第 24 卷 第 1 期 吉首大学学报(自然科学版) Vol. 24 No. 1
2003 年 3 月 Journal of Jishou University (Natural Science Edition) Mar. 2003

文章编号: 1007- 2985(2003)01- 0037- 03

非线性拟合的初值问题*

胡 亮
(昆明理工大学数理系, 云南 昆明 650224)

摘 要: 综述了非线性拟合初值的求解方法, 并在前人研究的基础上提出了常见非线性模型初值的简便求法. 该方法既可在计算机上编程实现, 亦可利用计算机数学分析工具 Matlab, Maple, Mathematica, Matcad, 微软 EXCEL 及微软 ORIGIN 等直接求解.

关键词: 数据处理; 非线性拟合; 插值法; 数值微分
中图分类号: O241; O245 文献标识码: A

曲线拟合是数据分析和数据处理的重要工作之一. 曲线拟合可分为线性拟合和非线性拟合. 许多数据关系可化为线性模型, 但数据关系极其复杂; 非线性模型也是工程技术和预测分析中常遇到的数据关系[1~3]. 非线性模型参数需用(加权)最小二乘法或最优化方法求解. 通常的求解方法具有局部收敛性, 需要给出适合的初值, 初值准确与否是整个求解工作成败的关键. 目前各种数学分析工具用于非线性拟合时, 都要给出参数初值. Matlab, Maple, Mathematica 可用求极小值或最小二乘函数公式求非线性模型参数; Matcad 则有多种非线性拟合公式, 其中包括广义非线性拟合公式 genfit; 微软 EXCEL 应用"规划求解"工具也能进行非线性拟合[4]; 微软 ORIGIN 则提供了许多拟合函数. 但是上述方法都需要设定初值, Matcad 的 genfit 还要求参数偏导的初值. 通常初值设定是凭经验进行猜测和试探, 盲目性很大, 难于求得合适的初值, 因此笔者拟对该初值问题进行了探讨.

1 初值估算方法概述

由于非线性拟合比较复杂, 因此应尽可能将模型线性化, 如进行取变量的倒数、对数等数学变换, 关系式的微分- 积分线性化变换[3,4], 分段线性化, 根据专业理论简化模型(如忽略小量)等, 将非线性拟合问题转化为线性拟合问题. 对于不能线性化的模型, 其最优化拟合就存在参数初值问题. 首先, 可进行专业理论分析确定参数数值范围, 在这个范围内设定初值. 其次, 最简单的方法是选定几组实验值代入模型, 联立其中简单的方程求解参数[1~3]; 或者用消元法得到单参数的非线性方程, 用较宽的求解方法求解, 如劈因子法; 或研究其大范围的收敛性, 得到近似初值[6], 该方法需要通过数学分析确定单变量方程的收敛区间. 对于多参数、高度复杂的非线性拟合, 可采用各种确定性和随机性的全局最优算法. 但是, 全局最优理论和方法比较复杂, 需要繁琐的编程和大量的计算. 同时, 线性化变换不如非线性拟合直接, 可能仅得到近似值. 因此, 有必要对应用广泛而又常见的非线性拟合寻找简便的参数初值确定方法.

2 几种初值估算方法

2.1 参数消元法

最常见的非线性拟合是包含 3 个参数的拟合问题. 其中带常数项的幂函数和指数函数在应用中常常用到, 其典型方程式为 $y = ax^b + c$ 和 $y = ab^x + c$ (或 $y = ae^{bx} + c$), 指数函数的 2 种形式很容易互相转

* 收稿日期: 2002- 06- 02
作者简介: 胡 亮(1964-), 男, 四川省泸州市人, 昆明理工大学数理系博士研究生, 主要从事计算机与应用化学研究.

换, 只要将 b 的对数或指数设为新的参数即可. Logistic 模型 $y = d/(1+ae^{-bx})$ 广泛应用于动物饲养、植物栽培、人口增长、病害流行、商品销售、资源开发及生态环保等研究领域中, 若令 $Y = 1/y$, $A = a/d$, $B = e^{-b}$, $C = 1/d$, 则转换为典型的指数函数形式. 另外, 如 $1/y = ae^{bx}+c$, $y = c/(1+ae^{bx})$, $y = c\exp(ae^{bx})$, $y = a/(c+x^{b})$, $y = c\exp(ax^{b})$ 等, 均可转换为前述方程形式. 这 2 种模型的拟合可以用消元法得到单参数的方程, 然后进行大范围收敛求解[6]. 但是如果设法估算系数 c 或 b, 然后再进行线性拟合确定其余参数, 会变得更为简便. 这种线性化估算方法对许多含 3 个参数的非线性拟合问题都有效, 且方便直观, 如 $y = a/(x+b)+c$, $y = a\ln(x+b)+c$; 而 $y = x/(a+bx)+c$(即 $y = (c+dx)/(a+bx)$), $\lg y = a/(x+b)+c$(化工中 Antoine 公式形式) 和 $y = c(x+b)a$ 则可用变量代换转换为前 2 种形式.

将 2 个实验点及其算术或几何平均值代入模型方程式, 消元求解可推导出系数 c 或 b 的估算式[2,7]. 幂函数取几何平均值关系 $x_3 = (x_1x_2)^{\frac{1}{2}}$, 则 $c = (y_1y_2-y_3^2)/(y_1+y_2-2y_3)$, 其中 (x_1, y_1), (x_2, y_2) 为二实验数据点, y_3 为对应于 x_3 的插值点. 同样, 指数函数系数估算式为算术平均值 $x_3 = (x_1+x_2)/2$, $c = (y_1y_2-y_3^2)/(y_1+y_2-2y_3)$; $y = a/(x+b)+c$ 模型系数估算式为 $y_3 = (y_1+y_2)/2$, $b = (x_1x_3+x_2x_3-2x_1x_2)/(x_1+x_2-2x_3)$; $y = a\ln(x+b)+c$ 模型系数估算式为 $y_3 = (y_1y_2)^{\frac{1}{2}}$, $b = (x_3^2-x_1x_2)/(x_1+x_2-2x_3)$. 该方法可编程运算, 亦可利用各种数学分析工具的插值功能来求 y_3 或 x_3, 再用线性拟合功能估算非线性拟合初值.

另外, $y = a/(x+b)+c$ 模型可以采用将 3 个实验点代入模型联立求解的方法[8], 或者代入 1 个实验点的值得 $(x-x_1)/(y-y_1) = b(b+x_1)/a+((b+x_1)/a)x$, 线性拟合可得 a 和 b, a 和 b 代回模型方程可得 c.

2.2 数据图形特征值法

有些数据的非线性拟合可通过绘制数据图形, 再由图形特点确定拟合参数. 图形特征值通常有曲线起点、峰值、峰位置、拐点、周期、渐近线等.

例如, $y = x/(a+bx)$ 的渐近线方程为 $x = -a/b$ 和 $y = 1/b$, 近似读取渐近线在坐标轴上的截距, 可得到 a 和 b 初值. 在用 Gaussian 函数和 Lorentzin 函数进行谱峰拟合时, 可根据峰值、峰位置和半高度处峰宽近似读取参数初值. Matcad2001 新增加了拟合函数 $y = a\sin(x+b)+c$, 可在图中读取正弦曲线的峰值、相位和 Y 轴平移量, 最重要的是 b 的读取, 而 a 和 c 还可用线性拟合得到. 在传递函数和时间响应函数的动态实验数据处理中, 可用特征值法求系统参数.[2] 如典型二阶系统的传递函数为 $W(s) = \omega_n^2/(s+2\zeta\omega_n s+\omega_n^2)$, 其中阻尼比 ζ 和固有频率 ω_n 为系统参数, 其阶跃响应函数为 $C(t) = 1-a\exp(-\beta t)\sin(\omega_d t+\varphi)$, 脉冲响应函数为 $g(t) = a\omega_n\exp(-\beta t)\sin(\omega_d t)$, 其中 $a = (1-\zeta^2)^{-\frac{1}{2}}$, $\omega_d = \omega_n(1-\zeta^2)^{\frac{1}{2}}$, $\beta = \zeta\omega_n$, $\varphi = \tan^{-1}\{(1-\zeta^2)^{\frac{1}{2}}/\zeta\}$. 参数可由数据图形的幅值、周期、渐近线等特征值得到.

2.3 数据点规划法

在实验设计时, 适当安排试验点可以将一些非线性回归问题转换为线性回归问题[9]. 同样, 对 1 组数据不符合某非线性方程拟合所要求的数据间隔, 甚至不知道是否符合该非线性模型时, 可以用插值方法设置符合线性化要求的数据点. 利用新设置的数据点进行线性拟合, 如果符合线性关系, 说明数据关系满足该非线性模型, 并得到非线性拟合的参数初值. 下面列出文献[8] 中已证明可线性化的且具有机械工程应用背景的非线性模型.

$y = a+bx+ce^{dx}$ 模型: 使 x 构成以 $h(h>0)$ 为公差的等差数列, 即 $x_{i+1} = x_i+h$, 则施行变换 $Y_i = \ln|y_{i+2}-2y_{i+1}-y_i|$, $X_i = x_i$, 可化成直线形式 $Y = A+dX$, 这里 $A = \ln|c(e^{dh}-1)^2|$. c 与 d 确定之后, 令 $t = y-ce^{dx}$, 则得 $t = a+bx$, 于是 a 与 b 也确定下来.

$y = ax^{b}+cx^{d}$ 模型: 使 x 构成以 e^{h} 为公比的等比数列, 即 $x_{i+1} = e^{h}x_i$, 则施行变换 $X_i = y_{i+1}/y_i$, $Y_i = y_{i+2}/y_i$, 可化成直线形式 $Y = AX+B$, 这里 $A = e^{(b+d)h}$, $B = -e^{(b+d)h}$. b 与 d 确定之后, 令 $\eta = y/x^{d}$, $\xi = x^{(b-d)}$, 则得 $\eta = a\xi+c$, 于是 a 与 c 也确定下来.

$y = e^{ax}(c\cos(bx)+d\sin(bx))$ 模型: 使 x 构成以 $h(h>0)$ 为公差的等差数列, 即 $x_{i+1} = x_i+h$, 则施

行变换 $X_i = y_{i+1}/y_i$, $Y_i = y_{i+2}/y_i$, 可化成直线形式 $Y = FX + E$, 这里 $F = 2e^{ah}\cos(bh)$, $E = -e^{2ah}$. a 与 b 确定之后, 令 $\eta = y/(e^{ax}\cos(bx))$, $\xi = \tan(bx)$, 则得 $\eta = d\xi + c$, 于是 c 与 d 也确定下来.

2.4 微分线性化法

如果非线性模型通过包括微分在内的各种运算可线性化, 则可用线性拟合获得模型系数近似值, 拟合的近似性是由数值微分的近似性决定的. 微分运算可减少参数个数, 在线性拟合之后须将所得系数代回到非线性模型, 设法求解余下的参数. 曲线的各阶微分可以用多项式作辅助函数求取,[10] 这要求曲线能较好地用多项式逼近. 当然, 这也能用其它辅助函数及数值微分法得到微分值. 下述模型可用微分线性化法获得拟合初值.

$H = a(1-e^{bD})^c$ 模型: a, b, c 为待定参数, 经对数、微分运算整理得 $H'^2 - HH'' = c^{-1}H'^2 - bHH'$, 令 $y = H'^2 - HH''$, $x_1 = H'^2$, $x_2 = HH'$, 线性化为 $y = c^{-1}x_1 - bx_2$, b 与 c 确定之后代入模型方程, 并令 $x = (1-e^{bD})^c$, 经线性拟合可解得 a.

$H = a(1-be^{kD})^c$ 模型: a, b, c, k 为待定参数, 经上面相同的方法得 $HH'' - 2H'^2 = c^{-1}H'^2 - kHH'$, 有了 c 与 k 之后, 模型化为 $H^{1/c} = a^{1/c} - a^{1/c}be^{kD}$, 由此求得 a, b.

3　结语

非线性模型是工程技术和预测分析中常遇到的模型, 许多分析工具都有非线性拟合功能, 如何确定参数初值关系到拟合功能能否有效利用. 常见的非线性拟合可以用简便的方法设定参数初值, 避免猜测和试探的盲目性, 有时确定出的参数初值甚至已达到精度要求. 在此总结的一些估算参数初值方法有助于分析工具非线性拟合功能的应用. 但由于非线性拟合复杂多样, 还须在实践中不断总结, 尤其应根据实验事实和各专业理论寻找有效的方法. 如谱峰分辨在分析科学中具有重要意义, 可以从化学实验事实出发, 提出可能的拟合峰个数、重叠峰位置等.

参考文献:

[1] 费业泰. 误差理论与数据处理(第 4 版)[M]. 北京: 机械工业出版社, 2000. 118- 157.

[2] 周秀银. 误差理论与数据处理[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 1986. 151, 194.

[3] 忻新泉. 计算机在化学中的应用[M]. 南京: 南京大学出版社, 1986. 82.

[4] 余　亮. 利用 Excel 软件进行非线性拟合的非编程方法[J]. 微型机与应用, 2000, (5): 16- 17.

[5] 胡　亮, 唐光阳, 施跃坚. 确定一级反应常数的新方法[J]. 云南师范大学学报, 2002, (1): 37- 38.

[6] 王基　. 大范围收敛的迭代法求解非线性回归的参数[J]. 数学的实践与认识, 1991, (2): 49- 57.

[7] 陈明浚. 三系数一元非线性回归的方法及程序设计[J]. 化学通报, 1987, (1): 50- 54.

[8] 王基　. Antoine 公式常数拟合的初值问题[J]. 化学通报, 1995, (3): 53- 54.

[9] 骆振华. 若干化为线性回归的曲线相关[J]. 数学的实践与认识, 1985, (3): 40- 43.

[10] 葛宏立. 用多项式作辅助近似求解非线性回归的参数[J]. 数学的实践与认识, 1989, (3): 41- 46.

Initial- Value Problem of Nonlinear Fitting

HU Liang

(Department of Mathematics, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650224, Yunnan China)

Abstract: Based on the previous studies, the convenient solutions to the initial- value problem of nenlinear fitting can be realized by using a computer with programming or using Matlab, Maple, Mathematica, Matcad, Microsoft Excel and Microsoft Origin, etc.

Keywords: data- processing; nonlinear fitting; interpolation; numerical derivation