

带约束多段多项式拟合算法及软件

陈阳泉 窦惠芳

(西安工业学院)

摘要 本文介绍了使用带约束多段多项式进行数据拟合的实用算法及软件。这种基于最小二乘法的方法比单个高阶多项式拟合更能刻画某些所需的局部特性。文中考虑了分段节点处及非分段节点处的三种等式约束,即函数值、斜率值及二阶导数值约束,可以满足数据拟合的实际需要。相应的计算机程序以 MS-FORTRAN4.0 及 MASM5.0 混合写成人图交互及 Borland 风格菜单形式。应用用户友好程序设计思想,增强了普通数值计算程序的应用潜力。通过方便的人图交互确定合适的分段段数、节点安排及各段多项式阶次以得到满意的拟合结果。最后给出了一个实际应用例子以表明本文算法及软件的实用性。

关键词 分段拟合; 最小二乘法; 约束最优化; 数据处理; 软件工程

0 引 言

从给出的离散数据中找出变量之间近似关系的问题称为数据拟合问题。数据拟合不仅能解决非确定性关系中的许多问题,还能协助处理确定性关系中的一些问题。

使用一个多项式

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$$

来从最小二乘法意义上对一组数据 $\{(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, m\}$ 进行拟合,是经典的方法。 a_i 的选取使

$$\sigma = \sum_{i=1}^m [p(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=0}^n a_j x_i^j - y_i \right)^2$$

有极小值,这需解一正则方程组

$$\sum_{j=0}^n a_j \sum_{i=1}^m x_i^{j+k} = \sum_{i=1}^m y_i X_i^k \quad (k=0, 1, \dots, n)$$

本文于1990年9月10日收到,1991年1月9日收到修改稿。

这是全局性的最佳拟合。当测得的数据中含有明显的拐点或奇点时，往往需要用较高阶次的多项式进行拟合才能得到较为满意的结果。而当拟合多项式阶次较高时，常常又易造成正则方程组的病态，如众所周知的 Runge 现象^[1]。这是多项式全局拟合的一个最大缺点。

本文主要采用多段多项式来进行数据的分段拟合。它实质上是用几个低阶的多项式通过对接点处的某些约束来对数据进行拟合的。这既可克服正则方程组的病态又可较好地反映数据的某些局部性质，如尖点等。虽然计算数学上使用某个亏数样条进行分片最小二乘数据拟合亦可达到相同效果^[3]，但本文建议的方法可根据数据的性态由人图交互方式来选择适当的分段数、分段结点及约束条件。对于工程应用而言，本文的工作具有较实用的价值。

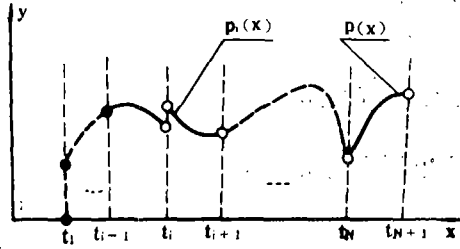


图 1 多段多项式拟合示意图

1 带约束多段多项式拟合的一般表达

设有一组实验数据 $\{(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, m\}$ 记 $c = \min\{x_i\}, d = \max\{x_i\}$,

对 $[c, d]$ 作分划 Δ

$$\Delta: c = t_1 < t_2 < \dots < t_{N+1} = d$$

参见图 1，设第 i 段内共有 m_i 个实验数据点，并设第 i 段使用

$$p_i(x) = \sum_{k=0}^{n_i} a_{i,k} x^k \quad (m_i \geq n_i)$$

来作为拟合多项式。无约束时的多段多项式最小二乘拟合是

$$\min_{a_{i,k}} \sigma = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{m_j} \left(\sum_{k=0}^{n_j} a_{j,k} x_{i+j}^k - y_{i+j} \right)^2 \quad (1)$$

其中

$$l_j = \sum_{i=1}^{j-1} m_i \quad (j=2, 3, \dots, N; l_1=0),$$

N 为分段数。

若考虑 n_0 个约束条件， $g_i(x) = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n_0)$ 则应由

$$\begin{cases} \min_{a_{i,k}} \sigma = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{m_j} \left(\sum_{k=0}^{n_j} a_{j,k} x_{i+j}^k - y_{i+j} \right)^2 \\ s, t \quad g_i(x) = 0, \quad i=1, 2, \dots, n_0 \end{cases} \quad (2)$$

来求取 $a_{i,k} \quad (j=1, 2, \dots, N; k=0, 1, 2, \dots, n_j)$ 。

本文使用 Lagrange 乘子法处理等式约束，即

$$\min_{a_{i,k}, \lambda_i} \sigma_c = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{m_j} \left(\sum_{k=0}^{n_j} a_{j,k} x_{i+j}^k - y_{i+j} \right)^2 - \sum_{i=1}^{n_0} \lambda_i g_i(x)$$

其中, λ_i 为 Lagrange 乘子。

2 结点处函数值连续约束多段多项式拟合

此时约束函数 $g_i(x)$ 写作

$$g_i(t_{i+1}) = \sum_{k=0}^{n_i} a_{i,k} t_{i+1}^k - \sum_{k=0}^{n_{i+1}} a_{i+1,k} t_{i+1}^k = 0 \quad (3)$$

($i=1, 2, \dots, N-1$)

保证结点间函数值连续的多段多项式拟合即从

$$\min_{a_{i,k}, \lambda_i} \sigma_c = \sum_{i=1}^N \sum_{i=1}^{m_i} \left(\sum_{k=0}^{n_i} a_{i,k} x_{l_j+i}^k - y_{l_j+i} \right)^2 - \sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i \left(\sum_{k=0}^{n_i} a_{i,k} t_{i+1}^k - \sum_{k=0}^{n_{i+1}} a_{i+1,k} t_{i+1}^k \right) \quad (4)$$

中求取 $a_{i,k}$ 。由 $\partial \sigma_c / \partial a_{i,k} = 0$ 及 $\partial \sigma_c / \partial \lambda_i = 0$ 得到下面的线性方程组

$$AX = B \quad (5)$$

其中,

$$x = (a_{1,0} a_{1,1} \dots a_{1,n_1}, \dots, a_{N,0} a_{N,1} \dots a_{N,n_N}, \lambda_1, \dots, \lambda_{N-1})^T$$

共有未知数 $\sum_{i=1}^N n_i + 2N - 1$ 个。记 $p = \sum_{i=1}^N n_i + N$, A 阵及 B 阵为

$$A = \begin{bmatrix} A_0 & \vdots & -\frac{1}{2} C_0^T \\ \dots & \dots & \dots \\ C_0 & \vdots & 0_{N-1} \end{bmatrix}_p \quad (6)$$

$$B = \left\{ \begin{bmatrix} B_0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \right\}^{p} \quad \} N-1 \text{ 个} \quad (7)$$

0_{N-1} 为 $N-1$ 阶零方阵, C_0 为 $(N-1) \times p$ 矩阵, A_0 为 $p \times p$ 方阵, B_0 为 $p \times 1$ 矩阵。 A_0 、 B_0 、 C_0 的具体公式为

$$A_0 = \text{diag}[A_{01}, A_{02}, \dots, A_{0N}] \quad (8)$$

其中

$$A_{0i} = \begin{bmatrix} m_i & \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i} & \dots & \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i}^{n_j} \\ \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i} & \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i}^2 & \dots & \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i}^{n_j+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i}^{n_j} & \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i}^{n_j+1} & \dots & \sum_{i=1}^{m_i} x_{l_j+i}^{2n_j} \end{bmatrix} \quad (9)$$

($(n_j+1) \times (n_j+1)$)

$$A = \begin{bmatrix} A_0 & \vdots & -\frac{1}{2}C_0^T & \vdots & -\frac{1}{2}C_1^T \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_1 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$B = [B_0 \vdots \underbrace{0, \dots, 0}_{p+N-1} \vdots \underbrace{0, \dots, 0}_{p+2N-2}]^T \quad (16)$$

其中, A_0 、 B_0 、 C_0 矩阵同前。 C_1 阵方

$$C_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2t_2 \cdots n_1 t_2^{n_1-1} & \vdots & 0 & -1 & -2t_2 \cdots -n_2 t_2^{n_2-1} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 1 & 2t_3 \cdots n_2 t_3^{n_2-1} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & -1 & -2t_3 \cdots -n_3 t_3^{n_3-1} & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & -2t_N \cdots -n_N t_N^{n_N-1} \end{bmatrix} \quad (17)$$

如果考虑结点间直至二阶导数连续, 此时应有 $3(N-1)$ 个等式约束, 式(5)中应有 $p+3(N-1)$ 个未知数。且 A 、 B 矩阵为

$$A = \begin{bmatrix} A_0 & \vdots & -\frac{1}{2}C_0^T & \vdots & -\frac{1}{2}C_1^T & \vdots & -\frac{1}{2}C_2^T \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_1 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_2 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \quad (18)$$

$$B = [B_0 \vdots \underbrace{0, \dots, 0}_{N-1} \vdots \underbrace{0, \dots, 0}_{N-1} \vdots \underbrace{0, \dots, 0}_{N-1}]^T$$

其中, A_0 、 C_0 、 C_1 、 B_0 同前, C_2 阵由附加的二阶导数等式约束 (19)

$$h_i(t_{i+1}) = \sum_{k=2}^{n_i} k(k-1)a_{i,k} t_{i+1}^{k-2} - \sum_{k=2}^{n_{i+1}} k(k-1)a_{i+1,k} t_{i+1}^{k-2} \quad (20)$$

$$(i=1, 2, \dots, N-1)$$

得到, 类似于 C_0 、 C_1 阵的形式。同样, 此时要求 $n_i \geq 3 (i=1, 2, \dots, N)$ 以保证足够的拟合机动性。

4 人图交互式数据拟合软件

本文完成的人图交互式数据拟合软件在 IBM-PC 上以 MS FORTRAN 4.0 和 MASM 5.0 混合写成。为区别于软件文档的内容, 这里仅概要地介绍该软件的主要特点。

4.1 约束描述文件与 A、B 矩阵自动生成

上面讨论了常见的几种约束,但实际问题中往往还有一些约束如某个点或某几个点处的函数值及导数值约束(如终起点处斜率或函数值)需要加入,使用上述的方法很容易处理。为使软件更加面向用户,利用本文方法适合计算机的特点,软件可根据约束描述文件自动构造(5)式中的 A 、 B 矩阵。考虑到实际应用,约束描述文件中包含两类约束:分段结点处约束和非分段结点处约束。每类约束最多为二阶导数约束。约束描述文件的结构是

$$\begin{aligned} & D_0, D_1, D_2 \\ & N_0, X_{0,1}, Y_{0,1}, \dots, X_{0,N_0}, Y_{0,N_0} \\ & N_1, X_{1,1}, Y_{1,1}, \dots, X_{1,N_1}, Y_{1,N_1} \\ & N_2, X_{2,1}, Y_{2,1}, \dots, X_{2,N_2}, Y_{2,N_2} \end{aligned}$$

其中, $D_i = 1$ 表示加入分段结点处第 i 阶导数连续连接约束而 $D_i = 0$ 表示不加入该约束 ($i = 0, 1, 2$);

N_i 表示非分段结点处第 i 阶导数值等式约束的个数;

$X_{i,j}, Y_{i,j}$ 表示第 j 个第 i 阶导数值等式约束的自变量与约束值, ($j = 1, 2, \dots, N_i; i = 0, 1, 2$)。软件读入该约束描述文件,自动构造 A 、 B 矩阵,解线性方程组得到约束多段多项式拟合的系数。如果解线性方程组失败,程序不退出,返回到程序开始,要求用户修改约束描述文件或重输入文件中的分段情况及各段拟合阶次重新运行。这可使用 Borland 公司的 Sidekick 产品与本文软件配合。

4.2 自动化图形交互

根据输入数据进行计算机图形显示是不困难的,但完全不要人的干预进行自动化图形交互则是本文的特色。这里,自动化体现在

- (1) 自动生成符合习惯的坐标系;
- (2) 自动决定缩放映射关系;
- (3) 自动对坐标轴进行合适的分划;
- (4) 自动标注坐标刻度,便于量取读图。

绘图的基础子程序是用汇编语言书写的,如点亮熄灭一个指定像素的子程序,连线(包括实线、虚线和点划线)子程序等。其它的都是用 FORTRAN 4.0 写成的。为实现这种自动绘图的思想,编写了基于规则的刻度分划规整化程序、坐标轴标注值的自然化处理与字符型转化程序和矢量式字符发生器程序等。本文使用 FORTRAN 语言完全实现了 IBM-PC BASICA 的 DRAW 功能,使字符的产生很方便易行而且可以进行字符的缩放与旋转。字符最小为 6×6 点阵。

4.3 Borland 风格自动菜单模块

本文使用 FORTRAN 语言完全实现了 Borland 风格的菜单模块。这种菜单对用户很友好。激活菜单中的某一项,可以用条形棒移动下拉选中也可以按该项中的大写字母选中。这种菜单能自动决定菜单是横排还是竖排,自动决定每项菜单中互不相同的用于激活的大写字母。

在该模块中,大量使用了标准 FORTRAN 77 的星号长度说明符、并置算符以及内部文件等技巧,加上一些绘图基础子程序,使得古老的 FORTRAN 语言的应用十分灵活。

总之,在软件方面,本文对工程计算机软件的用户友好性界面改造及其商品化作了一些初步的尝试,并取得较好的效果。

5 数据拟合软件的实际应用

这里仅以美国 Copperhead GLCP^[6] 的线性翻转力矩系数 $C_{ma}(M)$ 的风洞数据(见表 1)处理为例。 $C_{ma}(M)$ 在马赫数 $M=1$ 附近有一个明显的尖点。这里用几种拟合方案的比较来说明带约束分段拟合的灵活性。需要顺便提及的是,在 NATO 标准气动输入格式中正是要求气动曲线以不高于四次的分段多项式来表达的。

图 2 是使用一个多项式的全局拟合,多项式阶次为 10;图 3 是使用分段多项式拟合,分段数 $N=2$, $n_1=n_2=3$ 。节点为 $(0.5, 1.09, 1.8)$ 且 $t_2=1.09$ 处有函数值连续约束。图 4 同图 3 的情况,但在 $t_2=1.09$ 处为光滑连接的约束而且在 $t_1=0.5$ 处加上函数值为 -8.2 , 导数值为零的约束。根据实际问题的要求可知,图 3 的拟合方案是可用的。通过在机的人图交互式带约束多段多项式拟合软件,总能在很短的时间内得到合适的拟合方案,获得满意的结果。

表 1 Copperhead GLCP $C_{ma}(M)$

风洞数据			
M	C_{ma}	M	C_{ma}
0.5	-8.2	1.16	-11.6
0.6	-8.4	1.3	-7.4
0.7	-8.8	1.4	-5.0
0.8	-9.55	1.5	-3.2
0.9	-10.4	1.6	-1.8
1.0	-12.0	1.7	-1.19
1.09	-14.0	1.8	-0.8

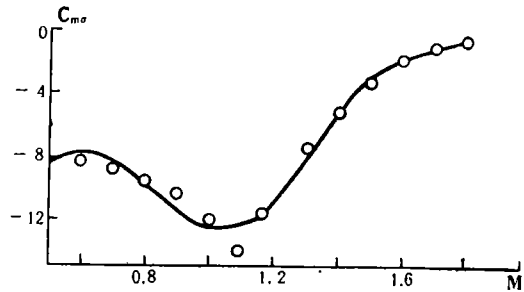


图 2 单个多项式全局拟合 ($N=10$)

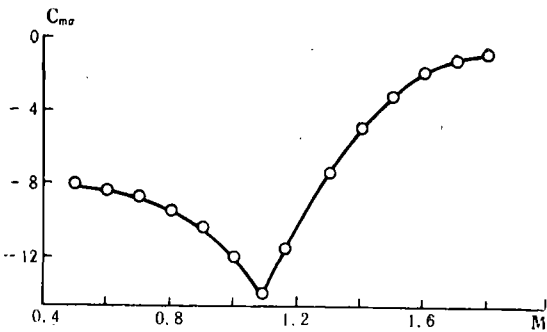


图 3 多段多项式拟合 ($N=2, n_1=n_2=3$, $t_2=1.09$ 处函数连续约束)

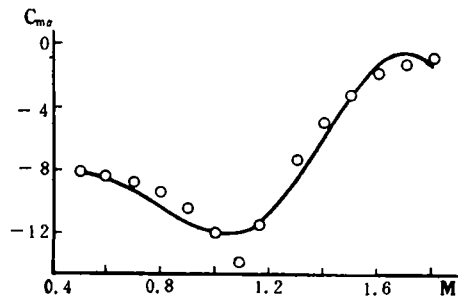


图 4 同图 3, $t_2=1.09$ 处光滑连接约束且 $C_{ma}(0.5)=-8.2, C'_{ma}(0.5)=0$

6 结 论

本文从工程应用角度给出了带约束多段多项式数据拟合算法,介绍了相应的软件。这种拟合方法比全局拟合更易于描述数据的一些局部性质。通过方便的在机人图交互,能够决定合适的约束多段多项式拟合方案,最终得到满意的结果。本文直接采用标准 FORTRAN 77,对工程计算软件的友好用户界面以及商品化作了一些有益的尝试。

致谢: 骊山微电子研究所曲涛同志参加了本文的编程工作。

参 考 文 献

- 1 黄友谦,李岳生编著,数值逼近,第二版,北京:高等教育出版社,1987。
- 2 南京大学数学系计算数学专业编,计算数学丛书(一),数值逼近方法,北京:科学出版社,1978。
- 3 程正兴编著,数据拟合,西安交通大学出版社,1986。
- 4 Byron S G,Joel W.Introduction to Optimization Theory,Prentice-Hall,Inc.,1973.
- 5 Robert L M.Free Flight Range Tests of Copperhead Projectile,AD A 100274,Mar,1981.

DATA FITTING BY MULTI-SEGMENT POLYNOMIALS WITH CONSTRAINTS FORMULATION AND SOFTWARE

Chen Yangquan Dou Huifang
(Xi'an Institute of Technology)

Abstract This paper introduced a practical method and programs for data fitting by multi-segment polynomials with constraints. Based on least squares method, this method can depict some relevant local properties wanted and can overcome the disadvantages of least squares fitting with one high degree polynomial. In this proposed method, only the equation constraints are considered such as functional value equation constraints, tangent value equation constraints, second derivatives equation constraints etc. Three kinds of equation constraints above mentioned are applied which may meet the practical data fitting requirements. The formulae about the applied constraints are given. The computer programs are coded in automatic man-graphics interaction form and with the Borland style menu. The compact software are implemented in MS-FORTRAN4.0 and MASM5.0 languages. The ideals of user-friendship programming technique are employed to enlarge the applicable potentials of ordinary numerical computation routines. Through the readiness man-graphics interaction the proper number of segments, knot arrangement and degree of polynomials in each segment can be decided to get the satisfactory fitting result. A practical application example is given which demonstrates the effectiveness and usefulness of the method and the software of this article.

Key words piecewise fitting, least squares method, constrained optimization, data processing, software engineering.