8. Апроксимування функцій

8.1. Постановка задачі апроксимації

Наближення функцій застосовують у випадках, якщо

- функція складна (трансцендентна або є розв’язком складної задачі) і її замінюють функцією, яка легко обчислюється (найчастіше, поліномом);
- необхідно побудувати функцію неперервного аргументу для функції, яка задана своїми значеннями (таблична);
- таблична функція наближається табличною ж функцією (згладжування).

Інтерполювання не кращий спосіб наближення функцій через розбіжність цього процесу для поліномів. Тим більше доцільність застосування інтерполювання сумнівна, якщо функція таблична, а її значення неточні. Потрібно будувати апроксимуючу функцію з інших міркувань.

Найбільш загальний принцип: наблизити $f(x)$ функцією $\Phi(x)$ так, щоб досягалася деяка задана точність ε:

$$|f(x) - \Phi(x)| < \varepsilon \tag{1}$$

Але розв’язок в такій постановці може не існувати або бути не єдиним.

Загальна постановка задачі наближення така. Нехай маємо елемент f лінійного нормованого простору R. Побудуємо підпростір M_n, в якому елементи є лінійною комбінацією:

$$\Phi = \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i \in M_n \subset R \tag{2}$$

по елементах лінійно незалежної системи

$$\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}, \quad \varphi_i \in R. \tag{3}$$

Відхилення $\Phi \in M_n$ від $f \in R$ є число

$$\Delta(f, \Phi) = |f - \Phi|. \tag{4}$$

Позначимо

$$\inf_{\Phi \in M_n} |f - \Phi| = \Delta(f). \tag{5}$$

Означення. Елемент Φ_0 такий, що

$$\Delta(d, \Phi_0) = |f - \Phi_0| = \inf_{\Phi \in M_n} |f - \Phi| = \Delta(f), \tag{6}$$

називається *елементом найкращого наближення* (ЕНН).

Ясно, що умову точності треба перевіряти на цьому елементі. У випадку її невиконання треба збільшувати кількість елементів n в (2).

Теорема 1: Для будь-якого лінійного нормованого простору R існує елемент найкращого наближення $\Phi_0 \in M_n$.

Доведення: Введемо

$$F(\vec{c}) = F(c_0, c_1, \ldots, c_n) = |f - \Phi| = \left| f - \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i \right|. \tag{7}$$

Це неперервна функція аргументів $\vec{c} = (c_0, c_1, \ldots, c_n)$. Для елементів, які задовольняють умові

$$|\Phi| > 2|f|, \quad f \in R_1, \quad \Phi \in M_n, \tag{8}$$

маємо

$$F(\vec{c}) = |f - \Phi| \geq |\Phi| - |f| > 2|f| - |f| = |f| > \Delta(f). \tag{9}$$

Значить ЕНН $\Phi_0 \in \{\Phi : \|\Phi\| \leq 2\|f\|\} = \overline{U} \subset M_n$. За теоремою Кантора $\exists \Phi_0$, де $F(\vec{c})$ досягає мінімуму. Причому $\|f - \Phi_0\| \leq \|f - \Phi\|$. $\square$

Елементів найкращого наближення в лінійному нормованому просторі може бути і декілька.

Означення: Простір R називається *строго нормованим*, якщо з умови

$$|f + g| = |f| + |g|, \quad |f| \neq 0, \quad |g| \neq 0 \tag{10}$$

випливає, що $\exists \lambda \neq 0$ таке, що

$$g = \lambda f. \tag{11}$$

Теорема 2: Якщо простір R строго нормований, то елемент найкращого наближення Φ_0 єдиний.

Доведення: від супротивного. Нехай існують $\Phi_0^{(1)} \neq \Phi_0^{(2)}$ — два елементи найкращого наближення. Візьмемо $\alpha \in [0, 1]$, тоді

$$\begin{aligned} \Delta(f) \leq \left\| f - \alpha\Phi_0^{(1)} - (1-\alpha)\Phi_0^{(2)} \right\| = \left\| \alpha \left(f - \Phi_0^{(1)} \right) + (1-\alpha) \left(f - \Phi_0^{(2)} \right) \right\| \leq \\ \leq \alpha \left\| f - \Phi_0^{(1)} \right\| + (1-\alpha) \left\| f - \Phi_0^{(2)} \right\| = \alpha\Delta(f) + (1-\alpha)\Delta(f) = \Delta(f). \end{aligned} \tag{12}$$

Тобто всі «$\leq$» можна замінити на «$=$» Отримаємо

$$\left| \alpha \left(f - \Phi_0^{(1)} \right) + (1-\alpha) \left(f - \Phi_0^{(2)} \right) \right| = \alpha \left| f - \Phi_0^{(1)} \right| + (1-\alpha) \left| f - \Phi_0^{(2)} \right|. \tag{13}$$

За припущенням $\exists \lambda$ таке, що

$$\alpha \left(f - \Phi_0^{(1)} \right) + \lambda(1-\alpha) \left(f - \Phi_0^{(2)} \right). \tag{14}$$

Виберемо $\alpha = 1/2$. Тоді

$$f - \Phi_0^{(1)} = \lambda \left(f - \Phi_0^{(2)} \right). \tag{15}$$

Оскільки

$$\left|f-\Phi_0^{(1)}\right| = \left|f-\Phi_0^{(2)}\right| = \Delta(f), \tag{16}$$

то остання рівність має місце тільки для $\lambda = 1$. Звідси

$$f-\Phi_0^{(1)} = f-\Phi_0^{(2)} \implies \Phi_0^{(1)} = \Phi_0^{(2)}. \tag{17}$$

Отже, ми отримали протиріччя з припущенням, що і доводить існування єдиного елемента найкращого наближення. □

Теорема 3: Гільбертів простір H — строго нормований.

Доведення: Нехай

$$|f+g| = |f| + |g|, \tag{18}$$
$$|f+g|^2 = |f|^2 + 2|f|\cdot|g| + |g|^2. \tag{19}$$

З іншого боку

$$|f+g|^2 = \langle f+g, f+g\rangle = |f|^2 + 2\langle f,g\rangle + |g|^2. \tag{20}$$

Звідси $\|f\|\cdot\|g\| = \langle f,g\rangle$. Для довільного гільбертового простору $\langle f,g\rangle \le \|f\|\cdot\|g\|$.

Таким чином на елементах (18) нерівність Коші-Буняковського перетворюється в рівність. Розглянемо

$$|f-\lambda g|^2 = |f| - 2\lambda\langle f,g\rangle + \lambda^2|g|^2 = |f|^2 - \lambda|f|\cdot|g| + \lambda^2|g|^2 = (|f| - \lambda|g|)^2. \tag{21}$$

Тоді для $\lambda = \|f\|/\|g\|$ маємо $\|f-\lambda g\| = 0$. Звідси $\exists\lambda$: $f = \lambda g$, тобто H — строго нормований. □

Наслідок: $R = H \implies \exists!\Phi_0 \in M_n$.

Приклади (*строго нормованих просторів*):

1. $L_2([a,b])$ з нормою $\|u\| = \sqrt{\int\limits_a^b u^2\,\mathrm{d}x}$.
2. $L_p([a,b])$ з нормою $\|u\| = \left(\int\limits_a^b u^p\,\mathrm{d}x\right)^{1/p}$, $p > 1$.

Простір $C([a,b])$ не є строго нормованим, але в ньому існує єдиний елемент найкращого наближення (про цей факт в наступному пункті).

8.2. Найкраще рівномірне наближення

Означення: *Найкраще рівномірне наближення* — це наближення в просторі $R = C([a,b])$, де $\|f\|_{C([a,b])} = \max\limits_{x\in[a,b]}|f|$ — рівномірна метрика.

Теорема 1 (*Хаара*): Для того, щоб $\forall f \in C([a,b])$ існував єдиний елемент найкращого рівномірного наближення необхідно і достатньо, щоб система $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ була *системою Чебишова*.

Означення: Система $\{\varphi\}_{i=1}^{\infty}$ називається *системою Чебишова*, якщо елемент $\Phi_n(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i(x)$ має не більше n нулів, причому $\sum_{i=1}^{n} c_i^2 \neq 0$.

Наприклад, системою Чебишова є поліноміальна система $\{x^i\}_{i=0}^{\infty}$.

Означення: Позначимо $Q_n^0(x)$ — *багаточлен найкращого рівномірного наближення* (далі — БНРН.).

Його відхилення від f:

$$\Delta(f) = \left\| Q_n^0(x) - f(x) \right\|_C = \inf_{Q_n(x)} \| Q_n(x) - f(x) \| . \tag{22}$$

Теорема 2 (*Чебишова*): $Q_n^0(x)$ — БНРН неперервної функції $f(x)$ тоді та тільки тоді, якщо на відрізку $[a, b]$ існує хоча б $(n+2)$-а точки $a \leq x_0 \leq \ldots \leq x_m \leq b$, $m \geq n+1$ такі, що

$$f(x_i) - Q_n^0(x_i) = \alpha(-1)^i \Delta(f), \tag{23}$$

де $i = \overline{0, m}$, $\alpha = \pm 1$.

Означення: Точки $\{x_i\}_{i=0}^{m}$, які задовольняють умовам теореми Чебишова, називаються *точками чебишовського альтернансу*.

Теорема 3: $Q_n^0(x)$ — БНРН для неперервної функції єдиний.

Доведення: Припустимо, існують два БНРН степеня n: $Q_n^{(1)}(x) \neq Q_n^{(2)}(x)$:

$$\Delta(f) = \left| f - Q_n^{(1)} \right|_C = \left| f - Q_n^{(2)} \right|_C. \tag{24}$$

Звідси випливає, що

$$\left| f - \frac{Q_n^{(1)}(x) + Q_n^{(2)}(x)}{2} \right| \leq \left| \frac{f - Q_n^{(2)}(x)}{2} \right| = \Delta(x), \tag{25}$$

тобто багаточлен

$$\frac{Q_n^{(1)}(x) + Q_n^{(2)}(x)}{2} \tag{26}$$

також є БНРН. Нехай $x_0, x_1, \ldots, x_m$ — відповідні йому точки чебишовського альтернансу.

Це означає, що

$$\left| \frac{Q_n^{(1)}(x_i) + Q_n^{(2)}(x_i)}{2} - f(x_i) \right| = \Delta(f), \tag{27}$$

або

$$\left(Q_n^{(1)}(x_i) - f(x_i)\right) + \left(Q_n^{(2)}(x_i) - f(x_i)\right) = 2\Delta(f). \tag{28}$$

Оскільки $\left|Q_n^{(k)}(x_i) - f(x_i)\right| \le \Delta(f)$, $k = 1, 2$, то (28) можливе лише у тому випадку, коли

$$Q_n^{(1)}(x_i) - f(x_i) = Q_n^{(2)}(x_i) - f(x_i), \tag{29}$$

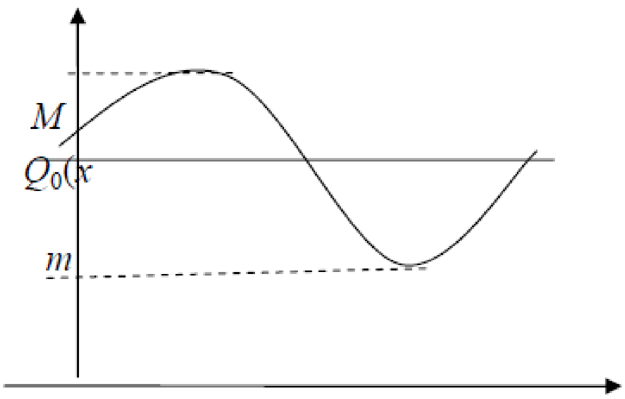
для усіх $i = \overline{0, n+1}$.

Звідки випливає, що $Q_n^{(1)}(x) = Q_n^{(2)}(x)$, а це суперечить початковому припущенню. □

8.3. Приклади побудови БНРН

Скінченого алгоритму побудови БНРН для довільної функції не існує. Є ітераційний [ЛМС, 73–79]. Але в деяких випадках можна побудувати БНРН за теоремою Чебишова.

1. Потрібно наблизити багаточленом нульового степеня.



Нехай $M = \max\limits_{[a,b]} f(x) = f(x_0)$, $m = \min\limits_{[a,b]} f(x) = f(x_1)$, тоді $Q_0(x)$ — БНРН має вигляд (див. рис. 11):

$$Q_0(x) = \frac{M+m}{2}, \tag{30}$$

де $\Delta(x_0) = \frac{M+m}{2}$, а x_0, x_1 — точки чебишовського альтернансу.

2. Опукла функція $f(x) \in C([a,b])$ наближається багаточленом першого степеня

$$Q_1(x) = c_0 + c_1 x. \tag{31}$$

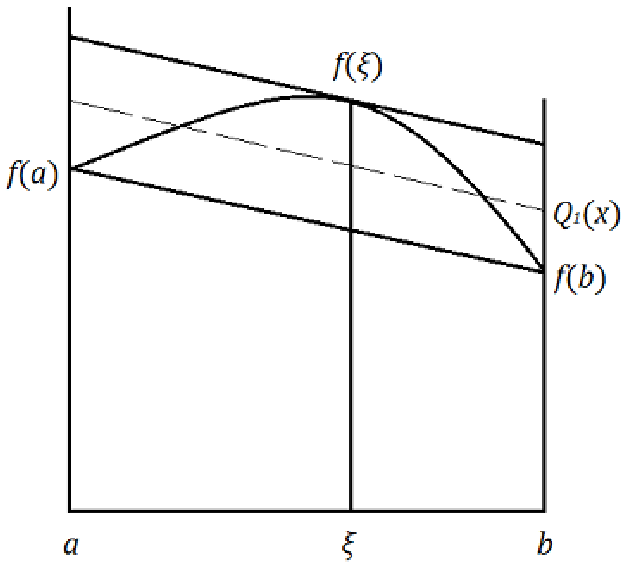
Оскільки $f(x)$ опукла, то різниця $f(x) - (c_0 + c_1 x)$ може мати лише одну внутрішню точку екстремуму. Тому точки a, b є точками чебишовського альтернансу. Нехай ξ третя — точка чебишовського альтернансу. Згідно з теоремою Чебишова, маємо систему:

$$\begin{cases} f(a) - c_0 - c_1 a = \alpha\Delta(f), \\ f(\xi) - c_0 - c_1 \xi = -\alpha\Delta(f), \\ f(b) - c_0 - c_1 b = \alpha\Delta(f). \end{cases} \tag{32}$$

Звідси $f(b) - f(a) = c_1(b-a)$ та $c_1 = \frac{f(b)-f(a)}{b-a}$.

Цю систему треба замкнути, використавши ще одне рівняння з умови: точка ξ є точкою екстремуму різниці $f(x) - (c_0 + c_1 x)$. Тому для диференційованої функції $f(x)$ для визначення ξ маємо рівняння (дотична і січна паралельні):

$$f'(\xi) = c_1 = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \tag{33}$$



Геометрично ця процедура виглядає наступним чином (див. рис. 12). Проводимо січну через точки $(a, f(a))$, $(b, f(b))$. Для неї тангенс кута дорівнює c_1. Проводимо паралельну їй дотичну до кривої $y = f(x)$, а потім пряму, рівновіддалену від січної та дотичної, яка і буде графіком $Q_1(x)$. При цьому $x_0 = a$, $x_1 = \xi$, $x_2 = b$.

3. Потрібно наблизити $f(x) = x^{n+1}$, $x \in [-1, 1]$ багаточленом степеня n: $Q_n^0(x)$. Введемо

$$\overline{P}_{n+1}(x) = x^{n+1} - Q_n(x) = x^{n+1} - a_1 x^n - \dots \tag{34}$$

Далі

$$\Delta(f) = \inf_{Q_n(x)} \left\| x^{n+1} - Q_n^0(x) \right\|_C = \inf_{\overline{P}_{n+1}} \left\| \overline{P}_{n+1} - 0 \right\|_C = \left\| \overline{T}_{n+1}(x) \right\|. \tag{35}$$

Звідси

$$x^{n+1} - Q_n^0(x) = \overline{T}_{n+1}(x), \tag{36}$$

або

$$Q_n^0(x) = x^{n+1} - \overline{T}_{n+1}(x). \tag{37}$$

> **Задача 25**: Для прикладу 3 вказати точки чебишовського альтернансу $\{x_i\}$, $i = \overline{0, n+1}$.

4. Потрібно наблизити $f(x) = P_{n+1}(x) = a_0 + \ldots + a_{n+1} x^{n+1}$, $a_{n+1} \neq 0$, $x \in [a, b]$ БНРН степеня n. Запишімо його у вигляді:

$$Q_n^0(x) = P_{n+1}(x) - a_{n+1}(x) \overline{T}_{n+1}^{[a,b]} \tag{38}$$

де $\overline{T}_{n+1}^{[a,b]}(x)$ — нормований багаточлен Чебишова на проміжку $x \in [a, b]$.

Дійсно це БНРН: вираз у правій частині є багаточленом степеня n, оскільки коефіцієнт при x^{n+1} дорівнює нулю, а його нулі

$$x_k = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot t_k, \tag{39}$$

де

$$t_k = \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)}\right), \tag{40}$$

для $k = \overline{0, n}$ є точками чебишевського альтернасу для $Q_n^0(x)$.

> **Задача 26**: Показати, що для $f(x)$ парної (непарної) функції БНРН це багаточлен по парних (непарних) степенях x.

5. Телескопічний метод. Дуже часто БНРН точно знайти не вдається. В таких випадках шукається багаточлен, близький до нього. Бажано щоб цей багаточлен був невисокого степеня (менше арифметичних операцій на його обчислення) Спочатку будують такий багаточлен

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j, \tag{41}$$

щоб відхилення від $f(x)$ була достатньо малою. (наприклад меншою за $\varepsilon/2$).

Можна це зробити, наприклад, за формулою Тейлора. Потім наближають багаточлен $P_n(x)$ багаточленом найкращого рівномірного наближення $P_{n-1}(x)$ (за алгоритмом п. 4; для простоти $x \in [-1, 1]$):

$$P_{n-1}(x) = P_n(x) - a_n T_n(x) 2^{1-n}. \tag{42}$$

Оскільки $|T_n(x)| \le 1$ на відрізку $[-1, 1]$, то

$$|P_{n-1}(x) - P_n(x)| \le |a_n| \cdot 2^{1-n}. \tag{43}$$

Далі наближають багаточлен $P_{n-1}(x)$ багаточленом найкращого рівномірного наближення $P_{n-2}(x)$ і т. д. Пониження степеня продовжується до тих пір, поки сумарна похибка від таких послідовних апроксимацій залишається меншою за задане мале число ε.

8.4. Найкраще середньоквадратичне наближення

Наблизимо функцію $f(x) \in H$ з гільбертового простору H функціями із скінченно-вимірного підпростору M_n простору H. Тут H — гільбертів простір із скалярним добутком $\langle u, r \rangle$, норма і відстань для якого визначаються формулами:

$$|u| = \sqrt{\langle u, u \rangle}, \quad \Delta(u, v) = |u - v|. \tag{44}$$

Побудуємо

$$u = \sum_{i=0}^{n} c_i \varphi_i \in M_n \subset H, \tag{45}$$

де $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ — лінійно-незалежна система елементів з H.

> **Означення**: *Елементом найкращого середньоквадратичного наближення* (в подальшому ЕНСКН) називатимемо Φ_0 такий, що

$$|f-\Phi_0| = \sqrt{\langle f-\Phi_0, f-\Phi_0\rangle} = \inf_{\Phi\in M_n} |f-\Phi|. \tag{46}$$

Теорема 1: Нехай $f \in H$, $\Phi_0 \in M_n$ — елемент найкращого середньоквадратичного наближення, тобто

$$|f-\Phi_0| = \inf_{\Phi\in M_n} |f-\Phi|, \tag{47}$$

тоді

$$\forall\Phi \in M_n : \quad \langle f-\Phi_0, \Phi\rangle = 0. \tag{48}$$

Доведення:

Нехай (48) не виконується, тобто $\exists\Phi_1 \in M_n$:

$$\langle f-\Phi_0, \phi_1\rangle = \alpha \neq 0. \tag{49}$$

Без обмеження загальності можемо вважати, що $\|\Phi_1\| = 1$.

Побудуємо $\Phi_2 = \Phi_0 + \alpha\Phi_1$, тоді

$$|f-\Phi_2|^2 = \langle f-\Phi_2, f-\Phi_2\rangle = |f-\Phi_0|^2 - \alpha^2 < |f-\Phi_0|^2. \tag{50}$$

Отже, елемент Φ_2 кращий за елемент найкращого середньоквадратичного наближення Φ_0. А це суперечність. $\square$

Наслідок: $f = \Phi_0 + \nu$, де $\Phi_0 \in M_n$, а $\nu \perp M_n$ (поправка ν — з ортогонального доповнення до M_n).

Знайти ЕНСКН

$$\Phi_0 = \sum_{i=0}^{n} c_i\varphi_i \tag{51}$$

означає знайти коефіцієнти c_i.

Для виконання (48) достатньо, щоб

$$\langle f-\Phi_0, \varphi_k\rangle = 0, \quad k = \overline{0,n}. \tag{52}$$

Підставимо (51) у формулу (52):

$$\langle f - \sum_{i=0}^{n} c_i\varphi_i, \varphi_k\rangle = 0. \tag{53}$$

Таким чином маємо СЛАР для c_i:

$$\sum_{i=0}^{n} c_i\langle\varphi_i, \varphi_k\rangle = \langle f, \varphi_k\rangle, \quad k = \overline{0,n}. \tag{54}$$

З теореми 1 витікає лише достатність умов (54) для знаходження коефіцієнтів c_i. Розглянемо задачу

$$|f-\Phi_0| = \inf_{\Phi\in M_n} |f-\Phi|, \tag{55}$$

як задачу мінімізації функції багатьох змінних:

$$F(a_0, \dots, a_n) = |f - \Phi|^2 = \left| f - \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i \right|^2 \to \min. \tag{56}$$

Умови мінімуму цієї функції приводять до (54).

> **Задача 27**: Показати, що для коефіцієнтів c_i елемента найкращого середньо-квадратичного наближення умови (54) є необхідними та достатніми.

Матриця СЛАР (54) складається з елементів $g_{ik} = \langle \varphi_i, \varphi_k \rangle$, тобто це матриця Грамма: $G = (g_{ik})_{i,k=0}^{n}$. Оскільки це матриця Грамма лінійно-незалежної системи, то $\det G \neq 0$det, що ще раз доводить існування та єдиність ЕНСКН. Оскільки $G^\intercal = G$, то для розв’язку цієї системи використовують метод квадратних коренів.

Якщо взяти $x \in [0, 1]$ та $\varphi_i(x) = x^i$, $i = \overline{0, n}$, $H = L_2(0, 1)$, то

$$g_{ik} = \int\limits_0^1 x^i x^k \,\mathrm{d}x = \frac{1}{i + k + 1}, \quad i, k = \overline{0, n}. \tag{57}$$

Це матриця Гілберта, яка є погано обумовленою: $\mathrm{cond} G \approx 10^7$, $n = 6$. Праві частини

$$f_k = \langle f, \varphi_k \rangle = \int\limits_0^1 f(x_i) x^k \,\mathrm{d}x \tag{58}$$

як правило, обчислюються наближено, тому похибки обчислення c_i можуть бути великими.

Що робити? Якщо вибирати систему $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ ортонормованою, тобто

$$\langle \varphi_i, \varphi_k \rangle = \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k, \end{cases} \tag{59}$$

то система (54) має явний розв’язок

$$\Phi_0 = \sum_{i=0}^{n} \langle f, \varphi_i \rangle \cdot \varphi_i. \tag{60}$$

Якщо $\{\varphi_i\}$ — повна ортонормована система, то довільну функцію можна представити у вигляді ряду Фур’є:

$$f = \sum_{i=0}^{\infty} \langle f, \varphi_i \rangle \cdot \varphi_i, \tag{61}$$

і

$$f - \Phi_0 = \sum_{i=n+1}^{\infty} c_i \varphi_i = \nu \tag{62}$$

— залишок (похибка). Таким чином ЕНСКН є відрізком ряду Фур’є. Далі

$$\begin{aligned}|f-\Phi_0|^2 &= \langle f-\Phi_0, f-\Phi_0\rangle = |f|^2 - 2\langle f,\Phi_0\rangle + |\Phi_0|^2 = \\ &= |f|^2 - 2|\Phi_0|^2 - 2\langle \nu,\Phi_0\rangle + |\Phi_0| = |f|^2 - |\Phi_0|^2 = \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} c_i^2 - \sum_{i=0}^{n} c_i^2 = \sum_{i=n+1}^{\infty} c_i^2 \xrightarrow[n\to\infty]{} 0.\end{aligned} \tag{63}$$

Останнє випливає з відповідної теореми математичного аналізу. Таким чином, якщо $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ — повна ортонормована система, то

$$\sum_{i=n+1}^{\infty} c_i^2 \xrightarrow[n\to\infty]{} 0, \tag{64}$$

$$\Phi_0^{(n)} \xrightarrow[n\to\infty]{} f, \tag{65}$$

Значить вірна

> **Теорема 2**: В гільбертовому просторі H послідовність ЕНСКН $\left\{\Phi_0^{(n)}\right\}$ по повній ортонормованій системі $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ збігається до f .

> **Зауваження 1**: Відхилення можна обчислити за формулою:
>
> $$\Delta^2(f) = |f-\Phi_0|^2 = |f|^2 - 2\langle f,\Phi_0\rangle + |\Phi_0|^2 = |f|^2 - |\Phi_0|^2 = |f|^2 - \sum_{i=0}^{n} c_i^2. \tag{66}$$

Якщо $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$ — ортогональна система, але не нормована, тобто $\langle\varphi_i,\varphi_k\rangle = \delta_{ik}\|\varphi_i\|^2$, то

$$c_i = \frac{\langle f,\varphi_i\rangle}{|\varphi_i|^2}, \tag{67}$$

$$\Phi_0 = \sum_{i=0}^{n} \frac{\langle f,\varphi_i\rangle}{|\varphi_i|^2}\cdot\varphi_i, \tag{68}$$

$$|f-\Phi_0|^2 = |f|^2 - \sum_{i=0}^{n}\frac{c_i^2}{|\varphi_i|^2}. \tag{69}$$

Для функції $f(x)$, щоб побудувати ЕНСКН покладемо $H = L_{2,\alpha}([a,b])$, в якому скалярний добуток виберемо наступним чином

$$\langle u,v\rangle = \int_a^b u(x)v(x)\,\mathrm{d}\alpha(x), \tag{70}$$

де $\alpha(x)$ — зростаюча функція. Можливі випадки:

1. $\alpha(x)\in C^1([a,b])$, тоді $\mathrm{d}\alpha(x) = \rho(x)\,\mathrm{d}x > 0$ та

$$\langle u,v\rangle = \int_a^b \rho(x)u(x)v(x)\,\mathrm{d}x. \tag{71}$$

2. $\alpha(x)$ — функція стрибків, $\alpha(x) = \alpha(x_k - 0)$, де $x_{k-1}\le x\le x_k$, $k=\overline{1,n}$. Якщо ввести $\rho_k = \alpha(x_k+0) - \alpha(x_k-0)$, то

$$\langle u, v\rangle = \sum_{k=1}^{n} \rho_k u(x_k) v(x_k). \tag{72}$$

Перший вибір $\alpha(x)$ використовується при апроксимації функцій неперервного аргументу, а другий — для табличних функцій.

8.5. Системи ортогональних функцій

Як вибирати ортонормальну або ортогональну систему функцій $\{\varphi_i\}_{i=0}^{\infty}$?

Розглянемо деякі з найбільш вживаних таких систем.

1. Якщо $H = L_2([-1, 1])$; $\rho \equiv 1$ (ваговий множник), то $\varphi_i(x) = L_i(x)$ — система *багаточленів Лежандра*, які мають вигляд

   $$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \cdot (x^2 - 1)^n. \tag{73}$$

   Використовують також рекурентні формули

   $$(n+1) L_{n+1}(x) = (2n+1) x L_n(x) - n L_{n-1}(x), \tag{74}$$

   до яких додаємо умови

   $$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x. \tag{75}$$

   Це ортогональна система в тому сенсі, що

   $$\langle L_i, L_k\rangle = \int_{-1}^{1} L_i(x) L_k(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{ik} |L_i(x)|^2, \tag{76}$$

   де $\|L_i(x)\|^2 = \frac{2}{2i+1}$ і тому $c_i = \frac{\langle f, L_i\rangle}{\|L_i\|^2} = \frac{2i+1}{2}\langle f, L_i\rangle$.

   > **Зауваження**: Якщо потрібно побудувати наближення на довільному проміжку (a, b), то бажано перейти до проміжку $(-1, 1)$, тобто по $f(x)$ на $[a, b]$ побудувати $f(t)$ з $t \in [-1, 1]$ заміною $x = At + B$, $t = \alpha x + \beta$ та для побудови багаточлена НСКН для $f(t)$ використати багаточлени Лежандра $L_i(t)$.

   Можна робити навпаки — систему багаточленів перевести з $[a, b]$ на $[-1, 1]$, але це вимагає більше обчислень і процес побудови ЕНСКН складніше.

2. Якщо $H = L_{2,\rho}([-1, 1])$, $\rho(x) = 1/\sqrt{1 - x^2}$, скалярний добуток

   $$\langle u, v\rangle = \int_{-1}^{1} \frac{u(x) v(x)}{\sqrt{1 - x^2}}\,\mathrm{d}x \tag{77}$$

   (це невласні інтеграли другого роду), то $\varphi_i(x) = T_i(x)$, де $\{T_i(x)\}$ — система ортогональних *багаточленів Чебишова* 1-го роду, які мають вигляд

   $$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)). \tag{78}$$

   Рекурентна формула для цих багаточленів:

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \tag{79}$$

до якої додаємо умови $T_0 = 1$, $T_1 = x$.

Для цієї системи

$$|T_n|^2 = \begin{cases} \pi, & n = 0, \\ \pi/2, & n = 1, 2, \ldots \end{cases} \tag{80}$$

3. H гільбертів простір з ваговим множником $\rho(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta$. Система $\varphi_i(x) = P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ — *багаточленів Якобі*, $\alpha, \beta > -1$ (α, β — числові параметри) ортогональна в сенсі скалярного добутку

$$\langle u, v\rangle = \int\limits_{-1}^{1} (1-a)^\alpha (1+x)^\beta u(x) v(x)\,\mathrm{d}x. \tag{81}$$

Ця система є узагальненням випадків 1. та 2.

Диференціальна формула для багаточленів:

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left((1-x)^{n+\alpha} (1+x)^{n+\beta} \right). \tag{82}$$

Рекурентна формула:

$$2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta) P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = \tag{83}$$
$$= (2n+\alpha+\beta+1)((2b+\alpha+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)x + \alpha^2 - \beta^2) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) - \tag{84}$$
$$- 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2) P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x), \tag{85}$$

де $P_0^{(\alpha,\beta)} = 1$, $P_{-1}^{(\alpha,\beta)} = 0$, і

$$\left| P_n^{(\alpha,\beta)} \right|^2 = \frac{2^{\alpha+\beta+1} \Gamma(\alpha+n+1) \Gamma(\beta+n+1)}{n! (\alpha+\beta+2n+1) \Gamma(\alpha+\beta+n+1)}, \tag{86}$$

та

$$\Gamma(z) = \int\limits_{0}^{\infty} e^{-t} t^{z-1}\,\mathrm{d}t, \tag{87}$$

а $\Gamma(z+1) = z \cdot \Gamma(z)$, $\Gamma(n+1) = n!$.

Коли $\alpha = \beta = 0$: $P_n^{(0,0)}(x) = L_n(x)$, а для $\alpha = \beta = -1/2$: $P_n^{(-1/2,-1/2)}(x) = T_n(x)$.

4. $H = L_{2,\rho}([0,\infty))$, $\rho(x) = x^\alpha e^{-x}$, $\alpha > -1$.

Цьому ваговому множнику відповідає *система багаточленів Лагерра* $\varphi_i(x) = L_i^\alpha(x)$, які задаються диференціальною формулою:

$$L_n^\alpha(x) = (-1)^n x^{-\alpha} e^x \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \left(x^{\alpha+n} e^{-x} \right) \tag{88}$$

або в рекурентній формі

$$(n+1) L_{n+1}^\alpha = (2n+\alpha+1-x) L_n^\alpha - (n+\alpha) L_{n-1}^\alpha, \tag{89}$$

де $L_0^\alpha = 1$, $L_{-1}^\alpha = 0$ та з нормою $\|L_n^\alpha\|^2 = n! \cdot \Gamma(\alpha + n + 1)$.

5. $H = L_{2,\alpha}((-\infty, \infty))$, $\rho(x) = e^{-x^2}$. Систему ортогональних функцій вибираємо як систему *багаточленів Ерміта* $\varphi_i(x) = H_i(x)$, які задаються диференціальною формулою:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-x^2}, \tag{90}$$

   або в рекурентній формі

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \tag{91}$$

   де $H_0 = 1$, $H_{-1} = 0$ та $\|H_n\|^2 = 2^n n! \sqrt{\pi}$.

6. $H = L_2([0, 2\pi])$, $\rho(x) \equiv 1$, $f(x) = f(x + 2\pi)$. $f(x)$ — 2π-періодичні функції. За систему ортонормованих функцій вибираємо *тригонометричну систему*

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \tag{92}$$

$$\varphi_{2k-1}(x) = \frac{\cos(kx)}{\sqrt{\pi}}, \tag{93}$$

$$\varphi_{2k}(x) = \frac{\sin(kx)}{\sqrt{\pi}}. \tag{94}$$

   Елемент найкращого середньоквадратичного наближення представляє собою тригонометричний багаточлен

$$\Phi_0(x) \equiv T_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{n} (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)), \tag{95}$$

   формули для обчислення цих коефіцієнтів наведені в наступному пункті.

7. Якщо потрібно апроксимувати табличну функцію, то $H = \ell_2$, $x_i = i$, $i = \overline{0, N}$,

$$\langle u, v \rangle = \frac{1}{N+1} \sum_{i=0}^{N} u_i v_i, \tag{96}$$

   і за систему ортогональних функцій вибираємо наступну систему багаточленів: $\varphi_k(x) = p_k^{(N)}(x)$, $k = \overline{0, m}$ ($m \le N$) — систему *багаточленів Чебишова дискретного аргументу*, які задається формулою

$$p_k^{(N)}(x) = \sum_{j=0}^{k} \frac{(-1)^j C_k^j C_{k+j}^j}{N^{(j)}} \cdot x^{(j)} \tag{97}$$

   де $x^{(j)} = x(x-1)\dots(x-j+1)$ — факторіальний багаточлен; C_k^j — число сполук.

   Рекурентна формула:

$$\frac{(m+1)(N-m)}{2(2m+1)} \cdot p_{m+1}^{(N)} = \left(\frac{N}{2} - x\right) p_m^{(N)} - \frac{m(N+m+1)}{2(2m+1)} \cdot p_{m-1}^{(N)}, \tag{98}$$

   з початковими значеннями $p_0^{(N)} = 1$, $p_{-1}^{(N)} = 0$.

Наприклад $p_1^{(N)} = 1 - \frac{2x}{N}$, $p_2^{(N)} = 1 - \frac{6x}{N} + \frac{6x^2}{N(N-1)}$.

У випадку, якщо задані вузли $t_i = t_0 + ih$, $i = \overline{0, N}$, то робимо заміну $x_i = \frac{t_i - t_0}{h} = i$.

8.6. Середньоквадратичне наближення періодичних функцій

Нехай маємо періодичну функцію $f(x)$ неперервного аргументу, з періодом $T = 2\pi$, тобто $f(x + 2\pi) = f(x)$. В просторі $H_2 = L_2([0, 2\pi])$ визначений скалярний добуток:

$$\langle u, v\rangle = \int\limits_0^{2\pi} u(x)v(x)\,\mathrm{d}x \tag{99}$$

В якості системи лінійно-незалежних функцій $\{\varphi_i\}$ виберемо тригонометричну систему функцій:

$$\varphi_0(x) = 1; \quad \varphi_{2k-1}(x) = \cos(kx); \quad \varphi_{2k}(x) = \sin(kx), \tag{100}$$

для $k = 1, 2, \ldots$, яка є повною нормованою системою в $L_2([0, 2\pi])$.

Будемо шукати $\Phi(x)$ у вигляді тригонометричного багаточлена

$$\Phi_0(x) \equiv T_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{n}(a_k\cos(kx) + b_k\sin(kx)), \tag{101}$$

За теорією найкращого середньоквадратичного наближення коефіцієнти обчислюємо за формулами:

$$\begin{cases} a_0 = \langle f, \varphi_0\rangle = \dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int\limits_0^{2\pi} f(x)\,\mathrm{d}x, \\ a_k = \langle f, \varphi_{2k-1}\rangle = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int\limits_0^{2\pi} f(x)\cos(kx)\,\mathrm{d}x, \\ b_k = \langle f, \varphi_{2k}\rangle = \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int\limits_0^{2\pi} f(x)\sin(kx)\,\mathrm{d}x. \end{cases} \tag{102}$$

Відхилення:

$$\Delta^2(f) = |f|^2 - \left(2\pi a_0^2 + \sum_{k=1}^{n}\pi(a_k^2 + b_k^2)\right). \tag{103}$$

Тепер нехай функція $f(x)$ задана таблично: $f_i = f(x_i)$, $i = \overline{1, N}$. Тригонометрична система $\varphi_0(x)$, $\varphi_{2k-1}(x)$, $\varphi_{2k}(x)$ — ортогональна в $H = L_2(\omega)$ для $\omega = \{x_i = \pi i/N, i = \overline{1, n}\}$ в сенсі скалярного добутку

$$\langle u, v\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} u_i v_i, \quad u_i = u(x_i). \tag{104}$$

Тоді

$$\begin{cases} a_0 = \dfrac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} f_i, \\ a_k = \dfrac{2}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} f_i \cos(kx_i), \\ b_k = \dfrac{2}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} f_i \sin(kx_i), \end{cases} \tag{105}$$

Це *формули Бесселя*. В формулі (101): $\Phi(x) \equiv T_n(x)$ (тобто багаточлен той же), але коефіцієнти визначаємо за формулою (105).

> **Зауваження**: Як правило кількість даних значень $N \gg 2n+1$. Але якщо $N = 2n+1$, то $n = \frac{N-1}{2}$ і N — непарне. При цьому $T_{\frac{N-1}{2}}(x)$ — БНСКН і звідси
>
> $$\Delta^2(f) = \left|f(x) - T_{\frac{N-1}{2}}(x)\right|^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(f(x_i) - T_{\frac{N-1}{2}}(x)\right)^2 \to \inf_{a_k, b_k}. \tag{106}$$

Оскільки найменше значення відхилення $\Delta^2(f) = 0$, то тригонометричний багаточлен найкращого середньоквадратичного наближення співпадає з інтерполяційним тригонометричним багаточленом і

$$T_{\frac{N-1}{2}}(x) = f(x_i). \tag{107}$$

Для визначення коефіцієнтів a_i, b_i за формулою Бесселя (105) необхідна кількість операцій $Q = O(N^2)$. Існують алгоритми, які дозволяють обчислити за $Q = O(N \cdot \log(N))$ операцій. Це так званий алгоритм швидкого перетворення Фур’є. Якщо в (105) існує група доданків, які рівні між собою, тобто число N можна представити як $N = p_1 p_2$, то можна так вибрати сітку, що $Q = O(N \cdot \max(p_1, p_2))$. Якщо ж $N = n^m$, то $Q = O(Nm) = O(N \log_2(N))$.

8.7. Метод найменших квадратів (МНК)

Нехай в результаті вимірювань функції $f(x)$ маємо таблицю значень:

$$y_i \approx f(x_i), \quad i = \overline{1, N}, \quad x_i \in [a, b]. \tag{108}$$

За даними цієї таблиці треба побудувати аналітичну формулу $\Phi(x; a_0, a_1, \ldots, a_n)$ таку, що

$$\Phi(x_i; a_0, a_1, \ldots, a_n) \approx y_i, \quad i = \overline{1, N}. \tag{109}$$

Виконувати це інтерполюванням тобто задавати

$$\Phi(x_i; a_0, a_1, \ldots, a_n) = y_i, i = \overline{1, N} \tag{110}$$

нераціонально, бо $N \gg n$ і система перевизначена; її розв’язки як правило не існують. Вигляд функції $\Phi(x; a_0, a_1, \ldots, a_n)$ і число параметрів a_i у деяких випадках відомі. В інших випадках вони визначаються за графіком, побудованим за відомими значеннями $f(x_i)$ так, щоб залежність (109) була досить простою і добре відображала результати спостережень. Але такі міркування не дають змогу побудувати єдиний елемент та й ще найкращого наближення.

Тому визначають параметри $a_0, \ldots, a_n$ так, щоб у деякому розумінні всі рівняння системи (109) одночасно задовольнялись з найменшою похибкою, наприклад, щоб виконувалося:

$$I(a_0, \ldots, a_n) = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - \Phi(x_i; a_0, \ldots, a_n)\right)^2 \to \min. \tag{111}$$

Такий метод розв’язання системи (109) і називають методом найменших квадратів, оскільки мінімізується сума квадратів відхилення $\Phi(x; a_0, a_1, \ldots, a_n)$ від значень $f(x_i)$.

Для реалізації мінімуму необхідно та достатньо виконання умов:

$$\frac{\partial I}{\partial a_i} = 0, \quad i = \overline{0, n}, \tag{112}$$

Якщо $\Phi(x_i; a_0, \ldots, a_n)$ лінійно залежить від параметрів $a_0, \ldots, a_n$, тобто

$$\Phi(x; a_0, \ldots a_n) = \sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x), \tag{113}$$

то з (110) маємо СЛАР:

$$\sum_{k=0}^{n} a_k \varphi_k(x_i) = y_i, \quad i = \overline{1, N}, \tag{114}$$

яку називають *системою умовних рівнянь*. Позначивши

$$C = (\varphi_k(x_i))_{j=\overline{0,n}}^{i=\overline{1,N}}, \tag{115}$$
$$\vec{a} = (a_0, \ldots, a_n)^\intercal, \tag{116}$$
$$\vec{y} = (y_1, \ldots, y_N)^\intercal, \tag{117}$$

маємо матричний запис СЛАР (114):

$$C\vec{a} = \vec{y}. \tag{118}$$

Помноживши систему умовних рівнянь (118) зліва на транспоновану до C матрицю $C^\intercal$ отримаємо систему нормальних рівнянь

$$C^\intercal C\vec{a} = C^\intercal\vec{y}, \tag{119}$$

де $G = A = C^\intercal C, \dim G = n+1$, $G = (g_{ik})_{i,k=0}^{n}$, а самі

$$g_{ik} = \sum_{j=1}^{N} c_{ij}^\intercal c_{jk} = \sum_{j=1}^{N} c_{ji} c_{jk} = \sum_{j=1}^{N} \varphi_k(x_i)\varphi_j(x_i), \tag{120}$$

а

$$C^\intercal\vec{y} = \left(\sum_{i=1}^{N} c_{ik} y_i\right)_{k=0}^{n} \tag{121}$$

з якої власно і обчислюють невідомі коефіцієнти.

Покажемо, що МНК є методом знаходження ЕНСКН, якщо визначити скалярний добуток

$$\langle u, v\rangle = \sum_{i=1}^{N} u(x_i)v(x_i). \tag{122}$$

Поставимо задачу знаходження ЕНСКН:

$$\Delta(f, \Phi) = |f - \Phi|^2 = \langle f - \Phi, f - \Phi \rangle = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \Phi(x_i, \vec{a}))^2 \to \inf. \tag{123}$$

За теорією середньоквадратичного наближення для цього необхідно, щоб коефіцієнти $a_0, \ldots, a_n$ знаходилися з системи:

$$\sum_{j=0}^{n} a_k \langle \varphi_k, \varphi_j \rangle = \langle \varphi_k, f \rangle, \tag{124}$$

де $k = \overline{0, n}$, а це співпадає з (119).

Якщо відома інформація про обчислювальну похибку для значень $f(x_i)$: $|f(x_i) - y_i| < \varepsilon_i$, то вибирають такий скалярний добуток

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^{N} \rho_i u(x_i) v(x_i), \tag{125}$$

де $\rho_i = 1/\varepsilon_i^2$,.

Нехай тепер $\Phi(x; a_0, \ldots, a_n)$ — нелінійна функція параметрів $a_0, \ldots, a_n$, наприклад:

$$\Phi = a_0 e^{a_1 x} + a_2 e^{a_3 x} + \ldots, \tag{126}$$

або

$$\Phi = a_0 \cos(a_1 x) + a_2 \sin(a_3 x) + \ldots \tag{127}$$

Складемо функціонал:

$$S(a_0, \ldots, a_n) = \sum_{i=1}^{N} \rho_i (y_i - \Phi(x, \vec{a}))^2 \to \int_a. \tag{128}$$

Оскільки тепер $\Phi(x; a_0, \ldots, a_n)$ нелінійна, то застосуємо метод лінеаризації.

Нехай відомі наближені значення $\vec{a}^{(0)} = \left(a_0^{(0)}, a_1^{(0)}, \ldots, a_n^{(0)}\right)$. Розкладемо $\Phi(x, \vec{a})$ в околі $a^{(0)}$. Тоді отримаємо лінійне наближення до $\Phi(x, \vec{a})$:

$$\Phi(x, \vec{a}) \approx \Phi\left(x, \vec{a}^{(0)}\right) + \sum_{k=0}^{n} \frac{\partial \Phi}{\partial a_k} \left\langle x, \vec{a}^{(0)} \right\rangle \left(a_k - a_k^{(0)}\right). \tag{129}$$

Якщо ввести позначення

$$\vec{x} = \vec{a} - \vec{a}^{(0)}, \tag{130}$$

$$y_i^\star = y_i - \Phi\left(x, \vec{a}^{(0)}\right), \tag{131}$$

$$c_{i,k} = \Phi'_{a_k}\left(x_i, \vec{a}^{(0)}\right), \tag{132}$$

то отримаємо систему умовних рівнянь відносно поправок до $\vec{a}^{(0)}$:

$$C\vec{z} = \vec{y}^\star. \tag{133}$$

Замінимо її на систему нормальних рівнянь

$$C^\intercal C\vec{z} = c^\intercal \vec{y}^\star. \tag{134}$$

Знайшовши $\vec{z}$, обчислюємо наступне наближення:$\vec{a}^{(1)} = \vec{a}^{(0)} + \vec{z}$. Цей процес можна продовжувати: на кожній ітерації знаходимо $\vec{z}^{(m)}$, $m = 0, 1, \dots$ і уточнюємо наближення до $\vec{a}$: $\vec{a}^{(m)} = \vec{a}^{(m-1)} + \vec{z}^{(m-1)}$.

Умова припинення ітерацій

$$\left|\vec{z}^{(m)}\right| = \sqrt{\sum_{k=0}^{n}\left(z_k^{(m)}\right)^2} < \varepsilon. \tag{135}$$

Важливим є вибір початкового наближення $\vec{a}^{(0)}$. З системи умовних рівнянь (нелінійної) виберемо деякі $n+1$. Розв’язок цієї системи і дасть початкове наближення.

Для деяких простих нелінійних залежностей від невеликої кількості параметрів задачу можна ліанеризувати аналітично. Наприклад, розглянемо наближення даних алометричним законом

$$y_i \approx f(x_i), \quad \Phi(x, A, \alpha) = Ax^\alpha. \tag{136}$$

Система умовних рівнянь має вигляд:

$$\Phi(x_i) = Ax_i^\alpha = y_i, \quad i = \overline{1, N}. \tag{137}$$

Прологарифмуємо її:

$$\psi(x_i) = \ln(\Phi(x_i)) = \ln(A) + \alpha\ln(x_i) = \ln(y_i), \quad i = \overline{1, N}. \tag{138}$$

Введемо $a = \ln(A)$. Тепер функція $\psi(x, a, \alpha)$ лінійна. Система умовних рівнянь відносно параметрів a та α має вигляд:

$$C\vec{z} = \vec{b}, \tag{139}$$

де $\vec{z} = (a, \alpha)$, $\vec{b} = (\ln(y_i))_{i=1}^N$, а

$$C = \begin{pmatrix} 1 & \ln(x_i) \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \ln(x_n) \end{pmatrix} \tag{140}$$

Запишемо систему нормальних рівнянь для методу найменших квадратів:

$$G = C^\intercal C = \begin{pmatrix} N & \sum\limits_{i=1}^N \ln(x_i) \\ \sum\limits_{i=1}^N \ln(x_i) & \sum\limits_{i=1}^N (\ln(x_i))^2 \end{pmatrix}, \tag{141}$$

і

$$C^\intercal \vec{b} = \begin{pmatrix} \sum\limits_{i=1}^{N} \ln(y_i) \\ \sum\limits_{i=1}^{N} \ln(x_i)\ln(y_i) \end{pmatrix}. \tag{142}$$

Розв’язавши систему (141)–(142), знаходимо α, та $A = \exp(a)$.

8.8. Згладжуючі сплайни

Якщо значення в точках x_i неточно $\tilde{f}_i = f_i + \varepsilon_i$, то застосовують згладжування. Для цього треба побудувати нову таблицю із згладженими значеннями $\bar{f}_i$.

Наведемо деякі прості формули згладжування:

1. $m = 1$:
    - $\bar{f}_i = \frac{1}{3}\left(\tilde{f}_{i-1} + \tilde{f}_i + \tilde{f}_{i+1}\right)$, $N = 3$;
    - $\bar{f}_i = \frac{1}{5}\left(\tilde{f}_{i-2} + \ldots + \tilde{f}_{i+2}\right)$, $N = 5$;
    - $\bar{f}_i = \frac{1}{2k}\left(\tilde{f}_{i-k} + \ldots + \tilde{f}_{i+k}\right)$.
2. $m = 3$:
    - $\bar{f}_i = \frac{1}{3\cdot 5}\left(-3\tilde{f}_{i-2} + 12\tilde{f}_{i-1} + 17\tilde{f}_i + 12\tilde{f}_{i+1} - 3\tilde{f}_{i+2}\right)$, $N = 5$.

Їх отримуємо в такий спосіб: до $\tilde{f}_i$ застосовуємо апроксимацію, будуємо багаточлен НСКН

$$Q_m(x) = \sum_{k=0}^{m} c_k p_k^N(x), \tag{143}$$

де p_k^N — система багаточленів Чебишова дискретного аргументу. Беремо значення $\bar{f}_i = Q_m(x_i)$, які приводять до наведених вище формул.

Але ці формули не дають гарантію, що в результаті ми отримаємо функцію, яка задовольняє умові $|\bar{f}_i - f_i| < \varepsilon_i$.

Згладжуючі сплайни дають можливість побудувати наближення з заданою точністю. Нагадаємо деякі відомості про сплайни. Явний вигляд кубічного сплайна:

$$\begin{aligned} s(x) = m_{i-1} \cdot \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + m_i \cdot \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + \\ + \left(f_{i-1} - \frac{m_{i-1}h_i^2}{6}\right) \cdot \frac{x_i - x}{h_i} + \\ + \left(f_i - \frac{m_i h_i^2}{6}\right) \cdot \frac{x - x_{i-1}}{h_i}, \end{aligned} \tag{144}$$

для $x \in [x_{i-1}, x_i]$, де $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Тут $s(x_i) = f_i$, $i = \overline{0, n}$, а $m_i = s''(x_i)$ задовольняють систему:

$$\begin{cases} \dfrac{h_i m_{i-1}}{6} + \dfrac{(h_i + h_{i+1} m_i)}{3} + \dfrac{h_{i+1} m_{i+1}}{6} = \\ \quad = \dfrac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \dfrac{f_i - f_{i-1}}{h_i}, \quad i = \overline{1, n-1} \\ m_0 = m_n = 0. \end{cases} \tag{145}$$

В матричній формі ця система має вигляд

$$A\vec{m} = H\vec{f}. \tag{146}$$

Тут

$$\vec{m} = (m_1, \ldots, m_{n-1})^\intercal, \quad \vec{f} = (f_0, \ldots, f_n)^\intercal, \tag{147}$$

а матриці

$$A = \begin{pmatrix} \frac{h_1+h_2}{3} & \frac{h_2}{6} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{h_2}{6} & \frac{h_2+h_3}{3} & \frac{h_3}{6} & \cdots & 0 & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{h_{n-2}}{6} & \frac{h_{n-2}+h_{n-1}}{3} & \frac{h_{n-1}}{6} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{h_{n-1}}{6} & \frac{h_{n-1}+h_n}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{148}$$

і

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{h_1} & -\left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2}\right) & \frac{1}{h_2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{h_2} & -\left(\frac{1}{h_2} + \frac{1}{h_3}\right) & \frac{1}{h_3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{h_{n-1}} & -\left(\frac{1}{h_{n-1}} + \frac{1}{h_n}\right) & \frac{1}{h_n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{149}$$

Кубічний інтерполяційний сплайн мінімізує функціонал:

$$\Phi(u) = \int_a^n (u''(x))^2 \,\mathrm{d}x : \tag{150}$$

$$\Phi(s) = \int_{u \in U} \Phi(u), \tag{151}$$

де

$$U = \left\{ u(x) : u(x_i) = f_i, i = \overline{0,n}, u(x) \in W_2^2([a,b]) \right\}. \tag{152}$$

Введемо функціонал

$$\Phi_1(u) = \Phi(u) + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - u(x_i) \right)^2. \tag{153}$$

Означення: Згладжуючим сплайном назвемо функцію g, яка є розв'язком задачі:

$$\Phi_1(g) = \inf_{u \in W_2^2([a,b])} \Phi_1(u). \tag{154}$$

Перший доданок в $\Phi_1(u)$ дає мінімум «згину», другий — середньоквадратичне наближення до значень $\tilde{f}_i$. Покажемо, що g є сплайном.

Нехай існує функція $g(x)$. Побудуємо кубічний сплайн такий, що $s(x_i) = g(x_i)$. З того, що $g(x)$ є розв'язком задачі (154), маємо $\Phi_1(s) \geq \Phi_1(g)$, а тоді

$$\int_a^b (s''(x))^2 \,\mathrm{d}x + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - s(x_i) \right)^2 \geq \int_a^b (g''(x))^2 \,\mathrm{d}x + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - g(x_i) \right)^2 \tag{155}$$

Звідси $\Phi(s) \geq \Phi(g)$.

Оскільки кубічний інтерполяційний сплайн $s(x)$ мінімізує функціонал (150) , то $\Phi(s) \leq \Phi(g)$. Тому $\Phi(s) = \Phi(g)$. Звідки $s = g$.

Позначимо

$$\mu_i = g(x_i), \quad i = \overline{0,n}, \tag{156}$$

Якби значення μ_i були б відомі, то для побудови g достатньо було б розв'язати систему

$$A\vec{m} = H\vec{\mu} \tag{157}$$

Підставимо (144) та (156) в $\Phi_1(g)$:

$$\Phi_1(g) = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(m_{i-1} \cdot \frac{x_i - x}{h_i} + m_i \cdot \frac{x - x_{i-1}}{h_i} \right)^2 \mathrm{d}x + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - \mu_i \right)^2 = \inf \Phi_1(u). \tag{158}$$

Після перетворень маємо:

$$\begin{aligned} \Phi_1(g) &= \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(m_{i-1} \cdot \frac{x_i - x}{h_i} + m_i \cdot \frac{x - x_{i-1}}{h_i} \right)^2 \mathrm{d}x + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - \mu_i \right)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^{n} m_i \left(\frac{h_i m_{i-1}}{6} + \frac{(h_i + h_{i+1}) m_i}{3} + \frac{h_{i+1} m_{i+1}}{6} \right) \mathrm{d}x + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - \mu_i \right)^2 = \\ &= \langle A\vec{m}, \vec{m} \rangle + \sum_{i=0}^{n} \rho_i \left(\tilde{f}_i - \mu_i \right)^2. \end{aligned} \tag{159}$$

Задача 28: Показати, що для кубічного згладжуючого сплайну g мають місце формули вище.

Оскільки $\Phi_1(g)$ представляє собою квадратичну функція відносно $\vec{m} = (m_0, \ldots, m_N)$, то необхідною і достатньою умовою мінімуму є

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial \mu_1} = 0, \quad j = \overline{0, n}. \tag{160}$$

Знаходимо:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi_1}{\partial \mu_j} &= \frac{\partial}{\partial \mu_j} \langle A\vec{m}, \vec{m} \rangle + 2\rho_j \left(\mu_j - \tilde{f}_j \right) = \\
&= 2 \left\langle \frac{\partial}{\partial \mu_j} (A\vec{m}), \vec{m} \right\rangle + 2\rho_j \left(\mu_j - \tilde{f}_j \right) = \\
&= 2 \left\langle \frac{\partial}{\partial m_j} (H\vec{\mu}), \vec{m} \right\rangle + 2\rho_j \left(\mu_j - \tilde{f}_j \right) = \\
&= 2 \left\langle \frac{\partial \vec{m}}{\partial m_j}, H^\intercal \vec{m} \right\rangle + 2\rho_j \left(\mu_j - \tilde{f}_j \right) = \\
&= 2 \left(H^\intercal \vec{m} \right)_j + 2\rho_j \left(\mu_j - \tilde{f}_j \right) = 0.
\end{aligned} \tag{161}$$

Отже, з умови мінімізації функціоналу

$$\Phi_1(u) + \int_a^b (u''(x))^2 \,\mathrm{d}x + \sum_{i=0}^n \rho_i \left(\tilde{f}_i - u(x_i) \right)^2. \tag{162}$$

ми отримали таку систему рівнянь :

$$2 \left(H^\intercal \vec{m} \right)_i + 2\rho_i(\mu_i - f_i) = 0, \tag{163}$$

де, як і раніше і μ_i — це невідомі значення згладжуючого сплайну:

$$\mu_i = s(x_i), \quad m_i = s''(x_i). \tag{164}$$

Можна записати (163) у матричному вигляді, якщо ввести матрицю $R = \operatorname{diag} \rho_i$:

$$H^\intercal \vec{m} + R\vec{\mu} = R\vec{f}. \tag{165}$$

Тут $\vec{f}$ — вектор заданих значень функції.

Таким чином маємо для $\vec{m}$ та $\vec{\mu}$ дві системи (157) і (165). Виключаючи $\vec{\mu}$ отримаємо таку систему лінійних рівнянь

$$\left(A + HR^{-1}H^\intercal \right) \vec{m} = H\vec{f}. \tag{166}$$

Розв'язавши її, можемо обчислити

$$\mu = \vec{f} - R^{-1}H^\intercal \vec{m} \tag{167}$$

і підставити знайдені значення μ_i та m_i в формулу для сплайну

$$\begin{aligned} g(x) = m_{i-1} \cdot \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + m_i \cdot \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + \\ + \left(\mu_{i-1} - \frac{m_{i-1} \cdot h_i^2}{6}\right) \cdot \frac{x_i - x}{h_i} + \\ + \left(\mu_i - \frac{m_i \cdot h_i^2}{6}\right) \cdot \frac{x - x_{i-1}}{h_i}, \end{aligned} \tag{168}$$

Тепер звернемо увагу на матрицю системи (165) :

$$A' = A + HR^{-1}H^\intercal. \tag{169}$$

Оскільки матриці H, $H^\intercal$ — трьохдіагональні, то матриця $HR^{-1}H^\intercal$ буде п’ятидіагональною, а тому п’ятидіагональною буде й A'.

Розв’язують зазвичай системи з такими матрицями наступним чином:

1. або методом квадратних коренів; для матриць із такою структурою цей метод має складність $Q = O(nm) = O(2n) = O(n)$, оскільки в нашому випадку півширина діагональної смуги $m = 2$.

2. або методом п’ятидіагональної прогонки [Самарский А. А., Николаев С. Н., «Методы решения сеточных уравнений»], що також має складність $O(n)$.

> **Зауваження**: ρ_i вибирають так: $\rho_i = 1/\varepsilon_i^2$.