

解非线性的最小二乘法拟合曲线的数值延拓法

钮 群

(河海大学理学院, 江苏 南京 210098)

摘要 非线性函数的最小二乘法拟合曲线需要求解一个非线性方程组. 根据解非线性方程组的全局收敛方法, 利用数值延拓法研究了非线性函数的最小二乘法拟合曲线的计算方法, 并给出其算法为全局收敛的充分条件.

关键词 最小二乘法 拟合曲线 数值延拓法 全局收敛

中图分类号 O241.5 **文献标识码** A **文章编号** 1000-1980(2003)05-0597-04

1 问题的提出

给定 N 对数据点 $(x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{pk}, y_k) (k = 1, 2, \dots, N)$, 要求确定函数 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_p, b_1, b_2, \dots, b_n)$ 中的非线性参数 $b_1, b_2, \dots, b_n$, 使得 $E = \sum_{k=1}^N [f(x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{pk}, b_1, b_2, \dots, b_n) - y_k]^2$ 极小. 其中 $f(x_1, x_2, \dots, x_p, b_1, b_2, \dots, b_n)$ 关于 $b_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 具有二阶连续偏导数, 记 $y = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T \in \mathbb{R}^n, n < N$. 此种求 $b_1, b_2, \dots, b_n$ 的方法称为最小二乘法.

令 $\frac{\partial E}{\partial b_i} = 0 (i = 1, 2, \dots, n)$, 则向量 $y = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$ 满足的非线性方程为

$$F(y) = 0 \quad (1)$$

其中 $F(y) = \left(\frac{\partial E}{\partial b_1}, \frac{\partial E}{\partial b_2}, \dots, \frac{\partial E}{\partial b_n} \right)^T$. 由假设, F 可微, 若记

$$F'(y) = (F_{ij})_{n \times n} \quad (2)$$

则
$$F_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial b_i \partial b_j} = 2 \sum_{k=1}^N \left[\left(\frac{\partial f}{\partial b_i} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial b_j} \right) + (f - y_k) \frac{\partial^2 f}{\partial b_i \partial b_j} \right] \quad (3)$$

其中 $f = f(x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{pk}, b_1, b_2, \dots, b_n)$, 且 $F_{ij} = F_{ji}$.

2 求拟合曲线的全局收敛方法

为了求出拟合曲线 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_p, b_1, b_2, \dots, b_n)$, 必须求解非线性方程(1). 而一般采用迭代法求解非线性方程组往往只是局部收敛, 这就使得初始向量很难确定. 本文采用数值延拓法建立求解(1)的全局收敛方法.

所谓数值延拓法, 可描述如下: 为求解方程(1), 引入一个参数 s , 将(1)嵌入一参数方程 $B(y, s) = 0$, 使得当 $s = 0$ 时, $B(y, 0) = F(y) - F(y^0)$, $s = 1$ 时, $B(y, 1) = F(y)$. 参数方程 $B(y, s) = 0$ 的构造可以有多种形式. 例如可以令

$$B(y, s) = F(y) + (s - 1)F(y^0) \quad y \in \mathbb{R}^n, \quad s \in [0, 1]$$

其中 y^0 是取定的. 假定对每一个 $s \in [0, 1]$, 方程组 $B(y, s) = 0$ 有连续解 $y = y(s)$, 则它的一个端点是初值 $y^0 = y(0)$, 另一端点 $y(1) = y^*$ 就是 $F(y) = B(y, 1) = 0$ 的解.

对于非线性方程组 $F(y) = 0 (y \in \mathbb{R}^n)$, 建立以下求解迭代格式: 设 $y^0 \in \mathbb{R}^n$, $\{k\}$ 为某自然数序列 ($k = 1$,

$2, \dots, m-1), [0, 1]$ 的一组分割为 $0 = s_0 < s_1 < \dots < s_m = 1$, 则

$$\begin{cases} y_k^{j+1} = y_k^j - A(y_k^j)B(y_k^j, s_k) & (j = 0, 1, 2, \dots, j_k - 1) \\ y_k^0 = y_{k-1}^{j_{k-1}} & (k = 1, 2, \dots, m-1) \\ y_1^0 = y^0 \end{cases} \quad (4)$$

$$y_m^{j+1} = y_m^j - A(y_m^j)B(y_m^j, 1) \quad y_m^0 = y_{m-1}^{j_{m-1}} \quad (j = 0, 1, 2, \dots) \quad (5)$$

其中 $A(y)$ 为矩阵, $B(y, s) = F(y) + (s-1)F(y^0)^{[1]}$.

定义 1 如果对于任取初始向量 $y^0 \in \mathbb{R}^n$, 存在 $[0, 1]$ 上的分割 $0 = s_0 < s_1 < s_2 < \dots < s_m = 1$, 以及自然数序列 $\{j_k\} (k = 1, 2, \dots, m-1)$, 使得迭代格式(4), (5)收敛于 $F(y) = 0$ 的解, 则称求解(1)的数值延拓法(4), (5)可行.

引理 1^[2] 如果存在非异矩阵 $A(y)$, 满足 $\|A(y)\| \leq \alpha(\|y\|)$, $\|I - A(y)F'(y)\| \leq \beta(\|y\|) < 1$ ($\alpha(s), \beta(s)$ 为连续函数), 且 $\int_0^{+\infty} \alpha^{-1}(s)[1 - \beta(s)]ds = +\infty$, 则数值延拓法(4), (5)可行.

回到方程(1), 由(3)可知 $F_{ij} = 2 \sum_{k=1}^N \left[\left(\frac{\partial f}{\partial b_i} \right)^2 + (f - y_k) \frac{\partial^2 f}{\partial b_i^2} \right]$; 设 $F_{ii} \neq 0$, 在迭代格式(4), (5)中取 $A(y) = \text{diag}(F_{11}^{-1}, F_{22}^{-1}, \dots, F_{nn}^{-1})$. 现在给出迭代格式(4), (5)全局收敛的充分条件.

定理 1 设

$$\begin{aligned} (a) \quad & \min_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{k=1}^N [(f_{b_i})^2 + (f - y_k)f_{b_i b_i}] \right| \geq \alpha^*(b_1, b_2, \dots, b_n) > 0 \\ & \max_{1 \leq i \leq n-t} \left[\sum_{k=1}^N |(f_{b_i})(f_{b_{i+t}}) + (f - y_k)f_{b_i b_{i+t}}| \right] \leq \frac{1}{2} \alpha_t(b_1, b_2, \dots, b_n) \end{aligned}$$

其中 α^*, α_t 连续, α^* 关于 b_i 分别单调减少, α_t 关于 b_i 分别单调增加, ($i = 1, 2, \dots, n, t = 1, 2, \dots, n-1$).

(b) $N(s) = \alpha^*(s, s, \dots, s) - \sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t(s, s, \dots, s) > 0 (s \geq 0)$, 且 $\int_0^{+\infty} N(s)ds = +\infty$, 则数值延拓法(4), (5)可行.

证明 由(2)可知 $F'(y) = \text{diag}(F_{11}, F_{22}, \dots, F_{nn}) + G(y)$, $G(y) = \sum_{t=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t} e_i e_{i+t}^T + \sum_{t=1}^{n-1} \sum_{i=1}^{n-t} F_{i+t, i} e_{i+t} e_i^T$.

$$\begin{aligned} \text{令 } G_t &= \sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t} e_i e_{i+t}^T, H_t = \sum_{i=1}^{n-t} F_{i+t, i} e_{i+t} e_i^T, \text{ 则 } G(y) = \sum_{t=1}^{n-1} G_t + \sum_{t=1}^{n-1} H_t, e_i = (\underbrace{0, \dots, 0}_{i}, 1, 0, \dots, 0)^T, \\ \|G(y)\|_2 &\leq \sum_{t=1}^{n-1} \|G_t\|_2 + \sum_{t=1}^{n-1} \|H_t\|_2, \forall U = (U_1, U_2, \dots, U_n) \in \mathbb{R}^n (U \neq 0), G_t U = \sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t} e_i e_{i+t}^T U = \\ \sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t} U_{i+t} e_i, \|G_t U\|_2^2 &= (G_t U)^T (G_t U) = \left(\sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t} U_{i+t} e_i^T \right) \left(\sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t} U_{i+t} e_i \right) = \sum_{i=1}^{n-t} F_{i, i+t}^2 U_{i+t}^2 \leq \\ \left(\max_{1 \leq i \leq n-t} |F_{i, i+t}| \right)^2 \sum_{i=1}^{n-t} U_{i+t}^2 &\leq \left(\max_{1 \leq i \leq n-t} |F_{i, i+t}| \right)^2 \|U\|_2^2, \|G_t\|_2 = \sup_{\|U\| \neq 0} \frac{\|G_t U\|_2}{\|U\|_2} \leq \max_{1 \leq i \leq n-t} |F_{i, i+t}|. \end{aligned}$$

同理可证 $\|H_t\|_2 \leq \max_{1 \leq i \leq n-t} |F_{i+t, i}|$. 由于 $F_{i+t, i} = F_{i, i+t}$, 所以

$$\begin{aligned} \|G(y)\|_2 &\leq 2 \sum_{t=1}^{n-1} \left(\max_{1 \leq i \leq n-t} |F_{i, i+t}| \right) = 4 \sum_{t=1}^{n-1} \left\{ \max_{1 \leq i \leq n-t} \left| \sum_{k=1}^N [(f_{b_i})(f_{b_{i+t}}) + (f - y_k)f_{b_i b_{i+t}}] \right| \right\} \leq \\ &4 \sum_{t=1}^{n-1} \left\{ \max_{1 \leq i \leq n-t} \left[\sum_{k=1}^N |(f_{b_i})(f_{b_{i+t}}) + (f - y_k)f_{b_i b_{i+t}}| \right] \right\} \end{aligned}$$

由条件(a)可知 $\|G(y)\|_2 \leq 2 \sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t(b_1, b_2, \dots, b_n)$. 因为 $b_i \leq |b_i| \leq \|y\|_2 (i = 1, 2, \dots, n)$, 且 α_t 单调增

加, 所以 $\alpha_t(b_1, b_2, \dots, b_n) \leq \alpha_t(\|y\|_2, \|y\|_2, \dots, \|y\|_2)$, 即 $\|G(y)\|_2 \leq 2 \sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t(\|y\|_2, \|y\|_2, \dots, \|y\|_2)$.

$\|y\|_2)$.

同理可证

$$\begin{aligned} \|A(y)\|_2 &= \|\text{diag}(F_{11}^{-1}, F_{22}^{-1}, \cdots, F_{nn}^{-1})\|_2 \leq \max_{1 \leq i \leq n} |F_{ii}^{-1}| = \\ &= \frac{1}{\min_{1 \leq i \leq n} |F_{ii}|} = \frac{1}{2 \min_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{k=1}^N [(f_{b_i})^2 + (f - y_k) f_{b_i b_i}] \right|} \leq \\ &= \frac{1}{2\alpha^*(b_1, b_2, \cdots, b_n)} \leq \frac{1}{2\alpha^*(\|y\|_2, \|y\|_2, \cdots, \|y\|_2)} = \alpha(\|y\|_2) \end{aligned}$$

因为 $F'(y) = \text{diag}(F_{11}, F_{22}, \cdots, F_{nn}) + G(y)$, 所以 $A(y)F'(y) = I + A(y)G(y)$, $\|I - A(y)F'(y)\|_2 \leq$

$$\begin{aligned} \|A(y)\|_2 \cdot \|G(y)\|_2 &\leq \frac{2 \sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t(\|y\|_2, \|y\|_2, \cdots, \|y\|_2)}{2\alpha^*(\|y\|_2, \|y\|_2, \cdots, \|y\|_2)} = \frac{\sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t}{\alpha^*} = \beta(\|y\|_2). \text{ 由于 } N(\|y\|_2) = \\ &= \alpha^* - \sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t > 0, \text{ 所以 } \beta(\|y\|_2) < 1, \int_0^{+\infty} \alpha^{-1}(s)[1 - \beta(s)]ds = \int_0^{+\infty} 2\alpha^*(s, s, \cdots, s) \left[1 - \sum_{t=1}^{n-1} \alpha_t(s, s, \cdots, s) / \right. \\ &\left. \alpha^*(s, s, \cdots, s) \right] ds = 2 \int_0^{+\infty} N(s) ds = +\infty. \text{ 由引理 1 可知数值延拓法 (4), (5) 可行.} \end{aligned}$$

假设非线性拟合曲线函数为 $z = \varphi(x_1, x_2, \cdots, x_p, b_1) + \sum_{j=2}^n \varphi_j(x_1, x_2, \cdots, x_p) b_j$, 其中 $\varphi(x_1, x_2, \cdots, x_p, b_1)$ 关于 b_1 具有二阶连续偏导数. 在迭代格式(4), (5)中, 令

$$f = f_k = \varphi(x_{1k}, x_{2k}, \cdots, x_{pk}, b_1) + \sum_{j=2}^n \varphi_j(x_{1k}, x_{2k}, \cdots, x_{pk}) b_j$$

则得到求参数向量 $y = (b_1, b_2, \cdots, b_n)^T$ 所满足方程(1)的解的迭代算法.

令 $m_{jk} = \varphi_j(x_{1k}, x_{2k}, \cdots, x_{pk})$ ($j = 2, 3, \cdots, n; k = 1, 2, \cdots, N$), $m = \min_{\substack{2 \leq j \leq n \\ 1 \leq k \leq N}} |m_{jk}|$, $M = \max_{\substack{2 \leq j \leq n \\ 1 \leq k \leq N}} |m_{jk}|$, $q = \min_{2 \leq j \leq n} \left(\sum_{k=1}^N m_{jk}^2 \right)$, $L = \max_{1 \leq t \leq n-2} \max_{2 \leq j \leq n-t} \left(\sum_{k=1}^N |m_{jk} m_{j+t, k}| \right)$, 则由定理 1 可得以下 2 个推论.

推论 1 如果 (a) $\left| \sum_{k=1}^N [\varphi_{b_1}^2 + (f_k - y_k) \varphi_{b_1 b_1}] \right| \geq q > 0$, (b) $\frac{L}{m} \leq \sum_{k=1}^N |\varphi_{b_1}| \leq \frac{q - \epsilon}{2M(n-1)}$, $\epsilon = \epsilon(b_1, b_2, \cdots, b_n)$ 关于 b_i 分别单调减少 ($i = 1, 2, \cdots, n$), 且 $\epsilon > 0$, $\int_0^{+\infty} \epsilon(s, s, \cdots, s) ds = +\infty$, 则数值延拓法(4), (5)可行.

证明 由 (a) 得 $\min_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{k=1}^N [(f_{b_i})^2 + (f_k - y_k) f_{b_i b_i}] \right| = q > 0$, 由 (b) 得 $\max_{1 \leq i \leq n-t} \left[\sum_{k=1}^N |(f_{b_i})(f_{b_{i+t}}) + (f_k - y_k) f_{b_i b_{i+t}}| \right] = \sum_{k=1}^N |\varphi_{b_1}| |m_{1+t, k}| \leq M \sum_{k=1}^N |\varphi_{b_1}| \leq M \frac{q - \epsilon}{2M(n-1)} = \frac{q - \epsilon}{2(n-1)}$, $E(s) = q - \sum_{t=1}^{n-1} \frac{q - \epsilon}{n-1} = q - (q - \epsilon) = \epsilon > 0$, $\int_0^{+\infty} E(s) ds = \int_0^{+\infty} \epsilon(s, s, \cdots, s) ds = +\infty$. 由定理 1, 可知数值延拓法(4), (5)可行.

推论 2 如果 (a) $\epsilon \leq \left| \sum_{k=1}^N \varphi_{b_i}^2 + (f_k - y_k) f_{b_i b_i} \right| \leq q$, (b) $\frac{L}{m} \leq \sum_{k=1}^N |\varphi_{b_1}| \leq \frac{\delta}{2M(n-1)}$, 其中 $\epsilon = \epsilon(b_1, b_2, \cdots, b_n)$ 关于 b_i ($i = 1, 2, \cdots, n$) 分别单调减少, $\delta = \delta(b_1, b_2, \cdots, b_n)$ 关于 b_i ($i = 1, 2, \cdots, n$) 分别单调增加, 且 $\epsilon(s, s, \cdots, s) > \delta(s, s, \cdots, s)$, 又 $\int_0^{+\infty} [\epsilon(s, s, \cdots, s) - \delta(s, s, \cdots, s)] ds = +\infty$, 则数值延拓法(4), (5)可行.

证明从略.

在实际应用中, 有时会预测或期望 $\sum_{k=1}^N |f_k - y_k| \leq e$ ($e > 0$). 为此, 可适当修正拟合函数中的一些参数, 使相应的数值延拓法(4), (5)可行.

例 给定 N 对数据点 $(x_k, y_k) (k = 1, 2, \cdots, N)$, 其非线性最小二乘法拟合函数为 $z = \lambda b_1 + \sin b_1 x + \sum_{j=2}^n \varphi_j(x) b_j$, 则 $f_k = \lambda b_1 + \sin b_1 x_k + \sum_{j=2}^n \varphi_j(x_k) b_j, \varphi = \lambda b_1 + \sin b_1 x_k, |\sum_{k=1}^N [\varphi_{b_1}^2 + (f_k - y_k) \varphi_{b_1 b_1}]| \geq N |\lambda|^2 - 2 |\lambda| \sum_{k=1}^N |x_k| - (e + 1) \sum_{k=1}^N x_k^2, N |\lambda| - \sum_{k=1}^N |x_k| \leq \sum_{k=1}^N |\varphi_{b_1}| \leq N |\lambda| + \sum_{k=1}^N |x_k|$.

设 λ 满足不等式组

$$\begin{cases} |\lambda|^2 - \frac{2}{N} |\lambda| \sum_{k=1}^N |x_k| - \frac{e+1}{N} \sum_{k=1}^N x_k^2 \geq \frac{q}{N} \\ \frac{L}{NM} + \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |x_k| \leq |\lambda| \leq \frac{q-\varepsilon}{2MN(n-1)} - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N |x_k| \end{cases} \quad (\varepsilon \text{ 为正常数}) \tag{6}$$

显然 $\int_0^{+\infty} \varepsilon \mathrm{d}s = +\infty$.

由推论 1 可知数值延拓法(4), (5)可行.

满足(6)不等式组的 λ 不止一个, 通过计算可取使拟合精度最好的一个. 同时(6)不是(4), (5)收敛的必要条件, 因此对不满足(6)的 λ 有时也给予考虑.

例如用 $z = \lambda b_1 + \sin b_1 x + b_2 x$ 拟合数据点 $(1.011\,0, 2.858\,4), (2.021\,0, 3.921\,4), (3.012\,0, 4.141\,2), (4.363\,0, 4.423\,4), (5.171\,0, 5.274\,3), (6.434\,0, 7.584\,2)$, 由数值延拓法(4), (5)计算得 $\lambda \approx 0.775, b_1 \approx 1.009, b_2 \approx 0.998$, 即拟合曲线为 $z = 0.782 + \sin 1.009x + 0.998x$.

参考文献：

[1] ORTEGA J M, RLEINBOLDT W C. Iterative solution of nonlinear equations in several variables[M]. New York :Academic Press, 1970. 244—248.
[2] 钮群. 解非线性方程组全局收敛方法(I) [J]. 河海大学学报, 1993, 21(2) 95—98.

Numerical continuation method for nonlinear curve fitting
by use of least square method

NIU Qun

(College of Sciences, Hohai Univ., Nanjing 210098, China)

Abstract It is necessary to solve a system of nonlinear equations for fitting the curve of nonlinear function by use of the least square method. Based on the global convergence method for solving the nonlinear equations, the numerical continuation method is adopted to study the least square fitting of nonlinear functions, and the sufficient condition is also given for the numerical method to realize the global convergence.

Key words least square method ; curve fitting ; numerical continuation method ; global convergence