Министерство образования и науки Российской Федерации.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»

Факультет Автоматики и вычислительной техники
Кафедра Вычислительной техники

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
Сплайн-аппроксимация и обработка экспериментальных данных

Методические указания к лабораторной работе
для студентов II курса дневного отделения АВТФ
Образовательные программы:
09.03.01 «Информатика и ВТ»;
09.03.04 «Программная инженерия»;
12.03.01 «Приборостроение»

НОВОСИБИРСК 2017

Содержание

1. Описание лабораторной работы

1.1 Цель и задачи работы

Целью работы является изучение и приобретение практических навыков численного решения задач приближения (аппроксимации) функций аналитическим выражением, оценки достигаемой точности и необходимых ресурсов, применения изучаемых методов для обработки экспериментальных данных методами восстановления сеточных функций.

Задачи:

- изучение методов кусочно-глобальной аппроксимации сплайнами, оценок точности получаемых приближений, границ применимости;
- изучение и применение алгоритмов обработки экспериментальных данных и глобальной аппроксимации функций, заданных таблично, на основе метода наименьших квадратов, оценок точности получаемых приближений, границ применимости.

1.2 Задание

Для заданной аналитической функции $y = y(x)$ создать псевдоэмпирические исходные данные – «зашумленные» сетки значений y различным числом узлов (например, n_1=10 , n_2=20). Результаты измерений содержат «экспериментальный шум» - случайные ошибки исследуемой величины y. Для формирования числовых наборов исходных данных использовать функции MathCAD генерации случайных величин, распределенных по равномерному и нормальному закону распределения с параметрами, определяющими погрешности соответствующих величин не более 10 процентов.

1. Ряд «экспериментальных» измерений функции $y = y(x)$ построить в двух вариантах :

   1) равноотстоящих точках x_i;

   2) в случайной последовательности с не равноотстоящими точками x_i.

2. Сгладить результаты измерений, используя алгоритмы (по выбору студента) линейного и нелинейного сглаживания.

3. Сравнить полученные результаты созданных псевдоэмпирических данных с заданными значениями «незашумленной», истинной функции.

4. Составить план проведения вычислительного эксперимента, отвечающий задачам исследования, перечисленным ниже.

4.1. Исследование интерполирование сплайн-функциями.

4.1.2 Провести сравнение качества построения интерполяционного полинома различными методами (критерий - уклонение в узлах интерполяционной сетки и на заданном интервале). (Доп. задание: при построении полиномов методом неопределенных коэффициентов зафиксировать изменения значений числа обусловленности интерполяционной матрицы от порядка полинома.)

4.1.2 Провести исследование погрешности интерполирования для модельной функции в зависимости от свойств гладкости и монотонности на интервале интерполирования; выявить зависимость погрешности от порядка интерполяционного полинома, от величины интервала, от типа сетки и предварительной обработки «псевдоэкспериментальных» данных.

4.2. Исследование среднеквадратичного приближения функций.

4.2.1. Для заданной функции на интервале приближения решить задачу приближения полиномами 2-й, 3-й, 4-й и максимально достижимой степени; обратить внимание на изменение значения числа обусловленности матрицы нормальной системы уравнений от ее порядка; при двух различных порядках приближающего полинома исследовать зависимость среднеквадратичной погрешности решения от величины массива исходных данных, от порядка полинома и типа сетки.

4.2.2 Исследовать устойчивость решения задачи среднеквадратичного приближения к погрешности исходных данных. Критерием может служить отличие величин среднеквадратичной погрешности аппроксимации, полученных при наличии и отсутствии возмущений, вызываемых «зашумлением» данных.

2. Варианты контрольных заданий

Для проведения вычислительных экспериментов в качестве аппроксимируемой функции на заданном интервале непрерывности брать из табл. 1 вариантов задания для лабораторной работы. Число узлов сетки аппроксимируемой функции варьировать равным от 5 до 20.

Варианты задания Таблица 1

№ вар.	[a, b]	$f(x)$	№ вар.	[a, b]	$f(x)$
1	[-2; 5]	$x\sqrt{e^x}$	18	[-1;2]	$\frac{5\sin 5x + x}{\cos x + 2x - 5}$
2	[-4; 5]	$\sin x + 2$	19	[1; 3]	$\operatorname{ctg} x$
3	[-1,5; 2,5]	$\operatorname{tg}\frac{x}{2}$	20	[2; 10]	$\frac{\sin x}{\ln x}$
4	[0,3; 10,3]	$\frac{\sin x}{x}$	21	[0,1; 2,1]	$\ln x + 2\cos x$
5	[1; 3]	$\ln x + \sin x^2$	22	[4; 12]	$1 - \sin x\sqrt[3]{(x-4)^2}$
6	[1,6; 4,6]	$\frac{\ln x}{\cos x}$	23	[1,8; 4,6]	$4x - \operatorname{tg} x$
7	[1,3; 9,3]	$e^{-x} + \frac{5\ln x}{x}$	24	[0,2; 1,2]	$1 + \frac{2}{x^2} - \frac{x^4}{4}$
8	[1,2; 7,2]	$\frac{\sin x + \cos x}{2}$	25	[-1; 4]	$\frac{1}{1+x^2}$
9	[1; 11]	$0{,}01x^2 - \frac{1}{x}$	26	[1,4; 7,4]	$\frac{e^x}{x^2}$
10	[1; 2]	$e^x + \sin 10x$	27	[1; 2]	$x\cos(10\ln x)$
11	[4; 12]	$2\sin x - x$	28	[1; 5]	$\frac{\sqrt[3]{\sin^2 x}}{x}$
12	[3,5; 5,5]	$\frac{1-\cos 5x}{1-\cos 2x}$	29	[1; 3]	$\sin x^2 + \cos x^2$
13	[0; 5]	$e^{\sin 2x}$	30	[1,2; 7,2]	$\frac{\ln^2 x}{1-x^3}$
14	[2; 7]	$(\pi - x)\operatorname{tg}\frac{x}{2}$	31	[0,1; 4,1]	$\sqrt[x]{e^{2x} + x}$
15	[2,4; 10,4]	$x^3 e^{-x}$	32	[0; 2,5]	$\frac{\sin x}{e^x + x}$
16	[6; 10]	$\ln^{\sin x} x$	33	[5; 10]	$\sqrt[3]{x^2} - 2\cos x$
17	[1,5; 2,5]	$\frac{\cos x}{\sin x + 2x^2 - 5}$	33	[2; 8]	$\cos x + 4$

Решение задачи может быть реализовано:
- на любом пакете программ или штатными средствами «MathCAD», включающих изучаемые методы;
- на основе самостоятельно разработанных программ, созданной в среде «MathCAD» или другой среды программирования по выбору студента.

3. Краткая теория к лабораторной работе

Все рассмотренные в 4-ой лабораторной работе методы позволяли получить полиномы, достаточно хорошо аппроксимирующие или интерполирующие сеточные функции при условии, что исходные данные достаточно точны. Однако в реальности, как значения узлов, так значения аппроксимируемой функции содержат ошибки. Обычно это связано с погрешностями измерений экспериментальных данных. В силу этого уровень неопределенности эмпирических данных при задании приближаемой функции $f(x_i)$ даже при точно заданных узлах, достаточно велик. Поэтому бессмысленно требовать выполнения условий интерполирования, т.е. точного равенства значений аппроксимирующих и аппроксимируемых в узловых значениях аргумента. Кроме того, число точек задания функции $f(x_i)$ часто весьма велико. Многочлен Лагранжа или Ньютона на всем отрезке $[a,b]$ с использованием большого числа узлов интерполирования часто приводит к плохому приближению, что объясняется накоплением погрешностей в ходе вычислений. Кроме того, из-за расходимости процесса интерполирования увеличение числа узлов не обязано приводить к повышению точности вычислений. Все это делает применение обычного интерполирования для обработки экспериментальных данных мало перспективным.

Существуют различные подходы для эффективного приближения эмпирических сеточных функций, в частности, основанные на методах глобальной и кусочно-глобальной аппроксимации. Этому в основном и посвящена данная лабораторная работа.

В случае кусочно-глобальной аппроксимации весь отрезок $[a,b]$ разбивается на частичные интервалы и на каждом из них приближающая функция $f(x)$ заменяется некоторой упрощенной функцией $\varphi_j(x)$, например, многочленом невысокой степени. Такая аппроксимация называется кусочно-полиномиальной.

При глобальной аппроксимации в качестве приближающей функции $f(x)$ применяется некоторая упрощенная функция такая, что удовлетворяла бы одному из заданных критериев близости аппроксимирующей к аппроксимируемой. Обычно для того, чтобы определить насколько далеко от данных лежит кривая $y = f(x)$ можно воспользоваться следующими нормами:

$$E_1(f) = \max_{1 \le k \le N} \left| f(x_k) - y_k \right| \text{ - максимальная ошибка,} \quad (1)$$

$$E_2(f) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left| f(x_k) - y_k \right| \text{ - средняя ошибка,} \quad (2)$$

$$E_3(f) = \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left| f(x_k) - y_k \right|^2 \right)^{1/2} \text{ - среднеквадратичная ошибка.} \quad (3)$$

В данной лабораторной работе рассматривается глобальное приближение функции методом наименьших квадратов (минимизация среднеквадратичной ошибки

3.1 Кусочно-линейное и кусочно-квадратичное интерполирование

Иногда, интерполирование по всей совокупности точек сетки бывает не достаточным. В этих случаях можно воспользоваться объединением фрагментов графиков полиномов низкой степени и интерполированием между последовательными узлами. Самый простой в использовании полином первой степени. Он создает ломаную, состоящую из отрезков, которые проходят через две точки. Чтобы представить эту кусочно-линейную кривую, используется полином Лагранжа:

$$S_k(x) = y_k \frac{(x - x_{k+1})}{(x_k - x_{k+1})} + y_{k+1} \frac{(x - x_k)}{(x_{k+1} - x_k)}$$

или используя формулу угла наклона отрезка линии в точке:

$$S_k(x) = y_k + \frac{(y_{k+1} - y_k)}{(x_{k+1} - x_k)}(x - x_k),$$

где $S_k(x)$ - линейный сплайн на отрезке [x_{k+1}, x_k], y_k – заданное значение функции, полученное экспериментально в заданных узлах. Аналогично можно построить кусочно-квадратичный полином.

Недостатком этого подхода является резкое изменение кривизны в общих узлах.

Пример: Для функции y=f(x), заданной таблично осуществить кусочно-линейное интерполирование и кусочно-квадратичное интерполирование.

x	0	0,5	1	2	3	4	5
f(x)	1,5	0	0	2	2	1	2

Решение: Осуществим кусочно-линейное интерполирование. Для этого разобьем данную функцию на элементарные промежутки, определяемые соседними числами верхней строки таблицы, и на каждом из участков строим прямую линию (полином первой степени), т.е.

$$S_1(x) = \begin{cases} -3x + 1.5, & \text{при } 0 \le x \le 0.5 \\ 0, & \text{при } 0.5 \le x \le 1 \\ 2x - 2, & \text{при } 1 \le x \le 2 \\ 2, & \text{при } 2 \le x \le 3 \\ -x + 5, & \text{при } 3 \le x \le 4 \\ x - 3, & \text{при } 4 \le x \le 5 \end{cases}$$

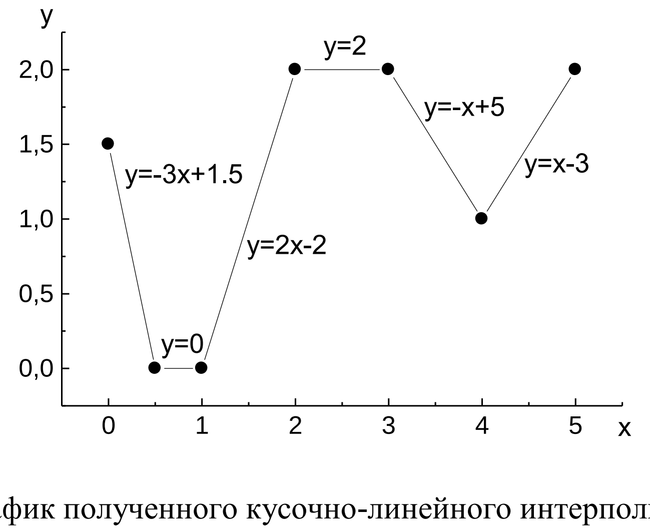

Рис. 1 График полученного кусочно-линейного интерполирования.

Осуществим кусочно-квадратичное интерполирование. Для этого будем рассматривать тройки известных точек отрезков [0;1],[1;3],[3;5]. На каждом из этих отрезках по известным точкам построим полином второй степени. В результате получим:

$$S_2(x)=\begin{cases}3x^2-4.5x+1.5, 0\le x\le 1\\ -x^2+5x-4, \quad 1\le x\le 3\\ x^2-8x+17, \quad 3\le x\le 5\end{cases}$$

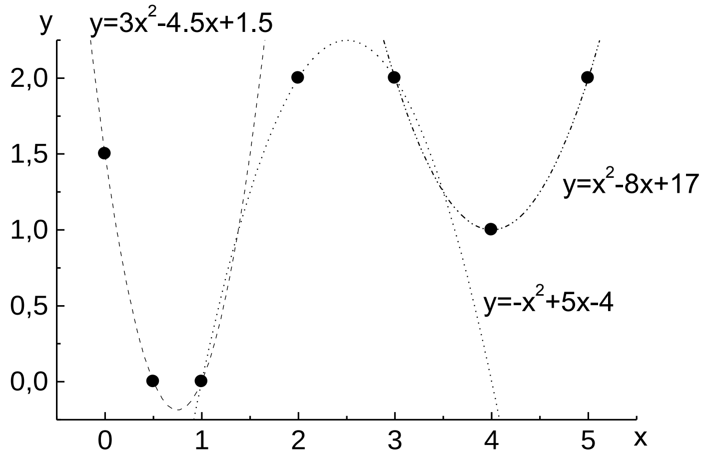

Рис.2. График полученного кусочно-квадратичного интерполирования.

3.2 Приближение функции сглаживанием

Суть процедуры сглаживания состоит в подмене данной функции на каждом из рассматриваемых отрезков наилучшим линейным среднеквадратичным приближением.

На первом этапе. Для таблично заданной функции найти такую функцию S(x), составленную из линейных функций $S_i(x)=a_i+b_i(x-x_i)$, чтобы $f(x)\approx S_i(x)$ для всех $\boldsymbol{x}$ в смысле минимума квадрата отклонений, т.е. $\sum_{k=i-1}^{i+1}\left(f(x_k)-S_i(x_k)\right)^2=\min$. В результате решается задача нахождения коэффициентов a_i, b_i методом наименьших квадратов:

$$a_i=\frac{1}{3}\left(f_{i-1}+f_i+f_{i+1}\right),\ b_i=\frac{1}{2h}\left(f_{i+1}-f_{i-1}\right)$$

Второй этап состоит в пересчете данной таблицы $S_i(x_i)=\frac{1}{3}\left(f_{i-1}+f_i+f_{i+1}\right)$, для $i=\overline{1,N-1}$. Доопределим новую табличную функцию значениями $S_0(x_0)=f_0$ и $S_N(x_N)=f_N$. В результате этого получаем новую табличную функцию, в которой сохраняется характер поведения исходной функции. Описанная процедура называется осреднением по трем точкам и является простым частным случаем линейного фильтра.

Некоторые задачи, возникающие при анализе и интерпретации опытных данных, не требуют построения единой аналитической формулы во всем диапазоне изменения переменной $\boldsymbol{x}$. Например, для численного дифференцирования (интегрирования) важно лишь устранить «шум» эксперимента, сохранив информацию об истинной функции. Для этой цели применяется сглаживание эмпирических данных, т. е. замена исходной таблицы опытных точек другой таблицей близких к ним точек, лежащих на достаточно гладкой кривой.

При сглаживании часто используется метод наименьших квадратов и аппроксимирующие многочлены различных степеней. Если используется многочлен первой степени, сглаживание называется *линейным*, в противном случае – *нелинейным*.

Количество точек для сглаживания берут нечетным, а группы точек – «скользящими» вдоль всей таблицы. Например, при линейном сглаживании по трем точкам последовательность действий такова. Сначала выбирают первые три точки $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$, по которым находят линейный многочлен наилучшего среднеквадратичного приближения, вычисляют значение этого многочлена $\tilde{y}_2(x_2)$ в средней точке и заменяют y_2 сглаженным значением $\tilde{y}_2$. Затем берут следующую группу точек $(x_2, y_2), (x_3, y_3), (x_4, y_4)$, и после соответствующих вычислений производят сглаживание среднего в данной группе значения y_3, (т. е. заменяют значение y_3 на $\tilde{y}_3$) и т. д. до конца таблицы. После этого сглаживают две первых и две последних точки по особым (менее точным) формулам.

Линейное сглаживание по трем точкам приводит к формулам:

$$\tilde{y}_i = \tfrac{1}{3}(y_{i-1} + y_i + y_{i+1}), \quad i = 2, 3, \ldots, n-1,$$

$$\tilde{y}_1 = \tfrac{1}{6}(5y_1 + 2\tilde{y}_2 - \tilde{y}_3),$$

$$\tilde{y}_n = \tfrac{1}{6}(5y_n + 2\tilde{y}_{n-1} - \tilde{y}_{n-2}). \tag{4}$$

3.3 Интерполирование сплайнами

Одним из способов кусочно-глобальной аппроксимации на всем отрезке является интерполирование с помощью сплайн-функций. Сплайн-функцией или сплайном называют кусочно-полиномиальную функцию, определенную на отрезке [a, b] и имеющую на этом отрезке некоторое число непрерывных производных.

Преимуществом сплайнов перед обычной интерполяцией является, во-первых, их сходимость и, во-вторых, устойчивость процесса вычислений. Рассмотрим частный случай (часто используемый на практике), когда сплайн определяется многочленом третьей степени

3.3.1 Построение кубического сплайна

Пусть на отрезке $[a, b]$ в узлах сетки заданы значения некоторой функции $f(x)$, т.е. $a = x_0 < x_1 < x_2 \ldots < x_n = b$, $y_i = f(x_i)$ (i= 0,1,…, n).

Сплайном, соответствующим этим узлам функции $f(x)$ называется функция *S(x)*, которая:

1) на каждом частичном отрезке является многочленом третьей степени;
2) функция $S(x)$ и ее первые две производные $S'(x), S''(x)$ непрерывны на $[a, b]$;
3) $S(x_i) = f(x_i)$.

На каждом частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ будем искать сплайн $S(x) = S_i(x)$, где $S_i(x)$ многочлен третьей степени

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i}{2} \cdot (x - x_i)^2 + \frac{d_i}{6} \cdot (x - x_i)^3. \tag{5}$$

То есть для $x \in [x_{i-1}, x_i]$ нужно построить такую функцию $S_i(x)$, где a_i, b_i, c_i, d_i подлежат определению. Для всего отрезка интерполирования $[a, b]$, таким образом, необходимо определить $\boldsymbol{4 \cdot n}$ неизвестных коэффициента.

$$S'(x)=b_i+c_i(x-x_i)+\frac{d_i}{2}\cdot(x-x_i)^2,$$
$$S''(x)=c_i+d_i(x-x_i),$$
$$S_i(x)=a_i=y_i.$$

Доопределим $a_0=f(x_0)=y_0$. Требование непрерывности функции *S(x)* приводит к условиям $S_i(x_i)=S_{i+1}(x_i)$, (i=0, 1,…,n-1).

Отсюда из (5) получаем следующие уравнения:

$$a_i=a_{i+1}+b_{i+1}(x_i-x_{i+1})+\frac{c_{i+1}}{2}(x_i-x_{i+1})^2+\frac{d_{i+1}}{6}(x_i-x_{i+1})^3 \quad \text{(i= 1,2,…,n-1).}$$

Введем шаг интерполирования $h_i=x_i-x_{i-1}$. Тогда последнее равенство можно переписать в виде $h_i\cdot b_i+\frac{h_i^2}{2}\cdot c_i+\frac{h_i^3}{6}\cdot d_i=f_i-f_{i-1}$ (i= 1,2,…,n). Из непрерывности первой производной следует $h_i\cdot c_i-\frac{h_i^2}{2}\cdot d_i=b_i-b_{i-1}$ (i= 2,3,…,n), а из непрерывности второй производной $h_i d_i=c_i-c_{i-1}$ (i= 2,3,…,n).

Объединив все три вида уравнений, получим систему из 3n-2 уравнений относительно 3n неизвестных b_i, c_i, d_i. Два недостающих уравнения получим, задав граничные условия для функции S(x). Для этого воспользуемся граничными условиями для сплайн-функции в виде $S''(a)=S''(b)=0$ (концы гибкой линейки свободны).

Тогда получим систему уравнений

$$\begin{cases} h_i\cdot d_i=c_i-c_{i-1}, c_0=c_n=0, (i=1,2,\ldots,n) \\ h_i\cdot c_i-\frac{h_i^2}{2}\cdot d_i=b_i-b_{i-1}, (i=2,3,\ldots,n) \\ h_i\cdot b_i+\frac{h_i^2}{2}\cdot c_i+\frac{h_i^3}{6}\cdot d_i=f_i-f_{i-1}, (i=1,2,\ldots,n). \end{cases} \tag{6}$$

Решая систему методом подстановки (исключаем из (6) неизвестные b_i,d_i), получим систему:

$$\begin{cases} h_i c_{i-1}+2(h_i+h_{i+1})\cdot c_i+h_{i+1}c_{i+1}=6\cdot\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{h_{i+1}}-\frac{y_i-y_{i-1}}{h_i}\right) \\ c_0=c_n=0 \end{cases} \tag{7}$$

(i= 1,2,…,n-1).

Система (7) имеет трехдиагональную матрицу. Эта система может быть решена методом прогонки или Гаусса. После ее решения коэффициенты сплайна d_i, b_i определим через коэффициенты c_i с помощью явных формул

$$d_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{h_i},$$

$$b_i = \frac{h_i}{2} \cdot c_i - \frac{h_i^2}{6} \cdot d_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \text{ (i= 1,2,…,n).}$$

3.3.2 Сходимость процесса интерполирования кубическими сплайнами

Доказывается, что при неограниченном увеличении числа узлов на одном и том же отрезке $[a,b]$ $S(x) \to f(x)$. Оценка погрешности интерполяции $R(x) = f(x) - S(x)$ зависит от выбора сетки и степени гладкости функции f(x).

При равномерной сетке $x_i = a + i \cdot h$ (i= 0,1,…,n)

$$|f(x) - S_h(x)| \le \frac{M_4 \cdot h^4}{8},$$

где $M_4 = \max\limits_{[a,b]} |f^{IV}(x)|$.

3.4 Аппроксимация функций методом наименьших квадратов

Для экспериментальных данных, представленных множеством $\{(x_i, y_i)\}$ требуется подобрать вид аппроксимирующей зависимости *y=f(x),* связывающей переменные *x* и *y* , и оценить её параметры. К такой задаче приходят при статистической обработке экспериментальных данных с помощью регрессионного анализа. Возможны следующие случаи:

во-первых - значения функции *f(x)* могут быть заданы в достаточно большом количестве узлов;

во-вторых - значения таблично заданной функции отягощены погрешностями. В этих случаях проводить приближения функции с помощью интерполяционных многочленов нецелесообразно, т.к.

- это неудобно делать, поскольку число узлов велико и пришлось бы строить несколько интерполяционных многочленов или один, но очень большого порядка;
- построив интерполяционные многочлены, мы повторили бы те же самые ошибки, которые присущи экспериментальным данным.

Поэтому, а также по ряду другим причинам, в том числе и вычислительного характера, приближающую функцию обычно ищут из следующих соображений:

1) приближающая функция не проходит через узлы сеточной эмпирической функции и не повторяет ошибки аргументов и значений функции;

2) чтобы она удовлетворяла бы одному из заданных критериев (2), (3), (4) близости аппроксимирующей к эмпирической сеточной функции.

Обычно для этих целей выбирают критерий минимума сумма квадратов отклонений приближающей функции от узловых значений эмпирических данных.

Пусть даны функции $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \ldots, \varphi_m(x)$, назовем их базисными функциями. Будем искать приближающую (аппроксимирующую) функцию в виде линейной комбинации

$$y = \Phi_m(x) \equiv c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + \ldots + c_m\varphi_m(x). \qquad (8)$$

Такая аппроксимация называется линейной, а $\Phi_m(x)$ – обобщенный многочлен. Согласно критерию метода наименьших квадратов вычислим сумму квадратов отклонений таблично заданной функции от искомого многочлена в узлах:

$$S_m(C)=\sum_{i=0}^{n}(y_i-\Phi_m(x_i))^2=\sum_{i=0}^{n}(y_i-c_0\phi_0(x_i)-\ldots-c_m\phi_m(x_i))^2 . \qquad (9)$$

Степень обобщенного многочлена неизвестна. Она выбирается так, чтобы $S_m(c)$ было наименьшим и удовлетворяла условиям:
- аппроксимирующая кривая не проходила бы через все узлы таблицы;
- получить приближение с заданной степенью точности.

Выражение $S_m(C)$ можно рассматривать как функцию от неизвестных $c_0,\ldots,c_m$. Требуется найти, при каких значениях $c_0,\ldots,c_m$, значение $S_m(C)$ будет минимально.

Из условием существования экстремума $S_m(C)$, частные производные от $S_m(C)$ по всем переменным $c_0,\ldots,c_m$ приравниваются нулю. Таким образом получается система уравнений вида:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\sigma_m}{\partial c_0}=-2\sum_{i=0}^{n}(y_i-c_0\varphi_0(x_i)-\ldots-c_m\varphi_m(x_i))\cdot\varphi_0(x_i)=0 \\ \cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot \\ \dfrac{\partial\sigma_m}{\partial c_m}=-2\sum_{i=0}^{n}(y_i-c_0\varphi_0(x_i)-\ldots-c_m\varphi_m(x_i))\cdot\varphi_m(x_i)=0 \end{cases} \qquad (10)$$

Система (10) - система линейных уравнений относительно $c_0,\ldots,c_m$. Для компактной записи системы (10) можно применить определение скалярного произведения функций. (**Определение.** Скалярным произведением функции f на g на множестве точек $x_0,\ldots,x_n$ называется выражение $(f,g)=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)\cdot g(x_i)$). Тогда систему (10) можно записать в виде:

$$\begin{cases} c_0(\varphi_0,\varphi_0)+c_1(\varphi_0,\varphi_1)+\ldots+c_m(\varphi_0,\varphi_m)=(\varphi_0,y) \\ c_0(\varphi_1,\varphi_0)+c_1(\varphi_1,\varphi_1)+\ldots+c_m(\varphi_1,\varphi_m)=(\varphi_1,y) \\ \cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot \\ c_0(\varphi_m,\varphi_0)+c_1(\varphi_m,\varphi_1)+\ldots+c_m(\varphi_m,\varphi_m)=(\varphi_m,y) \end{cases} . \qquad (10a)$$

Системы (10) и (10а) принято называть нормальными системами уравнений метода наименьших квадратов.

Решения этих СЛАУ являются искомые коэффициенты $c_0,\ldots,c_m$, и следовательно, аппроксимирующий многочлен будет полностью определен. Это возможно обычными методами решения нормальной системы уравнений при соблюдении двух основных условий: узлы сеточных эмпирических функций не равноотстоящие и базисные функции аппроксимирующего многочлена линейно не зависимы.

Степень аппроксимирующего многочлена ‘’**m**’’ обычно выбирается методом последовательного приближения. В случае, когда **m = n** $\min(S_m(C))$ становится равным нулю и мы получим интерполяционный многочлен со всеми его недостатками для приближения эмпирических данных. Для того чтобы избежать этого, достаточно выбирать m из условия **m<n** и задавать диапазон изменения $S_m(C)$ числами ε_1 и ε_2, учитывая следующее:

1) $\varepsilon_1>0$ и $\varepsilon_2>0$ должны быть такими, чтобы $S_m(C)$ находилось между ними;
2) первоначально **m** выбирают произвольно, но учитывая условие, что **m<<n**;
3) выбрав **m**, строят системы (10) и (10а), решив которые находят $c_0,\ldots,c_m$;
4) используя найденные коэффициенты вычисляется $S_m(C)$ и проверяется, попала ли она в промежуток между ε_1 и ε_2. Если попала, то степень многочлена выбрана правильно, иначе
   а) если $S_m(C)>\varepsilon_1$, то степень необходимо уменьшить хотя бы на единицу;
   б) если $S_m(C)<\varepsilon_2$, то степень необходимо увеличить хотя бы на единицу.
5) затем строить приближающую функцию.

Очень часто для приближения по методу наименьших квадратов используются алгебраические многочлены степени **m < n**, т.е. $\varphi_k(x)=x^k$. Тогда нормальная система (10) принимает следующий вид:

$$\sum_{j=0}^{m}\Big(\sum_{i=o}^{n}x_i^{j+k}\Big)c_j=\sum_{i=0}^{n}y_i x_i^k \quad (\text{k}=0,1,\ldots,\text{m}). \qquad (11)$$

Запишем систему (11) в развернутом виде в двух наиболее простых случаях m=1 и m=2. В случае многочлена первой степени $P_1(x)=c_0+c_1x$, нормальная система имеет вид

$$\begin{cases}(n+1)c_0+\Big(\sum_{i=0}^{n}x_i\Big)c_1=\sum_{i=0}^{n}y_i\\ \Big(\sum_{i=0}^{n}x_i\Big)c_0+\Big(\sum_{i=0}^{n}x_i^2\Big)c_1=\sum_{i=0}^{n}y_i x_i.\end{cases} \qquad (12)$$

Для многочлена второй степени $P_2(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$, нормальная система имеет вид

$$\begin{cases} (n+1)c_0 + (\sum_{i=0}^{n} x_i)c_1 + (\sum_{i=0}^{n} x_i^2)c_2 = \sum_{i=0}^{n} y_i \\ (\sum_{i=0}^{n} x_i)c_0 + (\sum_{i=0}^{n} x_i^2)c_1 + (\sum_{i=0}^{n} x_i^3)c_2 = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i \\ (\sum_{i=0}^{n} x_i^2)c_0 + (\sum_{i=0}^{n} x_i^3)c_1 + (\sum_{i=0}^{n} x_i^4)c_2 = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^2 \end{cases} \quad . \qquad (13)$$

4. Функции MathCAD для обработки результатов экспериментов

Для анализа экспериментальных зависимостей и приведения их к наглядному виду часто используют такие средства, как интерполяция, сглаживание и аппроксимация. Соответствующие функции MathCAD обычно разделяются на две основных группы:

1. Интерполяция и прогнозирование.
2. Аппроксимация и сглаживание.

Они состоят из большого числа разнообразных функций, использующих различные методы приближения и критерии точности аппроксимации.

4.1 Интерполяция и прогнозирование

В группе программ ***Mathcad*** «Интерполяция и прогнозирование» (**Interpolation and Prediction)** имеются встроенные функции, которые при интерполяции разрешают проводить через экспериментальные точки кривые разной степени гладкости. Функции интерполяции определяют кривую, точно проходящую через заданные точки. Из-за этого результат очень чувствителен к ошибкам данных. Если данные зашумлены, их следует предварительно сгладить или рассмотреть возможность использования регрессии (аппроксимации) вместо интерполяции. Вызвать эти функции можно с помощью команды меню I**nsert** => **Function**.

4.1.1 Линейная интерполяция

Наиболее простым методом интерполяции является линейная интерполяция. При линейной интерполяции аппроксимирующая функция соединяет экспериментальные точки (узлы интерполяции) отрезками прямых. Для линейной интерполяции используется функция ***linterp(x,y,Xi)***. Здесь: ***x*** - вектор значений аргументов, расположенных в порядке возрастания; ***y*** - вектор векторных значений функций; ***Xi*** - значение аргумента, при котором вычисляется значение функции. Эта функция соединяет точки данных отрезками прямых, создавая, таким образом, ломаную линию. Пример линейной интерполяции содержится в файле ЮЮЮЮЮЮ

4.1.2 Функции сплайн-аппроксимации

В большинстве случаев желательно соединять экспериментальные точки не отрезками прямой линии, а гладкой кривой. В этом случае используется сплайн - интерполяция. Кубическая сплайн - интерполяция разрешает провести кривую через набор точек, таким образом, который первые и вторые производные кривой будут непрерывные в каждой точке. Эта кривая образуется путем создания ряда кубических полиномов, которые проходят через наборы из соседних трех точек. Кубические полиномы затем последовательно состыковываются один с другим так, чтобы образовать единую кривую.

Чтобы провести кубический сплайн через набор точек с координатами x и y, содержащиеся в векторах **vx** (элементы **vx** должны быть расположены в порядке возрастания);и **vy** необходимо:

1) вычислить вектор **vs:=cspline(vx, vy).** Вектор **vs** содержит вторые производные интерполяционной кривой в рассматриваемых точках (узлах сопряжения).

2) Чтобы найти интерполируемое значение в произвольной точке X0 используется функция **interp(vs, vx, vy, X0)**, где **vs, vx** и **vy** - векторы, описанные ранее.

Обратите внимание, такой же кубический сплайн можно создать суперпозицией соответствующих функций **interp(cspline(vx, vy),vx,vy, X0).** Пример использования кубической сплайн-интерполяции приведен в файле П1 и файле П2.

Кроме функции **cspline**, Mathcad имеет еще две кубические сплайн-функции**:** **lspline** и **pspline**. Эти три функции отличаются только граничными условиями: функция **lspline** позволяет генерировать кривую сплайна, которая приближается к прямой линии в граничных точках; функция **pspline** генерирует кривую сплайна, которая приближается к параболе в граничных точках; функция **cspline** генерирует кривую сплайна, которая может быть кубическим полиномом в граничных точках. Использование функций **lspline** и **pspline** аналогично использованию функции **cspline**. Для определения кривой наилучшей интерполяции удобно между собой сравнить все три способа построения кубической сплайн-функции.

Обратите внимание, что результаты интерполяции различными типами кубических сплайнов практически не отличаются во внутренних точках интервала и совпадают с точными значениями функции. Вблизи краев интервала отличие становится более заметным, а при экстраполяции за пределы заданного интервала различные типы сплайнов дают существенно разные результаты.

Наряду с функциями кубической сплайн-интерполяцией в MathCad имеется возможность осуществить B – сплайн интерполяцию. B - сплайн интерполяция отличается от кубической сплайновой интерполяции тем, что сшивка отдельных отрезков ведется не в заданных точках, а в точках, которые выбирает пользователь. При этом возникает ограничение по размерности вектора значений аргумента, что делать крайне неудобным использование *B* - сплайн интерполяции. Пользоваться B-сплайнами следует в тех случаях, когда не удается получить удовлетворительный результат с помощью кубического сплайна, так как подбор точек сшивки может потребовать больших затрат времени и не всегда приводит к хорошему результату.

Если необходимо оценить значения функции в точках, находящихся вне области заданных значений функции, то следует использовать алгоритм экстраполяции, реализованный в функции **predict(v, m,n**), которая возвращает **n** предсказанных значений, основанных на **m** последовательных значениях вектора данных **v**. Элементы **v** должны представлять собой значения, взятые через равные интервалы. Рекомендуется использовать эту функцию, когда экстраполируемая функция является гладкой и осциллирующей, но не обязательно периодической. Пример использования функции predict приведен в файле П2.

4.2 Аппроксимация полиномами и нелинейными функциями

Основным недостатком выше рассмотренных способов описания эмпирических зависимостей интерполяционными функциями заключается в том, что они отражают эмпирические зависимости неявным образом. Часто на практике существует необходимость представления их в виде привычных аналитических выражений, которые позволяют непосредственно видеть их и работать с ними обычным способом. Сплайн-функции обычно этого не позволяют делать.

В *Mathcad* есть несколько встроенных функций, которые позволяют описывать эмпирические зависимости в явном виде, видеть формируемую аналитическую зависимость. Обычно это делается на основе получения набора коэффициентов аппроксимирующих аналитических выражений, например, в виде многочленов (8). По традиции эмпирические аналитические зависимости называются функциями регрессии (глобальной аппроксимации). Функции регрессии создают кривую или поверхность, которая минимизирует ошибку между собой и имеющимися данными. В отличие от функций интерполяции, рассмотренных в предыдущем разделе, эти функции не требуют, чтобы аппроксимирующая кривая или поверхность проходили через точки данных. Функции регрессии гораздо менее чувствительны к ошибкам данных, чем функции интерполяции. Конечный результат регрессии - функция, с помощью которой можно оценить значения в промежутках между заданными точками.

В Mathcad имеются функции четырех видов регрессии: линейная, полиномиальная, многомерная полиномиальная, обобщенная. При использовании функций линейной регрессии определяется наклон и смещение линии, которая будет приближена к исходным данным с наименьшим среднеквадратическим отклонением. Если поместить значения ***x*** в вектор **vx** и соответствующие значения y в **vy**, то линия определяется в виде **y = slope(vx, vy) • x + intercept(vx. vy).** Здесь функции **slope и intercept** возвращают скаляры: наклон и смещение по оси ординат линии регрессии. Эти функции полезны не только тогда, когда данные по существу должны представлять линейную зависимость, но и когда они представляют экспоненциальную зависимость. Например, если x и y связаны соотношением вида $y = A \cdot e^{k \cdot x}$ можно применить эти функции к логарифму данных и использовать факт, что **ln (y) = ln (A) + к·x.** В этом случае **A = exp (intercept(vx, vy)), к = slope(vx. vy).**

<u>Полиномиальная регрессия</u> используется в том случае, когда между **y** и **x,** полученными экспериментально, ожидается полиномиальная зависимость. При этом используются функции **regress(vx, vy, n)** или **loess(vx, vy, span).** Здесь **п -** порядок полинома, который должен приближать данные из **vx** и **yy. A**ргумент **span (span** > **0)** определяет, насколько большие окрестности функция **loess** будет использовать при выполнении локального приближения. Функции **regress и loess** возвращают векторы (обозначим **vs**), которые используются функцией **interp(vs, vx, vy, x),** которая для заданного значения x возвращает интерполируемое значение **y.** Обращение к указанным функциям выглядит следующим образом:

s:= regress(vx, vy, n) **Y(x):= interp(s, vx, vy, x),** или
Y(x):= interp(regress(vx, vy, n), vx, vy, x),

Пример использования функции **loess** при двух значениях аргумента **span** приведен в файле **Лр 5 Примеры 3 АппроксМНК.xmcd.**

<u>Обобщенная регрессия</u> используется в том случае, когда нужно искать приближение экспериментальной зависимости в виде комбинации произвольных функций, не являющейся полиномом. Если предполагается, что данные могли бы быть смоделированы в виде линейной комбинации произвольных функций (8)

$y = \Phi_m(x) \equiv c_0\varphi_0(x) + c_1\varphi_1(x) + ... + c_m\varphi_m(x)$ следует использовать функцию **linfit,** чтобы вычислить $\mathbf{c_k}$**.** **linfit(vx, vy,*Ф*)** – возвращает вектор, содержащий коэффициенты, используемые, чтобы создать линейную комбинацию функций из векторнозначной функции $\Phi=(\varphi_0(x), \varphi_1(x),\ldots, \varphi_m(x))$, которая дает наилучшую аппроксимацию данных из векторов **vx** и **vy**. Пример использования функции **linfit** приведен в файле **Лр 5 Примеры 3 АппроксМНК.xmcd.**

5. Вопросы самоконтроля.

1. Для чего применяются сглаживание эмпирических функций.
2. Построение сглаживающего многочлена.
3. В чем состоит идея метода наименьших квадратов и какова основная область его применения? Чем отличается этот метод от метода интерполяции?
4. Как распределяется ошибка интерполирования в пределах таблицы при глобальной аппроксимации?
5. Как изменяется ошибка аппроксимации внутри таблицы с ростом степени аппроксимирующего многочлена? Как она ведет себя на концах таблицы?
6. Как следует организовать построение аппроксимирующего многочлена при глобальной аппроксимации, чтобы минимизировать ошибку приближения?
7. Какую роль играет порядок координат вектора значений переменной x при построении интерполяционной кривой?
8. Какие условия накладываются на сплайн при кубической интерполяции?
9. В чем отличие интерполяции кубическими сплайнами от кусочно-кубической интерполяции?
10. Какие функции существуют в MathCAD для кубической интерполяции?
11. В чем различие между функциями, предназначенными для интерполяции с помощью кубических сплайнов?
12. Можно ли использовать кубические сплайны для построения интерполяционной поверхности для двумерных экспериментальных данных?
13. Как зависит поведение кривой внутри интервала экспериментальных значений от выбора функций **lspline (vx,vy)**, **pspline(vx,vy), cspline(vx, vy)** при построении сплайна?
14. При каких условиях использование кубического сплайна может привести к несоответствию построенной кривой экспериментальным данным?
15. В чем основное отличие B-сплайна от интерполяции кубическими сплайнами?
16. В каких случаях удобно использование B-сплайна?
17. Является ли произвольным количество точек сшивки при использовании B-сплайна? Как оно связано с количеством экспериментальных точек?
18. Какие условия накладываются на координаты точек сшивки при использовании B-сплайна?
19. Какие методы используют функции MathCAD для проведения линейной регрессии?
20. Как связан порядок полинома при проведении полиномиальной регрессии с числом точек в выборке?

21. В чем отличие процедуры построения полиномиальной регрессии от сплайн-интерполяции?
22. Выбрать правильное утверждение: полиномиальная регрессия в MathCAD может проводиться: а) одним полиномом; б) отрезками полиномов.
23. Можно или нет проводить полиномиальную регрессию с помощью функций **regress** и **loess** для многомерных экспериментальных зависимостей?
24. Какие функции MathCAD позволяют провести регрессию с использованием любой заданной функции?
25. Какие величины нужно рассмотреть для оценки качества регрессионной модели?
26. Всегда ли нормальная система уравнений является линейной относительно искомых параметров?
27. Как осуществляется подбор эмпирической формулы для установленной из опыта зависимости?
28. Каким образом сводится задача построения нелинейных аппроксимирующих функций к случаю линейной функции?
29. Как обосновывается метод наименьших квадратов с вероятностной точки зрения?

Литература

1. Латыпов И.И. Численные методы. Лабораторный практикум: Учебное пособие для студентов физико-математического факультета по основам численных методов. Книга 1.– Бирск: Бирск.гос.соц.-пед.акад., 2007. – 94 с.

2. **Исаков В.Б. Элементы численных методов:** Учебное пособие. - М.: Академия, 2003.-192 с. :ил.

3. Поршнев С. В., Беленкова И. В.
Численные методы на базе Mathcad. СПб.; БХВ-Петербург, 2005. 464 с: ил.

4. **Методы интерполяции и сглаживания сплайнами:**
http://mathhelpplanet.com/static.php?p=metody-interpolyatsii-i-sglazhivaniya-splaynami

5. Бидасюк Ю.М. Mathsoft MathCAD 11. Самоучитель М: Диалектика, **2004.** –208 с: ил.

6. **Обработка данных:** http://samoychiteli.ru/document21006.html

Приложение.
Файл П1. ЛР 5 Примеры 1 Сплайн_интерпол .xmcd
Файл П2. ЛР 5 Примеры 2 КубСплайн_интерпол .xmcd
Файл П3. Лр 5 Примеры 3 АппроксМНК.xmcd
Файл П4. ЛР 5 Примеры 4 ПриблЭмпирДанных ИнтерполВыраж.xmcd