第三章 数据拟合法

不用插值法建立实验模型原因：

1° 数据点存在误差

2° 高次多项式效果很差

3° 分段插值不反映物理本质.

3.1 超定方程组与最小二乘法

对超定方程组 $Ax=b$，按目标函数 $F=(b_i-A_{ij}x_j)^2$ 优化.

求F的极值，令 $\frac{\partial F}{\partial x_k}=0$ 得

$$2(b_i-A_{ij}x_j)(-A_{ik})=0$$

$$\Rightarrow A_{ik}A_{ij}x_j=A_{ik}b_i$$

$$\Rightarrow A^TAx=A^Tb \quad \text{(正规方程组)}$$

其中，系数矩阵 A^TA 是对称方阵；若A是列线性无关矩阵，则由 $x^T(A^TA)x=(Ax)^T(Ax)>0$ 知，(A^TA)正定。

注：正规方程组求解时，可用 LDL^T 分解做；不过对3阶及以下方程组，方法间区别不大.

3.2 多项式拟合.

$A=(x_i^{j-1})$

$A^TA=(\sum_k x_k^{i+j-2})$

$A^Tb=(x_j^{i-1}y_{j-1})$

① 用m次多项式拟合n个数据点，$(m<n-1)$　$y=a_0+a_1x+\cdots+a_mx^m$

② 用 $\ln y=\ln a+bx$ 拟合 $y=ae^{bx}$ 时，结果不符合 L_2 范数最小的约束。

③ 多变量线性拟合.

3.3 正交多项式拟合.

如果用 $\psi_m(x)=\sum_{k=0}^{m}\alpha_kP_k(x)$，$P_k(x)$为给定k次多项式拟合，

目标函数 $\varphi=\sum_{i=1}^{N}w_i\left(y_i-\sum_{k=0}^{m}\alpha_kP_k(x_i)\right)^2$，其中$w_i$为数据点的权重.

求φ的极值，得正规方程组

$$\sum_{k=0}^{m}G_{jk}\alpha_k-G_j=0 \quad (j=0,\cdots,m)$$

$$G_{jk}=\sum_{i=1}^{N}w_iP_j(x_i)P_k(x_i) \qquad G_j=\sum_{i=1}^{N}w_iy_iP_j(x_i)$$

定义满足关系 $G_{jk}=0\ (j\neq k)$；$G_{jj}>0$ 的多项式组 $\{P_k(x)\}$ 为关于某组 $\{x_i\}$ 和权值 $\{w_i\}$ 的正交多项式族。

这时 $\alpha_j=G_j/G_{jj}$