题目一：使用最小二乘法求解以下问题（建议使用牛顿法和高斯牛顿法）：

1. 求解非线性方程组

解：分别使用牛顿法与高斯牛顿法求解，终止条件为步长小于，K表示迭代次数，结果如下所示：

表1 非线性方程组求解结果

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 初值  方法 |  |  |
| Newton | K = 11 | K = 12 |
| Guass-Newton | K = 8 | K = 8 |

1. 已知某物理量 与另两个物理量 和 的依赖关系为

其中 ， 和 是待定参数。为确定这三个参数测得 ， 和 的五组数据如下：

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 1.000 | 2.000 | 1.000 | 2.000 | 0.100 |
|  | 1.000 | 1.000 | 2.000 | 2.000 | 0.000 |
|  | 0.126 | 0.219 | 0.076 | 0.126 | 0.186 |

解：分别使用牛顿法与高斯牛顿法求解，终止条件为步长小于，K表示迭代次数，初值为 ，并且利用cftool工具进行拟合，几种方法的拟合结果如表2所示：

表2 参数估计结果

|  |  |
| --- | --- |
| 方法 | 拟合结果 |
| Newton | K = 21 |
| Guass-Newton | K = 3 |
| cftool | (-0.3469, 6.609)  (12.44, 17.88)  (0.1269, 1.433) |

问题：

1. 牛顿法中Hessian矩阵确实难算，其迭代次数明显比高斯牛顿法要多。
2. 查询到cftool也是使用最小二乘法进行曲线拟合，但是在第2题中，待求参数与cftool拟合出的参数差距较大，并且即使Newton法或Guass-Newton法的初值设置为cftool中的最佳参数，结果仍然不变，目前还不清楚原因。

补充：问题(2)已经解决，上述结果不一致的原因是在于我在编写残差函数时为了方便

求解jacobi矩阵和Hessian矩阵，将原函数进行了一些变形，由于残差的要求为：

因此我将上式进行了变形，得到：，则残差向量函数为，但是最终的结果就是表2所示，与cftool中拟合得到的数值有较大差距。实际上，在最小二乘的求解中， 很少能直接等于0，而如果按照变形后的公式进行求解，得到的参数只是使得变形后的残差平方和最小，并不是使得原函数的残差平方和最小，因此不能将原函数进行变形。则将残差函数就用原函数表示，即：

残差向量函数为，利用Guass-Newton法进行求解，结果如下表所示：

表3 利用原函数进行参数估计结果

|  |  |
| --- | --- |
| 方法 | 拟合结果 |
| Guass-Newton | K = 8 |
| cftool | (-0.3469, 6.609)  (12.44, 17.88)  (0.1269, 1.433) |

则由表3可看出，Guass-Newton法得到的参数和利用cftool工具得到的参数基本一致，验证了程序的正确性。