§2.5 离散数据的曲线拟合

2.5 离散数据的曲线拟合

学习目标:

了解曲线拟合最小二乘法的意义。掌握线性拟合和二次多项式拟合的方法。

2.5　离散数据的曲线拟合

2.5.1 最小二乘拟合

对于已知的**m+1**的离散数据 $\{x_i, y_i\}_{i=0}^{m}$ 和权数 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$，记

$$a = \min_{0\le i\le m} x_i, \quad b = \max_{0\le i\le m} x_i$$

在连续函数空间**C[a,b]**中选定**n+1**个线性无关的基函数$\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{m}$，并记由它们生成的子空间 $\Phi = span\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \cdots \varphi_n(x)\}$。如果存在 $\varphi^*(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k^* \varphi^*(x) \in \Phi$，使得

$$\sum_{i=0}^{n} \omega_i [y_i - \varphi^*(x)]^2 = \min_{\varphi(x)\in\Phi} \sum_{i=0}^{n} \omega_i [y_i - \varphi(x)]^2 \qquad \mathbf{(2.5.1)}$$

则称$\varphi^*(x)$为离散数据$\{x_i, y_i\}_{i=0}^{m}$在子空间Φ中带权 $\{\omega_i\}_{i=0}^{m}$ 的最小二乘拟合。

函数$\varphi(x)$在离散点处的值为

$$\varphi(x_i) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x), i = 0,1,\cdots,m.$$

因此，（2.5.1）右边的和式是参数 $a_0, a_1, \cdots a_n$ 的函数，记作

$$I(a_0, a_1, \cdots a_n) = \sum_{i=0}^{m} \omega_i [y_i - \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x_i)]^2. \qquad （2.5.2）$$

这样，求极小值问题（2.5.1）的解 $\varphi^*(x)$,就是求多元二次函数 $I(a_0, a_1, \cdots a_n)$ 的极小点 $(a_0^*, a_1^*, \cdots a_n^*)$,使得

$$I(a_0^*, a_1^*, \cdots a_n^*) = \min_{a_0, a_1, \cdots a_n \in R} I(a_0, a_1, \cdots a_n).$$

由求多元函数极值的必要条件有

$$\frac{\partial I}{\partial a_j} = -2\sum_{i=0}^{m} \omega_i [y_i - \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x_i)] \varphi_j(x_i) = 0,\ j = 0,1,\cdots,n.$$

按内积的定义，上式可写为

$$\sum_{k=0}^{n} a_k (\varphi_k, \varphi_j) = (y, \varphi_j),\ j = 0,1,\cdots,n. \qquad （2.5.3）$$

这方程称为法方程(或正规方程)。这里，$y(x_i)=y_i, i=0,1,\cdots n$.

由于 $\varphi_0,\varphi_0,\cdots,\varphi_n$, 线性无关，故（2.5.3）的系数矩阵非奇异，方程组（2.5.3）存在唯一的解 $a_k=a_k^*, k=0,1,\cdots,n$从而得

$$\varphi^*(x)=\sum_{k=0}^{n} a_k^*\varphi_k(x)\in\Phi.$$

可以证明，这样得到的 $\varphi^*(x)$, 对于任何 $\varphi(x)\in\Phi$ ，都有

$$\sum_{i=0}^{n}\omega_i[y_i-\varphi^*(x)]^2\le\sum_{i=0}^{n}\omega_i[y_i-\varphi(x)]^2,$$

故$\varphi^*(x)$是所求的最小二乘拟合。记$\delta=y-\varphi^*(x)$，显然，平方误差 $\|\delta\|_2^2$或均方误差$\|\delta\|_2$越小，拟合的效果越好。平方误差有与（2.4.15）相同形式的表达式。

2.5.2 多项式的拟合

前面讨论了子空间 Φ中的最小二乘拟合。这是一种线性拟合模型。在离散说据 $\{x_i, y_i\}_{i=0}^{m}$的最小二乘拟合中，最简单、最常用的数学模型是多项式

$$\varphi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n .$$

即在多项是空间 $\Phi = span\{1, x, \cdots, x^n\}$ 中作曲线拟合，称为多项式拟合。这是一种特定的线性模型，因此可用上面讨论的方法求解。子空间 Φ得基函数为 $\varphi_k(x) = x^k, k = 0,1,\cdots,n$。

例 2.13 用多项式拟合表2-7中的离散数据。

表2-7

i	0	1	2	3	4
x_i	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
y_i	0.10	0.35	0.81	1.09	1.96

解　作数据点的图形如图2-2，从图形看出用二次多项式拟合比较合适。这时n=2，子空间Φ的基函数 $\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x,\varphi_2(x)=x^2$。数据中没有给出权数，不妨都取为1，即 $\omega_i=1, i=0,1,\cdots,4$ 。

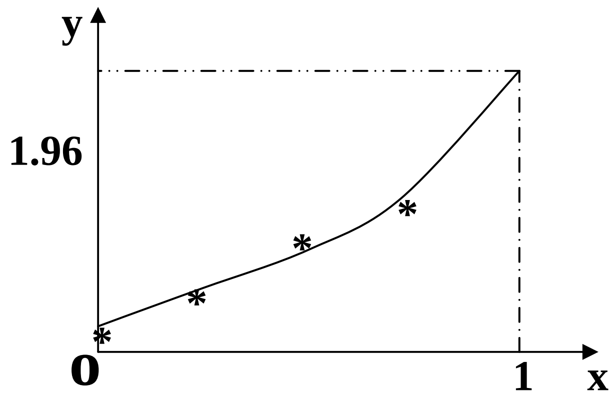


图2-2

按（2.5.3）有

$$\begin{pmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4.31 \\ 3.27 \\ 2.7975 \end{pmatrix}$$

解此方程组得 $a_0^*=0.1214, a_1^*=0.5726, a_2^*=1.2114$。从而，拟合多项式为

$$\varphi^*(x)=0.1214\ x+0.5726\ x+1.2114\ x^2,$$

其平方误差 $\|\delta\|_2^2 = 0.0337$。拟合曲线 $\varphi^*(x)$ 的图形见图2-2。

在许多实际问题中，变量之间的关系不一定能用多项式很好的拟合。如何找到更符合实际情况的数据拟合，一方面要根据专业知识和经验来确定拟合曲线的形式，另一方面要根据数据点的图形性状及特点来选择适当的曲线拟合这些数据。

例 2.14 已知函数y=f(x)的数据如表2-8。试选择适当的数学模型进行拟合。

表2-8

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
x_i	1	2	3	4	6	8	10	12	14	16
y_i	4.00	6.41	8.01	8.79	9.53	9.86	10.33	10.42	10.53	10.61

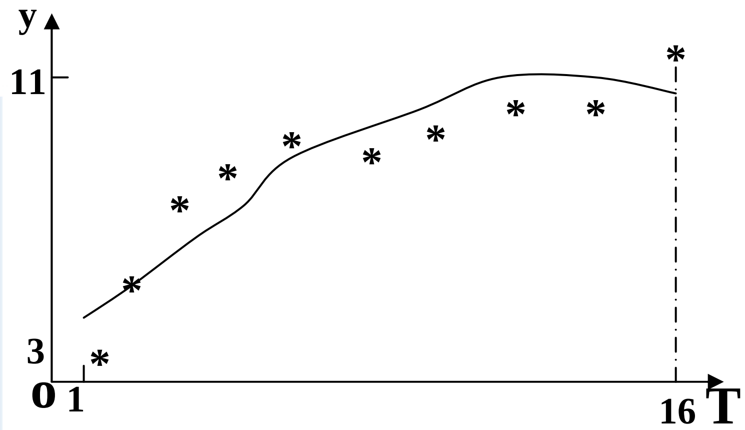
解 (1)观察数据点的图形(见图2-3),选择二次多项式作为拟合模型。取所有权数为1，按（2.5.3）有

$$\begin{pmatrix} 10 & 76 & 826 \\ 76 & 826 & 10396 \\ 826 & 10396 & 140434 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 88.49 \\ 757.59 \\ 8530.01 \end{pmatrix}.$$

解得 $a_0^* = 4.1490$, $a_1^* = 1.1436$, $a_2^* = -0.048320$ ，从而拟合函数为

$$\varphi^*(x) = 4.1490 + 1.1436x - 0.048320x^2$$

平方差 $\|\delta\|_2^2 = 3.9486$, $\varphi^*(x)$ 的图形见图2-3。有平方误差和 $\varphi^*(x)$ 的图形可见，拟合的效果不佳。因此，不宜直接选用多项式作拟合。



(2)从数据的图形看，可以选用指数函数进行拟合。设 $\varphi(x)=\alpha e^{\beta/x}$，其中 $\alpha>0, \beta>0$。这是一个非线性模型， 不能直接用上面讨论的方法求解。对于一般的非线性最小二乘问题.，用常规方法求解的难度较大。这里的非线性模型比较简单，可以把它转化成线性模型，然后用上面讨论的方法求解。

对说函数 $\varphi(x)=\alpha e^{\beta/x}$的两边取之然对数，得 $\ln\varphi(x)=\ln\alpha+\beta/x$ 。若令 $t=1/x, z=\ln\varphi(x), A=\ln\alpha$ ，则有z=A+βt。这是一个线性模型。将本题离散数据作相应的转换，见表2-9。

表2-9

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
t_i	1.0000	0.5000	0.33333	0.2500	0.1667	0.1250	0.1000	0.0833	0.0714	0.0625
z_i	1.3863	1.8575	2.0807	2.1736	2.2544	2.2885	2.3351	2.3437	2.3542	2.3681

对表2-9种的数据，作线性拟合，这时**n=1**，子空间Φ的基函数为$\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$。易得发方程

$$\begin{pmatrix} 10 & 2.6923 \\ 2.6923 & 1.49302 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ \beta \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 21.4362 \\ 4.9586 \end{pmatrix}.$$

解得**A=2.4284, β =-1.0579,**从而$\alpha=e^A=11.3411$。于是，所求的拟合函数为

$$\varphi^*(x)=11.3411\,e^{-1.0579/x},$$

平方误差为$\|\delta\|_2^2=\mathbf{0.1109}$。它比方法（1）的$\|\delta\|_2^2=\mathbf{3.9486}$小得多，拟合效果较好。

2.5.3　正交多项式拟合

一般地，用最小二乘法得到的方程组（2.5.3），其系数矩阵是病态的。实用的曲线拟合办法是采用正交函数作 Φ 的基。

若点集 $\{x_i\}_{i=0}^{m}$ 中至少有n+1个互异，那么可用三项递推公式(2.4.4)和(2.4.5)求出正交多项式序列 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{n}$，它们可以作为子空间 Φ =span $\{1, x, \cdots, x^n\}$ 的一组基。求出多项式序列 $\{\varphi_k(x)\}_{k=0}^{n}$ 后，可以建立拟合模型

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x)$$

此时，对应的法方程为

$$(\varphi_k, \varphi_k) a_k = (y, \varphi_k), k = 0,1,\cdots,n。$$

它的解为 $a_k = (y, \varphi_k)/(\varphi_k, \varphi_k), k = 0,1,\cdots,n$。

由于按法方程(2.5.3)有

$$(y, \varphi_j) = \sum_{k=0}^{n} a_k (\varphi_k, \varphi_j) = (\varphi, \varphi_j)$$

即$\left(y-\varphi,\varphi_j\right)=0,\ j=0,1,\cdots,n$。因而平方误差为

$$\|y-\varphi\|_2^2=(y-\varphi,y-\varphi)=(y-\varphi,y)$$
$$=\|y\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}a_k(\varphi_k,y)$$
$$=\|y\|_2^2-\sum_{k=0}^{n}a_k^2(\varphi_k,\varphi_k)=\|y\|_2^2-\|\varphi\|_2^2。$$

按上述求离散数据$\{x_i,y_i\}_{i=0}^m$的拟合多项式$\varphi(x)$的方法，称为正交多项式拟合。根据惟一性，所得结果与用前面的方法所得的结果相同，但数值计算比前者稳定。

例 2.15　用正交化方法求例2.13中的离散数据的二次多项式拟合。

解　已知离散数据为

$$\{x_i\}_{i=0}^4=\{0,0.25,0.5,0.75,1\},$$
$$\{y_i\}_{i=0}^4=\{0.1,0.35,0.81,1.09,1.96\}.$$

对权数 $\{\omega_i\}_{i=0}^{4}=\{1,1,1,1,1\}$,在例2.10中已求出了点集 $\{x_i\}_{i=0}^{4}$ 上的正交多项式

$$\varphi_0(x)=1,\varphi_1(x)=x-0.5,\varphi_2(x)=(x-0.5)^2-0.125,$$

并且有

$$(\varphi_0,\varphi_0)=5,(\varphi_1,\varphi_1)=0.625,(\varphi_2,\varphi_2)=0.0546875$$

进而有

$$(y,\varphi_0)=4.31,\ (y,\varphi_1)=1.115,\ (y,\varphi_2)=0.06625,$$

$$a_0=0.862,\quad a_1=1.784\quad a_2=1.211428571\text{。}$$

最后得拟合多项式

$$\varphi(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+a_2\varphi_2(x)$$

$$=0.826+1.784(x-0.5)+1.2114[(x-0.5]^2-0.125$$

$$=0.1214+0.5726x+1.2114x^2.$$

所得结果与例2.13相同.