最佳平方逼近

问题提出

线性最小二线乘问题存在与唯一

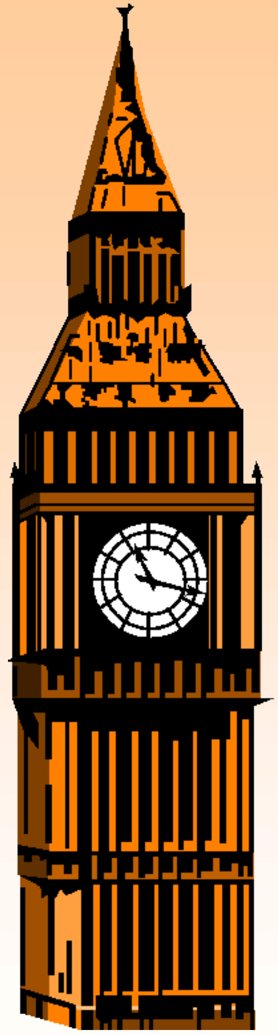
线性模型正规方程

线性模型举例

线性模型引深及推广

线性最小二乘方法评注

正交多项式



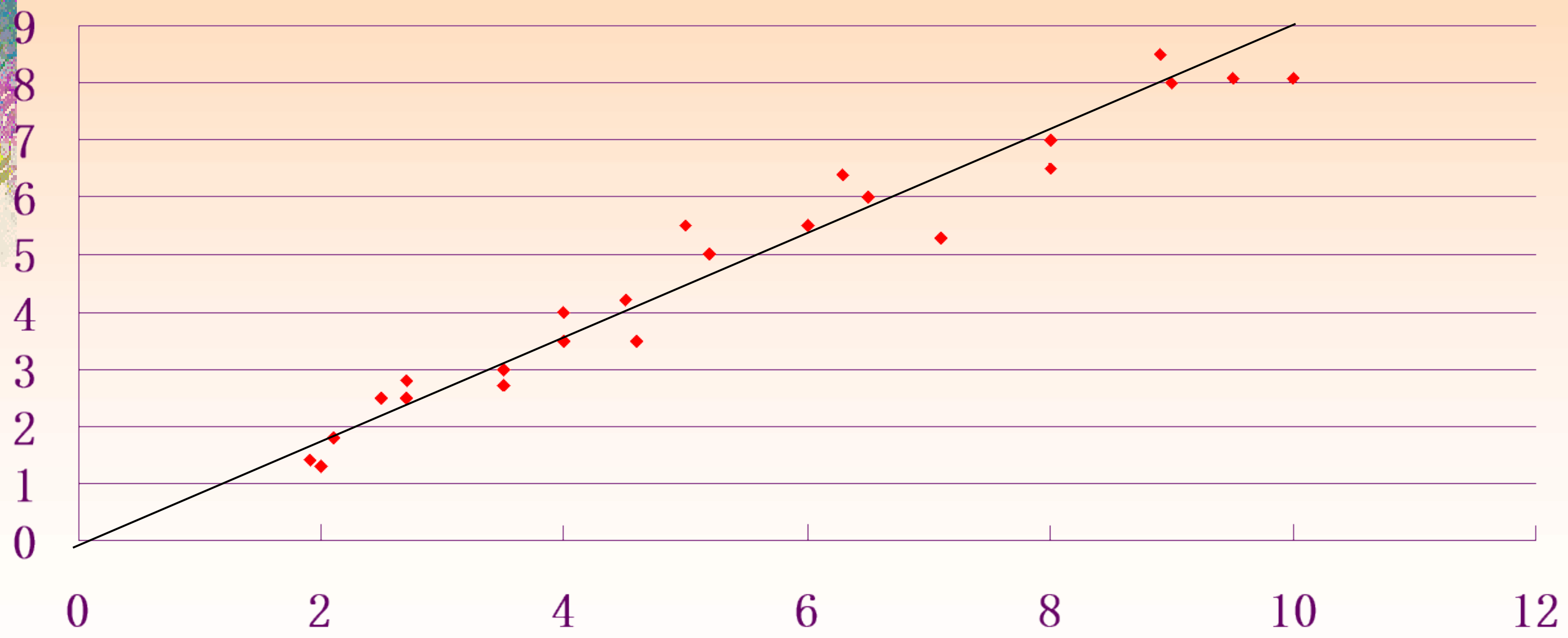
实例讲解

- 某种合成纤维强度与其拉伸倍数有直接关系，下表是实际测定24个纤维样品强度与对应拉伸倍数统计。

- 提醒：将拉伸倍数作为x, 强度作为y,在座标纸上标出各点，能够发觉什么?

数据表格

编号	拉伸倍数	强度 kg/mm^2	编号	拉伸倍数	强度 kg/mm^2
1	1.9	1.4	13	5.0	5.5
2	2.0	1.3	14	5.2	5.0
3	2.1	1.8	15	6.0	5.5
4	2.5	2.5	16	6.3	6.4
5	2.7	2.8	17	6.5	6.0
6	2.7	2.5	18	7.1	5.3
7	3.5	3.0	19	8.0	6.5
8	3.5	2.7	20	8.0	7.0
9	4.0	4.0	21	8.9	8.5
10	4.0	3.5	22	9.0	8.0
11	4.5	4.2	23	9.5	8.1
12	4.6	3.5	24	10.0	8.1


9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
0
2
4
6
8
10
12

- 从上图中能够看出强度与拉伸倍数大致成线形关系，可用一条直线来表示二者之间关系。
- 解：设 $y^*=a+bx_i$ ，令 $\delta=y_i-y^*_i=y_i-a-bx_i$, 依据最小二乘原理，即使误差平方和到达最小，也就是令

$$Q=\sum_{i=1}^{n}\delta_i^2$$

为最小 ，即求使

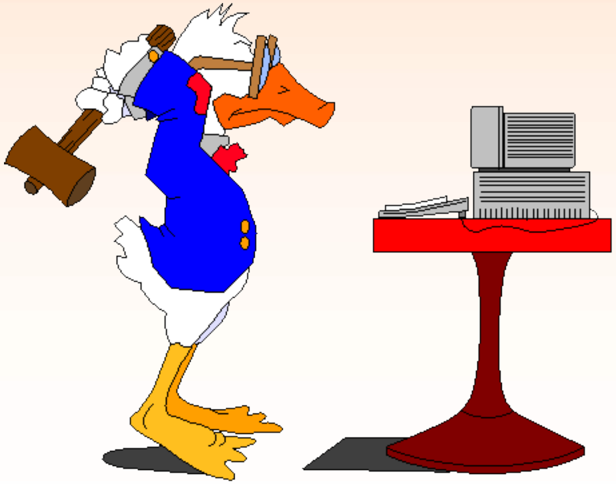
$$\varphi(a,b)=\sum_{i=1}^{24}\delta_i^2=\sum_{i=1}^{24}(y_i-a-bx_i)^2$$

有最小值a和b值。

- 计算出它正规方程得

$$\begin{cases} 24a+127.5b=113.1 \\ 127.5a+829.61b=731.60 \end{cases}$$

- 解得： **a=0.15 ， b=0.859**
  直线方程为：**y*=0.15+0.859x**



一 问题提出

插值法是使用插值多项式来迫近未知或复杂函数，它 要求插值函数与被插函数在插值节点上函数值相同，而在其它点上没有要求。在非插值节点上有时函数值会相差很大 。若要求在被插函数定义区间上，所选近似函数都能与被插函数有很好近似，就是最正确迫近问题。

最正确迫近是在函数空间 M中选 P(x) 满足

$$\max_{a \le x \le b} |f(x) - p(x)| = \min \text{L} \qquad (*)$$

但因为绝对值函数不宜进行分析运算,常将上式化为

$$\int_a^b \rho(x)(f(x) - p(x))^2 dx = \min$$

来讨论， 于是最正确迫近问题变为最正确平方迫近问题 ,而离散最正确平方逼进问题就是常说曲线拟合

$$\sum_{i=0}^{m} \rho_i (f(x_i) - p(x_i))^2 = \min$$

它们都可用最小二乘法求解。

• 曲线拟合最小二乘法

- 最小二乘原理
- 当由试验提供了大量数据时,不能要求拟合函数 $\varphi(x)$ 在数据点(x_i, y_i) 处偏差,即 $\delta_i = \varphi(x_i) - y_i$(i=1, 2, …, m)严格为零,但为了使近似曲线尽可能反应所给数据点改变趋势,需对偏差有所要求.通常要求偏差平方和

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

- 最小,此即称为最小二乘原理

•最小二乘法求法

设近似方程为 ：(共有 m 组数据且 m > n)

$$y^* = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x)$$

$$\phi(a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=1}^{m}(y_i^* - y_i)^2 = \min$$

对函数 ϕ 求偏导数并令其为零，可得 ：$\frac{\partial \phi}{\partial a_j} = 0$

$$\sum_{i=1}^{m} 2\left(\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x_i) - y_i\right)\varphi_j(x_i) = 0$$

得 ：$2\left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i) - \sum_{i=1}^{m} y_i\varphi_j(x_i)\right] = 0$

若引入记号 ：$\left(\varphi_j, \varphi_k\right) = \sum_{i=1}^{m}\varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i)$

$$\left(\varphi_j, f\right) = \sum_{i=1}^{m}\varphi_j(x_i)\, y_i$$

则有：$\sum_{k=0}^{n} a_k(\varphi_j,\varphi_k)=(\varphi_j,f)\quad (j=0,1,\ldots,n)$

$\therefore$ 可得矩阵

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_1,\varphi_n) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ (\varphi_n,\varphi_0) & (\varphi_n,\varphi_1) & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} (\varphi_0,f) \\ (\varphi_1,f) \\ \cdots \\ (\varphi_n,f) \end{bmatrix}$$

可知

当 $\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots\varphi_n(x)$ 线性无关时 存在唯一解 $a_i\ (i=0,1,\ldots,n)$

$\sum_{i=0}^{n} a_i\varphi_i(x)$就是所求的拟合函数

•最小二乘法几个特例

1. 作为曲线拟合的一种常见情况,拟合函数常为代数多项式,即拟合函数

$$\varphi(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots+a_nx^n$$

则以同样原理的相应法方程组(共有m组数据且m > n)

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} & \cdots & \sum x_i^{2n} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \cdots \\ \sum x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

由此可得到相应的系数 a_i $(i=0,1,\ldots,n)$

即可求得拟合函数 $\varphi(x)$

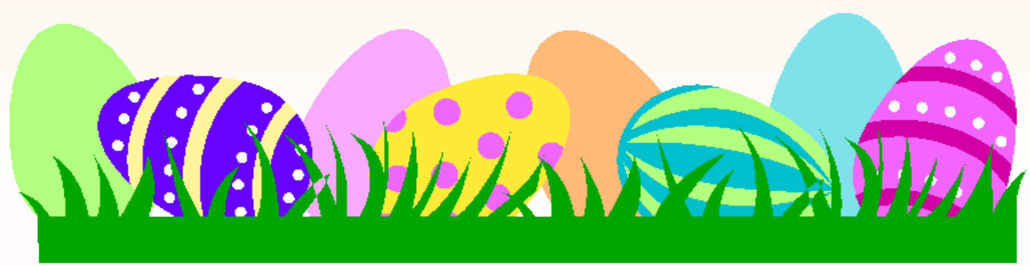
2. 特别的当 $n = 1$ 时，这就是用途最广的线性拟合.

对于拟合函数 $y = a_0 + b_0 x$

即

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ b_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

解得 a_0, b_0 即可



例　题

下面举个例子以说明用最小二乘法解题的步骤。

例 电流通过 2Ω 电阻，用伏安法侧得的电压电流如表

I(A)	1	2	4	6	8	10
V(V)	1.8	3.7	8.2	12.0	15.8	20.2

用最小二乘法处理数据。

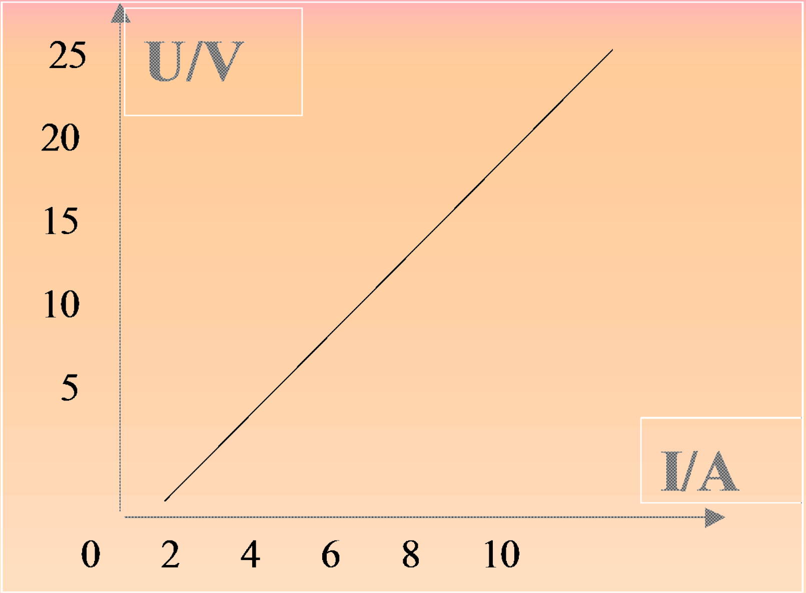
解 1.确定 V=φ(I)的形式。将数据点描绘在坐标上（如下图），可以看出这些点在一条直线的附近，故用线形拟合数据，即

$$V = a_0 + a_1 I$$

2.建立方程组。

$$m=6,\sum_{k=1}^{6} i_k=31,\sum_{k=1}^{6} i_k^2=221,$$

$$\sum_{k=1}^{6} V_k=61.7,\sum_{k=1}^{6} i_k V_k=442.4$$



则法方程组为

$$\begin{bmatrix} 6 & 31 \\ 31 & 221 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 61.7 \\ 442.4 \end{bmatrix}$$

3．求经验公式，解所得法方程组得

$$a_0=-0.215,\ a_1=2.032$$

所求经验公式为　V=-0.215+2.032I

二 线性最小问题存在与唯一

- 在科学试验中，很多情况数据间存在线性或可转化为线性关系。线性最小二乘是最基本也是最主要一个。
- 1　线性最小二乘问题与线性最小二乘求解

  设　　$Ax=b$

- 其中　$A\in R^{m\times n}$，$b\in R^{m}$，$x\in R^{n}$

  当$m>n$时，上方程超定方程组
- 令 $r=b-Ax$，　普通，超定方程无通常意义下解，
- 既无x使 $t=0$。对这类方程求解意义是求x，使

  $\|r\|_2^2=\|b-Ax\|_2^2$　为最小，

  称x为$Ax=b$最小二乘解。

主页

2　最小二乘解存在性与唯一性

定理：x^* 为 $Ax=b$ 最小二乘解充要条件

$$A^T A X^* = A^T b$$

证实：充分性：若存在 X^*，使 $A^T A X^* = A^T b$　则对任意向量 令 $x = x^* + y$　有

$$\| b-Ax \|_2^2 = \| b-AX^* \|_2^2 - 2\left(y,\ A^T(b-AX^*)\right) + \| Ay \|_2^2$$

$$= \| b-AX^* \|_2^2 + \| Ay \|_2^2 \geq \| b-AX^* \|_2^2$$

$\therefore X^*$ 为 $Ax=b$ 最小二乘解。

必要性：　令 $\| b-AX \|_2^2 = \varphi(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \varphi(x)$
则由多元函数极值必要条件知，若 X^* 为极值点，　则

$$\left.\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_i}\right|_{x=x^*} = 0$$