Введение в численные методы. Интерполяция и аппроксимация

Баев А.Ж.

Казахстанский филиал МГУ

14 марта 2019

План на семестр

1. СЛАУ (точные методы)
2. СЛАУ (итерационные методы)
3. решение нелинейных уравнений
4. интерполяция
5. **аппроксимация**
6. интегрирование
7. дифференцирование

Аппроксимация

Аппроксимация — математический метод, состоящий в замене одних математических объектов другими, в том или ином смысле близкими к исходным.

Дана сетка порядка n:

$$x_0 < x_1 < \ldots < x_n$$

Дан набор измерений:

$$y_i = f(x_i)$$

Необходимо восстановить вид функции f.

Линейное нормирование пространство

Линейное пространство L нормировано, если каждому элементу $v \in L$ поставлено в соответствие вещественное число $||v||$ такое, что:

1. $||v|| \geqslant 0$;
2. $||\alpha v|| = |\alpha| \cdot ||v||$;
3. $||v_1 + v_2|| \leqslant ||v_1|| + ||v_2||$.

Линейное пространство L строго нормировано, если из равенства $||v_1 + v_2|| = ||v_1|| + ||v_2||$ следует, что $v_1 = \alpha v_2$.

Задача наилучшего приближения

Пусть имеется некоторое линейное нормированное пространство L, элемент $f \in L$ и набор линейно–независимых элементов $\varphi_i \in L$, где $i = 1, \ldots, n$. Требует найти наилучшее линейное приближение по норме, то есть:

$$g = \underset{c_i}{Argmin} ||f - \sum_{i=1}^{n} c_i \varphi_i||.$$

Задача наилучшего приближения

Theorem

В любом нормированном пространстве существует элемент наилучшего приближения.

Задача наилучшего приближения

Доказательство.

1) Функционал

$$G_f(c_1, ..., c_n) = ||f - \sum_{i=1}^{n} c_i \varphi_i||$$

является непрерывной функцией переменных c_i (по неравенству треугольника).

2) Рассмотрим функционал на $f = 0$ на единичном шаре $a_1^2 + \cdot + a_n^2 = 1$. $G_0(a_1, ..., a_n)$ достигает нижней грани $\tilde{G}_0$ в некоторой точке $(\tilde{a}_1, ..., \tilde{a}_n)$.

3) Рассмотрим функционал на произвольной функции f в шаре радиуса α. $G_f(c_1, ..., c_n)$ достигает нижней грани $\tilde{G}_f$ в некоторой точке $(\hat{c}_1, ..., \hat{c}_n)$:

$$G_f(\hat{c}) \leqslant G_f(0) = ||f||$$

4) Рассмотрим функционал на произвольной функции f вне шара радиуса α.

$$G_f(c) = ||c_1\varphi_1 + ... + c_n\varphi_n - f|| \geqslant ||c_1\varphi_1 + ... + c_n\varphi_n|| - ||f|| =$$

Задача наилучшего приближения

Theorem

В любом строго нормированном пространстве элемент наилучшего приближения единственный.

Доказательство.

Пусть $\varphi_1 \neq \varphi_2$ — различные элементы наилучшего приближения. Рассмотрим элемент $\frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2)$. Тогда

$$\Delta \leqslant ||\frac{1}{2}(f - \varphi_1) + \frac{1}{2}(f - \varphi_2)|| \leqslant ||\frac{1}{2}(f - \varphi_1)|| + ||\frac{1}{2}(f - \varphi_2)|| = \Delta$$

Из строгой нормированности

$$\frac{1}{2}(f - \varphi_1) = \alpha \frac{1}{2}(f - \varphi_2)$$

Получаем, что $\alpha = 1$ и $\varphi_1 = \varphi_2$. $\square$

Гильбертово пространство

Линейной пространство со скалярным произведением.

$$||f||^2 = (f, f)$$

Гильбертово пространство

$$F(c_0, c_1, ..., c_n) = (f - \sum_{i=0}^{n} c_i\varphi_i, f - \sum_{j=0}^{n} c_j\varphi_j) =$$

$$= (f, f) - 2\sum_{i=0}^{n} c_i(\varphi_i, f) + \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} c_i c_j(\varphi_i, \varphi_j)$$

Производные по c_k должны обнулиться:

$$-2(\varphi_k, f) + 2\sum_{j=0}^{n} c_j(\varphi_k, \varphi_j) = 0$$

.

Получаем систему с матрицей Грамма:

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \dots & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) & \dots & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\varphi_n, \varphi_0) & (\varphi_n, \varphi_1) & \dots & (\varphi_n, \varphi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \\ \dots \\ (\varphi_n, f) \end{pmatrix}$$

Пример 1

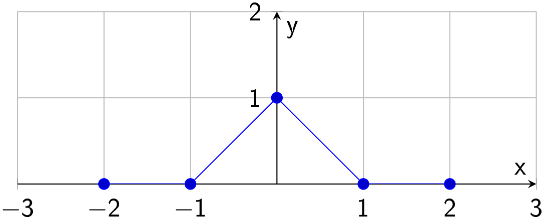
Рассмотрим кусочно–линейную аппроксимацию $f(x) \in C[0,1]$ по норме, согласованной со скалярным произведением:

$$(f,g) = \int_0^1 f(x)g(x)dx.$$

Пример 1

В качестве функции для ядра выберем:

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1 - x, & x \in [0; 1] \\ 1 + x, & x \in [-1; 0) \\ 0, & x \notin [-1; 1] \end{cases}$$

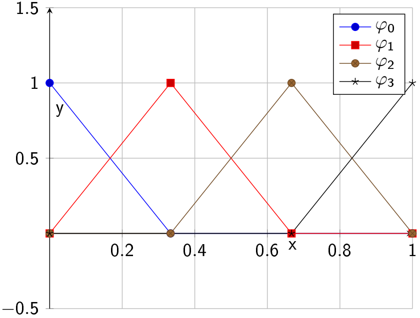


Пример 1

Базисные функции построим на равномерной сетке с шагом $h = \frac{1}{n}$.

Данную базисную функцию сожмем до интервала $[-h; h]$ и сдвинем на x_i для всех $i = 0, ..., n$. Получим базис:

$$\varphi_i(x) = \varphi\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$$



Пример 1

Вычислим элементы матрицы Грамма. Легко увидеть, что:

$$\int_{-1}^{1} \varphi^2(x)dx = 2\int_0^1 \varphi^2(x)dx = 2\int_0^1 x^2dx = \frac{2}{3}.$$

Значит диагональные элементы равны ($i = 1, ..., n-1$):

$$(\varphi_i(x), \varphi_i(x)) = \frac{2h}{3}.$$

Для первого и последнего элемента ответ будет в 2 раза меньше:

$$(\varphi_0(x), \varphi_0(x)) = (\varphi_n(x), \varphi_n(x)) = \frac{h}{3}.$$

Далее посмотрим скалярное произведение 2 подряд идущих базисных функций (над и под главной диагональю):

$$(\varphi_i(x), \varphi_{i+1}(x)) = h\int_0^1 (1-x)xdx = \frac{h}{6}.$$

Скалярное произведение элементов при $|i-j| > 1$ будет нулевое:

$$(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = 0.$$

Пример 1

В итоге, необходимо найти решение СЛАУ (все строки матрицы умножены на $\frac{6}{h}$) с трехдиагональной матрицей:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \cdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix} = \frac{6}{h} \begin{pmatrix} (\varphi_0, f) \\ (\varphi_1, f) \\ (\varphi_2, f) \\ \cdots \\ (\varphi_{n-2}, f) \\ (\varphi_{n-1}, f) \\ (\varphi_n, f) \end{pmatrix} \tag{1}$$

Интегралы для правых частей надо вычислять численно. Причем для первой и последней компоненты с особенными границами:

$$(\varphi_i, f) = \begin{cases} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \varphi_i(x) f(x) dx, i = 0 \\ \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \varphi_i(x) f(x) dx, i = 1..(n-1) \\ \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x) f(x) dx, i = n \end{cases} .$$

Пример 1

Дана сетка размером $n = 3$ на отрезке $[0; 1]$. Построить кусочно–линейную аппроксимацию функции

$$f(x) = 54x^2$$

методом наименьших квадратов с минимальным интегральным отклонением.

$$\varphi_0(x) = \varphi\left(\frac{x-0}{1/3}\right) = \begin{cases} 1 - 3x & , x \in \left[0, \frac{1}{3}\right] \\ 0 & , x \notin \left[0, \frac{1}{3}\right] \end{cases}$$

$$\varphi_1(x) = \varphi\left(\frac{x-1/3}{1/3}\right) = \begin{cases} 0 + 3x & , x \in \left[0, \frac{1}{3}\right] \\ 2 - 3x & , x \in \left[\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right] \\ 0 & , x \notin \left[0, \frac{2}{3}\right] \end{cases}$$

$$\varphi_2(x) = \varphi\left(\frac{x-2/3}{1/3}\right) = \begin{cases} -1 + 3x & , x \in \left[\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right] \\ 3 - 3x & , x \in \left[\frac{2}{3}, 1\right] \\ 0 & , x \notin \left[\frac{1}{3}, 1\right] \end{cases}$$

$$\varphi_3(x) = \varphi\left(\frac{x-1}{1/3}\right) = \begin{cases} -2 + 3x & , x \in \left[\frac{2}{3}, 1\right] \\ 0 & , x \notin \left[\frac{2}{3}, 1\right] \end{cases}$$

Пример 1

Вычислим проекции функции $f(x) = 54x^2$ на базисные функции $\varphi_i(x)$:

$$(f, \varphi_0) = \int_{\frac{0}{3}}^{\frac{1}{3}} 54x^2(1 - 3x)dx = \frac{1}{6} \approx 0.16667$$

$$(f, \varphi_1) = \int_{\frac{0}{3}}^{\frac{1}{3}} 54x^2(0 + 3x)dx + \int_{\frac{1}{3}}^{\frac{2}{3}} 54x^2(2 - 3x)dx = \frac{7}{3} \approx 2.33333$$

$$(f, \varphi_2) = \int_{\frac{1}{3}}^{\frac{2}{3}} 54x^2(-1 + 3x)dx + \int_{\frac{2}{3}}^{\frac{3}{3}} 54x^2(3 - 3x)dx = \frac{25}{3} \approx 8.33333$$

$$(f, \varphi_3) = \int_{\frac{2}{3}}^{\frac{3}{3}} 54x^2(-2 + 3x)dx = \frac{43}{6} \approx 7.16667$$

Пример 1

Умножаем полученные значения на $\frac{6}{h} = 18$ и получаем вектор–столбец $(3, 42, 150, 129)^T$ для СЛАУ, определяющая коэффициенты аппрокосимации:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 42 \\ 150 \\ 129 \end{pmatrix}$$

Решая данную систему методом прогонки, находим коэффициенты:

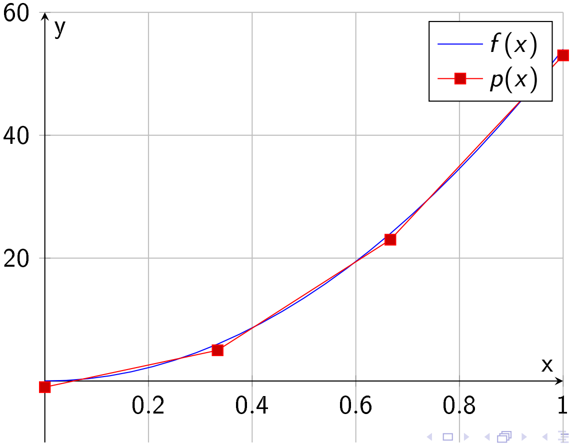
$$\begin{cases} c_0 = -1 \\ c_1 = 5 \\ c_2 = 23 \\ c_3 = 53 \end{cases}$$

Пример 1

Аппроксимирующая функция выглядит так:

$$p(x) = -\varphi_0(x) + 5\varphi_1(x) + 23\varphi_2(x) + 53\varphi_3(x).$$

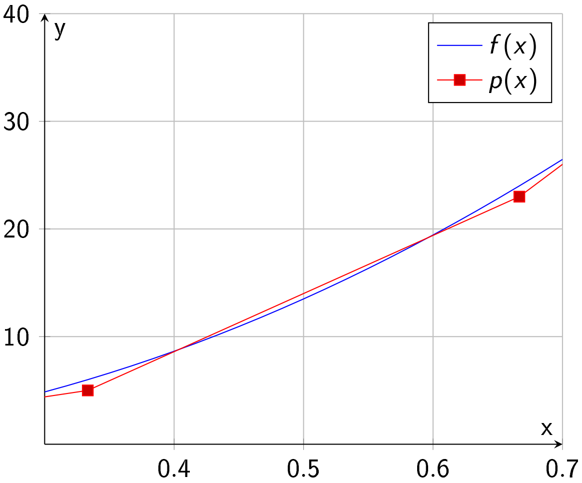
Это кусочно линейная функция, которая проходит через узлы: $(0, -1)$, $\left(\frac{1}{3}, 5\right)$, $\left(\frac{2}{3}, 23\right)$, $(1, 53)$.



Пример 1

Аппроксимирующая функция выглядит так:

$$p(x) = -\varphi_0(x) + 5\varphi_1(x) + 23\varphi_2(x) + 53\varphi_3(x).$$



Пример 1

Образ базиса и базисные функции:

```
n = int()
xi = linspace(0.0, 1.0, n + 1)
h = 1.0 / n

def phi(x):
    if -1 <= x <= 0:
        return 1 + x
    if 0 <= x <= 1:
        return 1 - x
    return 0

def phi(i, x)
    return phi((x - xi[i]) / h)
```

Пример 1

Функция, которая вычисляет интеграл

$$\int_0^1 f(t)\varphi_i(t)dt = \int_{x_i-h}^{x_i+h} f(t)\varphi_i(t)dt$$

методом трапеций (1000 трапеций).

```
def integral(f, i):
    m = 1000
    l = 0 if i == 0 else xi[i] - h
    r = 1 if i == n else xi[i] + h

    s = 0.5 * (f(l) * phi(i, l) + f(r) * phi(i, r))
    for t in linspace(l, r, m + 1)[1: -1]:
        s = s + f(t) * phi(i, t)
    return s * (r - l) / m
```

Пример 1

Функция вычисления весовых коэффициентов c_i с помощью функций *integral* — численное интегрирование и *sweep* — метод прогонки.

```
def generateLeastSquares():
    a = np.array([0] + [1] * (n - 1) + [1])
    b = np.array([2] + [4] * (n - 1) + [2])
    c = np.array([1] + [1] * (n - 1) + [0])
    f = np.zeros(n + 1)
    for i in range(n + 1):
        f[i] = 6 / h * integral(f, i)

    return sweep(n+1, a, b, c, f)[:-1]
```

Пример 2

Рассмотрим аппроксимацию $f \in R^n$ элементами из подпространства ($m < n$):

$$v = c_1\varphi_1 + \ldots + c_m\varphi_m$$

по норме, согласованной со скалярным произведением:

$$(f, g) = \sum_i f_i g_i$$

Метод наименьших квадратов.

$$\begin{pmatrix} (\varphi_1, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_2) & \ldots & (\varphi_1, \varphi_m) \\ (\varphi_2, \varphi_1) & (\varphi_2, \varphi_2) & \ldots & (\varphi_2, \varphi_m) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ (\varphi_m, \varphi_1) & (\varphi_m, \varphi_2) & \ldots & (\varphi_m, \varphi_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \ldots \\ c_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varphi_1, f) \\ (\varphi_2, f) \\ \ldots \\ (\varphi_m, f) \end{pmatrix}$$

Пример 2

Дан набор n измерений $y_i = f(x_i)$. Необходимо аппроксимировать вектор y вектором $\tilde{y}$, который получен линейной аппроксимацией

$$\tilde{y}_i = ax_i + b$$

с минимальным отклонением:

$$\min_{a,b}(y - \tilde{y}, y - \tilde{y}).$$

Пример 2

Пусть $m = 2$.

$$\varphi_1 = (x_1, x_2, ..., x_n)$$
$$\varphi_2 = (1, 1, ..., 1)$$

Метод наименьших квадратов.

$$(y - a\varphi_1 - b\varphi_2, y - a\varphi_1 - b\varphi_2) \to \min$$

Система.

$$\begin{pmatrix} x_1^2 + ... + x_n^2 & x_1 + ... + x_n \\ x_1 + ... + x_n & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 y_1 + ... + x_n y_n \\ y_1 + ... + y_n \end{pmatrix}$$

Введем обозначение средних величин:

$$\overline{z} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} z_i.$$

Система.

$$\begin{pmatrix} \overline{x^2} & \overline{x} \\ \overline{x} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{xy} \\ \overline{y} \end{pmatrix}$$

Пример 2

Минимизируем по школьному:

$$F(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

Производные по a и b должны обнулиться:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} x_i(ax_i + b - y_i) & = 0 \\ \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i) & = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i & = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{n} x_i + b\sum_{i=1}^{n} 1 & = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{cases}$$

Поделим каждое уравнение системы на n и получим:

$$\begin{cases} a\overline{x^2} + b\overline{x} & = \overline{xy} \\ a\overline{x} + b & = \overline{y} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a & = \frac{\overline{xy} - \overline{x} * \overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2} \\ b & = \overline{y} - a\overline{x} \end{cases} \qquad (2)$$

Пример 2

Дана сетка на $n = 3$ отрезка со значениями в узлах: $(2, 1)$, $(3, 4)$, $(4, 2)$, $(5, 5)$.
Построить линейную аппроксимацию методом наименьших квадратов.
Рассмотрим 2 вектора: $x = (2, 3, 4, 5)$ и $y = (1, 4, 2, 5)$.
Вычислим средние величины:

$$\overline{x} = \frac{1}{4}(2 + 3 + 4 + 5) = \frac{7}{2}$$

$$\overline{y} = \frac{1}{4}(1 + 4 + 2 + 5) = 3$$

$$\overline{xy} = \frac{1}{4}(2 \cdot 1 + 3 \cdot 4 + 4 \cdot 2 + 5 \cdot 5) = \frac{47}{4}$$

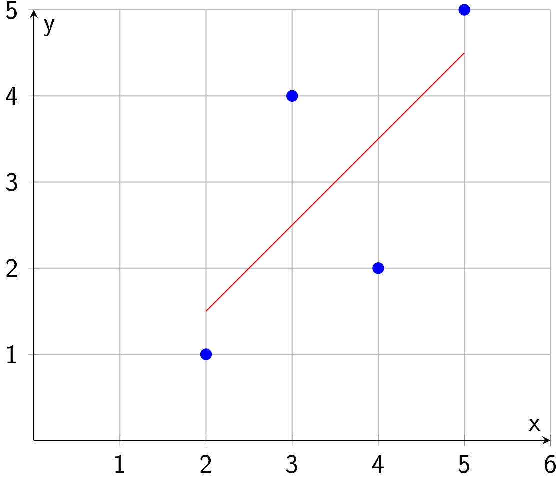
$$\overline{x^2} = \frac{1}{4}\left(2^2 + 3^2 + 4^2 + 5^2\right) = \frac{54}{4}$$

Коэффициенты прямой:

$$a = \frac{\overline{xy} - \overline{x} \cdot \overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2} = \frac{\frac{47}{4} - \frac{7}{2} \cdot 3}{\frac{54}{4} - \frac{49}{4}} = 1$$

$$b = \overline{y} - a \cdot \overline{x} = 3 - 1 \cdot \frac{7}{2} = -\frac{1}{2}$$

Пример 2



Пример 2

Код, вычисляющий коэффициенты:

```
def linearRegression(x, y)
    a = (x * y).mean() - x.mean() * y.mean()
    a /= (x * x).mean() - x.mean() ** 2
    b = y.mean() - a * x.mean()
    return a, b
```

Литература

Подробнее в [1, стр. 44] и [2, стр. 65].

Калиткин Н.Н. Численные методы. - Спб.: БХВ-Петербург, 2014.

Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. - М.: Наука, 1989.