برازش منحنی

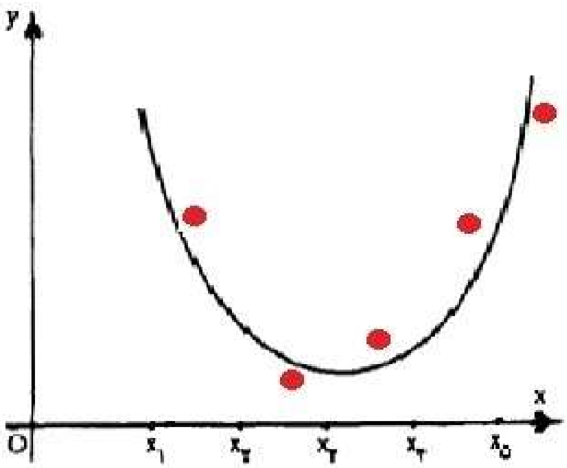
واقعیت این است که مقادیر f_i در یک تابع جدولی تقریبی هستند زیرا از طریق اندازه‌گیری یا آزمایش به دست می‌آیند. در عمل اکثراً نقاط جدول را به وسیلهٔ یک منحنی چنان برازش می‌کنند که خطا به نوعی حداقل باشد.

تعریف

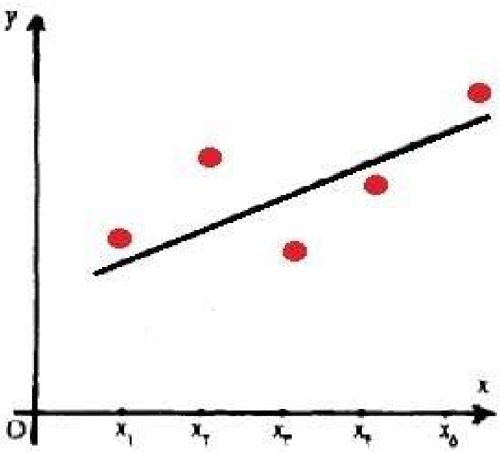
فرض کنید نقاط (x_i,y_i) ، $i=1,2,...,n$ ، مفروض و چند جمله‌ای $P(x)$ چنان باشد که

$$S=\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-P(x_i)\right)^2$$

کمترین مقدار را داشته باشد. در این صورت $P(x)$ را **چندجمله‌ای تقریب کمترین مربعات** برای داده‌های (x_i,y_i) ، $i=1,...,n$ ، نامند.



سهمی کمترین مربعات



خط کمترین مربعات

در حالت کلی برای به دست آوردن چندجمله‌ای کمترین مربعات $P(x)$ از درجهٔ m فرض کنید که

$$P(x)=a_m x^m+a_{m-1}x^{m-1}+...+a_0 \qquad , \qquad (a_m\neq 0)$$

برای به دست آوردن ضرایب $P(x)$ قرارمی‌دهیم:

$$\frac{\partial S}{\partial a_j}=0 \;, \qquad j=0,1,...,m.$$

لذا دستگاهی شامل $m+1$ معادله و $m+1$ مجهول a_0 ، a_1 ، ... ، a_m حاصل می شود که با حل آن ضرایب مجهول چندجمله ای $P(x)$ بدست می آید.

خط کمترین مربعات

یکی از متداولترین روشهای برازش منحنی انتخاب خط کمترین مربعات برای برازش n نقطهٔ مفروض (x_1,y_1)، ... ،(x_n,y_n) است. در این روش فرض می کنیم:

$$P(x) = ax+b$$

لذا باید a و b را چنان تعیین کنیم که

$$S=\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (ax_i+b)\right)^2$$

مینیمم باشد. از این‌رو، قرارمی‌دهیم:

$$\frac{\partial S}{\partial a}=0 \quad , \quad \frac{\partial S}{\partial b}=0$$

اما داریم:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S}{\partial a}=\sum_{i=1}^{n} -2x_i\left[y_i-(ax_i+b)\right]=0\\ \dfrac{\partial S}{\partial b}=\sum_{i=1}^{n} -2\left[y_i-\left(ax_i+b\right)\right]=0\end{cases}$$

پس از ساده کردن، دستگاه زیر نتیجه می شود:

$$\boxed{\begin{cases}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a +\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b = \sum_{i=1}^{n} x_iy_i\\ \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a + n b = \sum_{i=1}^{n} y_i\end{cases}}$$

از دستگاه بالا مقادیر a و b به دست می‌آیند که توسط آنها خط کمترین مربعات y=ax+b مشخص می‌شود.

مثال

خط کمترین مربعات مربوط به تابع جدولی زیر را تعیین کنید

x_i	-۲	-۱	۰	۱	۲
f_i	۰	۱	۲	۲	۳

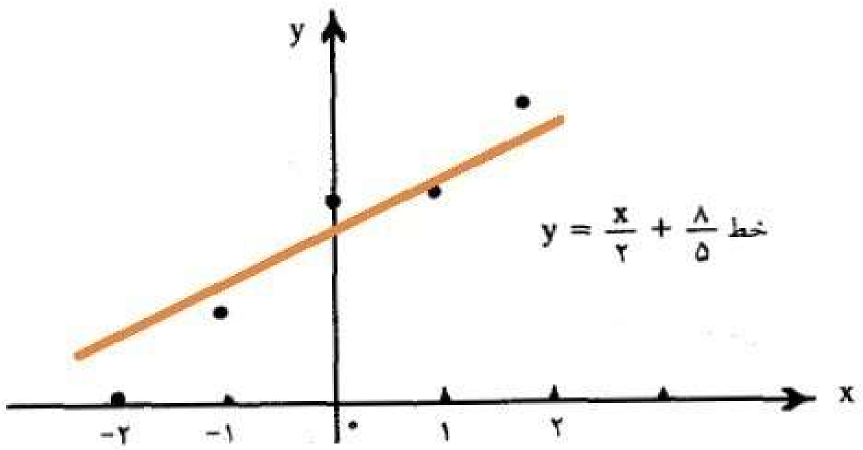
حل: در این مثال داریم:

$$n=5,\quad \sum_{i=1}^{5}x_i=0,\quad \sum_{i=1}^{5}x_i^2=10,\quad \sum_{i=1}^{5}x_iy_i=5,\quad \sum_{i=1}^{5}y_i=8$$

بنابراین،

$$\begin{cases}10\, a=5\\ 5\, b=8\end{cases}$$

که از آن نتیجه می‌شود: $a=\frac{1}{2}$ و $b=\frac{8}{5}$.



مشتقگیری و انتگرالگیری عددی

مشتق و انتگرال در علوم کاربردی زیادی ظاهر شده و مورد استفاده قرار می گیرد. در بسیاری از مواقع قادر به محاسبه مقدار مشتق و یا انتگرال یک تابع نیستیم که باید از روش های عددی استفاده کنیم.

مشتقگیری عددی

برای مشتقگیری عددی، همان‌طور که قبلاً اشاره شد، از چندجمله‌ای درونیاب استفاده می‌کنیم. چند جمله‌ای درونیاب f در نقاط متساوی الفاصله x_i، x_{i+1}، ...، x_{i+k} را چنین به دست آوردیم:

$$p(x) = f_i + \theta \Delta f_i + \frac{\theta(\theta-1)}{2!}\Delta^2 f_i + \frac{\theta(\theta-1))(\theta-2)}{3!}\Delta^3 f_i + \dots + \frac{\theta(\theta-1)\dots(\theta-k+1)}{k!}\Delta^k f_i$$

که در آن، $x = x_i + \theta h$ و $x_{i+1} - x_i = h$ برای $i = 0, 1, \dots, n-1$.

چون $P(x)$ برحسب θ ارائه شده است ، داریم که:

$$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} \simeq \frac{dP(x)}{dx} = \frac{dP}{d\theta} \times \frac{d\theta}{dx}$$

اما داریم، $dx = h\, d\theta$ که در نتیجه $\frac{d\theta}{dx} = \frac{1}{h}$

بنابراین، با مشتقگیری از $p(x)$ داریم :

$$p'(x) = f'(x) \simeq \frac{1}{h}\left[\Delta f_i + \left(\theta - \frac{1}{2}\right)\Delta^2 f_i + \left(\frac{\theta^2}{2} - \theta + \frac{1}{3}\right)\Delta^3 f_i + \left(\frac{\theta^3}{6} - \frac{\theta^2}{2} + \frac{5\theta}{12} - \frac{1}{2}\right)\Delta^4 f_i \dots\right]$$

اگر قرار دهیم $\theta=0$، با توجه به $x=x_i+\theta h$، داریم $x=x_i$ ولذا:

$$f'(x_i)=f'_i\simeq\frac{1}{h}\left(\Delta f_i-\frac{1}{2}\Delta^2 f_i+\frac{1}{3}\Delta^3 f_i-\frac{1}{4}\Delta^4 f_i+\dots\right)$$

معمولاً برای محاسبهٔ تقریبی از f'_i یک یا چندجمله از سمت راست انتخاب می‌شود.

مثلاً

$$\boxed{f'_i\simeq\frac{1}{h}\Delta f_i=\frac{f_{i+1}-f_i}{h}}$$

و یا

$$f'_i\simeq\frac{1}{h}\left[\Delta f_i-\frac{1}{2}\Delta^2 f_i\right]=\frac{1}{h}\left[f_{i+1}-f_i-\frac{1}{2}\left(f_{i+2}-2f_{i+1}+f_i\right)\right]$$

که در نتیجه

$$\boxed{f'_i\simeq\frac{2f_{i+1}-\frac{1}{2}f_{i+2}-\frac{3}{2}f_i}{h}}$$

ضمناً، اگر قراردهیم $\theta=\frac{1}{2}$، با توجه به $x=x_i+\theta h$ ، داریم: $x=x_i+\frac{h}{2}$ و لذا

$$f'(x_i+\frac{h}{2})\simeq\frac{1}{h}\left(\Delta f_i-\frac{1}{24}\Delta^3 f_i+\frac{1}{48}\Delta^4 f_i+\dots\right)$$

از این رو، اگر تنها جملهٔ اول داخل پرانتز سمت راست را انتخاب کنیم:

$$\boxed{f'(x_i+\frac{h}{2})\simeq\frac{\Delta f_i}{h}=\frac{f_{i+1}-f_i}{h}}$$

و اگر دو جملهٔ اول را منظور کنیم:

$$\boxed{f'(x_i+\frac{h}{2})\simeq\frac{1}{h}\left(\Delta f_i-\frac{1}{24}\Delta^3 f_i\right)}$$

مثال

جدول زیر مقادیر تابع $f(x)=e^x$ را نمایش می دهد. تقریبی از مشتقات مرتبه اول این تابع جدولی یعنی f'_i، به ازای $i=0،1،2،3$ را بر اساس دو فرمول بالا محاسبه کنید:

x_i	۰/۱	۰/۱۵	۰/۲	۰/۲۵	۰/۳
f_i	۱/۱۰۵۱۷	۱/۱۶۱۸۳	۱/۲۲۱۴۰	۱/۲۸۴۰۳	۱/۳۴۹۸۶

حل: جدول تفاضلات f را تشکیل دهیم.

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$
۰/۱	۱/۱۰۵۱۷			
		۰/۰۵۶۶۶		
۰/۱۵	۱/۱۶۱۸۳		۰/۰۰۲۹۱	
		۰/۰۵۹۵۷		۰/۰۰۰۱۵
۰/۲	۱/۲۲۱۴۰		۰/۰۰۳۰۶	
		۰/۰۶۲۶۳		۰/۰۰۰۱۴
۰/۲۵	۱/۲۸۴۰۳		۰/۰۰۳۲۰	
		۰/۰۶۵۸۳		
۰/۳	۱/۳۴۹۸۶			

لذا به ازای ۰/۰۵ = h ، خواهیم داشت:

f_i	$f'_i \simeq \dfrac{\Delta f_i}{h}$	$f'_i \simeq \dfrac{\Delta f_i - \frac{1}{2}\Delta^2 f_i}{h}$
۱/۱۰۵۱۷	۱/۱۳۳۲	۱/۱۰۴
۱/۱۶۱۸۳	۱/۱۹۱۴	۱/۱۶۰۸
۱/۲۲۱۴۰	۱/۲۵۲۶	۱/۲۲۰۶
۱/۲۸۴۰۳	۱/۳۱۶۶	—

با توجه به آنکه مشتق تابع f با خودش برابر است. بنابراین، در جدول اخیر، باید اعداد موجود در هر سه ستون یکسان باشند! که نیستند. البته مشاهده می‌شود مقادیر تقریبی ستون سوم دقیق تر از ستون دوم است.

خطای مشتقگیری عددی

برای پیدا کردن خطای فرمولهای مختلف مشتق مرتبه اول f (x) ، می توانیم از بسط تیلور استفاده کنیم. مثلاً،

$$f_{i+1} = f(x_{i+1}) = f(x_i+h)$$

در نتیجه

$$f_{i+1} = f(x_i+h) = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i + \frac{h^3}{6} f'''_i + \ldots$$

از طرفی:

$$\frac{f_{i+1}-f_i}{h} = f'_i + \frac{h}{2} f''_i + \dots$$

لذا $\frac{f_{i+1}-f_i}{h}$، به عنوان تقریبی از f'_i، به صورت زیر است:

$$\boxed{\frac{f_{i+1} - f_i}{h} - f'_i = \frac{h}{2} f_i'' + \frac{h^2}{6} f_i''' + \dots}$$

در اینجا با توجه به این که h کوچک فرض می‌شود **جملهٔ غالب** در سمت راست $\frac{h}{2} f''_i$ است که اصطلاحاً گفته می‌شود **خطا متناسب با h** است و یا نوشته می‌شود:

$$\boxed{\frac{f_{i+1} - f_i}{h} - f'_i = O(h)}$$

قضیه

$$f'\left(x_i + \frac{h}{2}\right) - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} = O(h^2)$$

برهان با توجه به بسط تیلور تابع $f'(x)$ می‌توان نوشت:

$$f'\left(x_i + \frac{h}{2}\right) = f'_i + \frac{h}{2} f''_i + \frac{\left(\frac{h}{2}\right)^2}{2!} f'''_i + \dots = f'_i + \frac{h}{2} f''_i + \frac{h^2}{8} f_i''' + \dots$$

با کم کردن جملات از یکدیگر داریم:

$$f'\left(x_i + \frac{h}{2}\right) - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} = \frac{h^2}{8} f'''_i - \frac{h^2}{6} f'''_i + \dots = -\frac{1}{24} h^2 f'''_i + \dots$$

که فوراً حکم قضیه را به دست می‌دهد.

همچنانکه در مثال ها مشاهده شد، هرچه توان h در عبارت خطا بیشتر باشد تقریب بهتر، یا خطا کمتر است. اما، به طور کلی نباید به نتایج تقریبی که از فرمولهای فوق حاصل می‌شود اعتماد کرد. در حالت کلی خطا به صورت $O(h^p)$ است که در آن p بستگی به تعداد جملاتی دارد که از فرمول اصلی بسط حاصل می‌شوند. ظاهراً هرچه p بزرگتر باشد خطا نیز کمتر خواهد بود، ولی عملاً خطای گرد کردن، به هنگام کوچک بودن مقدار h، سبب مشکلاتی در سازگاری نظری با نتایج عددی می‌شود. توضیح این که در محاسبهٔ کسر زیر به عنوان تقریبی از f'_i:

$$\frac{f_{i+1} - f_i}{h},$$

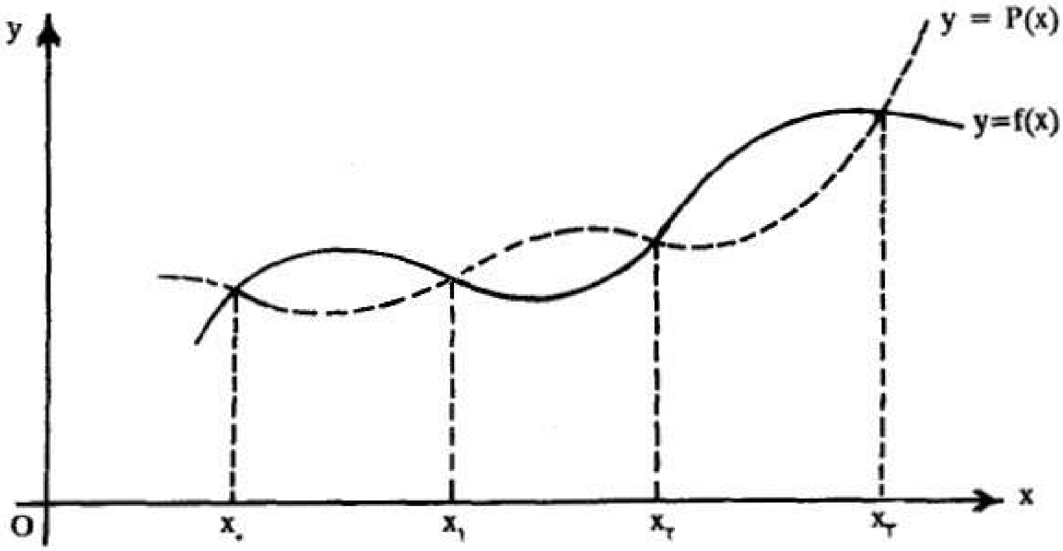
که خطای آن متناسب با h است، ظاهراً برای کوچک بودن خطا باید h را حتی‌المقدور کوچک اختیار کنیم. اما اگر h خیلی کوچک باشد f_i و f_{i+1} دو عدد بسیار نزدیک خواهند بود و در محاسبهٔ $f_{i+1} - f_i$ ارقام با معنا کم و دقت کم می‌شود و چون این حاصل، بر h که قرار است بسیار کوچک باشد، تقسیم می‌شود (یعنی در حقیقت $(f_{i+1} - f_i)$ در $\frac{1}{h}$، که بسیار بزرگ است، ضرب می‌شود) خطا باز هم بیشتر می‌شود.

خلاصه این که اگر h خیلی کوچک باشد خطای مقدار محاسبه شدهٔ $\frac{f_{i+1} - f_i}{h}$ زیاد خواهد بود.

از این‌رو، برای این که این کسر با خطایی کوچک محاسبه شود h نباید خیلی کوچک اختیار شود!

پس از طرفی h باید خیلی کوچک اختیار شود، از طرف دیگر، نباید خیلی کوچک اختیار شود که در نتیجه در تنگنا قرارمی‌گیریم و باید بهترین h را اختیار کنیم که در عمل میسر نیست.

شکل زیر نشان می‌دهد که اگر $P(x)$ تقریبی از $f(x)$ باشد، همواره $P'(x)$ تقریب مناسبی از $f'(x)$ نخواهد بود و در عمل حتی‌المقدور باید از مشتقگیری عددی کمتر استفاده کرد.



مماس بر منحنیهای $y=f(x)$ و $y=P(x)$، در نقاط برخورد $P(x_i) = f(x_i)$ با یکدیگر متفاوت‌اند. به عبارت دیگر، ضریب زاویهٔ خطوط مماس، در نقاطی که طول آنها x_0، x_1، ... است، بر دو منحنی کاملاً با هم متفاوت است!

مشتقات مراتب بالا

با توجه به آنچه گفته شد می‌توان مشتق مرتبهٔ دوم، سوم و... را نیز برآورد کرد.

$$f''(x) = \frac{d f'(x)}{dx} \simeq \frac{d p'(x)}{d\theta} \times \frac{d\theta}{dx}$$

مطابق آنچه انجام دادیم:

$$f''(x) \simeq \frac{1}{h^2}\left[\Delta^2 f_i + (\theta-1)\Delta^3 f_i + \left[\frac{\theta^2}{2} - \theta + \frac{5}{12}\right]\Delta^4 f_i + \ldots\right]$$

در اینجا هم می‌توان یک یا چند جمله از عبارت سمت راست را به عنوان تقریبی از $f''(x)$ اختیار کرد. مثلاً، اگر $\theta=0$ آن گاه $x=x_i$ و

$$f''_i = f''(x_i) \simeq \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 f_i - \Delta^3 f_i + \frac{5}{12}\Delta^4 f_i + \ldots\right)$$

که از آن تقریبهای زیر حاصل می‌شود:

$$\boxed{f''_i \simeq \frac{\Delta^2 f_i - \Delta^3 f_i}{h^2}} \quad \text{و} \quad \boxed{f''_i \simeq \frac{\Delta^2 f_i}{h^2}}$$

همچنین، اگر $\theta=1$ داریم $x=x_i+h$ یعنی، $x=x_{i+1}$ و در نتیجه

$$f''_{i+1} \simeq \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 f_i - \frac{1}{12}\Delta^4 f_i + \ldots\right)$$

که از آن تقریبهای زیر حاصل می‌شود:

$$\boxed{f''_{i+1} \simeq \frac{\Delta^2 f_i - \frac{1}{12}\Delta^4 f_i}{h^2}} \quad \text{و} \quad \boxed{f''_{i+1} \simeq \frac{\Delta^2 f_i}{h^2}}$$

مثال

با استفاده از جدول تفاضلات مثال قبل تقریبهایی از f''_i را برای تابع $f(x)=e^x$ حساب کنید.

حل:

x_i	f_i	f''_i	f''_i
۰/۱	۱/۱۰۵۱۷	۱/۱۶۴	۱/۱۰۴
۰/۱۵	۱/۱۶۱۸۳	۱/۲۲۴	۱/۱۶۸
۰/۲	۱/۲۲۱۴۰	۱/۲۸	–

ملاحظه می‌شود که $\frac{\Delta^2 f_i - \Delta^3 f_i}{h^2}$ تقریب بهتری برای f''_i است تا $\frac{\Delta^2 f_i}{h^2}$.