1.3. НАИЛУЧШЕЕ СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Процедура интерполяции функции подразумевает построение некоторой новой функции, совпадающей с заданной в фиксированных узлах. В ряде случаев целесообразно приближать функции не по точкам, а в среднем, например, когда значения функции в узлах определены неточно, или, когда требуется построить аппроксимирующую функцию для всего диапазона задания таблицы.

Пусть имеется множество функций $\varphi(x)$, принадлежащих линейному пространству функций. Под близостью в среднем исходной y и аппроксимирующей φ функций будем понимать результат оценки суммы

$$I = \sum_{i=1}^{N} \rho_i [y(x_i) - \varphi(x_i)]^2 \tag{1}$$

где ρ_i - вес точки. Суммирование выполняется по всем N узлам заданной функции.

Такой вид аппроксимации называют среднеквадратичным приближением. Можно рассмотреть две задачи:

1 - подобрать функцию $\varphi(x)$ так, чтобы выполнялось неравенство

$$I \le \varepsilon \;;$$

2 - найти наилучшее приближение, т.е. такую функцию $\overline{\varphi}(x)$, чтобы было справедливым соотношение

$$\sum_{i=1}^{N} \rho_i [y(x_i) - \varphi(x_i)]^2 = min \tag{2}$$

Далее займемся отысканием наилучшего приближения, которое применительно к таблично заданным функциям называется методом наименьших квадратов.

Разложим функцию $\varphi(x)$ по системе линейно независимых функций $\varphi_k(x)$:

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x) \ . \qquad (3)$$

В дальнейшем для сокращения записи будем пользоваться определением скалярного произведения в пространстве дискретно заданных функций

$$(f,\varphi) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i \ f(x_i)\ \varphi(x_i), \ \ \rho_i > 0 \, .$$

Несложно установить, что имеют место следующие равенства, справедливые для обычного скалярного произведения элементов линейного пространства

1. $(f,\varphi)=(\varphi, f)$
2. $(f+\varphi,\gamma) = (f,\gamma)+(\varphi,\gamma)$ (4)

Подставляя (3) в условие (2), получим с учетом (4.)

$$((y-\varphi),(y-\varphi)) = (y,y) - 2\sum_{k=0}^{n} a_k (y,\varphi_k) + \sum_{k=0}^{n}\sum_{m=0}^{n} a_k a_m (\varphi_k,\varphi_m) = \min \ .$$

Дифференцируя это выражение по a_k и приравнивая производные нулю, найдем

$$\sum_{m=0}^{n} (\varphi_k,\varphi_m) a_m = (y,\varphi_k), \quad 0 \le k \le n \ . \qquad (5)$$

Матрица данной системы представляет собой матрицу Грама. Определитель этой матрицы в силу линейной независимости функций $\varphi_k(x)$ не равен нулю. Следовательно, из системы (5) можно найти коэффициенты a_k, определяющие функцию $\varphi(x)$ согласно (3) и минимизирующие (1). Таким образом, наилучшее среднеквадратичное приближение существует и оно единственно.

В качестве $\varphi_k(x)$ чаще всего используют полиномы Лежандра, Чебышева, Лагерра, Эрмита, ортогональные с заданным весом.

Наиболее употребительный вариант метода наименьших квадратов соответствует случаю степенного вида функций $\varphi_k(x)$, т.е. $\varphi_k(x) = x^k$, причем $0 \le k \le n$. Обычно степень полинома не превышает пяти-шести.

Система уравнений (5) при этом принимает вид

$$\sum_{m=0}^{n} (x^k, x^m)\, a_m = (y, x^k)\ ,\ 0 \le k \le n\ , \tag{6}$$

где $\quad (x^k, x^m) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i^{k+m}, \quad (y, x^k) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i y_i x_i^k$.

Пример 2.1. Методом наименьших квадратов аппроксимировать функцию линейной зависимостью вида $\varphi(x) = a_0 + a_1 x$.

В данном случае $n = 1$. В итоге система уравнений (6) имеет вид

$$(x^0, x^0)a_0 + (x^0, x^1)a_1 = (y, x^0), \tag{7}$$

$$(x^1, x^0)a_0 + (x^1, x^1)a_1 = (y, x^1). \tag{8}$$

Скалярные произведения в полученной системе записываются следующим образом:

$$(x^0, x^0) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i\ ,\ (x^1, x^0) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i\ ,\ (x^1, x^1) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i^2$$

$$(y, x^0) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i y_i\ ,\ (y, x^1) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i y_i x_i\ .$$

Окончательно решение системы уравнений (7), (8)

$$a_0 = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i y_i \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i^2 - \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} \rho_i \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i^2 - (\sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i)^2}\ ,$$

$$a_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i y_i - \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i \sum_{i=1}^{N} \rho_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} \rho_i \sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i^2 - (\sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i)^2} .$$

Система функций x^k не ортогональна, поэтому при больших n задача (5) плохо обусловлена, в связи с чем на практике ограничиваются значениями $n \le 5$.

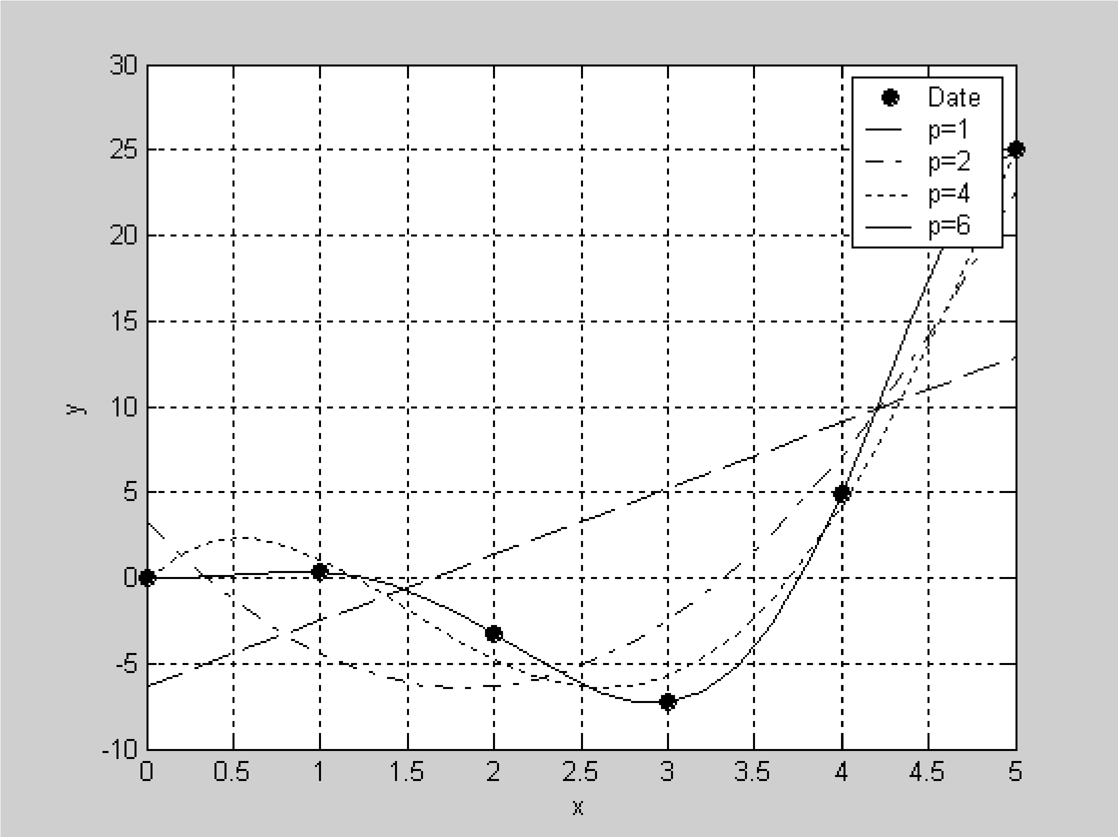

Рис.1 Аппроксимация функции методом наименьших квадратов

На рис.1 представлен результат применения метода наименьших квадратов для аппроксимации данных (черные точки) полиномами степеней 1, 2, 4 и 6. Веса всех точек приняты равными 1.

Отметим, что из (7) следует, что при использовании полинома первой степени в методе наименьших квадратов, прямая линия проходит через, своего рода, центр тяжести совокупности точек, т.е. через точку с координатами

$$X = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i x_i}{\sum_{i=1}^{N} \rho_i}, \quad Y = \frac{\sum_{i=1}^{N} \rho_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} \rho_i}. \qquad (9)$$

Действительно, подставляя (9) в выражение

$$Y = a_0 + a_1 X \ ,$$

придем к уравнению (7).

Сделаем некоторые замечания о введенных выше (1) весах точек ρ_i. Вес определяет «значимость» точки. Чем больше вес точки, тем ближе к точке проходит аппроксимирующая кривая. Под весом можно понимать, например, величину, обратную относительной погрешности задания функции, т.е. чем более точное значение имеет табличная функция в некоторой точке, тем больше ее вес и тем ближе к ней пройдет график аппроксимирующей функции. Что является вполне логичным.

Подведем итоги.

Для применения метода наименьших квадратов в случае аппроксимации полиномом следует действовать следующим образом.

1. Выбирается степень полинома n<<N. Обычно степень полинома не превышает 5-6.
2. Составляется система линейных алгебраических уравнений типа (6).
3. В результате решения СЛАУ находятся коэффициенты полинома a_k

В качестве исходных данных используется произвольная табличная функция, для каждого узла i которой пользователь задает вес ρ_i по своему усмотрению.