第3章　函数逼近与曲线拟合

§4 曲线拟合的最小二乘法

- 一、最小二乘法的定义
- 二、求解方法
- 三、求解步骤
- 四、举例

帮助　返回

一、最小二乘法的定义

1. “曲线拟合”问题

已知：一组实验数据（x_i，y_i）(i=0,1,…,m)，且观测数据有误差

求：自变量x与因变量y之间的函数关系 y=F(x)，不要求y=F(x)经过所有点，而只要求在给定点上误差

$$\delta_i = F(x_i) - y_i \qquad (i = 0,1,\ldots,m)$$

按*某种标准*最小。

度量标准不同，将导致不同的拟合结果，常用的准则有如下三种：

(1)使残差的最大绝对值为最小

$$\max_i |e_i| = \max_i |y_i - F(x_i)| = \min$$

(2)使残差的绝对值之和为最小

$$\sum_i |e_i| = \min$$

(3)使残差的平方和为最小

$$\sum_i e_i^2 = \min$$

最小二乘法

2. 多项式拟合的一般定义

已知： 一组数据（x_i，y_i）(i=0,1,…,m)，

求： 在函数类 $\varphi = span\{1, x, \ldots, x^n\}$ 中找一个函数 $y = S^*(x)$，使误差平方和最小，即

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} [S^*(x_i) - y_i]^2$$

$$= \min_{S(x)\in\varphi} \sum_{i=0}^{m} [S(x_i) - y_i]^2$$

这里 $S(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n \qquad (n < m)$

3. 一般定义

已知： 一组数据（x_i，y_i）(i=0,1,…,m)，

求： 在函数类 $\varphi = span\{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$中找一个函数 $y = S^*(x)$，使误差平方和最小，即

$$\|\delta\|_2^2 = \sum_{i=0}^{m} \delta_i^2 = \sum_{i=0}^{m} [S^*(x_i) - y_i]^2$$

$$= \min_{S(x)\in\varphi} \sum_{i=0}^{m} [S(x_i) - y_i]^2$$

这里

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \ldots + a_n\varphi_n(x) \qquad (n < m)$$

4. 广义定义

通常把最小二乘法 $\|\delta\|_2^2$ 都考虑为加权平方和

即

$$\|\delta\|_2^2=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[S^*(x_i)-y_i]^2 \qquad \omega(x)\geq 0$$

其中

$$S(x)=a_0\varphi_0(x)+a_1\varphi_1(x)+\ldots+a_n\varphi_n(x) \qquad (n<m)$$

注：权函数在实际问题中有重要作用！

二、求解方法

求$S^*(x)$

求如下多元函数的最小值

$$I(a_0,a_1,\ldots,a_n)=\sum_{i=0}^{m}\omega(x_i)[\sum_{j=0}^{n}a_j\varphi_j(x_i)-f(x_i)]^2$$

由多元函数求极值的必要条件

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0, \quad (k = 0,1,\cdots,n) \quad \text{即}$$

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2\sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)[\sum_{j=0}^{n} a_j \varphi_j(x_i) - f(x_i)]\varphi_k(x_i)$$

展开

$$\sum_{j=0}^{n} a_j \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i)\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) = \sum_{i=0}^{m} \omega(x_i) f(x_i)\varphi_k(x_i)$$

法方程

解方程组

有唯一解$a_k = a_k^*(k = 0,1,\ldots,n)$

则$S^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + a_1^*\varphi_1(x) + \ldots + a_n^*\varphi_n(x)$

三、求解步骤

最困难！

确定拟合曲线的形式

↓

确定变量对应的数据

↓

确定法方程

↓

求解法方程

四、举例

例1. 已知一组实验数据如下，求它的拟合曲线.

x_i	1	2	3	4	5
f_i	4	4.5	6	8	8.5
ω_i	2	1	3	1	1

解　根据所给数据，在坐标纸上标出，从图中看到各点在一条直线附近，故可选择线性函数作拟合曲线，即令

$$S_1(x) = a_0 + a_1 x$$

得法方程为

$$\begin{cases} 8a_0 + 22a_1 = 47 \\ 22a_0 + 74a_1 = 145.5 \end{cases}$$

解得

$$a_0 = 2.77, a_1 = 1.13$$

于是所求拟合曲线为

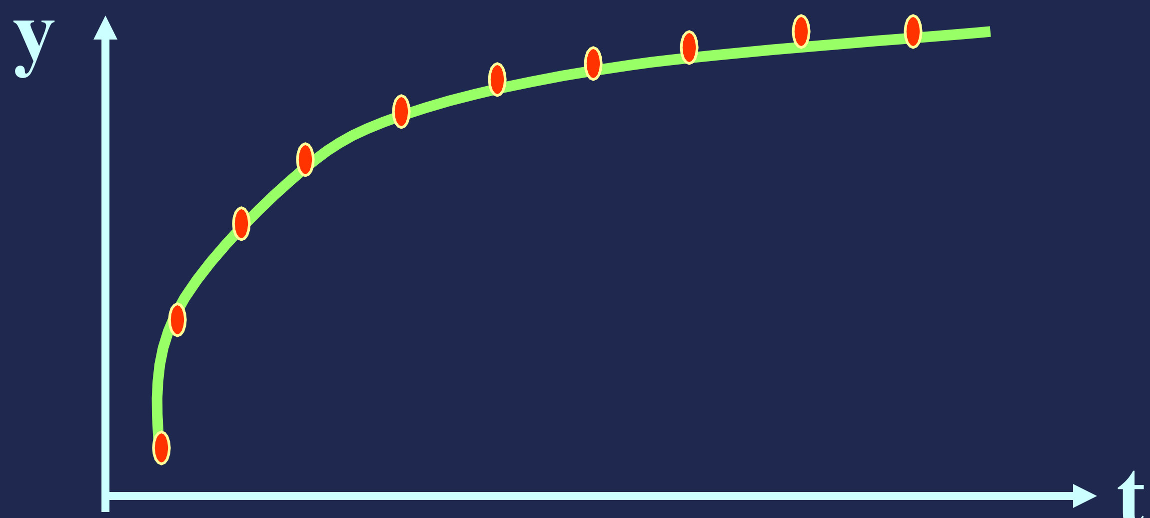
$$S_1^*(x) = 2.77 + 1.13x$$

例2. 在某化学反应里，根据实验所得生成物的浓度与时间关系如下表，求浓度y与时间t的拟合曲线y=F(t).

t	1	2	3	4	5	6	7	8
Y	4.00	6.40	8.00	8.80	9.22	9.50	9.70	9.86

t	9	10	11	12	13	14	15	16
y	10.00	10.20	10.32	10.42	10.50	10.55	10.58	10.60

解　根据所给数据，在坐标纸上标出，得下图



从图中可以看出开始时浓度增加较快，后来逐渐减弱，到一定时间就基本稳定在一个数值上，即当$t\to\infty$时，y趋于某个常数，故有一水平渐近线。另外 $t = 0$ 时，反应未开始，浓度为0。概括起来为