数值分析实验报告

张钰晖
2015011372, yuhui-zh15@mails.tsinghua.edu.cn, 185-3888-2881

2017 年 6 月 15 日

1 题目描述

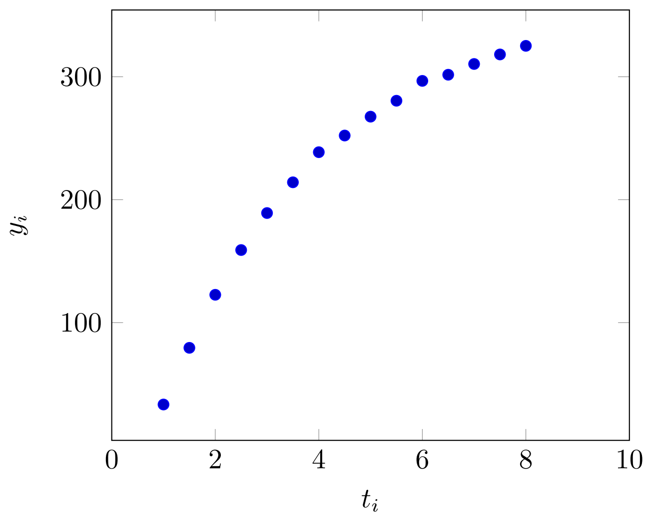
6-3 对物理实验中所得下列数据

t_i	1	1.5	2	2.5	3.0	3.5	4	4.5
y_i	33.40	79.50	122.65	159.05	189.15	214.15	238.65	252.2
t_i	5	5.5	6	6.5	7	7.5	8	
y_i	267.55	280.50	296.65	301.65	310.40	318.15	325.15	

(1) 用公式 $y = a + bt + ct^2$ 做直线拟合.

(2) 用指数函数 $y = ae^{bt}$ 做曲线拟合.

(3) 比较上述两条拟合曲线，哪条更好？



2 解题思路

实验给定函数的形式，通过已知测量点去拟合这条已知的函数曲线。求解这一类问题的算法我们称之为最小二乘法。

对于方程 Ax=b，其中 A 是一个 n×m 的矩阵。由于矩阵 A 不是方阵，所以方程可能没有解、可能有唯一解或可能有无穷多解。最小二乘法要求，求解 $\hat{x}$，使得 $||b - A\hat{x}||^2$ 取到最小值。形象的说，即找到一条曲线，使得系数矩阵 A 的点与 b 上的点的平方和最小。

求解最小二乘法的方法是，在 Ax = b 左右两边同乘 A^T ，我们得到 $A^TAx = A^Tb$，这个方程称为法方程。再对这个线性方程组的 x 进行求解，得到的就是最小二乘解。

第一个曲线拟合公式本身为线性方程，故可以直接构成最小二乘法，求解 a,b,c 的最小二乘解即可。而对于第二个指数曲线，我们在等式两边求对数，得到 $ln(y) = lna + bt$，得到可拟合的线性方程组。

求解最小二乘解方程中，系数矩阵 A^TA 是实对称正定矩阵，故我们可以使用之前使用过的 Cholesky 分解对之进行求解，进而得到我们想要的结果。

3 实验结果

算法运行的结果如下：

(1) RESULT: $y = -45.2942 + 94.1943t + -6.1268t^2$
MEAN SQUARE: 5.8834

(2) RESULT: $y = 67.3938e^{0.2390t}$

MEAN SQUARE: 58.4973

(3) 从均方误差上看，指数函数构成的曲线的平均误差远大于二次函数构成的曲线的平均误差。在不考虑其他条件，即认为我们的测量数据完全准确的情况下，二次函数构成的曲线的拟合效果较好。但是由于数据大致呈凹函数形状，二次函数可以为凹函数，但指数函数必定为凸函数，不符合数据增长规律，故拟合效果较差。

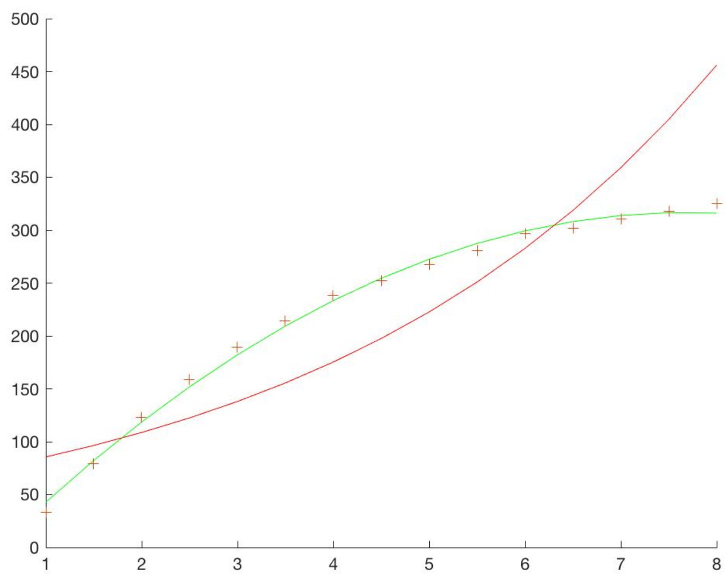


图 1: 实验拟合结果

4 实验心得

通过这次实验，我更加深入理解了最小二乘法相关的知识点，并使用了之前封装好的 Cholesky 分解算法和求解算法。在实现最小二乘法后，我深深的体会到了矩阵运算与方程求解在拟合曲线方面的重要作用。

同时，我还明白了，曲线拟合的结果好坏与否与我们拟合函数类的选取非常重要，以本题为例，由于数据大致呈凹函数形状，二次函数可以为凹函数，但指数函数必定为凸函数，不符合数据增长规律，故拟合效果较差。

5 源代码

```
% 对矩阵A进行Cholesky分解，输入矩阵A，输出分解后的矩阵A
function [A] = cholesky(A)
n = size(A, 1);
% 将A提取为下三角矩阵
A = tril(A);
% 执行算法过程
for j = 1: n
   for k = 1: j - 1
      A(j, j) = A(j, j) - A(j, k) ^ 2;
   end
   A(j, j) = sqrt(A(j, j));
   for i = j + 1: n
      for k = 1: j - 1
         A(i, j) = A(i, j) - A(i, k) * A(j, k);
      end
      A(i, j) = A(i, j) / A(j, j);
   end
end
```

```
% 对Cholesky分解后的矩阵L解线性方程组，输入矩阵L，b，输出求解结果x
function [x] = solve_cholesky(L, b)
n = size(L, 1);
y = zeros(n, 1);
% 回代法解线性方程组
for i = 1: n
   y(i) = b(i);
   for j = 1: i - 1
      y(i) = y(i) - L(i, j) * y(j);
   end
   y(i) = y(i) / L(i, i);
end
x = zeros(n, 1);
for i = n: -1: 1
   x(i) = y(i);
   for j = n: -1: i + 1
      x(i) = x(i) - L(j, i) * x(j);
   end
   x(i) = x(i) / L(i, i);
end
```

```
% 最小二乘法拟合曲线，输入向量t、f，拟合函数phi，输出拟合结果x和拟合矩阵A
function [x, A] = least_square(t, f, phi)
m = length(t);
n = length(phi);
A = zeros(m, n);
```

```
for i = 1: m
   for j = 1: n
      A(i, j) = phi{j}(t(i));
   end
end
G = A' * A;
b = A' * f;
L = cholesky(G);
x = solve_cholesky(L, b);
```

```
% 数据集
t = (1: 0.5: 8)';
y =
    [33.40;79.50;122.65;159.05;189.15;214.15;238.65;252.20;267.55;280.50;296.65;301.65;310.40;318.15;325.15];

hold on

% 最小二乘法拟合函数，画图
phi = {@(z) 1; @(z) z; @(z) z^2};
[x, A] = least_square(t, y, phi);
fprintf('RESULT: y=%.4f+%.4ft+%.4ft^2\nMEAN SQUARE: %.4f\n', x(1), x(2), x(3), std(y - A * x));
plot(t, A * x, 'g')

% 最小二乘法拟合函数，画图
phi = {@(z) 1; @(z) z};
[x, A] = least_square(t, log(y), phi);
fprintf('RESULT: y=%.4fe^%.4ft\nMEAN SQUARE: %.4f\n', exp(x(1)), x(2), std(y - exp(A * x)));
plot(t, exp(A * x), 'r');

plot(t, y, '+');
hold off
```

参考文献

[1] 数值分析与算法（第二版），喻文健, 2015.