

3.4 曲线拟合的最小二乘法

朱升峰

华东师范大学 数学科学学院

2026 年 4 月

曲线拟合的最小二乘法

已知有关 $f(x)$ 的离散数据

x	x_0	x_1	\dots	x_m
$f(x)$	y_0	y_1	\dots	y_m

要找函数 $y = S^*(x)$ 与 $f(x)$ 最近, 几何上看所给数据拟合。记误差

$$\delta = (\delta_0, \delta_1, \dots, \delta_m)^T$$

其中 $\delta_i = S^*(x_i) - y_i$ ($i = 0, 1, \dots, m$).

设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 是线性无关函数族,

$\varphi = \text{span}\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\} \subset C[a, b]$

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

其中

$$S(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \dots + a_n\varphi_n(x) \quad (n < m).$$

一般情形：加权平方和

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

$\omega(x) \geq 0$ 是 $[a, b]$ 上的权函数，表示不同点处的数据比重不同。
求 $S^*(x)$ 的该问题等价于

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

$I(a_0, a_1, \dots, a_n)$ 是关于 a_0, a_1, \dots, a_n 的多元二次函数。由多元函数求最小值的必要条件得

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

即

$$\frac{\partial I}{\partial a_k} = 2 \sum_{i=0}^m \omega_i \left[\sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_i) - f(x_i) \right] \varphi_k(x_i) = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

记

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) \varphi_k(x_i) \varphi_j(x_i) \quad k, j = 0, 1, \dots, n.$$

$$(f, \varphi_k) = \sum_{i=0}^m \omega(x_i) f(x_i) \varphi_k(x_i) \equiv d_k, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

关于 a_0, a_1, \dots, a_n 的线性方程组

$$\sum_{j=0}^n (\varphi_k, \varphi_j) a_j = d_k, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

称之为法方程

$$\begin{bmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

$$Ga = d$$

$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 线性无关 \Leftrightarrow 系数矩阵行列式不为零?

定义 1

设 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$ 的任意线性组合在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m (m \geq n)$ 上至多只有 n 个不同的零点, 则称 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 满足 Haar 条件.

定理 2

$\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x) \in C[a, b]$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 满足 Haar 条件, 则法方程系数矩阵非奇异, 即法方程存在唯一解 $a_k = a_k^*$ ($k = 0, 1, \dots, n$)。

- $1, x, \dots, x^n$ 在点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 上满足 Haar 条件。

令

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

$S^*(x)$ 是 $f(x)$ 在 Φ 中的唯一最佳平方逼近函数, 令 $\delta(x) = f(x) - S^*(x)$, 则最佳平方逼近的误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2 = \sum_{k=0}^n a_k^* (\varphi_k(x), f(x)).$$

若取 $\varphi_k(x) = x^k, \rho(x) \equiv 1, f(x) \in C[0, 1]$, 则要在 H_n 中求 n 次最佳平方逼近多项式

$$S^*(x) = a_0^* + a_1^* x + \dots + a_n^* x^n$$

- 当 n 较大时, Hilbert 矩阵高度病态, 选用 $\{1, x, \dots, x^n\}$ 作基直接求解较困难, 通常采用正交基。

例 求下列数据的拟合曲线

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

解 画散点图看到各点在一条直线附近, 可用线性函数作拟合曲线。

$$S_1(x) = a_0 + a_1x, \quad m = 4, \quad n = 1, \quad \varphi_0(x) = 1, \quad \varphi_1(x) = x.$$

$$(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{i=0}^4 \omega_i = 8, \quad (\varphi_0, \varphi_1) = (\varphi_1, \varphi_0) = \sum_{i=0}^4 \omega_i x_i = 22$$

$$(\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=0}^4 \omega_i x_i^2 = 74, \quad (\varphi_0, f) = \sum_{i=0}^4 \omega_i f_i = 47$$

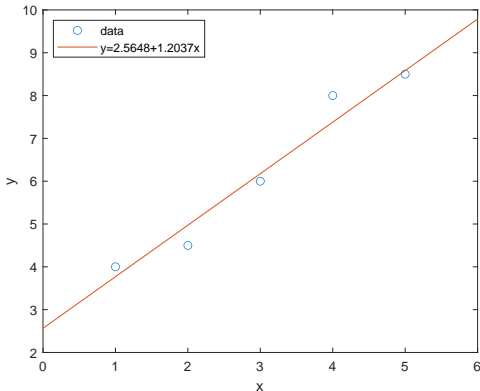
$$(\varphi_1, f) = \sum_{i=0}^4 \omega_i x_i f_i = 145.5$$

解线性方程组

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

解出 $a_0 = 0.934$, $a_1 = 0.426$, 故

$$S_1^*(x) = 2.5648 + 1.2037x.$$



非线性最小二乘拟合

有时需要非线性函数，如指数函数、对数函数、幂函数等拟合给定的数据，这时建立的法方程是一个非线性方程组，这类拟合问题称为**非线性最小二乘拟合**。

思路：作变量代换，转化为线性拟合

- $S(x) = ae^{bx}$

令 $\bar{y} = \ln y$, 则 $\bar{y}(x) = bx + A$, 其中 $A = \ln a$, 即 $a = e^A$.

- $S(x) = a \ln x + b$

令 $\bar{x} = \ln x$, 则 $y(x) = a\bar{x} + b$

- $S(x) = ax^b$

令 $\bar{y} = \ln y$, $\bar{x} = \ln x$, 则 $\bar{y}(x) = b\bar{x} + A$, 其中 $A = \ln a$, 即 $a = e^A$.

例 设数据 (x_i, y_i) ($i = 0, 1, 2, 3, 4$) 由表给出. 表第 4 行为 $\ln y_i = \bar{y}_i$, 画散点图确定模型为 $y = ae^{bx}$, 用最小二乘法确定 a 和 b .

i	0	1	2	3	4
y_i	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00
y_i	5.10	5.79	6.53	7.45	8.46
\bar{y}	1.629	1.756	1.876	2.008	2.135

解 画散点图确定曲线方程为 $y = ae^{bx}$, 两边取对数得 $\ln y = \ln a + bx$, 若令 $\bar{y} = \ln y$, $A = \ln a$, 则得 $\bar{y} = A + bx$, 确定 A, b , 先将 (x_i, y_i) 转化为 (x_i, \bar{y}_i)

$$(\varphi_0, \varphi_0) = 5, \quad (\varphi_0, \varphi_1) = \sum_{i=0}^4 x_i = 7.5, \quad (\varphi_1, \varphi_1) = \sum_{i=0}^4 x_i^2 = 11.875,$$

$$(\varphi_0, \bar{y}) = \sum_{i=0}^4 \bar{y}_i = 9.404, \quad (\varphi_1, \bar{y}) = \sum_{i=0}^4 x_i \bar{y}_i = 14.422.$$

法方程

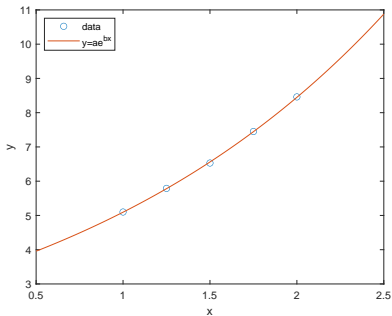
$$\begin{cases} 5A + 7.50b = 9.404 \\ 7.50A + 11.875b = 14.422 \end{cases}$$

解得

$$A = 1.122, b = 0.505, a = e^A = 3.071$$

最小二乘法拟合曲线为

$$y = 3.071e^{0.505x}$$



用正交多项式作最小二乘拟合

若 $\{\varphi_j(x)\}_{j=0}^n$ 是关于点集带权正交的函数族, 即

$$(\varphi_j(x), \varphi_k(x)) = \begin{cases} 0, & j \neq k \\ A_k > 0, & j = k \end{cases}$$

此时法方程的系数矩阵 G 为非奇异对角阵, 法方程解为

$$a_k^* = \frac{(f, \varphi_k)}{(\varphi_k, \varphi_k)}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

最佳平方逼近函数为

$$S^*(x) = \sum_{k=0}^n \frac{(f(x), \varphi_k(x))}{\|\varphi_k(x)\|_2^2} \varphi_k(x).$$

最佳平方逼近的误差为

$$\|\delta(x)\|_2^2 = \|f(x)\|_2^2 - \sum_{k=0}^n \frac{(\varphi_k, f)^2}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

正交多项式族

根据点集 $\{x_i\}_{i=0}^m$ 及权函数 $\omega(x)$, 用递推公式构造带权正交的多项式 $\{p_k(x)\}_{k=0}^n$:

$$\begin{cases} p_0(x) = 1, & p_1(x) = x - \alpha_0 \\ p_{k+1}(x) = (x - \alpha_k)p_k(x) - \beta_k p_{k-1}(x), & k = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha_k = \frac{(xp_k, p_k)}{(p_{k-1}, p_{k-1})}, & k = 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ \beta_k = \frac{(p_k, p_k)}{(p_{k-1}, p_{k-1})}, & k = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

可以证明 $\{p_k(x)\}$ 正交。

由正交多项式作最小二乘拟合, 可计算出

$$a_k^* = \frac{(f, p_k)}{(p_k, p_k)} = \frac{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) f(x_i) p_k(x_i)}{\sum_{i=0}^m \omega(x_i) p_k^2(x_i)}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

代入

$$S^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + \dots + a_n^* p_n(x).$$

例 给定数据表, 求二次最小二乘拟合多项式

x_i	0	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
y_i	1.00	1.75	1.96	2.19	2.44	2.71	3.00

解

$$(p_0, p_0) = \sum_{i=0}^6 1 = 7, (f, p_0) = \sum_{i=1}^6 y_i = 15.05, (xp_0, p_0) = \sum_{i=1}^6 x_i = 4.5$$

$$a_0^* = (f, p_0) / (p_0, p_0) \approx 2.15, \quad \alpha_0 = (xp_0, p_0) / (p_0, p_0) \approx 0.64$$

$$p_1(x) = x - 0.64 \quad a_1^* \approx 1.98, \quad \alpha_1 \approx 0.36, \quad \beta_1 \approx 0.094$$

$$p_2(x) = x^2 - 0.98x + 0.12 \quad a_2^* \approx 1.00$$

$$S_2^*(x) = a_0^* p_0(x) + a_1^* p_1(x) + a_2^* p_2(x) = x^2 + x + 1$$

- 正交多项式是目前为止多项式拟合最好的方法：
不用解线性方程组，根据次数 n ，只用递推公式方便地计算正交多项式。
- MATLAB 正交多项式最小二乘拟合函数：

$$p = \text{polyfit}(x,y,n)$$

输入参数 $x := [x_0, x_1, \dots, x_m]$; $y := [y_0, y_1, \dots, y_m]$

返回次数为 n 的多项式 $p(x)$ 的系数。

p 中的系数按降幂排列， p 的长度为 $n + 1$ 。

- 见 [exp32.m](#)