曲线拟合的最小二乘法

最小二乘法的引入

- 给出一组离散点，确定一个函数逼近原函数，插值是这样的一种手段
  在实际中，数据不可避免的会有误差，插值函数会将这些误差也包括在内

- 需要一种新的逼近原函数的手段：

  - 不要求过所有的点（可消除误差影响）
  - 尽可能表现数据的趋势，靠近这些点

曲线拟合的最小二乘法

- 有时候，问题本身不要求构造的函数过所有点
  如：**6**个风景点，要修一条公路**R**使得**R**为直线，且到所有风景点的距离和最小。

- 对如上两类问题，有一个共同的数学提法：找空间上的函数**g**，使得**g**到**f**的距离最小

预备知识

定义1：向量范数

映射：$\|\cdot\|: R^n \to R^+ \bigcup \{0\}$ 满足：

①非负性 $\|X\| \geq 0$, 且 $\|X\| = 0 \Leftrightarrow X = 0$

②齐次性 $\forall a \in R, \|aX\| = |a| \cdot \|X\|$

③三角不等式 $\|X + Y\| \leq \|X\| + \|Y\|$

称该映射为向量的一种范数

定义两点的距离为：$\|X - Y\|$

曲线拟合的最小二乘法

常见的范数有：

$$\|X\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|, X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$$

$$\|X\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i)^2}, X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$$

$$\|X\|_\infty = \max\{|x_i|\}, X = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$$

定义2：函数*f*，*g*的关于离散点列 $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ 的离散内积为：

$$(f, g)_D = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) g(x_i)$$

曲线拟合的最小二乘法

定义3：函数f的离散范数为

$$\| f \|_D = \sqrt{\sum_{i=0}^{n} f(x_i) f(x_i)}$$

提示：该种内积，范数的定义与向量的2－范数一致

我们还可以定义函数的离散范数为：

$$\| f \|_D = \left\| \left(f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n) \right) \right\|_\infty = \max \left| \left(f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n) \right) \right|$$

$$\| f \|_D = \left\| \left(f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n) \right) \right\|_1 = \sum_{i=0}^{n} \left| f(x_i) \right|$$

最小二乘法定义

f(x)为定义在区间***[a,b]***上的函数，$\{x_i\}_{i=0}^{n}$为区间上***n+1***个互不相同的点，Φ为给定的某一函数类。求 Φ上的函数g(x)满足***f(x)***和***g(x)***的距离最小

如果这种距离取为**2**－范数的话，称为最小二乘问题

下面看最小二乘问题：

求 $g(x)\in\Phi$ 使得 $R_2=\sqrt{\sum_{i=0}^{n}\left(g(x_i)-f(x_i)\right)^2}$ 最小

设

$$\Phi=span\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots\varphi_n\}$$

$$g(x)=a_0\varphi_0(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)$$

则

$$\|g(x)-f(x)\|_D=\min_{\varphi\in\Phi}\|\varphi(x)-f(x)\|_D$$

即

$$\left\|f(x)-\left(a_0\varphi_0(x)+\cdots+a_n\varphi_n(x)\right)\right\|_D$$

关于系数 $\{a_0,a_1,\cdots a_n\}$ 最小

曲线拟合的最小二乘法

$$\left\| f(x) - \left(a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)\right)\right\|_D^2$$

$$= \|f\|_D^2 - 2(f, a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x))_D$$

$$+ \|a_0\varphi_0(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)\|_D^2$$

$$= \|f\|_D^2 - 2\sum_{k=0}^{n} a_k (f, \varphi_k) + \sum_{i,k=0}^{n} a_i a_k (\varphi_i, \varphi_k)$$

$$= Q(a_0, a_1, \cdots, a_n)$$

由于它关于系数 $\{a_0, a_1, \cdots a_n\}$ 最小，因此有：

$$\frac{\partial Q}{\partial a_i} = 0, i = 0, \cdots, n$$

即

$$\sum_{k=0}^{n} a_k(\varphi_i, \varphi_k) = (f, \varphi_i), i = 0, \cdots, n$$

曲线拟合的最小二乘法

写成矩阵形式有：

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0)_D & \cdots & (\varphi_0,\varphi_n)_D \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n,\varphi_0)_D & \cdots & (\varphi_n,\varphi_n)_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,\varphi_0)_D \\ \vdots \\ (f,\varphi_n)_D \end{pmatrix}$$

由$\{\varphi_0,\varphi_1,\cdots\varphi_n\}$的线性无关性，知道该方程存在唯一解

法方程

例： ① $y = a + bx$

第一步：函数空间的基 $\{1, x\}$ 然后列出法方程

$$\begin{pmatrix} (1,1)_D & (1,x)_D \\ (x,1)_D & (x,x)_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,1)_D \\ (f,x)_D \end{pmatrix}$$

曲线拟合的最小二乘法

②

x	-3	-2	-1	2	4
y	14.3	8.3	4.7	8.3	22.7

$$y = ax^2 + b$$

第一步：函数空间的基 $\{x^2, 1\}$ ，然后列出法方程

$$\begin{pmatrix} (x^2, x^2)_D & (1, x^2)_D \\ (1, x^2)_D & (1,1)_D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f, x^2)_D \\ (f, 1)_D \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 370 & 34 \\ 34 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 563 \\ 58.3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.832716 \\ 7.49691 \end{pmatrix}$$

③ $y = ae^{bx}$

由 $\ln y = \ln a + bx$ ，可以先做$y^* = a^* + bx$　$y = e^{y^*} = e^{a^*}e^{bx}$

x	-3	-2	-1	2	4
y	14.3	8.3	4.7	8.3	22.7
$\ln y$	2.66026	2.11626	1.54756	2.11626	3.12236

$$\begin{pmatrix} (1,1)_D & (1,x)_D \\ (1,x)_D & (x,x)_D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f,1)_D \\ (f,x)_D \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 34 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11.5627 \\ 2.9611 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.31254 \\ 0.0870912 \end{pmatrix}$$

矛盾方程组的求解

求解一个矛盾方程组，计算的是在均方误差 $\min \|AX - b\|_2^2$ 极小意义下的解，也就是最小二乘问题。

我们有：

矛盾方程组恒有解，且

$$\boxed{A^T AX = A^T b \Leftrightarrow \|AX - b\|_2^2 = \min_{Y \in R^n} \|AY - b\|_2^2}$$