5.3 Задачі апроксимації. Метод найменших квадратів

5.3.1 Постановка задачі апроксимації і метод найменших квадратів

Нехай результати спостережень представлені у вигляді таблиці

x_1	x_2	…	x_n
y_1	y_2	…	y_n

Задача апроксимації полягає в тому, що на основі даних спостережень двох кількісних ознак x і y потрібно визначити вигляд функціональної залежності однієї з них від іншої для подальшої обробки експериментальних даних.

Для розв'язування задачі апроксимації потрібно побудувати *апроксимаційну функцію*, що відображає характер залежності випадкових величин y і x, згладивши випадкові відхилення, які обумовлені різного роду похибками спостережень.

Функція $y = F(x)$ називається *апроксимаційною*, якщо вона задовольняє умовам:

1) є неперервною;
2) не обов'язково проходить через всі задані таблицею точки;
3) відображає загальну поведінку множини точок, заданих таблицею, згладжуючи випадкові відхилення.

З теоретичного аналізу задачі або за видом поля розсіювання потрібно обрати вид апроксимаційної функції, що згладжує випадкові відхилення. Це може бути лінійна, квадратична, показникова, дробово-раціональна або будь-яка інша функція, що найбільш точно відображає поле розсіювання точок на площині, заданих таблицею.

Після того, як вигляд залежності обрано, ставиться задача знаходження параметрів цієї залежності, які і визначають апроксимаційну функцію $y = F(x)$.

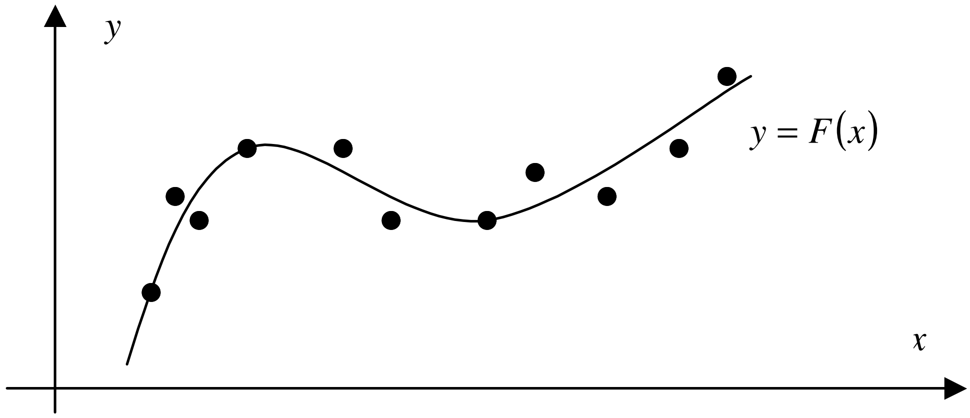

Рисунок 1 – Апроксимаційна функція

Однозначність побудови апроксимаційної функції визначається за методом найменших квадратів.

Відповідно до принципу максимальної правдоподібності необхідно обрати функцію виду $y = F(x, a_1, a_2, ..., a_k)$, що визначається параметрами $a_1, a_2, ..., a_k$ так, щоб сума квадратів відхилень значень функції $y = F(x_i)$ від спостережених значень y_i, $i = \overline{1, n}$, була мінімальною

$$\Phi(a_1, a_2, ..., a_k) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - F(x_i, a_1, a_2, ..., a_k))^2 \to \min .$$

Для знаходження невідомих параметрів $a_1, a_2, ..., a_k$ потрібно скористатися необхідною умовою існування екстремуму функції багатьох змінних, для цього прирівняти до нуля частинні похідні функції $y = \Phi(a_1, a_2, ..., a_k)$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi(a_1, ..., a_k)}{\partial a_1} = 0, \\ \dfrac{\partial \Phi(a_1, ..., a_k)}{\partial a_2} = 0, \\ \quad .... \\ \dfrac{\partial \Phi(a_1, ..., a_k)}{\partial a_k} = 0. \end{cases}$$

і розв'язати систему k алгебраїчних рівнянь відносно k невідомих параметрів $a_1, a_2, ..., a_k$.

Функція $y = F(x, a_1, a_2, ..., a_k)$ зі знайденими значеннями параметрів є апроксимаційною функцією і також розв'язком задачі апроксимації.

5.3.2 Лінійна апроксимація

Нехай апроксимаційна крива є прямою лінією, рівняння якої визначається двома параметрами

$$F(x, a, b) = ax + b .$$

За даними спостережень (x_1, y_1), (x_2, y_2), …, (x_n, y_n) знайдемо такі значення параметрів a і b, щоб точки (x_i, y_i), $i = \overline{1, n}$, побудовані на площині xOy (поле розсіювання), якнайближче розташовувалися до апроксимаційної прямої, тобто сума квадратів відхилень $(y_i - (ax_i + b))$ була мінімальною

$$\Phi(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)^2 \to \min .$$

Скористаємося необхідною умовою існування екстремуму і прирівняємо до нуля частинні похідні функції

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial a} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a x_i - b) x_i = 0, \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial b} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a x_i - b) = 0. \end{cases}$$

Тоді параметри a та b знайдемо як розв'язки системи рівнянь

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} \left(x_i y_i - a x_i^2 - b x_i \right) = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a x_i - b) = 0. \end{cases} \qquad \begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - b \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i - nb = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} b = \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right), \\ \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right) \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} b = \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right), \\ n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i - an \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i + a \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right)^2 = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} a = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right)^2 - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2}, \\ b = \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right). \end{cases}$$

Отримані значення параметрів визначають лінійну апроксимаційну функцію $y = ax + b$.

5.3.3 Квадратична апроксимація

Нехай апроксимаційна крива буде квадратичною параболою, рівняння якої визначається трьома параметрами

$$F(x, a, b, c) = ax^2 + bx + c,$$

то за допомогою методу найменших квадратів одержимо систему алгебраїчних рівнянь для визначення параметрів a, b та c за даними спостережень (x_1, y_1), (x_2, y_2), …, (x_n, y_n).

$$\Phi(a, b, c) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - ax_i^2 - bx_i - c\right)^2 \to \min,$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial a} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left(y_i - ax_i^2 - bx_i - c\right) x_i^2 = 0, \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial b} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left(y_i - ax_i^2 - bx_i - c\right) x_i = 0, \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial c} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left(y_i - ax_i^2 - bx_i - c\right) = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} \left(x_i^2 y_i - ax_i^4 - bx_i^3 - cx_i^2\right) = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} \left(x_i y_i - ax_i^3 - bx_i^2 - cx_i\right) = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} \left(y_i - ax_i^2 - bx_i - c\right) = 0. \end{cases} \qquad \begin{cases} a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^4 + b\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + c\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 y_i \\ a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + b\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + c\sum\limits_{i=1}^{n} x_i = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i, \\ a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum\limits_{i=1}^{n} x_i + cn = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i. \end{cases}$$

Значення параметрів a b і c, що є розв'язком системи лінійних алгебраїчних рівнянь, визначають квадратичну апроксимаційну функцію $y = ax^2 + bx + c$.

5.3.4 Степенева апроксимація

Нехай апроксимаційна функція належить до класу степеневих функцій і визначається двома параметрами a та m

$$F(x, a, m) = a \cdot x^m.$$

Візьмемо логарифм від обох частин рівності

$$\ln F(x, a, m) = \ln a + m \cdot \ln x$$

і одержимо лінійну залежність $\ln F$ від $\ln x$.

Функцію, що мінімізуємо, представимо у вигляді

$$\Phi(a, m) = \sum_{i=1}^{n} (\ln y_i - \ln a - m \ln x_i)^2 \to \min$$

і застосуємо до неї необхідну умову існування екстремуму

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial a} = -\dfrac{2}{a} \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (\ln y_i - m \ln x_i - \ln a) = 0, \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial m} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (\ln y_i - m \ln x_i - \ln a) \ln x_i = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} (\ln y_i - m \ln x_i - \ln a) = 0, \\ \sum_{i=1}^{n} (\ln y_i - m \ln x_i - \ln a) \ln x_i = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} \ln y_i - m \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln x_i - n \cdot \ln a = 0, \\ \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \ln y_i - m \cdot \sum_{i=1}^{n} (\ln x_i)^2 - \ln a \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln x_i = 0. \end{cases}$$

$$\begin{cases} m = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} \ln x_i \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln y_i - n \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \cdot \ln y_i}{\left(\sum_{i=1}^{n} \ln x_i \right)^2 - n \cdot \sum_{i=1}^{n} (\ln x_i)^2}, \\ a = \exp\left[\dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} \ln y_i - m \cdot \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \right) \right]. \end{cases}$$

Отримані значення параметрів a та m визначають степеневу апроксимаційну функцію $y = a \cdot x^m$.

У ряді випадків, коли апроксимаційна крива не є многочленом першої або другої степені, можна за допомогою заміни змінних звести її до відповідного многочлена.

Формули знаходження значень параметрів степеневої апроксимаційної функції можуть бути отримані з формул лінійної апроксимації, якщо змінну y замінити на вираз $\ln y$, змінну x замінити на $\ln x$, параметр a замінити на m, параметр b замінити на $\ln a$.

5.3.5 Показникова апроксимація

Нехай апроксимаційна функція належить до класу показникових функцій, тобто має вигляд

$$F(x, a, m) = a \cdot e^{mx}$$

і характеризується двома параметрами a та m.

Візьмемо логарифм від обох частин рівності та одержимо

$$\ln F(x, a, m) = \ln a + m \cdot x,$$

що представляє собою лінійну залежність $\ln F$ від x.

Формули знаходження значень параметрів показникової апроксимаційної функції можна отримати з формул лінійної апроксимації, якщо змінну y замінити на вираз $\ln y$, параметр a замінити на m, параметр b замінити на $\ln a$, змінну x залишити без змін.

$$\begin{cases} m = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \ln y_i - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \ln y_i}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right)^2 - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i)^2}, \\ a = \exp\left[\dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} \ln y_i - m \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right) \right]. \end{cases}$$

Отримані значення параметрів a і m визначають показникову апроксимаційну функцію $y = a \cdot e^{mx}$.

5.3.6 Логарифмічна апроксимація

Нехай апроксимаційна функція належить класу логарифмічних функцій, тобто має вигляд

$$F(x, a, b) = a \cdot \ln x + b$$

і характеризується двома параметрами a та b.

Формули знаходження значень параметрів логарифмічної апроксимаційної функції можна отримати з формул лінійної апроксимації, якщо змінну x замінити на вираз $\ln x$.

$$\begin{cases} a = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} \ln x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \ln x_i \cdot y_i}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} \ln x_i \right)^2 - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (\ln x_i)^2}, \\ b = \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \ln x_i \right). \end{cases}$$

Отримані значення параметрів a та b визначають логарифмічну апроксимаційну функцію $y = a \cdot \ln x + b$.

5.3.7 Дробово-лінійна апроксимація

Нехай апроксимаційна функція належить до класу дробово-лінійних функцій, тобто має вигляд

$$F(x, a, b) = \frac{1}{ax + b}$$

і характеризується двома параметрами a й b.

Розглянемо функцію, зворотну до обраної,

$$\frac{1}{F(x, a, b)} = ax + b$$

і одержимо лінійну залежність виразу $\dfrac{1}{F}$ від змінної x.

Формули знаходження значень параметрів дробово-лінійної апроксимаційної функції можна отримати з формул лінійної апроксимації, якщо змінну y замінити на вираз $\frac{1}{y}$.

$$\begin{cases} a = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{y_i} - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{x_i}{y_i}}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i\right)^2 - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2}, \\ b = \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{y_i} - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i\right). \end{cases}$$

Отримані значення параметрів a та b визначають дробово-лінійну апроксимаційну функцію $y = \frac{1}{ax+b}$.

5.3.8 Гіперболічна апроксимація

Нехай апроксимаційна функція належить до класу гіперболічних функцій, тобто має вигляд

$$F(x,a,b) = \frac{a}{x} + b \qquad \text{або} \qquad F(x,a,b) = a \cdot \frac{1}{x} + b,$$

описується двома параметрами a та b, і є лінійною функцією F від $\frac{1}{x}$.

Формули знаходження значень параметрів гіперболічної апроксимаційної функції можна отримати з формул лінійної апроксимації, якщо змінну x замінити на вираз $\frac{1}{x}$.

$$\begin{cases} a = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{x_i} \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{y_i}{x_i}}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{x_i}\right)^2 - n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left(\dfrac{1}{x_i}\right)^2}, \\ b = \dfrac{1}{n} \cdot \left(\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \dfrac{1}{x_i}\right). \end{cases}$$

Отримані значення параметрів a та b визначають гіперболічну апроксимаційну функцію $y = \frac{a}{x} + b$.

5.3.9 Дробово-раціональна апроксимація

Нехай апроксимаційна функція належить до класу дробово-раціональних функцій, тобто має вигляд

$$F(x,a,b)=\frac{x}{ax+b}$$

і описується двома параметрами a та b.

Розглянемо функцію, зворотну до обраної,

$$\frac{1}{F(x,a,b)}=a+b\cdot\frac{1}{x}$$

і одержимо лінійну залежність $\frac{1}{F}$ від $\frac{1}{x}$.

Формули знаходження значень параметрів дробово-раціональної апроксимаційної функції можна отримати з формул лінійної апроксимації, якщо змінну y замінити на вираз $\frac{1}{y}$, змінну x замінити на вираз $\frac{1}{x}$, коефіцієнти a та b поміняти місцями.

$$\begin{cases} b=\dfrac{\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{x_i}\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{y_i}-n\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{x_i y_i}}{\left(\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{x_i}\right)^2-n\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}\left(\dfrac{1}{x_i}\right)^2}, \\ a=\dfrac{1}{n}\cdot\left(\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{y_i}-b\cdot\sum\limits_{i=1}^{n}\dfrac{1}{x_i}\right). \end{cases}$$

Отримані значення параметрів a та b визначають дробово-раціональну апроксимаційну функцію $y=\frac{x}{ax+b}$.