数 $E(A)$ 的最小值:

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

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:

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

$y=Ax^M$

上式可化简为式(16)。

最小二乘指数拟合

$$y=Ax^M$$

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

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

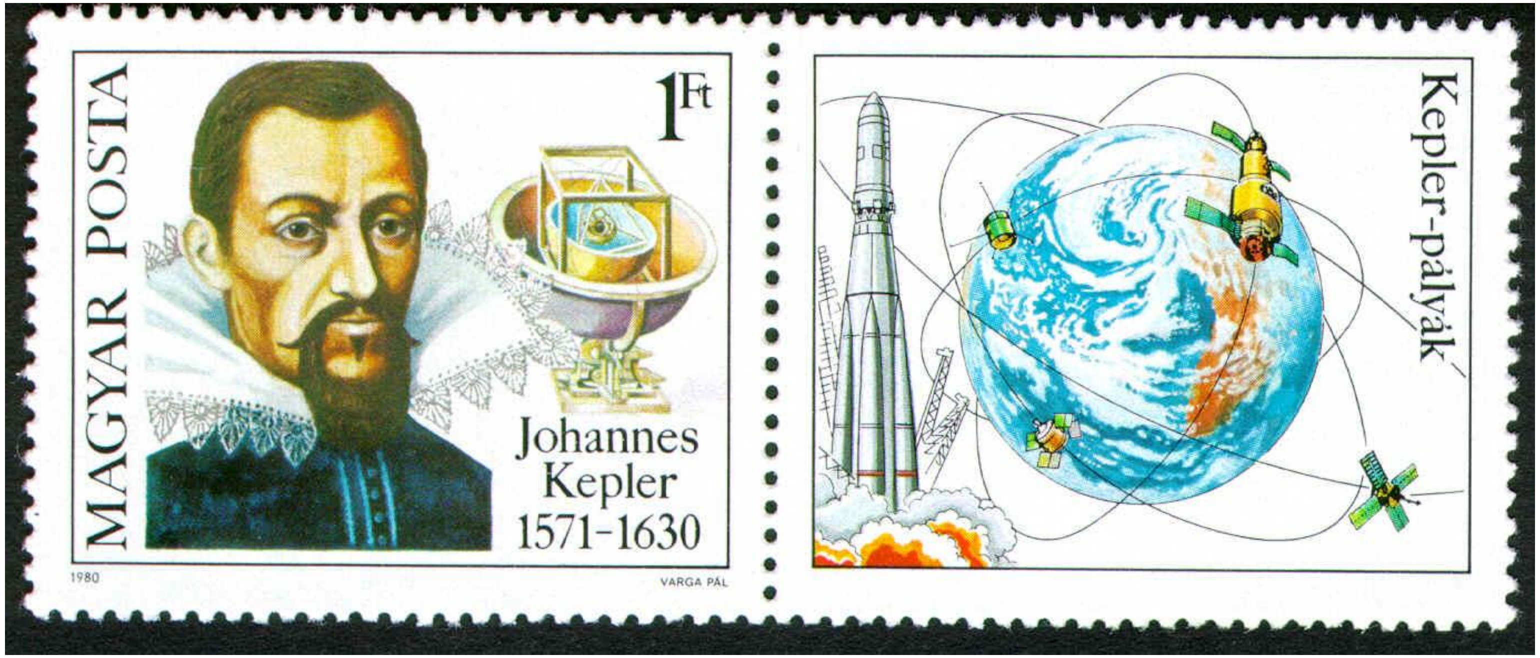
时间，t_k	距离，d_k	$d_k t_k^2$	t_k^4
0.200 0	0.196 0	0.0078 4	0.001 6
0.400 0	0.785 0	0.1256 0	0.023 6
0.600 0	1.766 5	0.6359 4	0.129 6
0.800 0	3.140 5	2.0099 2	0.409 6
1.000 0	4.907 5	4.9075 0	1.000 0
		7.6868 0	1.566 4

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 $g=2A=9.7146\mathrm{m/s^2}$。

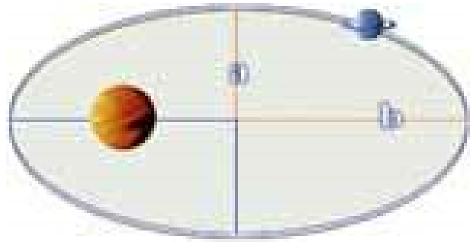
最小二乘指数拟合



•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



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

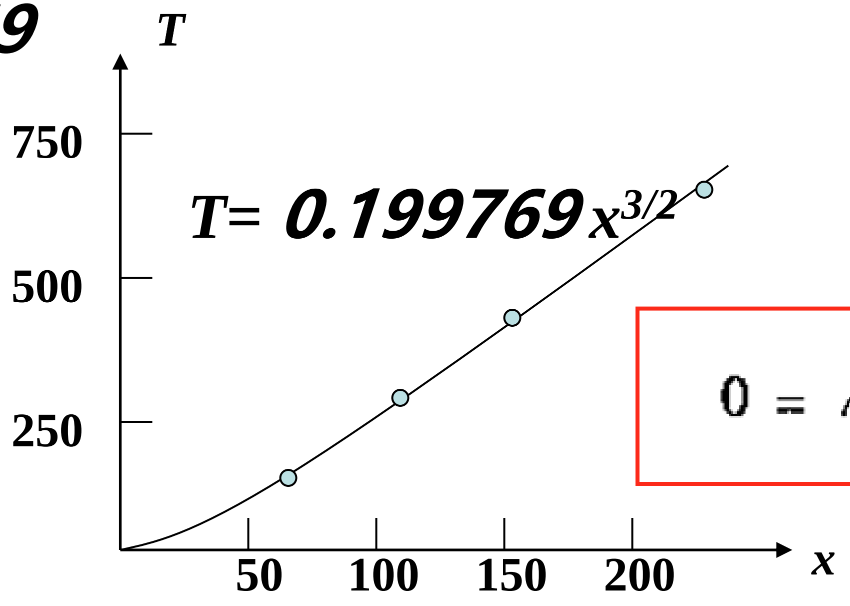
x是行星离太阳的距离（MKm），T是行星绕太阳一周所需的时间（Days), C是常数。

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，T）	（58，88）	（108，225）	（150，365）	（228，687）

通过最小二乘法获得常数

C=0.199769



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

人口模型与交互界面

输入：

censusgui

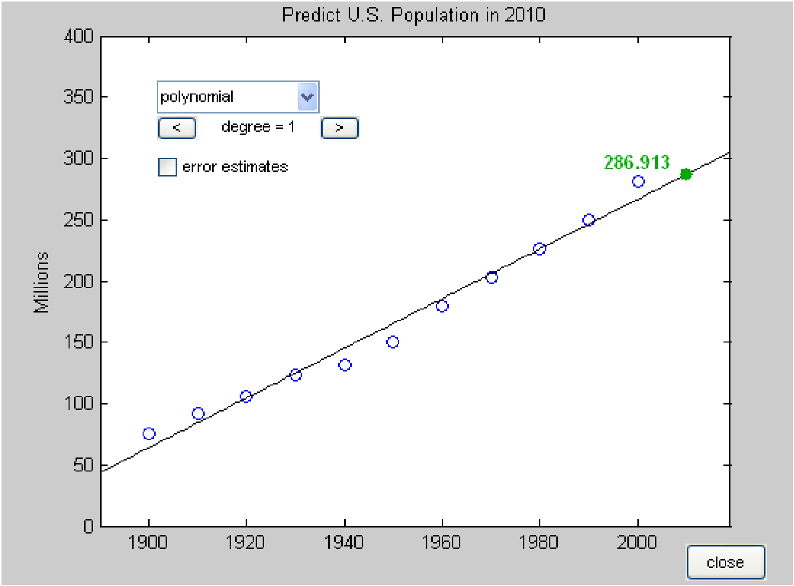
这个美国的人口普查的数据。

几个常见的模型是：

1.如果模型是关于参数 **t** 的线性函数，就是一条直线：

t	y
1900	75.995
1910	91.972
1900	105.711
1930	123.203
1940	131.669
1950	150.697
1960	179.323
1970	203.212
1980	226.505
1990	249.633
2000	281.422

$$y(t) = \beta_1 t + \beta_2$$



（美国人口变化的模拟，这个是线性模拟. **NCM** 程序中的 **censusgui** 程序中）

注意：取的低次的时候就可能不通过这些点，当取高次的时候就可能都通过这些点，

问题：拟合和插值的区别是什么？

人口模型与交互界面

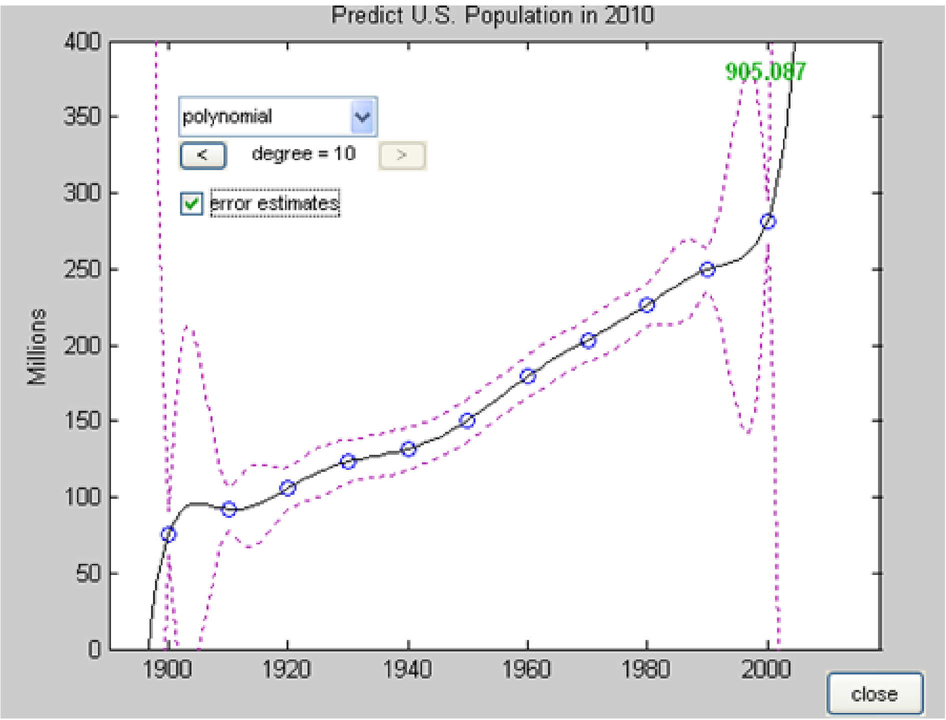
t	y
1900	75.995
1910	91.972
1900	105.711
1930	123.203
1940	131.669
1950	150.697
1960	179.323
1970	203.212
1980	226.505
1990	249.633
2000	281.422

2.如果假设的模型是关于参数 **t** 的多项式：

$$y(t) = \beta_1 t^{n\text{-}1} + \cdots + \beta_{n\text{-}1} t + \beta_n$$

假设是**10**次多项式

假设是**n-1**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。



温度预测

乌鲁木齐最近1个月早晨7:00左右(北京时间)的天气预报所得到的温度数据表，按照数据找出任意次曲线拟合方程和它的图像。(2008年10月26~11月26)

天数 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

温度 9 10 11 12 13 14 13 12 11 9

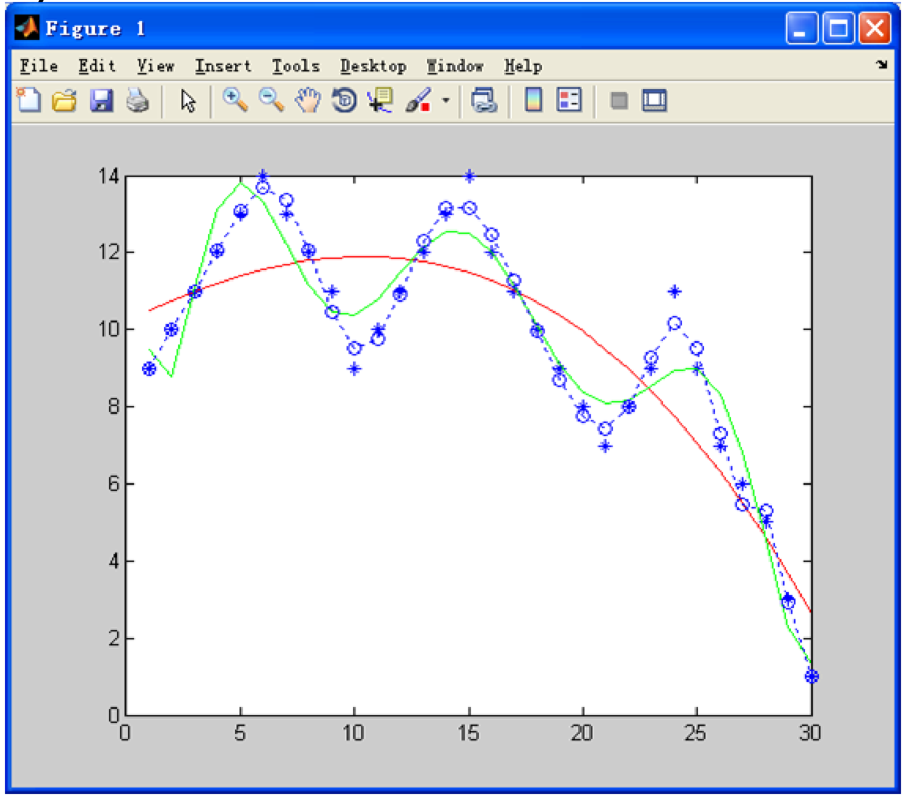
天数 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20

温度 10 11 12 13 14 12 11 10 9 8

天数 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30

温度 7 8 9 11 9 7 6 5 3 1

```
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%
```



可见，对于某些复杂曲线，明显不是线性的曲线，取高次一点是有效的。

非线性最小二乘指数拟合

$y=Ce^{Ax}$

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

$$y = Ce^{Ax} \tag{1}$$

第一步是对式(1)两边取对数:

$$\ln(y) = Ax + \ln(C) \tag{2}$$

然后引入变量变换:

$$Y = \ln(y), X = x, B = \ln(C) \tag{3}$$

变量变换形成线性关系式:

$$Y = AX + B \tag{4}$$

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:

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

求出 A 和 B 后,式(1)中的参数 C 可用下式计算:

$$C = e^B \tag{6}$$

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:

$$\{(X_k,Y_k)\}=\{(0,\ln(1.5)),(1,\ln(2.5)),(2,\ln(3.5)),(3,\ln(5.0)),(4,\ln(7.5))\} \quad (7)$$

$$=\{(0,0.40547),(1,0.91629),(2,1.25276),(3,1.60944),(4,2.01490)\}$$

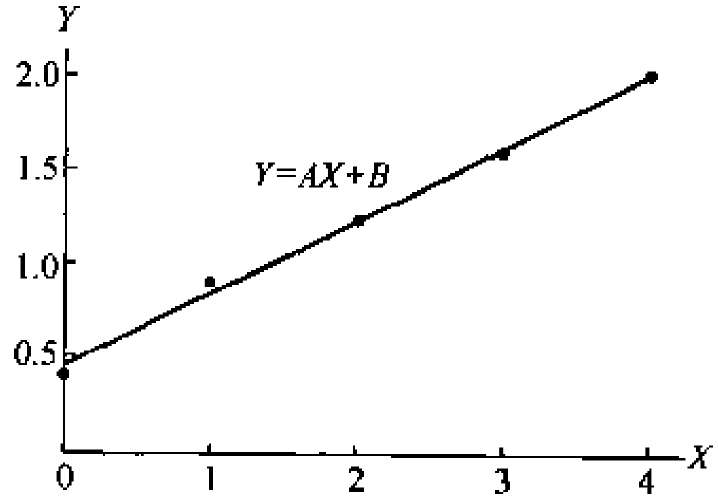


图 5.4 变换后的点集$\{(X_k,Y_k)\}$

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：

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

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：

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

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/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/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$(t_i, y_i)(i=1,2,\cdots,16)$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 $t\to 0$ 时以原点为极限点;

(3)当 $t\to\infty$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

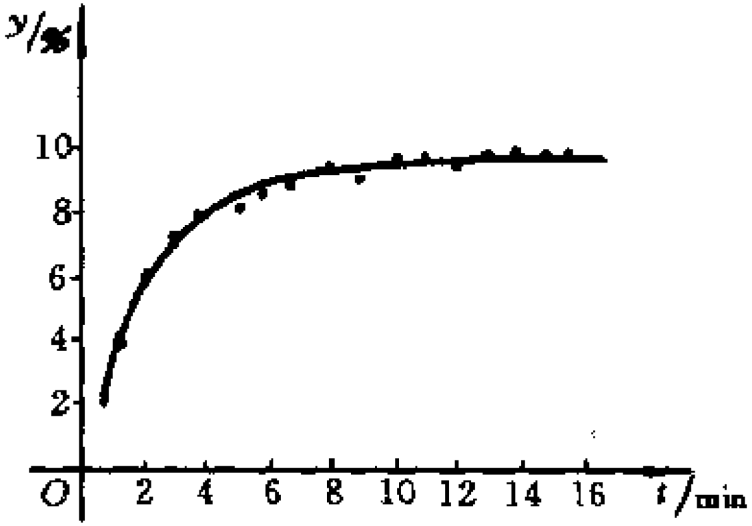


图 4－11

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

$$y=\frac{t}{at+b} \tag{4.62}$$

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

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

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

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

则(4.62)式就是

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

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

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

代入(4.62)，即得经验公式

$$y=\frac{t}{80.6621t+161.6822} \tag{4.64}$$

方案 2：设想 $y=\varphi(t)$具有指数形式

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

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

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

则(4.65)式就是

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

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

i	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

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

从而

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

代入(4.65)，即得另一经验公式

$$y = 0.011325e^{-\frac{1.0567}{t}} \tag{4.67}$$

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	1.19×10^{-3}	0.568×10^{-3}
(4.67)式	0.34×10^{-3}	0.277×10^{-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

$$H_n \cdots H_2 H_1 X = R. \qquad H_n \cdots H_2 H_1 y = z.$$

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

$$R\beta \approx z,$$

QR分解

还是使用缩小样本的人口普查算例来说明上述 QR 解法，我们使用二次多项式拟合其中的 6 个观测点：

$$y(s) \approx \beta_1 s^2 + \beta_2 s + \beta_3$$

s 是时间变量，y 是人口。

s=((1950:10:2000)'-1950)/50

y=[150.6970;179.3230;203.2120;226.5050;249.6330;281.4220]

```
s =

         0
    0.2000
    0.4000
    0.6000
    0.8000
    1.0000
```

为了对应于 s 的平方项，一次方项，零次方项，构造下面数组：

X=[s.*s s ones(size(s))]

```
X =

         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
```

QR分解

M-文件 qrsteps 可以显示 QR 分解的各个步骤，

执行：

```
qrsteps(X,y)
```

第一步，是 X 第一列对角元下的全部元素为 0

-1.2516	-1.4382	-1.7578
0	0.1540	0.9119
0	0.2161	0.6474
0	0.1863	0.2067
0	0.0646	-0.4102
0	-0.1491	-1.2035

同样的 Householder 反射于 y 得到：

-449.3721

160.1447

126.4988

53.9004

-57.2197

-198.0353

第二步，使 X 第二列的对角元下方元素变为 0

-1.2516	-1.4382	-1.7578
0	-0.3627	-1.3010
0	0	-0.2781
0	0	-0.5911
0	0	-0.6867
0	0	-0.5649

同样的 Householder 反射于 y 得到：

-449.3721

-242.3136

-41.8356

-91.2045

-107.4973

-81.8878

QR分解

最后，第三列对角元下方的元素被零化，该反射也作用于 y，于是生成了三角矩阵 R 和变换后的右端量 z

R=

-1.2516	-1.4382	-1.7578
0	-0.3627	-1.3010
0	0	1.1034
0	0	0
0	0	0
0	0	0

z =

-449.3721

-242.3136

168.2334

-1.3202

-3.0801

4.0048

$R\beta = z$ 与原方程规模相同，R 仍然是 6x3 矩阵，我们可以对前三个方程式精确求解，因为 R(1:3,1:3)是非奇异矩阵。

```
beta=[-1.2516, -1.4382, -1.7578; 0, -0.3627, -1.3010; 0, 0, 1.1034]\[-449.3721;-242.3136;168.2334]

beta =
    5.6571
  121.1814
  152.4682
```

该结果 beta 和直接采用如下左除算符所得到的结果相同：

```
beta=R\z
```

或

```
beta=X\y
```

不管 β 如何选择，$R\beta = z$ 方程组的最后三个方程式都无法满足，所以，Z 向量中的最后三个分量就代表残差，事实上，以下两个量：

```
norm([-1.3202;-3.0801;4.0048])
ans =
    5.2219

norm(X*beta-y)
ans =
    5.2219
```

都是相等的。

另外，注意一点的是，虽然我们使用了QR分解，但是我们并没有真正的计算过Q阵。

所以，形象一点来说，QR分解就是将矩阵的有效质量向右上方迁移，左下方尽可能变到零，这样，减少了方程的个数，最后形成的有效方程就是右上方的方程了。

另外，值得提醒的一点是QR分解和高斯消元法类似，第一步中，保持第一列中第一行元素不为0，第一列的其他行元素均为0，第一行的所有元素在后面的操作均保持不变；然后进入第二步，保持二列中第二行的元素不为0，第二列以下的其他行的元素均为0，这个时候，不对第一行进行任何操作；后面的操作均如此。和高斯消元法比较类似。

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 = polyfit(xdata,ydata,n)

其中 n 表示多项式的最高阶数,xdata,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 = polyval (a, x)

Use the new lsqcurvefit.m function

一般的曲线拟合: p = curvefit('Fun',p0,xdata,ydata)

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

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

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)，$i = 1, 2, \cdots, n$，要确定四个未知参数 a, b, c, d。

使用 curvefit 命令，数据输入 xdata = $[x_1, x_2, \cdots, x_n]$; ydata = $[y_1, y_2, \cdots, y_n]$；初值输入 p0 = $[a_0, b_0, c_0, d_0]$；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.

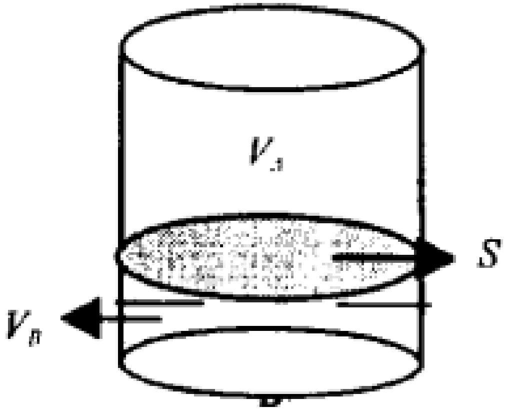
2. 符号说明

1）$C_A(t)$、$C_B(t)$表示 t 时刻膜两侧溶液的浓度；

2）α_A、α_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 $V_AC_A(t+\Delta t)-V_AC_A(t)$,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

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

两边除以 Δt,令 $\Delta t\to 0$ 并整理得

$$\frac{\mathrm{d}C_A}{\mathrm{d}t}=\frac{SK}{V_A}(C_B-C_A). \tag{5.1}$$

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 α_A,α_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

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

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)
```

Use the new lsqcurvefit.m function

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).

第四章 课后作业

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

第四章 课后作业

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

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

第四章 课后作业

式中 α，β，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 α，β，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				

感谢聆听,欢迎讨论！