3.3. Метод наименьших квадратов

При наличии значительного числа экспериментальных точек сглаживание с помощью многочленной интерполяции не имеет смысла не только из-за неустойчивости (локальных выбросов) интерполирующей функции, но и из-за сильного колебания заданных точек. Способы локальной интерполяции, например, с помощью сплайнов, также не дают приемлемых результатов.

В этом случае дискретно заданную функцию сглаживают в среднем, чаще всего многочленом, коэффициенты которого находят с помощью минимизации отклонения сглаживающей функции от заданных точек в *некотором среднеинтегральном смысле* (рис 3.6).

Одним из таких методов является *метод наименьших квадратов* (МНК). Суть его заключается в следующем.

Пусть дана экспериментальная таблица (3.1).

x_i	x_0	x_1	...	x_n
y_i	y_0	y_1	...	y_n

Поставим ей в соответствие функцию вида

$$F(x, a_0, a_1, ..., a_m) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + ... + a_m\varphi_m(x), \quad (3.17)$$

где $\varphi_j(x)$, $j = \overline{1, m}$ - базисные функции, a_j - коэффициенты, подлежащие определению. В частности, если в качестве базисных функций использовать степенные $\varphi_j(x) = x^j$, задача сводится к поиску полинома степени m ($m << n$), приближающего исходную таблицу: $F(x, a_0, a_1, ..., a_m) = a_0 + a_1 x + ... + a_m x^m$.

С целью определения коэффициентов a_j будем искать такую функцию $F(x, a_0, a_1, ..., a_m)$, отклонение значений которой от заданных таблицей (3.1) значений y_i, $i = \overline{0, n}$ минимально в некотором среднеинтегральном смысле.

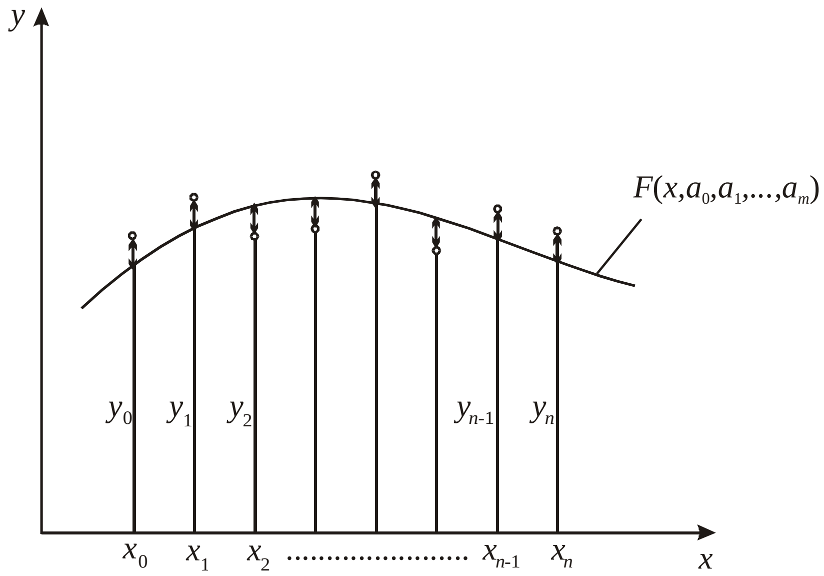

Рис 3.6. К методу наименьших квадратов

В точечном методе наименьших квадратов строится функционал

$$S(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{i=0}^{n} [F(x_i, a_0, a_1, \ldots, a_m) - y_i]^2 \,, \qquad (3.18)$$

который геометрически представляет собой сумму квадратов отклонений значений y_i от значений аппроксимирующей функции (3.17) в точках x_i, $i = \overline{0, n}$ (на рис.3.6 показаны двусторонними стрелками).

Необходимым условием минимума функции многих переменных является равенство нулю ее частных производных первого порядка по независимым переменным. В функционале (3.18) такими независимыми переменными являются коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$ разложения (3.17), которые до их определения являются не постоянными, а варьируемыми переменными.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial a_0} = 2\sum\limits_{i=0}^{n} \left[F(x_i, a_0, a_1, \ldots, a_m) - y_i\right]\varphi_0(x_i) = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_1} = 2\sum\limits_{i=0}^{n} \left[F(x_i, a_0, a_1, \ldots, a_m) - y_i\right]\varphi_1(x_i) = 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_m} = 2\sum\limits_{i=0}^{n} \left[F(x_i, a_0, a_1, \ldots, a_m) - y_i\right]\varphi_m(x_i) = 0. \end{cases} \qquad (3.19)$$

Система (3.19) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений порядка $m+1$ относительно неизвестных $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Ее матрица является симметрической и положительно определенной. Решения $a_0, a_1, \ldots, a_m$ доставляют *минимум* функционалу (3.18).

Введем в рассмотрение следующие объекты:

- матрицу Φ размерности $(n+1)\times(m+1)$, содержащую значения базисных функций в узлах таблицы $\varphi_j(x_i)$, $\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \ldots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \ldots & \varphi_m(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_0(x_n) & \ldots & \varphi_0(x_n) \end{pmatrix}$,

- вектор наблюдения y размерности $n+1$, содержащий табличные значения y_i, $y = (y_0, y_1, \ldots, y_n)^T$,

- искомый вектор коэффициентов a размерности $m+1$, $a = (a_0, a_1, \ldots, a_m)^T$.

Тогда СЛАУ (3.19) может быть представлена в виде

$$\Lambda a = \beta, \tag{3.20}$$

где $\Lambda = \Phi^T\Phi$, $\beta = \Phi^T y$.

Решение данной СЛАУ может быть осуществлено любым из известных методов (см. раздел 1). Подставляя найденные в результате решения СЛАУ значения $a_0, a_1, \ldots, a_m$ в (3.18), получаем непрерывную функцию $F(x)$, наилучшим образом приближающую дискретную функцию (3.1) в среднеквадратическом смысле.

Качество такого приближения может быть оценено, например, величиной среднеквадратичного отклонения $\delta = \left(\dfrac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} (F(x_i) - y_i)^2 \right)^{1/2}$.

В интегральном методе наименьших квадратов рассматривается интегрируемая с квадратом функция $y = f(x)$, $x \in [a,b]$, которая трудна для исследования (например, трудно вычислить производные).

Будем аппроксимировать эту функцию некоторой функцией $F(x)$ с минимизацией заштрихованной площади (см. рис. 3.7), например, с помощью многочлена

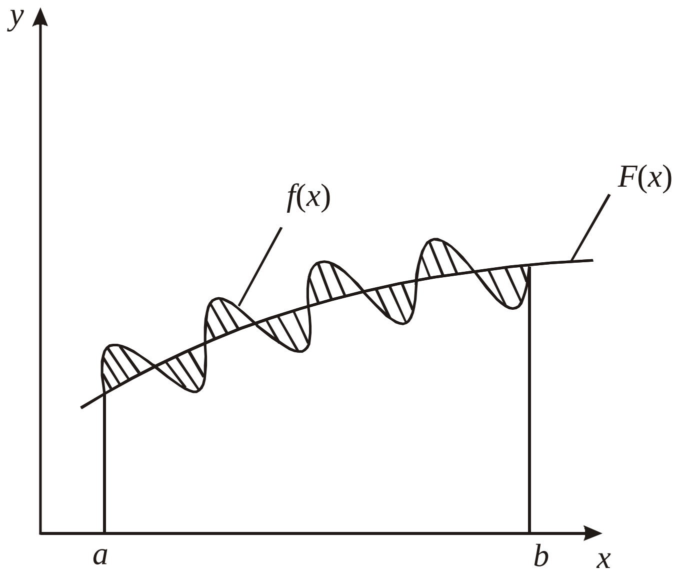

Рис. 3.7. К интегральному методу наименьших квадратов

$$F(x, a_0, a_1, \ldots, a_m) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \ldots + a_m\varphi_m(x),$$

где $a_0, a_1, \ldots, a_m$ находят из условия минимизации следующего квадратичного функционала:

$$S(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \int_a^b [F(x, a_0, a_1, \ldots, a_m) - f(x)]^2\,dx.$$

Необходимые условия минимума данного функционала имеют вид:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial a_0} = 2\displaystyle\int_a^b [F(x, a_0, \ldots, a_m) - f(x)]\varphi_0(x)dx = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_1} = 2\displaystyle\int_a^b [F(x, a_0, \ldots, a_m) - f(x)]\varphi_1(x)dx = 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_m} = 2\displaystyle\int_a^b [F(x, a_0, \ldots, a_m) - f(x)]\varphi_m(x)dx = 0, \end{cases}$$

Таким образом, задача сводится к решению следующей СЛАУ:

$$\Lambda a = \beta, \qquad (3.21)$$

где Λ - матрица размерности $m+1 \times m+1$, элементами которой являются скалярные произведения базисных функций (скалярное произведение интегрируемых на отрезке $[a,b]$ функций $p(x)$ и $q(x)$ определяется как

$(p,q)=\int\limits_a^b p(x)q(x)dx$),

$$\Lambda=\begin{pmatrix} (\varphi_0(x),\varphi_0(x)) & (\varphi_1(x),\varphi_0(x)) & \dots & (\varphi_m(x),\varphi_0(x)) \\ (\varphi_0(x),\varphi_1(x)) & (\varphi_1(x),\varphi_1(x)) & \dots & (\varphi_m(x),\varphi_1(x)) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (\varphi_0(x),\varphi_m(x)) & (\varphi_1(x),\varphi_m(x)) & \dots & (\varphi_m(x),\varphi_m(x)) \end{pmatrix},$$

β - вектор размерности $m+1$ с элементами $\beta_j=\int\limits_a^b f(x)\varphi_j(x)dx$, $\overline{j=1,m}$,

a - вектор искомых коэффициентов размерности $m+1$, $a=(a_0,a_1,\dots,a_m)^T$.

В нормальной СЛАУ (3.21) относительно коэффициентов $a_0,a_1,\dots,a_m$ правые части могут не интегрироваться в силу сложности исследуемой функции $f(x)$. В этом случае правые части вычисляются с помощью методов численного интегрирования, которые рассматриваются ниже.

Пример 3.4. Точечным методом наименьших квадратов аппроксимировать заданную таблицу линейным и квадратичным полиномами.

x_i	2	3	4	5
y_i	7	5	8	7

Решение.

В случае линейного аппроксимационного полинома имеем $F(x,a_0,a_1)=a_0+a_1x$, т.е. $\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$.

Матрица Φ принимает вид $\Phi=\begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) \\ \varphi_0(x_2) & \varphi_0(x_2) \\ \varphi_0(x_3) & \varphi_0(x_3) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \\ 1 & 5 \end{pmatrix}$.

Вектор наблюдений y выглядит следующим образом $y=\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 7 \\ 5 \\ 8 \\ 7 \end{pmatrix}$.

Составим систему уравнений (3.31) для рассматриваемого случая:

$$\Lambda=\Phi^T\Phi=\begin{pmatrix}1&1&1&1\\2&3&4&5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2\\1&3\\1&4\\1&5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4&14\\14&54\end{pmatrix},\ \beta=\Phi^T y=\begin{pmatrix}1&1&1&1\\2&3&4&5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}7\\5\\8\\7\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}27\\96\end{pmatrix}.$$

Решая систему $\Lambda a=\beta$, получаем вектор искомых коэффициентов $a=\begin{pmatrix}5{,}7\\0{,}3\end{pmatrix}$.

Таким образом, искомый полином $F(x)=5{,}7+0{,}3x$.

Оценим погрешность такой аппроксимации: $\delta=\left(\frac{1}{4}\sum_{i=0}^{3}(F(x_i)-y_i)^2\right)^{1/2}=1{,}0368$.

В случае квадратичного аппроксимационного полинома имеем $F(x,a_0,a_1,a_2)=a_0+a_1x+a_2x^2$, т.е. $\varphi_0(x)=1$, $\varphi_1(x)=x$, $\varphi_2(x)=x^2$.

Матрица Φ принимает вид $\Phi=\begin{pmatrix}\varphi_0(x_0)&\varphi_1(x_0)&\varphi_2(x_0)\\\varphi_0(x_1)&\varphi_1(x_1)&\varphi_2(x_1)\\\varphi_0(x_2)&\varphi_0(x_2)&\varphi_2(x_2)\\\varphi_0(x_3)&\varphi_0(x_3)&\varphi_2(x_3)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&x_0&x_0^2\\1&x_1&x_1^2\\1&x_2&x_2^2\\1&x_3&x_3^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&4\\1&3&9\\1&4&16\\1&5&25\end{pmatrix}$.

Вектор наблюдений y остается без изменений $y=\begin{pmatrix}y_0\\y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}7\\5\\8\\7\end{pmatrix}$.

Система уравнений (3.20) для рассматриваемого случая выглядит следующим образом:

$$\Lambda=\Phi^T\Phi=\begin{pmatrix}1&1&1&1\\2&3&4&5\\4&9&16&25\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&4\\1&3&9\\1&4&16\\1&5&25\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4&14&54\\14&54&224\\54&224&978\end{pmatrix},$$

$$\beta=\Phi^T y=\begin{pmatrix}1&1&1&1\\2&3&4&5\\4&9&16&25\end{pmatrix}\begin{pmatrix}7\\5\\8\\7\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}27\\96\\376\end{pmatrix}.$$

Решая систему $\Lambda a=\beta$, получаем вектор искомых коэффициентов $a=\begin{pmatrix}8{,}45\\-1{,}45\\0.25\end{pmatrix}$.

Таким образом, искомый полином $F(x)=8{,}45-1{,}45x+0{,}25x^2$.

Оценим погрешность такой аппроксимации:

$$\delta = \left(\frac{1}{4} \sum_{i=0}^{3} (F(x_i) - y_i)^2 \right)^{1/2} = 1{,}0062 .$$