《数值分析》16

主要内容：

- 数据拟合的非线性模型
- 最小二乘法几何意义
- 超定方程组QR分解算法
- 数据拟合确定常微分方程

数据拟合的非线性模型

观测数据

x	x_1	x_2	$\cdots\cdots\cdots$	x_m
f	y_1	y_2	$\cdots\cdots\cdots$	y_m

求拟合函数 $f(x, c_0, c_1, \cdots, c_n)$满足

$$\sum_{i=1}^{m}[f(x_i, c_0, c_1, \cdots, c_n) - y_i]^2 = \min$$

例1. 已知世界人口统计数据

年	1804	1927	1960	1975	1987	1999
数量	10	20.	30.	40	50	60.

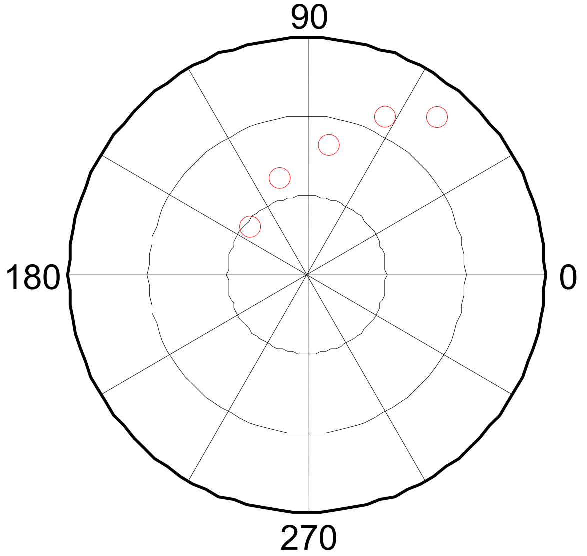
求拟合函数, $N(t) = \exp(at + b)$ 或 $N(t) = \dfrac{K}{1 + \exp(-rt - c_0)}$

使得 $S = \sum_{j=1}^{6}[N(t_j) - y_j]^2 = \min$

1

例2.利用极坐标观察值确定慧星轨道

r	2.70	2.00	1.61	1.20	1.02
φ	48°	67°	83°	108°	126°



$$r = \frac{p}{1 - e\cos\varphi}$$

p=?, e = ?

其中，p 为参数，e为偏心率

令k=1/r

k	0.3704	0.5000	0.6211	0.8333	0.9804
φ	0.8378	1.1694	1.4486	1.8850	2.1991

$$r = \frac{p}{1 - e\cos\varphi} \Rightarrow 1 - e\cos\varphi = \frac{p}{r} \Rightarrow 1 - e\cos\varphi = kp$$

$$\boxed{\text{线性方程组}\ k_j p + \cos\varphi_j e = 1\ (j = 1,2,3,4,5)}$$

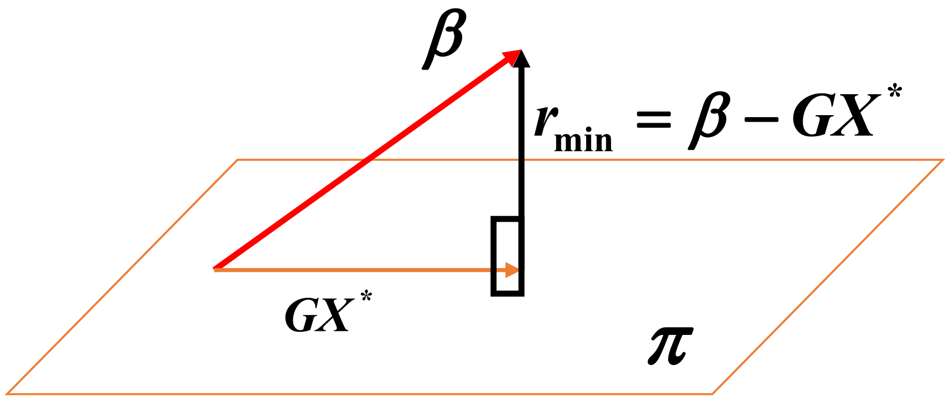
超定方程组最小二乘解 X^* 的几何意义

例 $\begin{cases} 2x+4y=11 \\ 3x-5y=3 \\ x+2y=6 \end{cases}$ $\quad G=\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ $\quad \beta=\begin{bmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \end{bmatrix}$

$$\|\beta-GX^*\|=\min_{X\in R2}\|\beta-GX\|_2$$

向量组 $G=[\alpha_1,\alpha_2]$

平面 π $\quad GX=x\alpha_1+y\alpha_2$



正规方程

$$G^TGX^*=G^T\beta$$

$$G^T(\beta-GX^*)=0$$

$$G^Tr_{\min}=0$$

$$(GX^*,r_{\min})=0$$

超定方程组QR分解算法

超定方程组 $GX=\beta$ ➔ $G^TGX=G^T\beta$

超定方程组的最小二乘解

$$X=(G^TG)^{-1}G^T\beta$$

➔矩阵的广义逆 $G^+=(G^TG)^{-1}G^T$

矩阵的正交三角分解: $G=QR$

Q—列正交矩阵; R—单位上三角矩阵

$GX=\beta$ ➔ $QRX=\beta$ ➔ $DRX=Q^T\beta$

➔ $RX=D^{-1}Q^T\beta$ ➔ $X=R^{-1}D^{-1}Q^T\beta$

例. 用最小二乘法求解超定方程组 $\begin{cases} 2x+4y=11 \\ 3x-5y=3 \\ x+2y=6 \end{cases}$

解 $G=\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & -5 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ $\beta=\begin{bmatrix} 11 \\ 3 \\ 6 \end{bmatrix}$

$G^T G=\begin{bmatrix} 14 & -5 \\ -5 & 45 \end{bmatrix}$ $G^T\beta=\begin{bmatrix} 37 \\ 41 \end{bmatrix}$

解方程组 $\begin{bmatrix} 14 & -5 \\ -5 & 45 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 37 \\ 41 \end{bmatrix}$ $\Rightarrow$ $\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 3.0909 \\ 1.2545 \end{bmatrix}$

$GX=\begin{bmatrix} 11.2 \\ 3 \\ 5.6 \end{bmatrix}$ $r=\beta-GX=\begin{bmatrix} -0.2 \\ 0 \\ 0.4 \end{bmatrix}$ $\|r\|_2=0.4472$

正交变换法. 设 $G=\begin{bmatrix}2 & 4\\ 3 & -5\\ 1 & 2\end{bmatrix}=[g_1\ \ g_2]$

$$(g_1,g_2)=g_1^Tg_2=8-15+2=-5\neq 0$$

$$(g_1,g_1)=g_1^Tg_1=4+9+1=14 \qquad r_{12}=\frac{(q_1,g_2)}{(q_1,q_1)}$$

$$q_1=g_1$$

$$q_2=g_2-\frac{(q_1,g_2)}{(q_1,q_1)}q_1=\begin{bmatrix}4\\ -5\\ 2\end{bmatrix}-\frac{-5}{14}\begin{bmatrix}2\\ 3\\ 1\end{bmatrix}=\frac{1}{14}\begin{bmatrix}66\\ -55\\ 33\end{bmatrix}$$

$$(q_1,q_2)=q_1^Tq_2=\frac{1}{14}(132-165+33)=0$$

$$g_1=q_1 \qquad g_2=q_2+r_{12}q_1 \qquad [g_1\ \ g_2]=[q_1\ \ q_2]\begin{bmatrix}1 & r_{12}\\ & 1\end{bmatrix}$$

超定方程组QR分解算法

$$G=[g_1\ \ g_2]\quad Q=[q_1\ \ q_2]\ \rightarrow\ G=QR$$

$$\rightarrow\ GX=\beta\qquad G=\begin{bmatrix}2 & 4\\ 3 & -5\\ 1 & 2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2 & 33/7\\ 3 & -55/14\\ 1 & 33/14\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -5/14\\ & 1\end{bmatrix}$$

$$\rightarrow\ (QR)X=\beta$$

单位上三角方程组

$$(Q^TQ)=\begin{bmatrix}14 & \\ & 605/14\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & -5/14\\ & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=(Q^TQ)^{-1}Q^T\beta\qquad Q^T\beta=\begin{bmatrix}37\\ 759/14\end{bmatrix}$$

$$\rightarrow\ \begin{bmatrix}1 & -5/14\\ & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}37/44\\ 69/55\end{bmatrix}$$

超定方程组最小二乘解 $\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}34/11\\ 69/55\end{bmatrix}$

矩阵G的QR(正交三角)分解算法

$$G=(g_{ij})_{m\times n}\quad m>n$$

将矩阵按列分块，记为

$$G=[g_1, g_2, \cdots\cdots, g_n]$$

正交化过程

① $q_1=g_1$

② $q_2=g_2-r_{12}q_1$, 其中 $r_{12}=(g_2,\ q_1)/(q_1,\ q_1)$

……………………………………………

ⓝ $q_n=g_n-(r_{1n}q_1+r_{2n}q_2+\cdots+r_{n-1,n}q_{n-1})$

其中 $r_{1n}=\dfrac{(g_n,q_1)}{(q_1,q_1)}$ …… $r_{n-1,n}=\dfrac{(g_n,q_{n-1})}{(q_{n-1},q_{n-1})}$

$$g_1 = q_1$$
$$g_2 = r_{12}q_1 + q_2$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\boldsymbol{g_n = r_{1n}q_1 + r_{2n}q_2 + \cdots + r_{n-1,n}q_{n-1} + q_n}$$

记 $Q = [q_1, q_2, \cdots\cdots, q_n]$

$$G = [g_1 \ \ g_2 \cdots\cdots g_n]$$
$$= [q_1 \ \ (r_{12}q_1 + q_2) \ \ \cdots\cdots \ \ (r_{1n}q_1 + \cdots + r_{n\text{-}1,n}q_{n\text{-}1} + q_n)]$$

$\rightarrow$ $G = [q_1, q_2, \cdots\cdots, q_n]R$

$\rightarrow$ $G = QR$

其中 $\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{1} & \boldsymbol{r_{12}} & \boldsymbol{r_{13}} & \cdots & \boldsymbol{r_{1n}} \\ & \boldsymbol{1} & \boldsymbol{r_{23}} & \cdots & \boldsymbol{r_{2n}} \\ & & \ddots & \cdots & \vdots \\ & & & \boldsymbol{1} & \boldsymbol{r_{n-1,n}} \\ & & & & \boldsymbol{1} \end{bmatrix}$

多项式拟合用于数据平滑处理（五点抛物线拟合）

t	······	-2	-1	0	1	2	······
y	······	y_{k-2}	y_{k-1}	y_k	y_{k+1}	y_{k+2}	······

设拟合函数为: $P(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2$ （抛物线）

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{k-2} \\ y_{k-1} \\ y_k \\ y_{k+1} \\ y_{k+2} \end{bmatrix}$$

➔ 目的：光滑 y_k

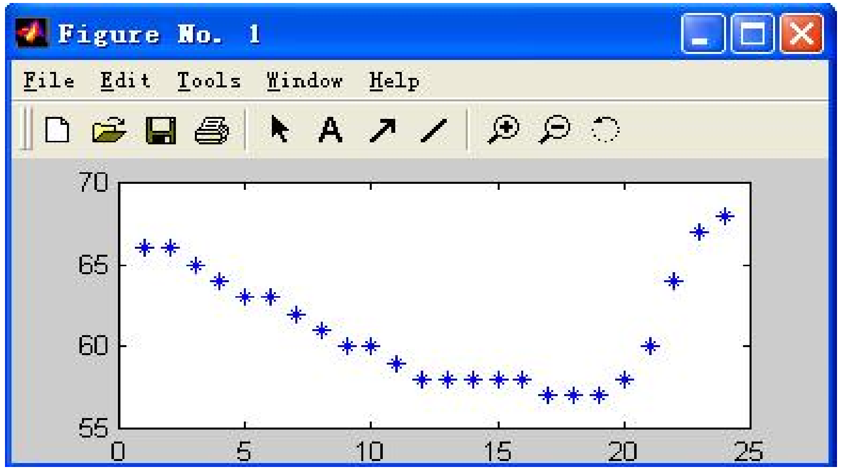
步骤：
1) 算出 a_0, a_1, a_2 得到 $P(t)$

2) 重新代入 $t=0$，得到新的 y_k 替换之前得到 y_k 这点的平滑数据

温度数据的平滑处理

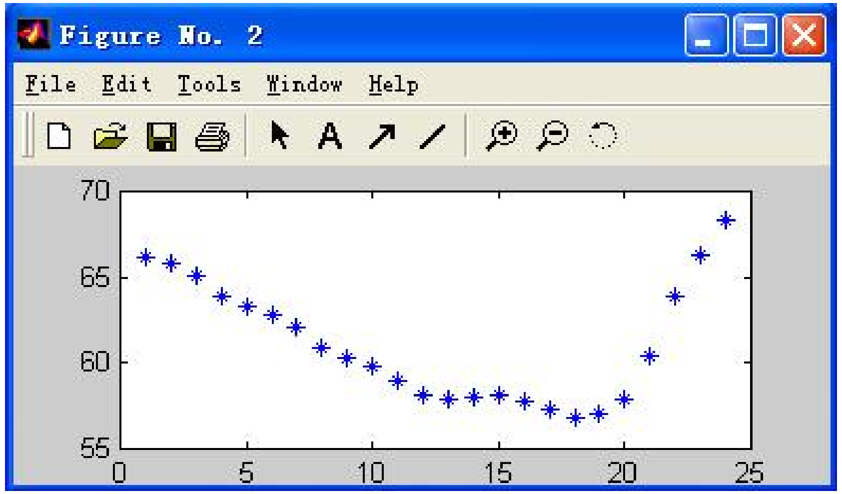
66, 66, 65, 64, 63, 63, 62, 61, 60, 60, 59, 58,
58, 58, 58, 58, 57, 57, 57, 58, 60, 64, 67, 68

原始数据 →



五点抛物线拟合公式处理数据

数据平滑后 →



血液中酒精含量数据拟合实验

国标GB19522-2004规定，驾驶员血液中酒精含量≥20毫克/百毫升，≤80毫克/百毫升为饮酒驾车，血液中酒精含量≥80毫克/百毫升为醉酒驾车。

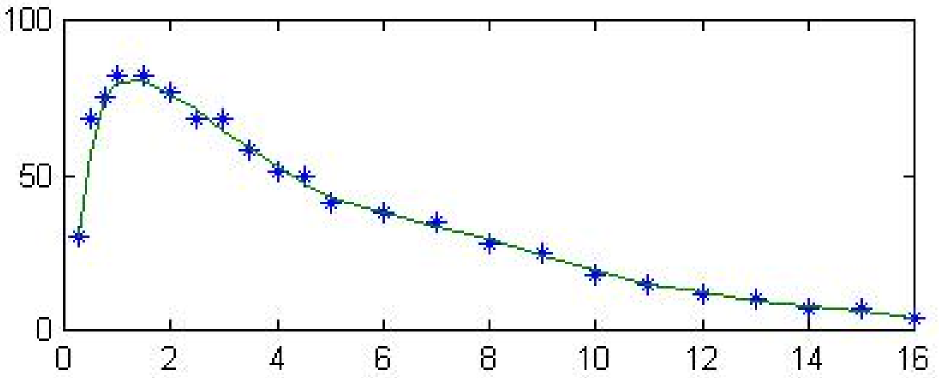
对某志愿者饮酒后做间隔时间酒精测试，数据如下

时间（小时）	0.25	0.5	0.75	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5
酒精含量	30	68	75	82	82	77	68	68	58	51	50	41
时间（小时）	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	
酒精含量	38	35	28	25	18	15	12	10	7	7	4	

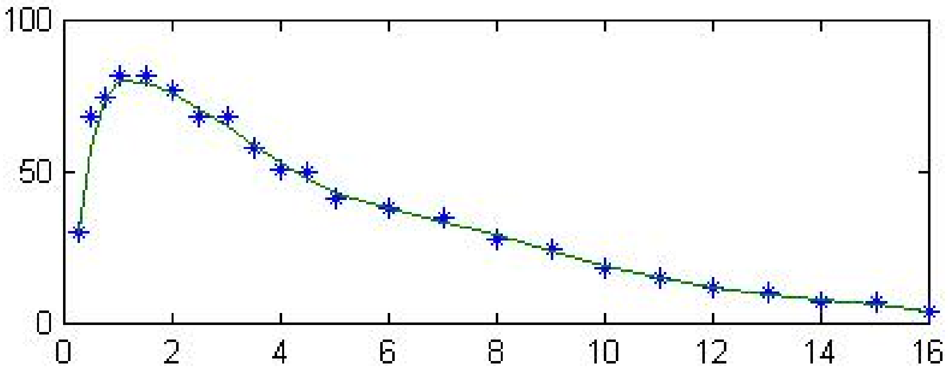
确定常微分方程 $$\frac{d^2u}{dt^2}+p\frac{du}{dt}+qu=0$$

数据平滑

$$u_k \leftarrow \frac{1}{3}(u_{k-1} + u_k + u_{k+1})$$



五点抛物线拟合光滑



数值导数计算

左导数近似 $$u'(x_k - 0) \approx \frac{u_k - u_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} \quad (k = 2, \cdots, m)$$

右导数近似 $$u'(x_k + 0) \approx \frac{u_{k+1} - u_k}{x_{k+1} - x_k} \quad (k = 1, \cdots, m-1)$$

一阶导数计算

$$u'_k \leftarrow \frac{1}{2}\left[\frac{u_{k+1}-u_k}{x_{k+1}-x_k}+\frac{u_k-u_{k-1}}{x_k-x_{k-1}}\right] \qquad (k=2,\cdots,m-1)$$

二阶导数计算 （参见：数值分析第7讲）

$$u''_k \leftarrow \left[\frac{u_{k+1}-u_k}{x_{k+1}-x_k}-\frac{u_k-u_{k-1}}{x_k-x_{k-1}}\right]/(x_{k+1}-x_{k-1})/2$$

$$(k=2,\cdots,m-1)$$

设 $u(t)$ 满足二阶常微分方程

$$u''+pu'+qu=0$$

将数据 u''_k, u'_k, u_k 代入，得线性方程组

数据拟合确定常微分方程

$$u_k'' + pu_k' + qu_k = 0 \qquad (k = 2, \cdots, m-1)$$

$$\rightarrow \begin{cases} pu_2' + qu_2 = -u_2'' \\ pu_3' + qu_3 = -u_3'' \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ pu_{m-1}' + qu_{m-1} = -u_{m-1}'' \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} u_2' & u_2 \\ u_3' & u_3 \\ \vdots & \vdots \\ u_{m-1}' & u_{m-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} u_2'' \\ u_3'' \\ \vdots \\ u_{m-1}'' \end{bmatrix}$$

解超定方程组,求出 p , q 的估计值

得二阶常微分方程 $u'' + pu' + qu = 0$

求解辅助方程 $\lambda^2 + p\lambda + q = 0$

$$\lambda_{1,2} = \frac{-p \pm \sqrt{p^2 - 4q}}{2}$$

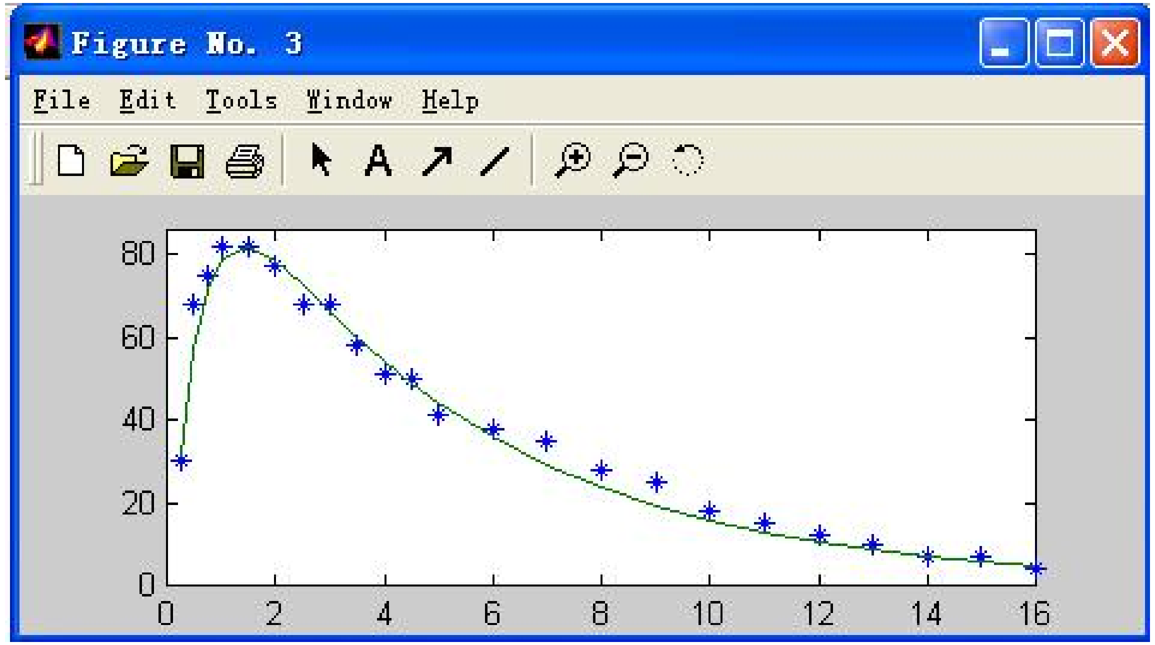
得常微分方程通解

$$u(t) = C_1 \exp(\lambda_1 t) + C_2 \exp(\lambda_2 t)$$

利用数据确定系数 C_1 和 C_2

数据拟合确定常微分方程

数据拟合曲线图



$$u(t) = 127.24\exp(-0.21t) - 144.03\exp(-1.85t)$$

结论:饮酒后1小时到1.5小时血液中酒精含量达到峰值。10小时后血液中酒精含量降至正常。

数据拟合确定常微分方程

希尔伯特矩阵

$$H_n = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & \cdots & 1/n \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/(n+1) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1/n & 1/(n+1) & \cdots & 1/(2n-1) \end{bmatrix}$$

条件数如下

n	2	3	4	5	6
$C(H_n)$	1.92e+1	5.24e+2	1.55e+4	4.76e+5	1.49e+7

猜测：希尔伯特矩阵条件数以指数规律增长。即，设矩阵阶数为n，有

$$\mathrm{Cond}(H_n) \approx \exp(\, a\, n + b\,)$$

用数据拟合的方法验证。

学到了什么?

- 数据拟合的非线性模型
- 最小二乘法几何意义
- 超定方程组QR分解算法
- 数据拟合确定常微分方程