

曲线拟合的极小 l_1 模法

姚健康

河海大学理学院, 南京 210098

[摘要] 曲线拟合被应用于许多领域, 曲线拟合的常用方法是最小二乘法, 本文提出了曲线拟合的极小 l_1 模法。首先研究了极小 l_1 模剩余向量的性质及其计算方法, 利用这些结果可以将曲线拟合的极小 l_1 模法求解问题转化为先求解极小 l_1 模剩余向量, 再求解一个优化问题, 最后求解一个相容的方程组问题。从最后的示例可以看出, 与最小二乘法相比, 本方法的效果较好。

[关键词] 曲线拟合; 极小 l_1 模法; 极小 l_1 模剩余向量; 相容方程组

[中图分类号] O242

[文献标识码] A

[文章编号] 1000-7857(2007)12-0028-04

Minimum l_1 Norm Method for Fitting a Curve

YAO Jiankang

College of Science, Hohai University, Nanjing 210098

Abstract: Least squares method is widely used for fitting a curve. In this paper a minimum l_1 norm method for fitting a curve is proposed. The concept of the minimum l_1 residue vector and its calculation are first discussed. It is then shown that the minimum norm method for fitting a curve can be translated into a new problem, to find a minimum l_1 residue vector and to solve an optimization problem and a consistency equations. Numerical examples show that this method for fitting a curve is effective.

Key Words: fitting a curve; minimum l_1 norm method; minimum l_1 norm residue vector; consistency equations

CLC Number: O242

Document Code: A

Article ID: 1000-7857(2007)12-0028-04

0 引言

在科学实验和统计研究中, 往往需要从已知的实验(或观测)数据 $(x_i, y_i) (i=1, 2, \dots, n)$ 出发, 构造某类函数逼近这组数据, 即假设 $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$ 为已知的某类函数, 求解 $a_1, a_2, \dots, a_m$, 使曲线

$$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \dots + a_m f_m(x)$$

尽可能逼近所有的点 $(x_i, y_i) (i=1, 2, \dots, n; m < n)$, 这就是曲线拟合问题。

常用的曲线逼近已知点的评价标准是使 $\sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2$ 最小, 称为最小二乘法。在某些情况下, 需要考虑另一种评价标准, 使得 $\sum_{i=1}^n |y_i - f(x_i)|$ 最小, 称为极小 l_1 模法, 即求 $a_1, a_2, \dots, a_m$ 满足

$$\min \sum_{i=1}^n |y_i - f(x_i)| \quad (1)$$

记

$$B = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \dots & f_m(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \dots & f_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_1(x_n) & f_2(x_n) & \dots & f_m(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nm} \end{pmatrix}_{n \times m}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

则曲线拟合的极小 l_1 模问题就是求解不相容线性方程组

$$Ba = y \quad (2)$$

的极小 l_1 范数解。若 a^* 为方程组(2)的极小 l_1 范数解, 称 $r^* = Ba^* - y$ 为不相容方程组(2)的极小 l_1 模剩余向量。本文的目的是设法求出极小 l_1 模剩余向量 r^* , 这样 $Ba = y + r^*$ 就是一个相容的线性方程组, 容易求出其解, 即为问题(1)的解。

收稿日期: 2007-02-14

作者简介: 姚健康, 南京市西康路 1 号河海大学理学院, 讲师, 研究方向为最优化理论; E-mail: yaojk@126.com

1 极小 l_1 模剩余向量的性质和求法

由文献[2],有如下定理存在。

定理 设有不相容线性方程组 $Ba=y$, $Ca=y$, 若存在可逆阵 P , 使 $B=CP$, 则这两个方程组的极小 l_1 模剩余向量相同。

下面讨论如何求极小 l_1 模剩余向量。

不妨设 $B=\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$, B_1 为 m 阶可逆阵, 则 $\begin{pmatrix} I \\ B_2 B_1^{-1} \end{pmatrix}$

$B_1 a=y$; 令 $V=B_1 a$, 若 r 为方程组(2)的极小 l_1 模剩余向

量, 由定理可知, $\begin{pmatrix} I \\ B_2 B_1^{-1} \end{pmatrix} V=y$ 与方程组(2)具有相同

的极小 l_1 模剩余向量, 因而 $\begin{pmatrix} I \\ B_2 B_1^{-1} \end{pmatrix} V=y+r$ 为相容线性

方程组。由于

$$V=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$B_2 B_1^{-1} V=\begin{pmatrix} y_{m+1} \\ y_{m+2} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} r_{m+1} \\ r_{m+2} \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

将式(3)代入式(4), 得

$$B_2 B_1^{-1} \left(\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} y_{m+1} \\ y_{m+2} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r_{m+1} \\ r_{m+2} \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix} \quad (5)$$

记

$$B_2 B_1^{-1} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1m} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{n-m,1} & c_{n-m,2} & \cdots & c_{n-m,m} \end{pmatrix}_{n \times m}$$

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-m} \end{pmatrix} = B_2 B_1^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_{m+1} \\ y_{m+2} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

则式(5)可简化为

$$\begin{cases} r_{m+1} - (c_{11}r_1 + c_{12}r_2 + \cdots + c_{1m}r_m) = d_1 \\ r_{m+2} - (c_{21}r_1 + c_{22}r_2 + \cdots + c_{2m}r_m) = d_2 \\ \vdots \\ r_n - (c_{n-m,1}r_1 + c_{n-m,2}r_2 + \cdots + c_{n-m,m}r_m) = d_{n-m} \end{cases}$$

现在的问题就是如何选取 $r_1, r_2, \dots, r_n$, 使得 $\sum_{i=1}^n |r_i|$ 最小。

极小 l_1 模剩余向量可以由下面约束不可微优化问题求得:

$$\begin{aligned} P: \min \sum_{i=1}^n |r_i| \\ \text{st } z_{m+1} - (c_{11}z_1 + c_{12}z_2 + \cdots + c_{1m}z_m) = d_1 \\ z_{m+2} - (c_{21}z_1 + c_{22}z_2 + \cdots + c_{2m}z_m) = d_2 \\ \vdots \\ z_n - (c_{n-m,1}z_1 + c_{n-m,2}z_2 + \cdots + c_{n-m,m}z_m) = d_{n-m} \end{aligned}$$

应用文献[3]的算法, 求得问题 P 的最优解

$$z^* = \begin{pmatrix} * \\ z_1 \\ * \\ z_2 \\ \vdots \\ * \\ z_n \end{pmatrix}$$

则曲线拟合极小 l_1 模问题(1)的解为

$$a^* = B_1^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} + B_1^{-1} \begin{pmatrix} * \\ z_1 \\ * \\ z_2 \\ \vdots \\ * \\ z_m \end{pmatrix}$$

综上所述, 求解曲线拟合极小 l_1 模问题(1)的步骤如下。

1) 计算 B , 并将 B 化为 $\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix}$ 形式, 计算

$$(c_{ij})_{(n-m) \times m} = B_2 B_1^{-1}, \quad \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-m} \end{pmatrix} = B_2 B_1^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_{m+1} \\ y_{m+2} \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

2) 构造最优化问题 P , 并求最优化问题 P 的最优解 z^* 。

3) 求解相容线性方程组 $Ba=y+z^*$, 或者

$$B_1 a = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} * \\ z_1 \\ * \\ z_2 \\ \vdots \\ * \\ z_m \end{pmatrix}。$$

4) 写出问题(1)所求的曲线

$$f(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + \cdots + a_m f_m(x)$$

2 实例

已知下列数据

x_i	-3	-2	-1	0	1	2	3
y_i	1	0	0	0	0	1	2

用极小 l_1 模法求解拟合这组数据的二次多项式函数

$$y = a_1 + a_2 x + a_3 x^2$$

分析与解

$f_1(x)=1, f_2(x)=x, f_3(x)=x^2, m=3, n=7$, 将表中数据代入计算, 得

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

为方便计算, 将 B 和 y 调整为

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 9 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

取

$$B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad B_2 = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix}$$

则有

$$B_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1/2 \\ -1 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad B_2 B_1^{-1} = \begin{pmatrix} -8 & 6 & 3 \\ -3 & 3 & 1 \\ -3 & 1 & 3 \\ -8 & 3 & 6 \end{pmatrix}$$

$$d = B_2 B_1^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

构造约束最优化问题为

$$P: \min \sum_{i=1}^7 |z_i|$$

$$\text{st } z_4 - (-8z_1 + 6z_2 + 3z_3) = -1$$

$$z_5 - (-3z_1 + 3z_2 + z_3) = 0$$

$$z_6 - (-3z_1 + z_2 + 3z_3) = -1$$

$$z_7 - (-8z_1 + 3z_2 + 6z_3) = -2$$

解得最优解即极小 l_1 模剩余向量为

$$z^* = \left(0, 0, \frac{1}{3}, 0, \frac{1}{3}, 0, 0 \right)^T$$

得出相容的线性方程组为

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 9 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

解之得

$$a^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/6 \\ 1/6 \end{pmatrix}$$

所求二次函数为 $y = \frac{1}{6}x + \frac{1}{6}x^2$ 。

图 1 为用极小 l_1 模法所求拟合曲线与实际点的差距。运用最小二乘法求解得 $y = -\frac{1}{7} + \frac{5}{28}x + \frac{5}{28}x^2$, 图 2 是用最小二乘法所求拟合曲线与实际点的差距。

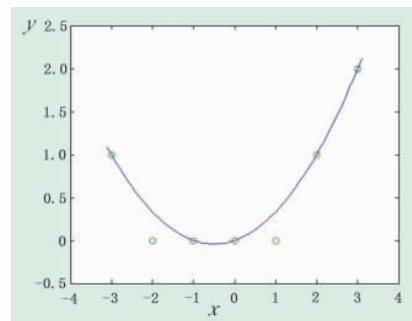


图 1 极小 l_1 模法

Fig. 1 Minimum l_1 norm method

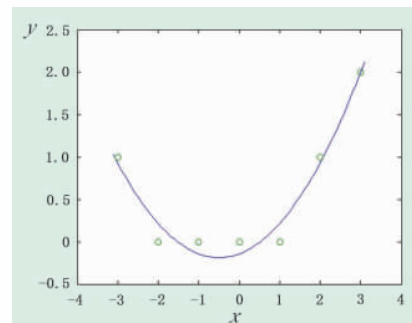


图 2 最小二乘法

Fig. 2 Method of least squares

3 结论

本文所讨论的求解超定线性方程组极小 l_1 范数解的一个解法, 是利用极小 l_1 模剩余向量, 将问题转化为求解一个最优化问题和一个相容线性方程组。这个算法是解决这一问题的一个新算法, 是对其他算法的有益补充和发展, 它具有不扩大规模、简单、易于操作的特点, 为解决这一问题提供了又一个解决方法。

参考文献 (References)

- [1] 李庆扬, 王能超, 易大义. 数值分析 [M]. 北京: 清华大学出版社, 施普林格出版社, 2001.
LI Qingyang, WANG Nengchao, YI Dayi. Numerical analysis [M]. Beijing: Tsinghua University Press, Springer, 2001.
- [2] 崔明根, 权日光. 不相容线性方程组极小极大解的一种新算

法[J]. 计算数学, 1996, 4(18): 349-354.

CUI Minggen, QUAN Riguan. A new algorithm of minimax solution for incompatible system of linear equation [J]. Mathematical Numerica Sinica, 1996, 4(18): 349-54.

- [3] 姚健康, 颜世建. 求线性方程组极小 l_1 范数解的一种算法[J]. 淮阴师范学院学报 (自然科学版), 2003, 1(2): 13-18.
YAO Jiankang, YAN Shijian. An algorithm for l_1 norm solution to the system of linear equation [J]. Journal of Huiyin Teachers College (Nature Science ed), 2003, 1(2): 13-18.

- [4] 陈宝林. 最优化理论与算法 [M]. 北京: 清华大学出版社, 1989.

CHEN Baolin. Theory and algorithms of optimization [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1989.

(责任编辑 朱宇)

·科技智力游戏·

如果将本栏目正确答案寄至本刊编辑部, 您将有机会获得自下期至 2008 年底的《科技导报》一套。

轻松一刻——九宫填数

该游戏的填数规则为: ① 在 9×9 的大九宫格内, 出题者已给出若干数字, 其他宫位的数字空留, 需要读者根据逻辑推理填写剩下空格里的数字; ② 填满数字的大九宫里, 数字之间的关系必须满足: 每一行与每一列都有 1~9 的数字, 每个实线所标 3×3 的小九宫格里也有 1~9 的数字, 且每个数字在每行、每列及每个小九宫格里只能出现 1 次, 即既不能重复也不能缺少; 同时在 9×9 大九宫格的两条对角线上, 均有 1~9 的数字, 且只能出现 1 次。答案请见下期。

上期答案

九宫1 难度系数 ◆◆◆◆◇◇

7	5	1	8	4	9	3	6	2
3	8	4	6	2	1	9	5	7
9	2	6	5	7	3	8	4	1
4	9	7	1	3	6	2	8	5
5	1	2	4	9	8	6	7	3
6	3	8	7	5	2	4	1	9
8	7	3	2	1	4	5	9	6
2	4	5	9	6	7	1	3	8
1	6	9	3	8	5	7	2	4

九宫1 难度系数 ◆◆◆◆◇◇

		7		1		4	8	
6		5		9	2			
4	8					6	5	
	7							
3								6
						1		
8	9					4	1	
		1	3		9		2	
	6	2		9		8		

九宫2 难度系数 ◆◆◆◆◇◇

	4	3				7	1	
2								5
7			5		4			3
		9				4		
		5				6		
4			2		1			6
6								7
	3	1				8	2	

九宫2 难度系数 ◆◆◆◆◇◇

3	4	1	5	8	7	9	2	6
8	6	7	4	9	2	5	3	1
9	2	5	3	1	6	4	8	7
4	5	6	1	3	9	8	7	2
1	9	2	6	7	8	3	5	4
7	8	3	2	5	4	1	6	9
6	7	8	9	4	3	2	1	5
2	1	4	8	6	5	7	9	3
5	3	9	7	2	1	6	4	8

(供稿 李建才 责任编辑 赵佳)