УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Вычислительная математика

Малышева Татьяна Алексеевна, доцент, к.т.н.

Санкт-Петербург, 2020

Лекция №3 Аппроксимация функций
Постановка задачи

В инженерной практике наиболее распространенным является случай, когда вид связи между параметрами X и Y неизвестен, т.е. невозможно записать эту связь в виде некоторой зависимости $y=f(x)$. Как правило, даже при известной зависимости $y=f(x)$, она настолько громоздка, что ее использование в практических расчетах затруднительно. Чаще всего эта связь представлена в виде таблицы, т.е. дискретному множеству значений аргумента $\{x_i\}$ поставлено в соответствии множество значений функции $\{y_i\}(i=1,2,.., n)$. Эти значения – либо результаты расчетов, либо экспериментальные данные.

На практике нам могут понадобиться значения величины $\boldsymbol{y}$ и в других точках, отличных от узлов $\boldsymbol{x}_i$. Часто эти значения можно получить лишь путем сложных расчетов или проведением дорогостоящих экспериментов.

Таким образом, необходимо использовать имеющие табличные данные для приближенного вычисления искомого параметра y при любом значении (из некоторой области) определяющего параметра x, поскольку точная связь $y=f(x)$ неизвестна.

Аппроксимация функций
Постановка задачи

Таким образом, необходимо использовать имеющие табличные данные для приближенного вычисления искомого параметра *y* при любом значении (из некоторой области) определяющего параметра *x*, поскольку точная связь *y=f(x)* неизвестна.

Задачи исследования в большинстве случаев требуют ***установить определенный вид функциональной зависимости*** между характеристиками изучаемого явления. Этой цели и служит задача о приближении функции. Т.е. задача о приближении (аппроксимации) функции состоит в том, чтобы ***данную функцию f(x) приближенно заменить (аппроксимировать) некоторой функцией φ(x), значения которой в заданной области мало отличались от опытных данных*** –

$$f(x) \approx \varphi(x).$$

АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИИ

Приближенная функциональная зависимость, полученная на основании экспериментальных данных, называется *аппроксимирующей функцией или эмпирической формулой.*

<u>Построение эмпирической формулы состоит из 2 этапов:</u>

1. Подбор общего вида формулы.

Иногда он известен из физических соображений.

Если характер зависимости неизвестен, то первоначально его выбирают геометрически: экспериментальные точки наносятся на график, и примерно угадывается общий вид зависимости путем сравнения полученной кривой с графиками известных функций (многочлена, логарифмической, показательной функций и т.п.).

Выбор вида эмпирической зависимости – наиболее сложная часть решения задачи, ибо класс известных аналитических зависимостей необъятен. Практика, однако, показывает, что при выборе аналитической зависимости достаточно ограничиться довольно узким кругом функций: линейные, степенные и показательные.

2. ***Определение значений параметров аппроксимирующей функции.***

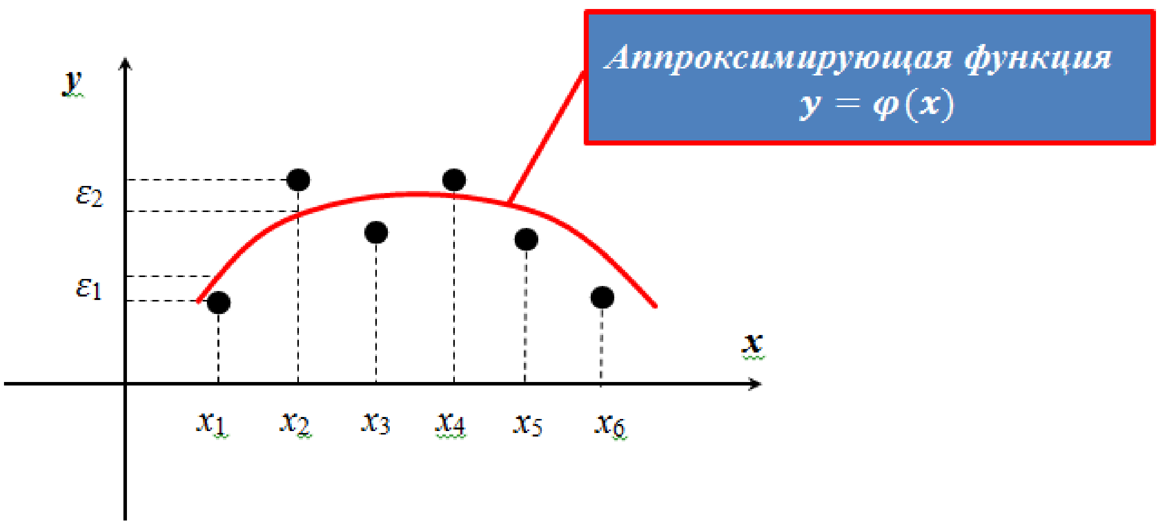
МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Будем считать, что вид аппроксимирующей функции или эмпирической формулы выбран и представлен в виде:

$$y = \varphi(x, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m),$$

где φ – известная функция, $a_0, a_1, a_2, \dots, a_m$ – неизвестные параметры.

Требуется определить такие параметры, при которых значения аппроксимирующей функции приблизительно совпадали со значениями исследуемой функции в точках x_i, т.е. $y_i \approx \varphi(x_i)$. Разность между этими значениями (отклонения) обозначим через ε_i. Тогда $\varepsilon_i = \varphi(x, a_0, a_1, a_2, \dots, a_m) - y_i$
$i = 1,2, \dots n$



МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Мерой отклонения многочлена $\varphi(x)$ от заданной функции *f(x)* на множестве точек $((x_i, y_i)$ является величина S (критерий минимизации), равная сумме квадратов разности между значениями многочлена и функции для всех точек $x_0, x_1, \ldots, x_n$:

$$S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} [\varphi(x_i) - y_i]^2 \rightarrow min$$

Задача нахождения наилучших значений параметров $a_0, a_1, \ldots, a_m$ сводятся к некоторой минимизации отклонений ε_i.

Параметры $a_0, a_1, \ldots, a_m$ эмпирической формулы находятся из условия минимума функции $S = S(a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m)$,.

Так как здесь параметры выступают в роли независимых переменных функции S, то ее минимум найдем, приравнивая к нулю частные производные по этим переменным (m – степень многочлена, n - число точек в таблице) :

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 2\sum_{i=1}^{n} a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_{m-1} x_i^{m-1} + a_m x_i^m - y_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 2\sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_{m-1} x_i^{m-1} + a_m x_i^m - y_i) x_i = 0$$

$$\ldots \ldots \ldots$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_m} = 2\sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_{m-1} x_i^{m-1} + a_m x_i^m - y_i) x_i^m = 0$$

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Преобразуем полученную линейную систему уравнений: раскроем скобки и перенесем свободные слагаемые в правую часть выражения.

$$\begin{cases} a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + \cdots + a_{m-1} \sum_{i=1}^{n} x_i^{m-1} + a_m \sum_{i=1}^{n} x_i^m = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \cdots + a_{m-1} \sum_{i=1}^{n} x_i^m + a_m \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \cdots \cdots \cdots \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} + \cdots + a_{m-1} \sum_{i=1}^{n} x_i^{2m-1} + a_m \sum_{i=1}^{n} x_i^{2m} = \sum_{i=1}^{n} x_i^m y_i \end{cases}$$

в матричном виде:

$$\begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \ldots & \sum_{i=1}^{n} x_i^m \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \ldots & \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} \\ & \cdots & \cdots \cdots & \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^m & \sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1} & \ldots & \sum_{i=1}^{n} x_i^{2m} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ a_m \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \cdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^m y_i \end{vmatrix}$$

Линейная аппроксимация

Рассмотрим в качестве эмпирической формулы линейную функцию:

$$\varphi(x, a, b) = ax + b$$

Сумма квадратов отклонений запишется следующим образом:

$$S = S(a, b) = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} [\varphi(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2 \to min$$

Для нахождения *a* и *b* необходимо найти минимум функции *S(a,b).* Необходимое условие существования минимума для функции *S:*

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial a} = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial b} = 0 \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} 2\sum\limits_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)x_i = 0 \\ 2\sum\limits_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i) = 0 \end{cases}$$

Упростим полученную систему:

$$\begin{cases} a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum\limits_{i=1}^{n} x_i = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i + bn = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i \end{cases}$$

Линейная аппроксимация

Введем обозначения:

$SX = \sum_{i=1}^{n} x_i$, $SXX = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$, $SY = \sum_{i=1}^{n} y_i$, $SXY = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$

Получим систему уравнений для нахождения параметров *a* и *b:*

$$\begin{cases} aSXX + bSX = SXY \\ aSX + bn = SY \end{cases},$$

из которой находим:

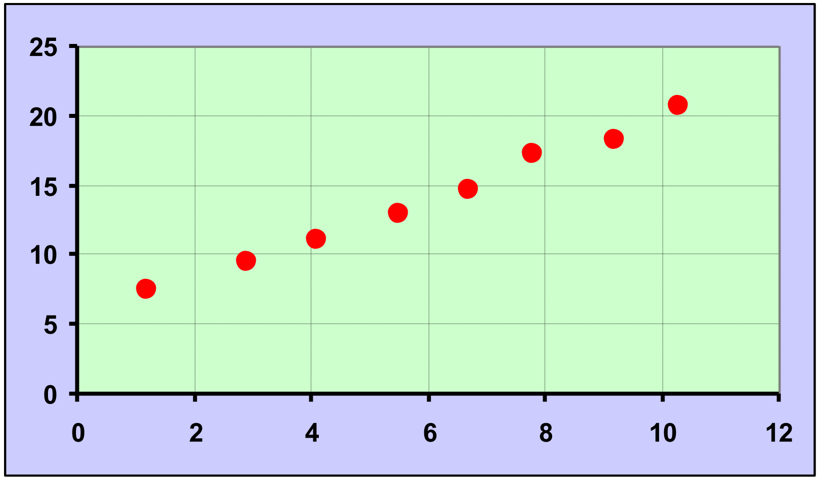
$$a = \frac{SXY \cdot n - SX \cdot SY}{SXX \cdot n - SX \cdot SX}, \quad b = \frac{SXX \cdot SY - SX \cdot SXY}{SXX \cdot n - SX \cdot SX}$$

Линейная аппроксимация

Пример 1. Пусть, изучая неизвестную функциональную зависимость между *x* и *y*, в результате серии экспериментов, была получена таблица значений. Необходимо найти приближенную функциональную зависимость и определить значения параметров аппроксимирующей функции.

X	1,2	2,9	4,1	5,5	6,7	7,8	9,2	10,3
Y	7,4	9,5	11,1	12,9	14,6	17,3	18,2	20,7

Для определения вида зависимости нанесем экспериментальные точки на график: в качестве аппроксимирующей функции выбираем многочлен первой степени и строим линейную модель $f = ax + b$



Линейная аппроксимация

Вычисляем суммы: SX=47,7 SXX=353,37 SY=111,7 SXY=766,3

Получаем систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} 353{,}37a + 47{,}7b = 766{,}3 \\ 47{,}7a + 8b = 111{,}7 \end{cases}$$

Решая систему, получим значения коэффициентов: *a*=1,4543 и *b*=5,2911.

Проверим правильность выбора линейной модели. Для этого вычислим значения аппроксимирующей функции ***f* = 1,4543*x* +5,2911**

№ п.п.	1	2	3	4	5	6	7	8
X	1,2	2,9	4,1	5,5	6,7	7,8	9,2	10,3
Y	7,4	9,5	11,1	12,9	14,6	17,3	18,2	20,7
f=ax +b	7,0363	9,5086	11,2538	13,2899	15,0351	16,6348	18,6709	20,2707
ε_i	-0,3637	0,0086	0,1538	0,3899	0,4351	-0,6652	0,4709	-0,4293

Вывод: исследуемая функциональная зависимость может быть приближенно описана линейной моделью *f* = 1,4543*x* +5,2911, т.к. ***f(x_i)≈Y_i***, $\boldsymbol{\varepsilon_i \to min}$

Определим меру отклонения: $S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = 1{,}3459$

Коэффициент корреляции

Коэффициент корреляции – это степень связи между двумя переменными.

Корреляция помогает найти ответ на два вопроса.

Во-первых, является ли связь между переменными положительной (прямо пропорциональная зависимость) или отрицательной (обратно пропорциональная зависимость). Во-вторых, насколько сильна зависимость.

Коэффициент корреляции Пирсона:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}}$$

Средние значения *x* и *y:*

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \quad \bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$$

$$\boldsymbol{-1 \leq r \leq 1}$$

При $r = \pm 1$ - строгая линейная функциональная зависимость в зависимости от знака коэффициента *a.*

При $r = 0$ - связь между переменными отсутствует (в данном случае линейная).

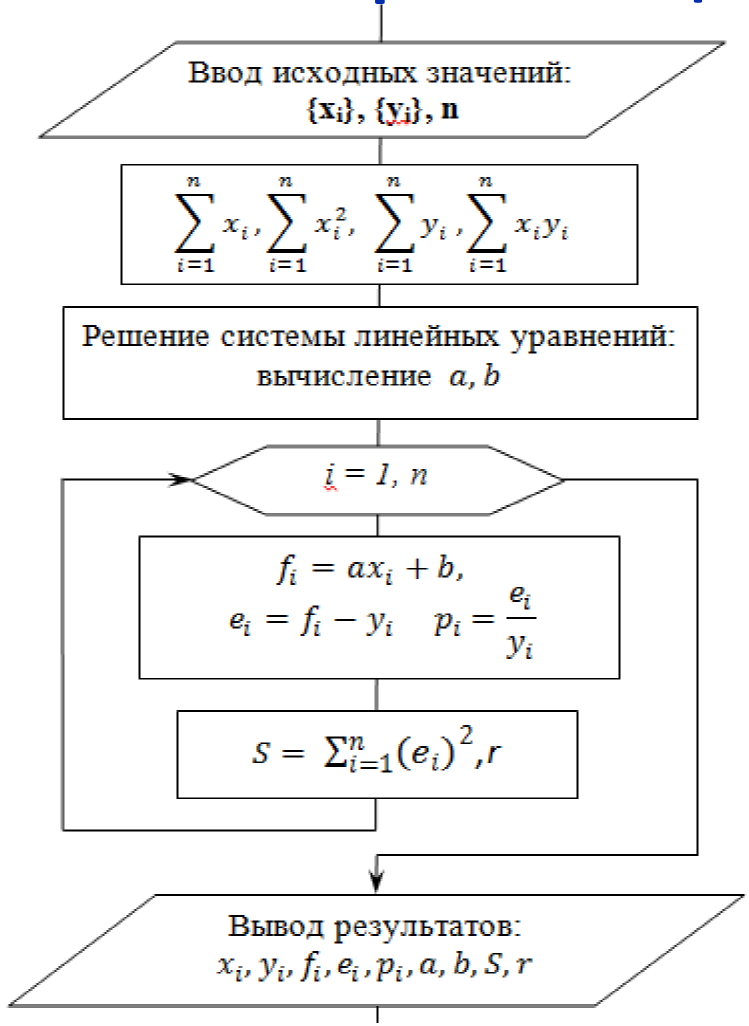
$r = 0{,}7 \div 0{,}9$ - связь высокая

$r = 0{,}9 \div 0{,}99$ - связь весьма высокая

Вычислим коэффициент корреляции для примера 1:

$\boldsymbol{r = 0{,}9909}$, т.е. наличие линейной связи правомерно

Блок-схема метода наименьших квадратов для линейной аппроксимации



КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

Рассмотрим в качестве эмпирической формулы квадратичную функцию:

$$\varphi(x, a_0, a_1, a_2) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

Сумма квадратов отклонений запишется следующим образом:

$$S = S(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i)^2 \to min$$

Приравниваем к нулю частные производные *S* по неизвестным параметрам, получаем систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial a_0} = 2\sum_{i=1}^{n} a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_1} = 2\sum_{i=1}^{n} (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i) x_i = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_2} = 2\sum_{i=1}^{n} (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i) x_i^2 = 0 \end{cases}$$

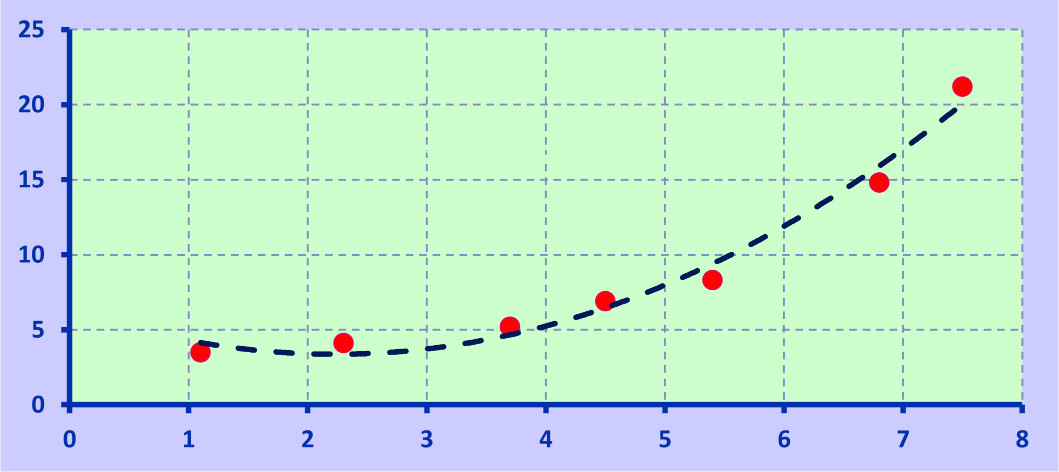
$$\begin{cases} a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i \end{cases}$$

КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

Пример 2. Пусть в результате серии экспериментов была получена таблица значений:

X	1,1	2,3	3,7	4,5	5,4	6,8	7,5
Y	3,5	4,1	5,2	6,9	8,3	14,8	21,2

Необходимо найти приближенную функциональную зависимость и определить значения параметров аппроксимирующей функции. Для определения вида зависимости нанесем экспериментальные точки на график: в качестве аппроксимирующей функции выбираем многочлен второй степени и строим полиномиальную модель $f(x, a_0, a_1, a_2) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$



КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

Сумма квадратов отклонений запишется следующим образом:

$$S = \sum_{i=1}^{n} (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i)^2 \rightarrow min$$

Вычислим:

$\sum_{i=1}^{n} x_i = 31{,}3$ $\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 172{,}09$ $\sum_{i=1}^{n} x_i^3 = 1049{,}05$ $\sum_{i=1}^{n} x_i^4 = 6779{,}43$

$\sum_{i=1}^{n} y_i = 64$ $\sum_{i=1}^{n} x_i\, y_i = 368{,}03$ $\sum_{i=1}^{n} x_i^2\, y_i = 2355{,}72$

Получим систему линейных уравнений, решив которую, определим значения коэффициентов эмпирической формулы:

$$\begin{cases} 7a_0 + 31{,}3a_1 + 172{,}09a_2 = 64 \\ 31{,}3a_0 + 172{,}09a_1 + 1049{,}05a_2 = 368{,}03 \\ 172{,}09a_0 + 1049{,}05a_1 + 6779{,}43a_2 = 2355{,}72 \end{cases} \qquad \begin{cases} a_0 = 6{,}365 \\ a_1 = -2{,}687 \\ a_2 = 0{,}602 \end{cases}$$

Проверим правильность выбора модели. Для этого вычислим значения аппроксимирующей функции ***f*** **=** $0{,}602x_i^2 - 2{,}687x_i + 6{,}365$

КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

№ п.п.	1	2	3	4	5	6	7
X	1,1	2,3	3,7	4,5	5,4	6,8	7,5
Y	3,5	4,1	5,2	6,9	8,3	14,8	21,2
$f=a_0+a_1x+a_2x^2$	4,138	3,369	4,664	6,464	9,410	15,930	20,075
ε_i	0,638	-0,731	-0,536	-0,436	1,110	1,130	-1,125

Вывод: исследуемая функциональная зависимость может быть приближенно описана выбранной моделью, т.к.

$f(x_i) \approx Y_i,\ \varepsilon_i \to \min$

Определим меру отклонения: $S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = 5{,}191$

Вычислим коэффициент корреляции: $r = 0{,}995$

Аппроксимация с помощью других функций

Помимо линейных зависимостей для описания результатов эксперимента используют также показательные, степенные, логарифмические функции. Эти функции легко могут быть приведены к линейному виду, после чего для определения коэффициентов аппроксимирующей функции можно использовать описанный выше алгоритм.

Аппроксимирующая функция задана степенной функцией вида: $\boldsymbol{\varphi(x) = ax^b}$

Для применения метода наименьших квадратов степенная функция линеаризуется:

$$\ln\left(\varphi(x)\right) = \ln\left(ax^b\right) = \ln(a) + b\ln(x)$$

Введем обозначения: Y=$\ln\left(\varphi(x)\right)$; A=$\ln(a)$; B=b; X=$\ln(x)$

Получаем линейную зависимость: Y=A+BX. После определения коэффициентов A и B вернемся к принятым ранее обозначениям: $\boldsymbol{a = e}^{\mathrm{A}}$ и b=B

Аппроксимирующая функция задана экспоненциальной функцией вида: $\boldsymbol{\varphi(x) = ae^{bx}}$

Для применения метода наименьших квадратов экспоненциальная функция линеаризуется:

$$\ln\left(\varphi(x)\right) = \ln\left(ae^{bx}\right) = \ln a + bx$$

Введем обозначения: Y=$\ln\left(\varphi(x)\right)$; A=$\ln(a)$; B=b

Получаем линейную зависимость: Y=A+Bx. После определения коэффициентов A и B вернемся к принятым ранее обозначениям: $\boldsymbol{a = e}^{\mathrm{A}}$ и b=B

Аппроксимирующая функция задана логарифмической функцией вида: $\boldsymbol{\varphi(x) = a\ln(x) + b}$

Вид функции	Табличный X	Табличный Y
Степенная	Ln X	Ln Y
Экспоненциальная	X	Ln Y
Логарифмическая	Ln X	Y

Среднеквадратичное отклонение

В случае, когда экспериментальные данные могут быть описаны несколькими уравнениями, выбор наилучшего из них можно осуществить по величине среднеквадратичного отклонения:

$$\boldsymbol{\delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(\varphi(x_i) - y_i)^2}{n}}}$$

Наилучшим считается уравнение, для которого значение $\boldsymbol{\delta}$ минимально.

Выбор аппроксимирующей функции

Пример 3. Найти функцию, являющуюся наилучшим приближением заданной табличной функции :

X	1,1	2,3	3,7	4,5	5,4	6,8	7,5
Y	2,73	5,12	7,74	8,91	10,59	12,75	13,43

Используя метод наименьших квадратов, вычислим коэффициенты различных аппроксимирующих функций, проанализируем меру отклонения S и среднеквадратичное отклонение $\boldsymbol{\delta}$. Результаты вычислений сведем в таблицу:

Выбор аппроксимирующей функции

Вид функции	a	b	c	Мера отклонения S	Среднеквадратичное отклонение δ
$f = ax + b$	1,6854	1,2168	-	0,47302	0,25995
$f = ax^b$	2,5421	0,8382	-	0,15412	0,14838
$f = ae^{bx}$	2,7309	0,2346	-	10,72993	1,23808
$f = a\ln x + b$	5,6500	1,1989	-	4,19977	0,77457
$f = ax^2bx + c$	-0,0589	2,1974	0,3743	0,06902	0,09929

Выбор аппроксимирующей функции