

Use MQHOA TO Fit Parameters

Lu ZhiJun

2015 年 12 月 13 日

1 误差评判方法研究

1.1 $y = x^2$ 傅里叶级数展开

如果 $f(x)$ 在 $[-l, l]$ 上分段连续, 其傅里叶级数

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos \frac{k\pi}{l} x + b_k \sin \frac{k\pi}{l} x) + \frac{a_0}{2}$$

那么 $y = x^2$ 在 $[-l, l]$ 傅里叶级数展开:

$$f(x) = 4 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{l}{k\pi}\right)^2 \cos\left(\frac{k\pi}{l} x\right) + \frac{l^2}{3}$$

也可写成:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \cos\left(\frac{k\pi}{l} x\right)$$

其中

$$a_k = \begin{cases} \frac{l^2}{3} & k=0 \\ (-1)^k \left(\frac{2l}{k\pi}\right)^2 & k=1, 2, \dots \end{cases}$$

又 $f(x)$ 在 $[-l, l]$ 上连续, 又 $f'(x)$ 绝对可积, 有:

$$f'(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (A_k \cos\left(\frac{k\pi}{l} x\right) + B_k \sin\left(\frac{k\pi}{l} x\right))$$

利用求系数公式和分部积分可证明:

$$\begin{cases} A_k = \frac{k\pi}{l} b_k + (-1)^k c & k=0, 1, 2, \dots \\ B_k = -\frac{k\pi}{l} a_k & k=1, 2, \dots \\ c = \frac{1}{l} [f(l) - f(-l)] \end{cases}$$

由于 $f(l) = f(-l)$, 则 $f'(x)$ 的傅里叶级数可以通过对 $f(x)$ 的逐项求导而得, 即

$$f'(x) = 4 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \left(\frac{l}{k\pi}\right) \sin\left(\frac{k\pi}{l} x\right) = \sum_{k=1}^{\infty} -\frac{k\pi}{l} a_k \sin\left(\frac{k\pi}{l} x\right)$$

1.2 构造评价函数

对参数 a_k 进行拟合, 取 $k = [0, 1, \dots, D-1]$, 即评价函数维度为 D 维实验数据集

* $S1 = \{(x, y) | y = x^2 + \text{normal}(0, 2), x = \text{linspace}(-l, l, N)\}$

* $S2 = \{(x, y') | \text{gaussian_filter}(\text{diff}(y)), x = \text{linspace}(-l, l, N-1)\}$

其中 `normal` 为正态分布函数 (为模拟工程测量误差), `linspace` 为线性分布函数; `diff` 为差分函数, `gaussian_filter` 对差分结果作高斯平滑处理. 为保证算法对 $f(x)$ 与 $f'(x)$ 都有较好拟合, 构造评价函数.

$$G(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}) = \text{MSE}(f(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x)) + \text{MSE}(f'(a_1, \dots, a_{D-1}, x))$$

$$= \frac{\sum_{i=0}^{N-1} (y_i - f(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x_i))^2}{N} + \frac{\sum_{i=0}^{N-1} (y'_i - f'(a_1, \dots, a_{D-1}, x_i))^2}{N}$$

转化为求 $\min G(a_0, a_1, \dots, a_{D-1})$ 的解.

1.3 实验

实验假设 $l = 5, D = 20$, 数据集采样点数为 50 可根据上面公式计算 a_k

```
In [1]: import pandas as pd
import math
from pandas import Series, DataFrame
%pylab inline
plt.rc('figure', figsize=(12, 8))
l=5
D=20
Ak=[1**2/3.0]
for i in range(D-1):
    Ak.append((-1)**(i+1)*(2*l/(i+1.0)/math.pi)**2)
print Ak
```

Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib

```
[8.333333333333334, -10.13211836423378, 2.533029591058445, -1.125790929359309, 0.6332573977646112,
```

另外用智能算法根据 $\text{MSE}(f(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x))$ 进行拟合, 得到最优解记作 a_{k1} , 用智能算法根据 $\text{MSE}(f'(a_1, \dots, a_{D-1}, x))$ 进行拟合, 得到最优解记作 a_{k2} , 联合以上两种 MSE 进行拟合, 得到最优解记作 a_{k12}

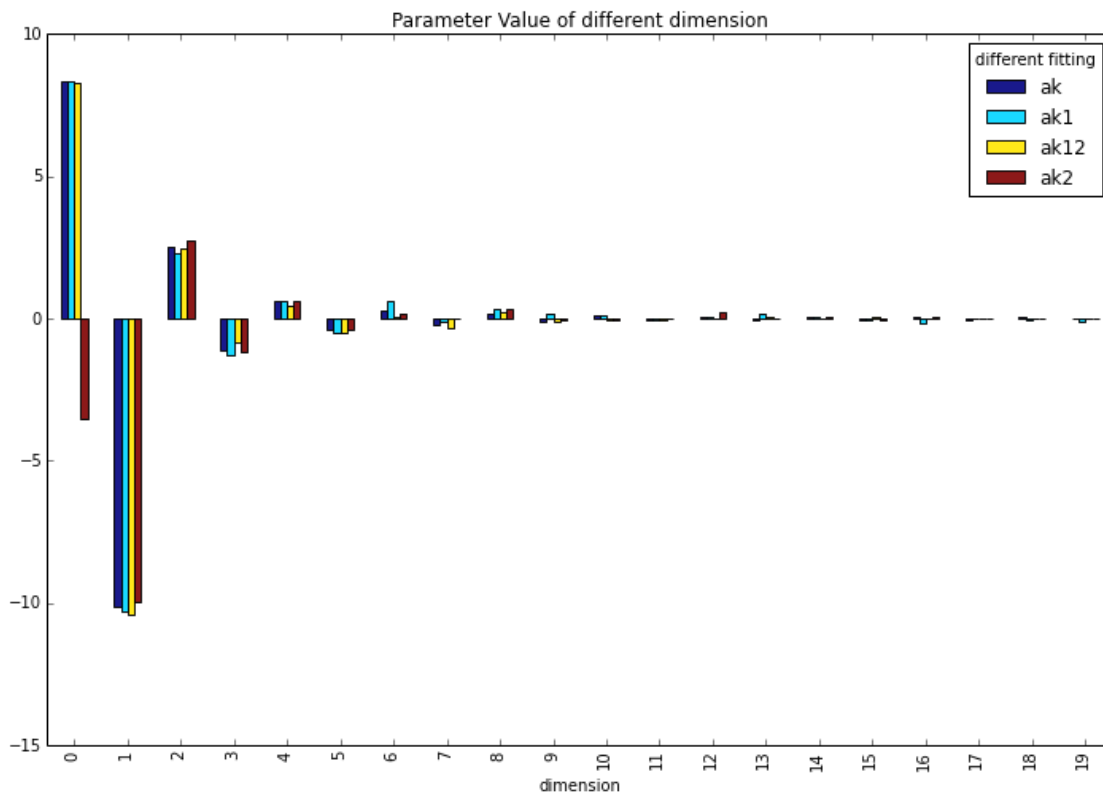
下面图显示采取不同策略计算的最优解与 A_k 的对比

```
In [2]: ak1=[8.33281219 , -10.318981, 2.27375948, -1.28375446, 0.6257736, -0.53357938, 0.59340663, -0.
ak2=[-3.54610586e+00, -9.98962044e+00 , 2.71518383e+00, -1.17027024e+00, 5.93715316e-01, -3.69
```

```

ak12=[ 8.29574732e+00,-1.04340274e+01, 2.43998920e+00,-8.19756871e-01, 4.50149664e-01,-5.0
df=DataFrame({'ak':Ak,'ak1':ak1,'ak2':ak2,'ak12':ak12})
df.columns.name='different fitting'
df.index.name='dimension'
df.plot(kind='bar',stacked=False,colormap='jet',alpha=0.9,title='Parameter Value of differ

```

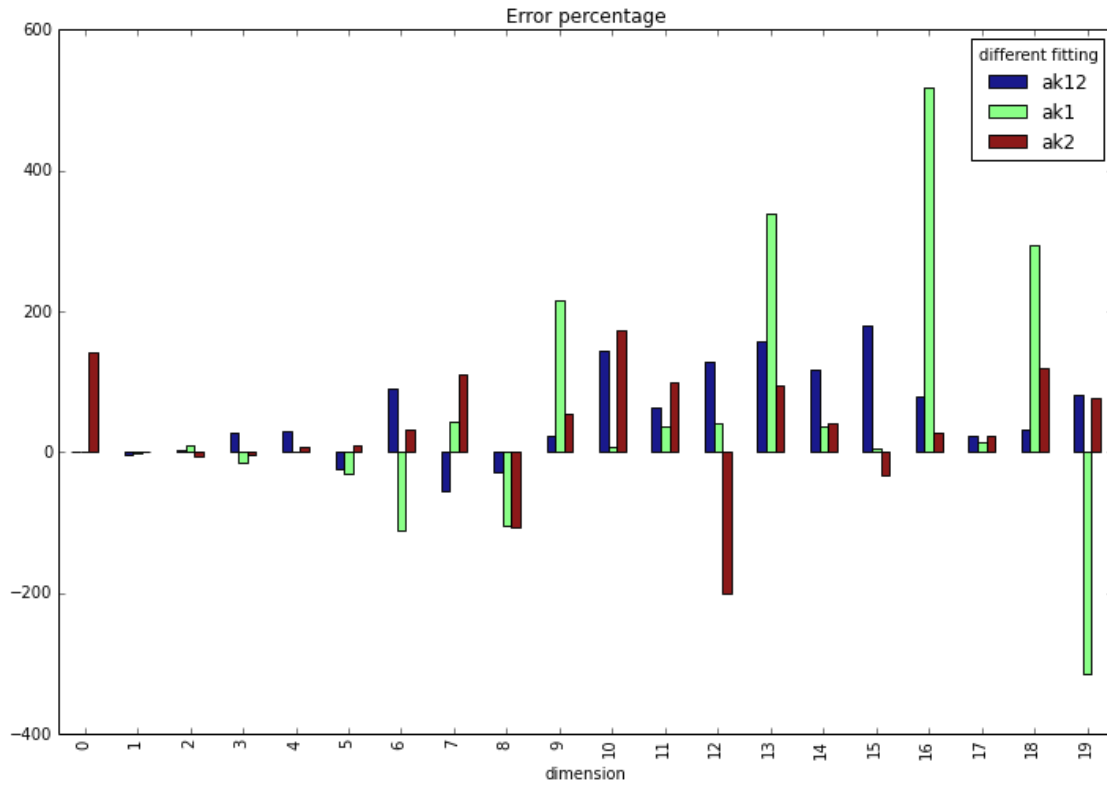


为对比方便，下图展示三种策略下的最优解在各维度上相对 ak 的误差百分比

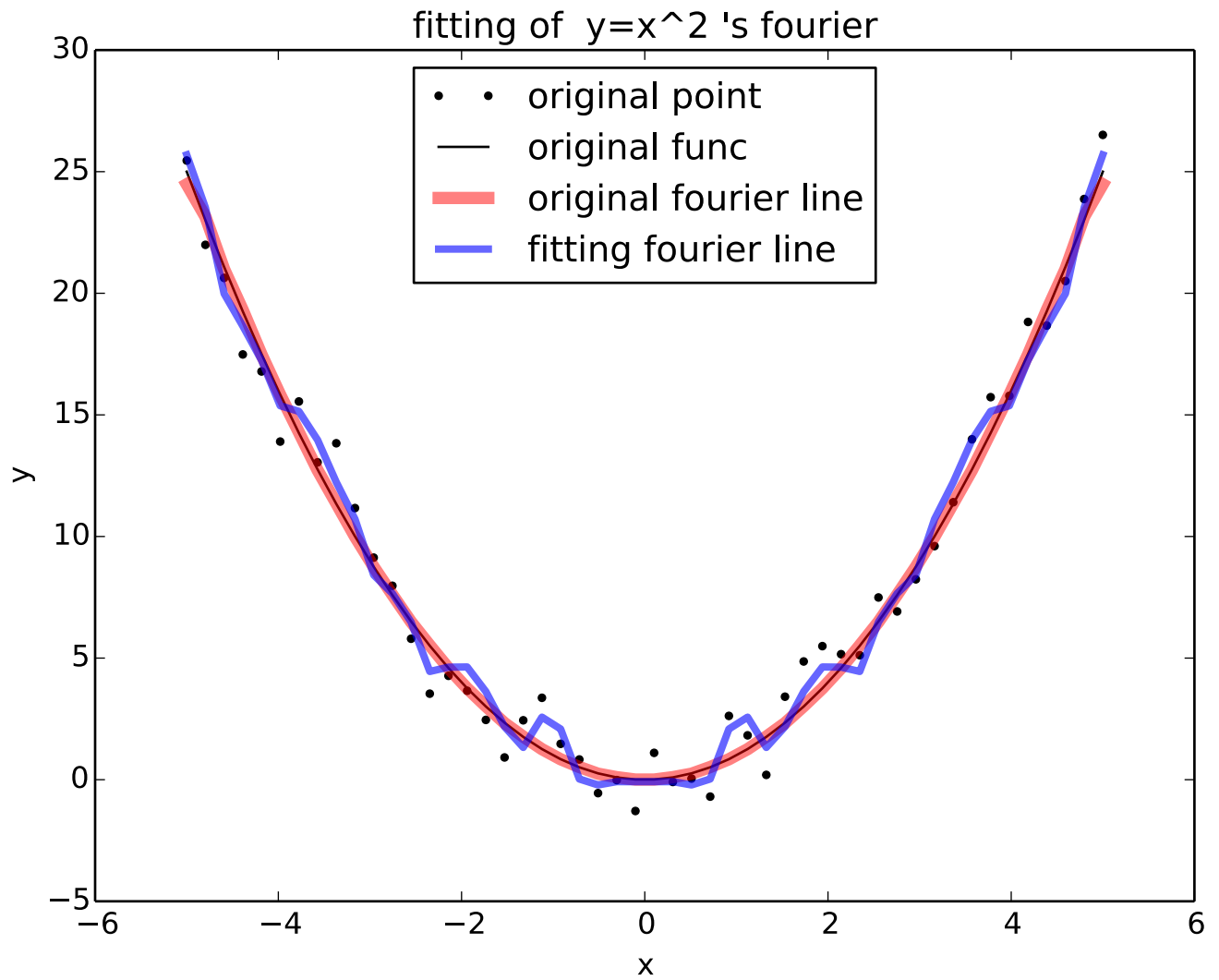
```

In [3]: b=df[['ak12','ak1','ak2']]
        c=df['ak']
        d=b.rsub(c,axis=0)
        e=d.div(c,axis=0)*100
        e.plot(kind='bar',stacked=False,colormap='jet',alpha=0.9,title='Error percentage');

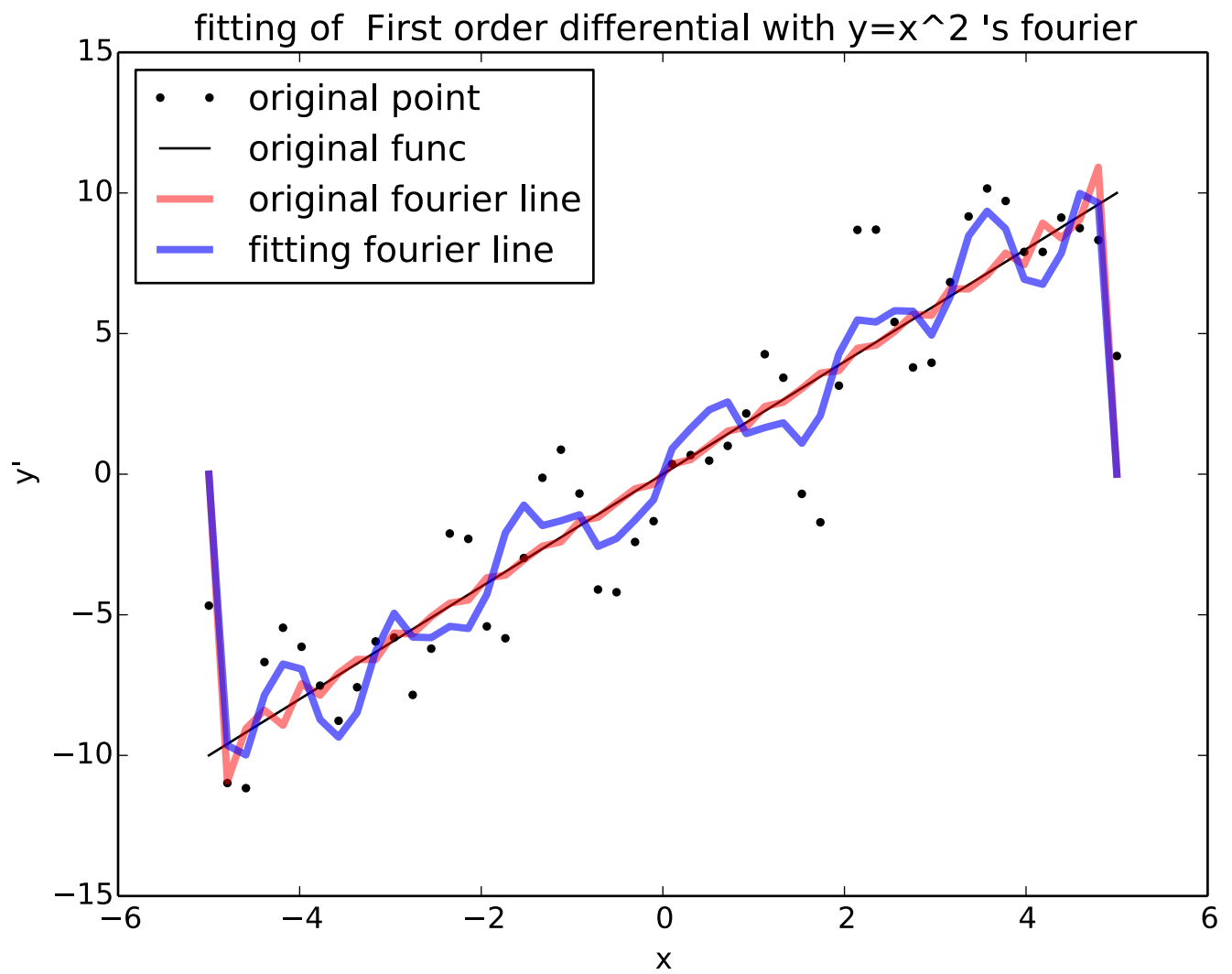
```



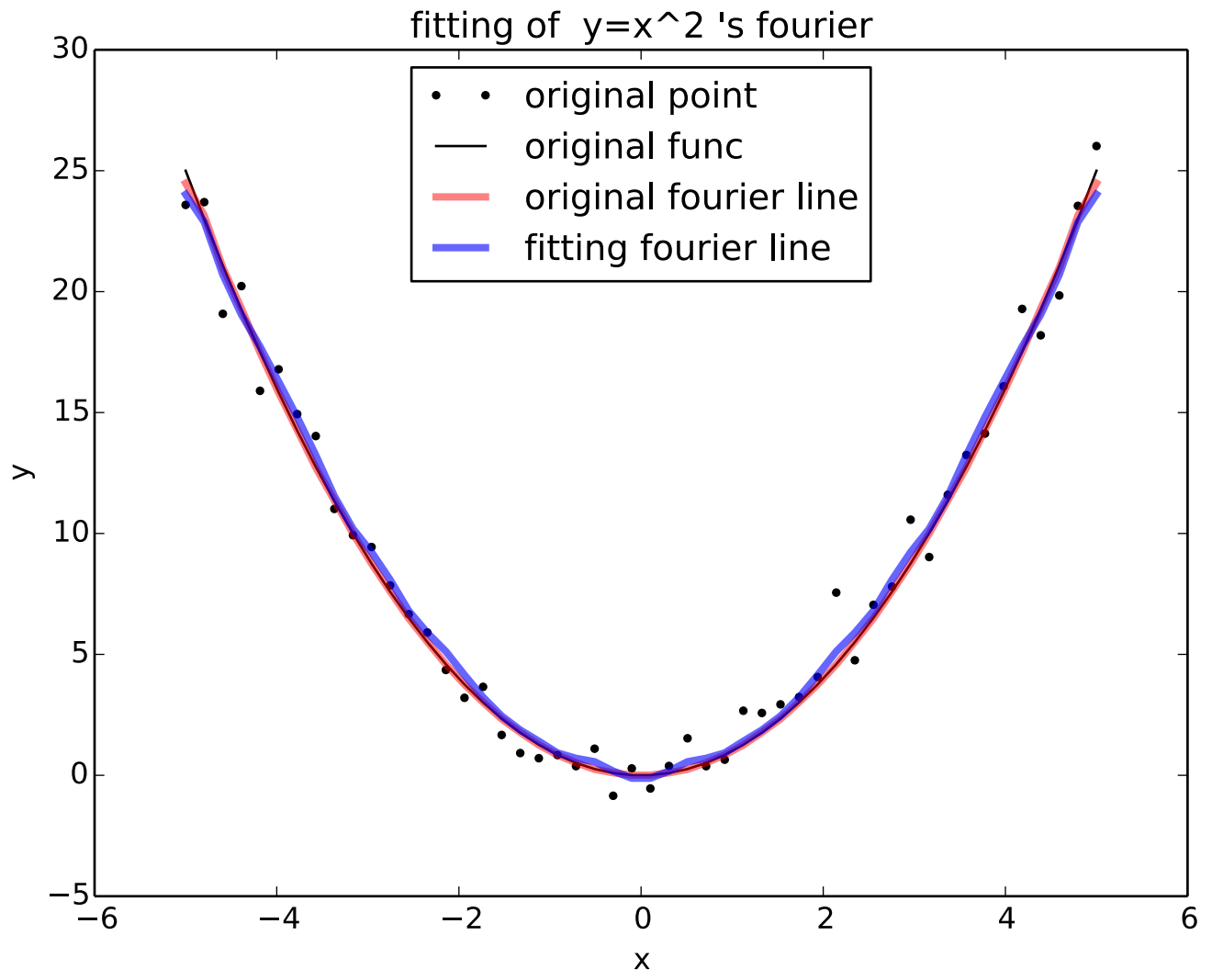
其中 $ak2$ 不对 a_0 进行拟合, 其值没有参考意义。对比各图, 可见 $ak12$ 的相对误差要比 $ak1$ 与 $ak2$ 都要小。以下为 $ak1$ 拟合结果比较图, 其中包括 $S1$ 数据点, x^2 原始函数与傅里叶展开的图像, 以及拟合 $ak1$ 参数的傅里叶展开图。



ak2 拟合结果比较图，其中包括 S_2 数据点， $2x$ 原始函数与傅里叶展开的图像，以及拟合 ak1 参数的傅里叶展开图

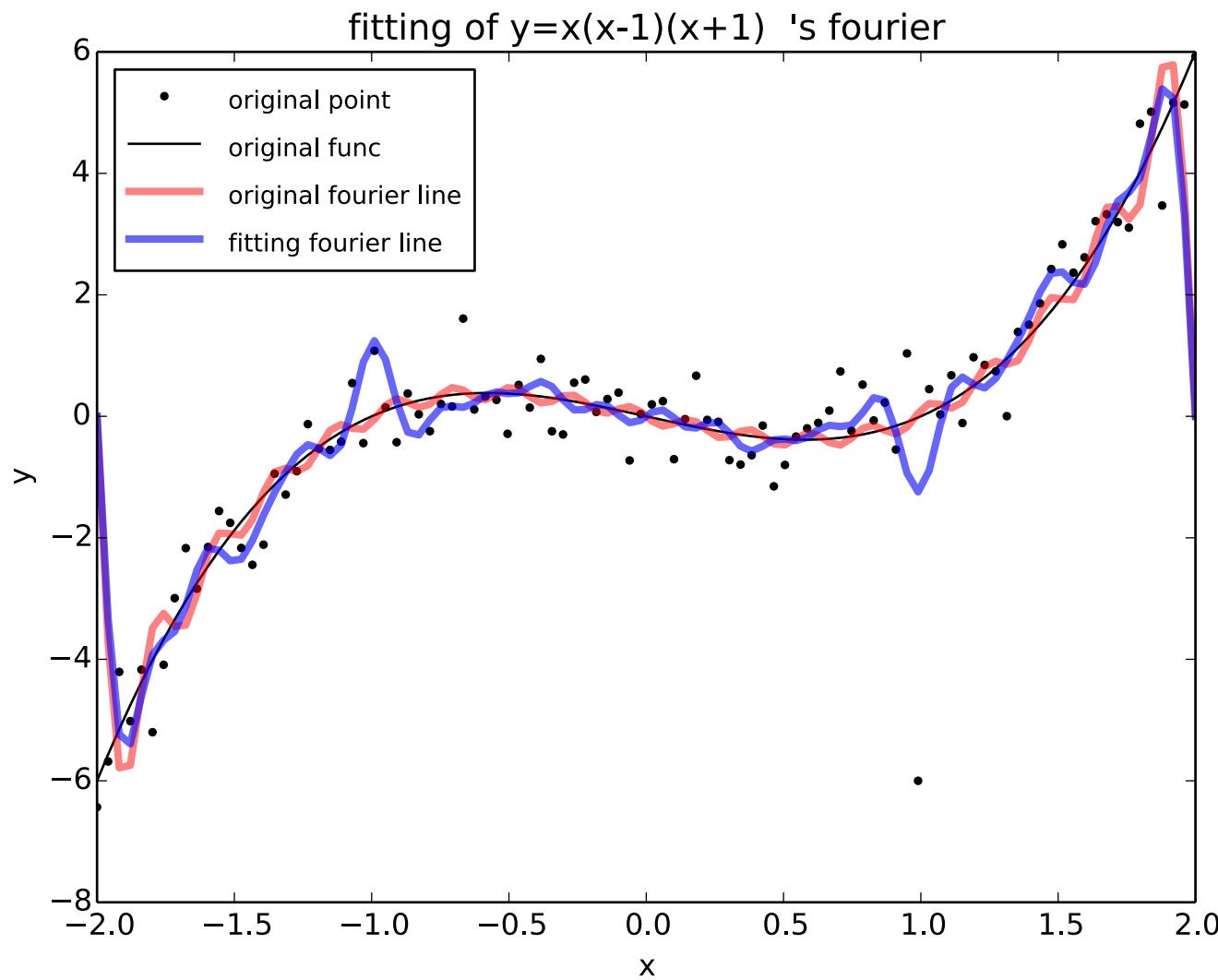


ak12 拟合结果比较图，各参数与第一幅图类似

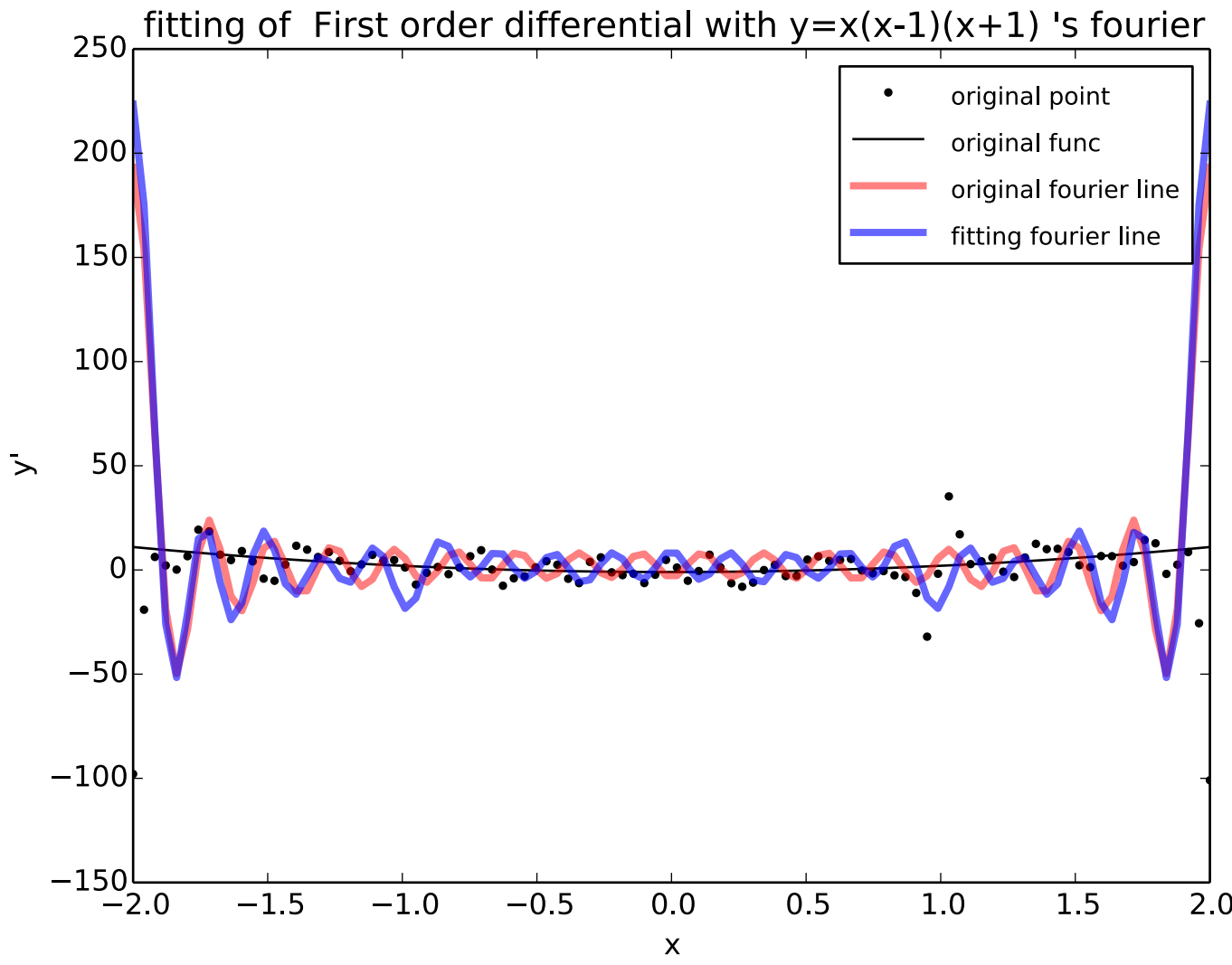


1.4 测试函数： $y = x(x-1)(x+1)$

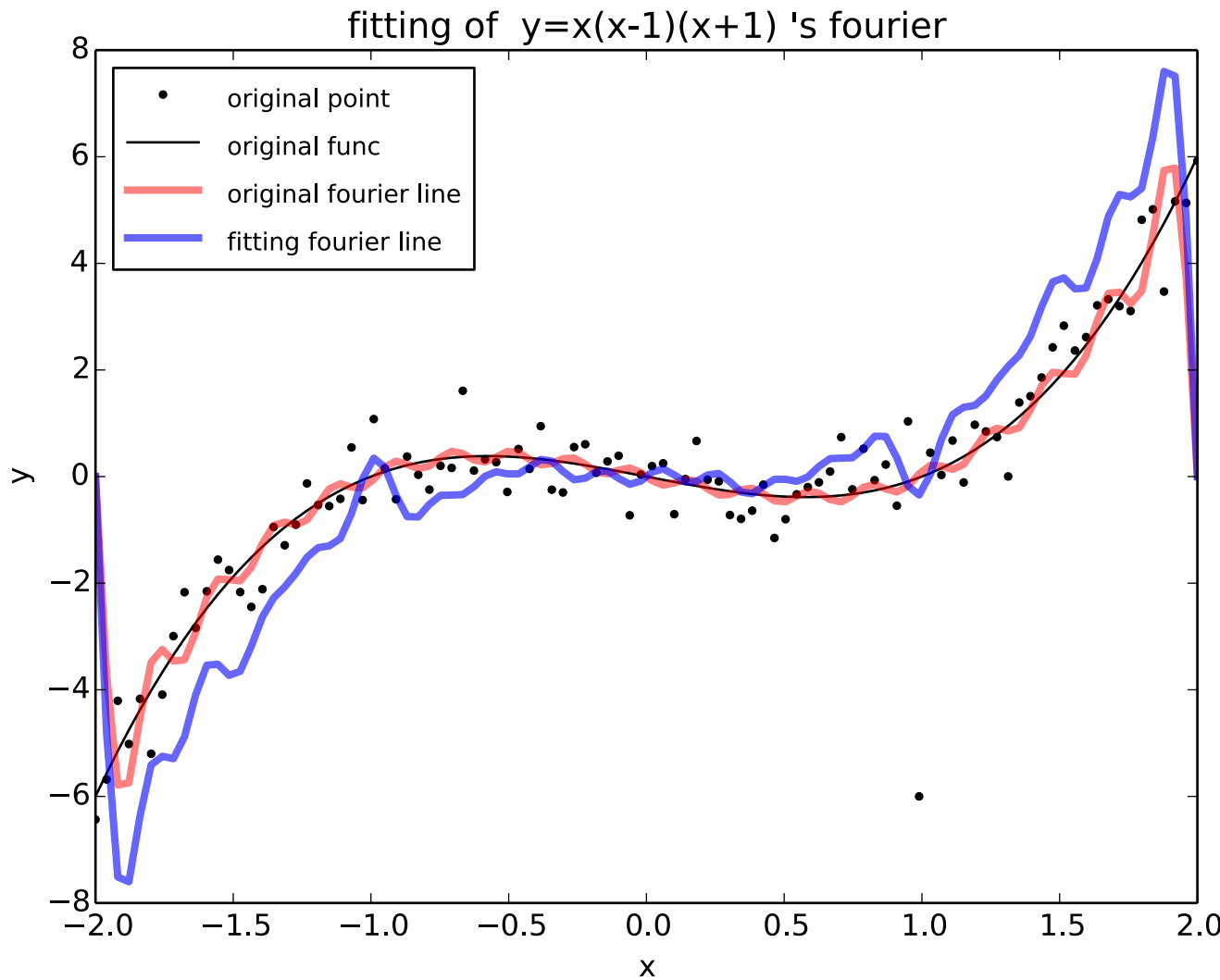
把 $y = x^2$ 替换成 $y = x(x-1)(x+1)$ ， $N=100$ ，增加噪点 (1,-6)，重复上述内容，可得



1.



2.



3.

很显然，这时候 ak12 拟合结果比 ak1 要差。其原因在于第二幅图强调对原数据点拐点的拟合，权重集中于拐点处，因而两侧的权重较小。为了使第二幅图的影响权重在合理范围内，需要重构评价函数。

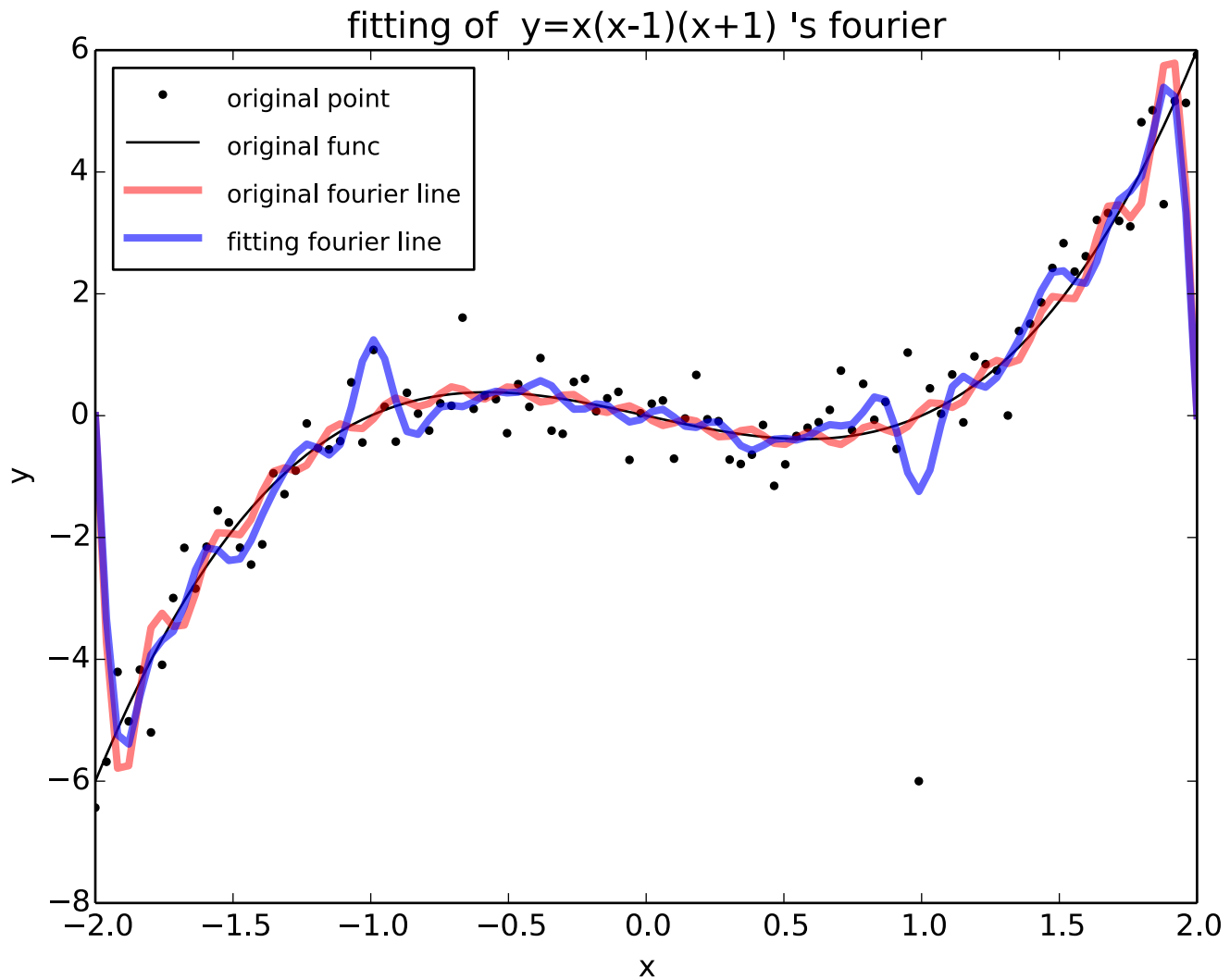
1.5 重构评价函数

为保证算法对 $f(x)$ 与 $f'(x)$ 都有较好拟合，并且两者的影响权重对结果影响均衡，构造评价函数

$$G'(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, \alpha) = (1-\alpha)MSE(f(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x)) + \alpha MSE(f'(a_1, \dots, a_{D-1}, x)) = (1-\alpha) \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{y_i - f(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x_i)}{y_i} \right)^2}{N}$$

$$s.t., \alpha \in [0, 1]$$

转化为求 $\min G'(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, \alpha)$ 的解，其中取 0，这样就是求解 $D+1$ 维最优解问题。最终可求 $\alpha=0.000005213$ ，也就是说第二张图的影响权重几乎为零，对应图像：



1.6 增加积分权重

由上可知 α 很小, 也就是说导数部分对最终拟合的结果影响很小, 引入积分权重进一步对上面函数进行拟合.

$$F(x) = \int_{-l}^x f(t)dt = -\frac{1}{2l} \int_{-l}^l xf(x)dx + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{l}{k\pi} (a_k \sin \frac{k\pi}{l}x - b_k \cos \frac{k\pi}{l}x) + \frac{a_0(x+l)}{2}$$

可证:

$$\int_{-l}^x f(t)dt = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{l}{k\pi} (a_k \sin \frac{k\pi}{l}x - b_k (\cos \frac{k\pi}{l}x + (-1)^{k+1})) + \frac{a_0(x+l)}{2}$$

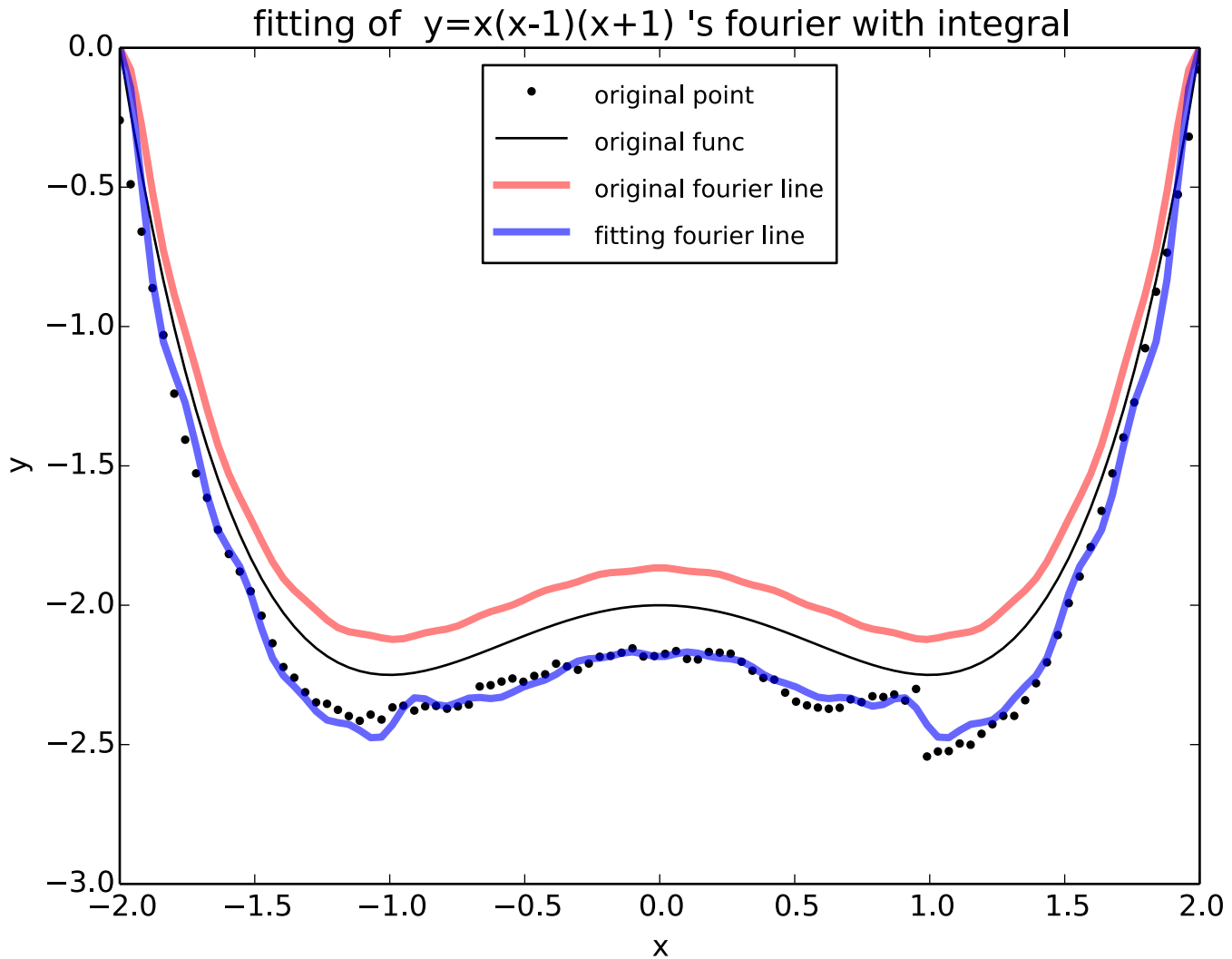
增加数据集

* S3={ (x,F(x))|F(x)=integrate([f(x)],x=linspace(-1,1,N)) }

其中 linspace 为线性分布函数, integrate 对 x 点前面的所有点 (包括自身) 的积分增加评价权重 :

$$MSE(F(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x_0, \dots, x_i)) = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{F_i - F(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x_0, \dots, x_i)}{y_i} \right)^2}{N}$$

使用该 MSE 作为评价函数可得如下图:



新评价函数 :

$$G''(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, \alpha) = (1 - \alpha - \beta)MSE(f(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x)) + \alpha MSE(f'(a_1, \dots, a_{D-1}, x)) + \beta MSE(F(a_0, a_1, \dots, a_{D-1}, x_0, \dots, x_i))$$

$$s.t., \alpha, \beta, \alpha + \beta \in [0, 1]$$

通过计算可得 $\alpha = 5.3292029e-06$, $\beta = 0.998920117$, 也就是说这个函数增大积分权重的影响可以得到最好结果, 如图所示 :

