第 3 章模型拟合

韩建伟

信息学院
hanjianwei@zjgsu.edu.cn

2019/10/16

分析数据集合的三个任务

刹车问题: $d_b = C_1 v^2$, $d_b = C_2 v$, 如何选择?

任务 1 按照一个或一些选出的模型类型对数据进行拟合.

- 必须明确最佳模型的含义，以及由此产生的需解决的数学问题.

任务 2 从一些已经拟合的类型中选取最合适的模型.

- 为了比较不同类型的模型需要有一个判定准则.

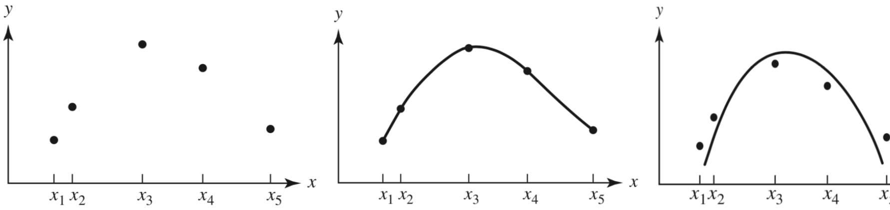
任务 3 根据收集的数据做出预报: 内插（第 4 章）.

- 为了决定如何在观测的数据点间做出预测，也要明确一个判定准则.

模型的拟合和内插之间的关系

拟合 接受模型和数据之间的某些偏差，以便有一个满意地解释所研究问题的模型. 强调为数据提供模型.

内插 受数据的强力引导，曲线应该追踪数据的趋向，在数据点间做出预测. 对收集的数据给予了更大的信任，而较少注意模型的形式意义.



(a) 数据　(b) 插值　(c) 拟合

建模过程中的误差来源

公式化的误差 可源于一些变量可忽略的假设条件，或在各种子模型中描述变量之间关系的过分简化.

截断误差 归因于一个数学问题所用的数值方法.

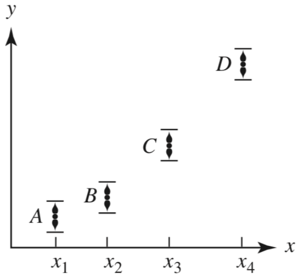
舍入误差 计算时使用有限小数位的机器引起的.

测量误差 由数据收集过程中的不精确性引起的.

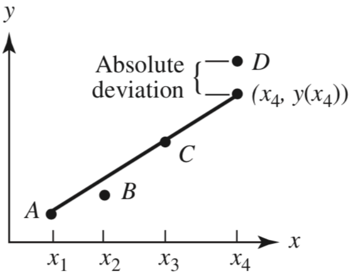
用图形为数据拟合模型

如何确定模型的参数？ 收集数据！

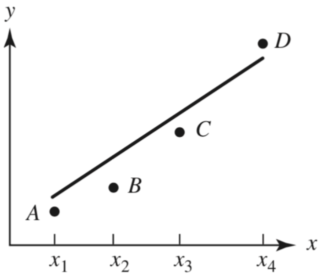
- 采集多少个数据点？ 观察它们的费用和模型所要求的精度间进行平衡.
- 数据点的跨度. 自适应的数据采集密度.
- 将数据点看做是一个置信区间而不是一个单独的点.



对原始数据拟合视觉观测的模型



(a) 极小化绝对偏差和



(b) 极小化最大绝对偏差

视觉方法虽然不精确，但往往与建模过程的精度相称．不要过分信任数值计算，视觉也是很重要的方法!

变换数据

x	1	2	3	4
y	8.1	22.1	60.1	165

表: 收集的数据

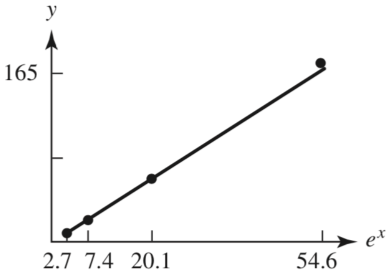


图: $y \propto e^x$

变换后的数据

x	1	2	3	4
ln y	2.1	3.1	4.1	5.1

表: 变换后的数据: $y = Ce^x \Rightarrow \ln y = \ln C + x$

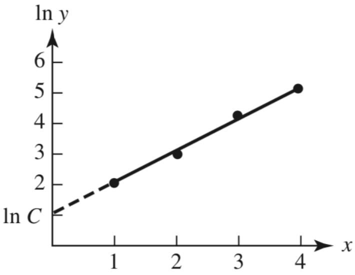
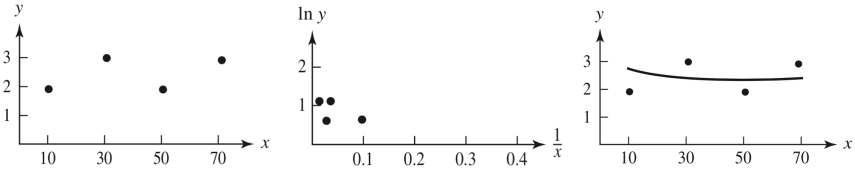


图: $\ln y \propto x$

数据变换

- 变换过程中，距离发生了变换
- 选择一个好的变换非常重要
- $y = Ce^{\frac{1}{x}} \Rightarrow \ln y = \frac{1}{x} + \ln C$



(a) 收集的数据　(b) 变换后的数据点　(c) 拟合结果

模型拟合的解析方法

- 切比雪夫近似准则
- 极小化绝对偏差之和
- 最小二乘准则

切比雪夫近似准则

定义

给定某种函数类型 $y = f(x)$ 和 m 个数据点 (x_i, y_i) 的一个集合，对整个集合极小化最大绝对偏差 $|y_i - f(x_i)|$，即确定函数类型 $y = f(x)$ 的参数从而极小化：

$$Maximum|y_i - f(x_i)|, i = 1, 2, .., m$$

- 实际应用中通常很复杂.
- 应用这一准则所产生的最优化问题可能需要高级的数学方法，或者要用计算机数值方法.

极小化绝对偏差之和

定义

给定某种函数类型 $y = f(x)$ 和 m 个数据点 (x_i, y_i) 的一个集合，极小化绝对偏差 $|y_i - f(x_i)|$ 之和，即确定函数类型 $y = f(x)$ 的参数从而极小化：

$$\sum_{i=1}^{m} |y_i - f(x_i)|$$

- 由于出现了绝对值，这个和式的微分是不连续的.

最小二乘准则

定义

给定某种函数类型 $y = f(x)$ 和 m 个数据点 (x_i, y_i) 的一个集合，极小化绝对偏差 $|y_i - f(x_i)|$ 之平方和，即确定函数类型 $y = f(x)$ 的参数从而极小化：

$$\sum_{i=1}^{m} |y_i - f(x_i)|^2$$

- 运算简单，应用很广

谈谈准则

极小化绝对偏差之和 赋予每个数据点相等的权值来平均这些偏差

切比雪夫准则 对潜在有大偏差的单个点给于更大的权值

最小二乘准则 根据与中间某处的远近来加权，与单个点的偏离有关

- 切比雪夫近似准则产生的偏差记为 $c_i = |y_i - f_1(x_i)|, i = 1, 2, ..., m$
- 最小二乘准则产生的偏差记为 $d_i = |y_i - f_2(x_i)|, i = 1, 2, ..., m$
- $d_{max} \geq c_{max}$
- $d_1^2 + d_2^2 + ... + d_m^2 \leq c_1^2 + c_2^2 + ... + c_m^2 \leq mc_{max}^2$
- $D = \frac{\sqrt{d_1^2+d_2^2+...+d_m^2}}{m} \leq c_{max} \leq d_{max}$

应用最小二乘准则拟合直线

问题

设预期模型的形式为 $y = Ax + B$, 并决定用 m 个数据点 $(x_i, y_i)(i = 1, 2, ..., m)$ 来估计 A 和 B.

- 用 $y = ax + b$ 记作 $y = Ax + B$ 的最小二乘估计，则要求极小化:

$$S = \sum_{i=1}^{m} [y_i - f(x_i)]^2 = \sum_{i=1}^{m} [y_i - ax_i - b]^2$$

- 最优的必要条件是:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = 0$$

应用最小二乘准则拟合直线

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{m}(y_i - ax_i - b)x_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{m}(y_i - ax_i - b) = 0$$

重写这些方程：

$$a\sum_{i=1}^{m} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i$$

$$a\sum_{i=1}^{m} x_i + mb = \sum_{i=1}^{m} y_i$$

应用最小二乘准则拟合直线

$$a = \frac{m\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{m\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \Rightarrow \text{斜率}$$

$$b = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i y_i \sum x_i}{m\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \Rightarrow \text{截距}$$

- 拟合幂曲线
- 经变换的最小二乘拟合
- 方法与直线拟合类似

选择一个好模型

x	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
y	0.7	3.4	7.2	12.4	20.1

表: 数据

准则	模型	$\sum [y_i - y(x_i)]^2$	$Max\|y_i - y(x_i)\|$
最小二乘	$y = 3.1869x^2$	0.2095	0.3476
变换后最小二乘	$y = 3.1368x^2$	0.3633	0.4950
切比雪夫	$y = 3.17073x^2$	0.2256	0.28293

表: 模型对比

如何评价模型

- 根据偏差进行选择
- 以具体个案为基础，要考虑模型的目的、实际情况要求的精度、数据的准确性以及使用模型时独立变量值的范围
- 视觉方法（从图中观察）
- 数据收集的不够就无法为进一步的模型求精提供保证

试用本章方法分析上一节课的刹车问题.