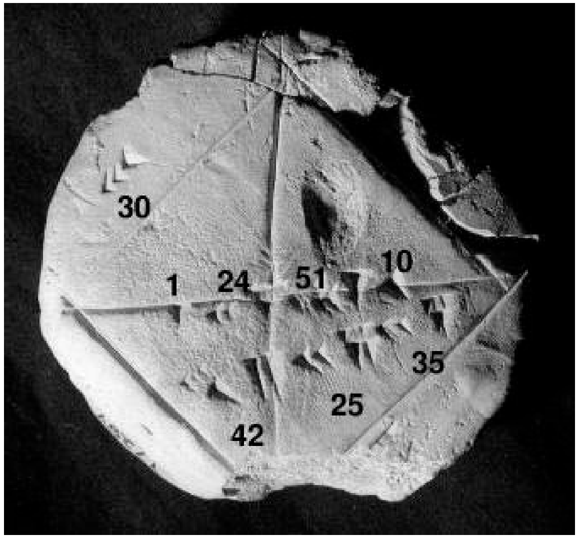
计算方法（A）



童 伟 华　管理科研楼1205室

E-mail: tongwh@ustc.edu.cn

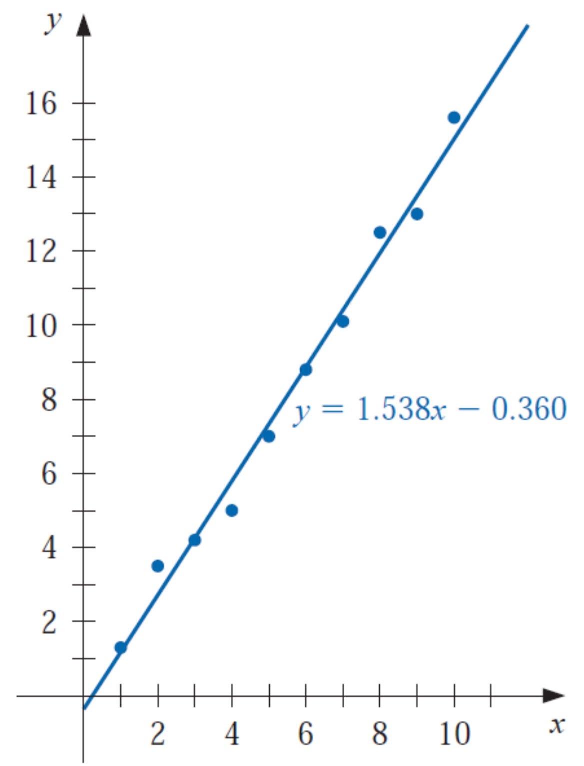
中国科学技术大学　数学科学学院

http://math.ustc.edu.cn/

第二章 最小二乘拟合

拟合函数

- 在实际问题中，**数据不可避免的会有误差**，插值函数会将这些误差也包括在内
- 若误差较大时，用插值方法构造函数的效果不好
- 用逼近的方法构造函数
  - 不要求过所有的点（可以减少误差影响）
  - 尽可能表现数据的趋势，靠近这些点



拟合函数

- 如何刻画数据点和逼近函数之间的靠近程度?
- 给定一组观察或测量得到的一组离散数据序列 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$，选定函数空间 Φ，构造函数 $\varphi(x)\in\Phi$，使得函数 $\varphi(x)$ 最优的靠近离散数据序列 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$，即向量 $Q=\left(\varphi(x_1),\varphi(x_2),\ldots,\varphi(x_m)\right)^T$ 与 $Y=(y_1,y_2,\ldots,y_m)^T$ 的误差或距离最小
- 如何定义向量之间的距离：向量范数

$$R_1=\|Q-Y\|_1=\sum_{i=1}^{m}\left|\varphi(x_i)-y_i\right| \quad \Longrightarrow \quad \text{最小平均逼近}$$

$$R_2=\|Q-Y\|_2=\left(\sum_{i=1}^{m}\left|\varphi(x_i)-y_i\right|^2\right)^{1/2} \quad \Longrightarrow \quad \text{最小平方逼近}$$

$$R_\infty=\|Q-Y\|_\infty=\max_{1\le i\le m}\{|\varphi_i(x)-y_i|\} \quad \Longrightarrow \quad \text{最小一致逼近}$$

拟合函数

- Gauss和Legendre分别发明
- 最小二乘法：$R = R_2^2 = \left(\sum_{i=1}^{m} \left| \varphi(x_i) - y_i \right|^2 \right)$
  - 均方误差
  - 按均方误差达到最小
  - 优点：易于求解
- 最小二乘法是最基本的函数逼近方法，被广泛应用于运筹学、统计学、逼近论等各个领域
- 问题：如何选定函数空间 Φ？
  - 专业知识或工作经验
  - 观察数据

线性拟合和二次拟合函数

- 最小二乘问题：给定数据序列 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$ 和函数空间

$$\Phi = \mathrm{span}\{\varphi_1(x), \varphi_2(x), \ldots, \varphi_n(x)\},$$

求函数 $\varphi(x) \in \Phi$，使得

$$\min_{\varphi\in\Phi} \sum_{i=1}^m \left(\varphi(x_i) - y_i\right)^2$$

其中 $\varphi(x) = a_1\varphi_1(x) + a_2\varphi_2(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x),\ a_i \in \mathbb{R},\ i = 1, 2, \ldots n$

- 若定义

$$Q(a_1, a_2, \ldots, a_n) = \sum_{i=1}^m \left(\varphi(x_i) - y_i\right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(a_1\varphi_1(x_i) + a_2\varphi_2(x_i) + \cdots + a_n\varphi_n(x_i) - y_i\right)^2$$

则最小二乘问题 可写成

$$\min_{a_1, a_2, \ldots, a_n \in \mathbb{R}} Q(a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

线性拟合和二次拟合函数

- 将 $Q(a_1,a_2,\ldots,a_n)=\sum_{i=1}^{m}(a_1\varphi_1(x_i)+a_2\varphi_2(x_i)+\cdots+a_n\varphi_n(x_i)-y_i)^2$ 写成矩阵的表示形式：记

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}\varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \cdots & \varphi_n(x_1)\\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) & \cdots & \varphi_n(x_2)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \varphi_1(x_m) & \varphi_2(x_m) & \cdots & \varphi_n(x_m)\end{pmatrix}_{m\times n},\ \mathbf{x}=\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix}_{n\times 1},\ \mathbf{b}=\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_m\end{pmatrix}_{m\times 1},$$

则有

$$Q(\mathbf{x})=\|\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2=\mathbf{x}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}-2\mathbf{x}^T\mathbf{A}^T\mathbf{b}+\mathbf{b}^T\mathbf{b}$$

- 二次型取最小值的条件

$$\frac{\partial Q(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}=0\Rightarrow 2\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}-2\mathbf{A}^T\mathbf{b}=0\Rightarrow \mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$$

线性拟合和二次拟合函数

- 线性拟合：取函数空间 $\Phi = \mathrm{span}\{1, x\}$，$\varphi(x) = a + bx$，则

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{b} \Rightarrow \begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^{m} x_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i & \sum_{i=1}^{m} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \end{pmatrix}$$

线性拟合和二次拟合函数

- 二次拟合：取函数空间$\Phi = \mathrm{span}\{1, x, x^2\}$，$\varphi(x) = a + bx + cx^2$，则

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T\mathbf{b} \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 y_i \end{pmatrix}$$

线性拟合和二次拟合函数

- 形如 ae^{bx} 曲线拟合：取函数空间 $\Phi = \{ae^{bx} \mid a,b \in \mathbb{R}\}$
  - 非线性空间
  - 线性化：作变换 $z = \ln y$，有

    $$z_i = \ln y_i$$

    $$\ln \varphi(x) = \ln(ae^{bx}) = \ln a + bx = A + Bx$$
  - 利用线性拟合求 A, B
- 类似地，可求形如 $\frac{1}{a+bx}$ 曲线拟合
- 注意：变换后的所得拟合曲线，已经不在是平方误差极小意义下的拟合曲线

解矛盾方程组

- 矛盾方程组：

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}_{m\times n},\ \mathbf{x}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}_{n\times 1},\ \mathbf{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}_{m\times 1}$$

- 当 $m \gg n$ 时，方程组 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ 通常无解，故称为矛盾方程组
- 修改：要求均方误差最小

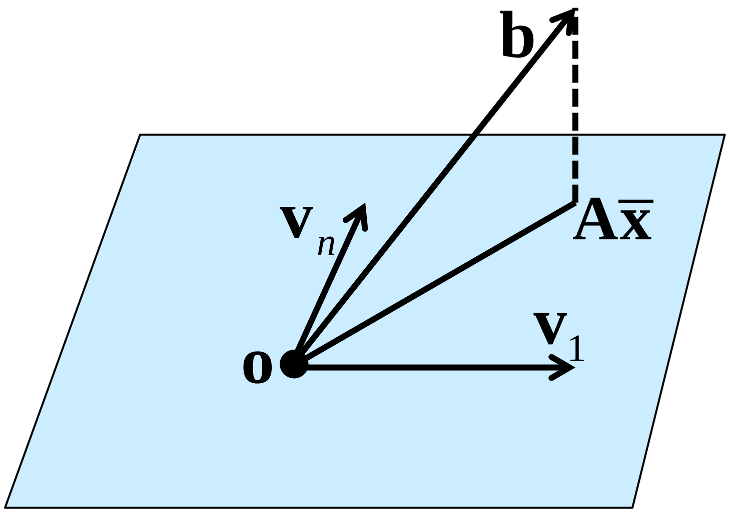
$$\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|_2^2$$

  - 最小二乘意义下的解

解矛盾方程组

- 最小二乘法的几何解释：

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow x_1\mathbf{v}_1 + x_2\mathbf{v}_2 + \cdots + x_n\mathbf{v}_n = \mathbf{b}$$



$$(\mathbf{b} - \mathbf{A}\overline{\mathbf{x}}) \perp \{\mathbf{Ax} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}$$

$$\mathbf{x}^T\mathbf{A}^T(\mathbf{b} - \mathbf{A}\overline{\mathbf{x}}) = 0, \ \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

$$\mathbf{A}^T(\mathbf{b} - \mathbf{A}\overline{\mathbf{x}}) = 0 \Rightarrow \mathbf{A}^T\mathbf{A}\overline{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$$

解矛盾方程组

- 定理：设 A 为 $m\times n$ 阶的矩阵，b为 m 维列向量，则

(1) $\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$ 称为矛盾方程 $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 的法方程，恒有解

(2) $\mathbf{x}$ 是 $\min\limits_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}\|\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2$ 的解 $\Longleftrightarrow$ $\mathbf{x}$ 是法方程 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$ 的解