ЛЕКЦИЯ 3.1 АППРОКСИМАЦИЯ.

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

1. Задача аппроксимации табличной функции

Как уже указывалось в п. 1 лекции 2.1, кроме интерполяции существует второй подход к решению задачи аналитического приближения табличных функций — аппроксимация. Чем вызвана его необходимость? Применение интерполяции не всегда оправдано, это особенно касается таблиц с большим числом узлов. Объясняется это следующими причинами. Во-первых, интерполирующие функции для них очень сложны; например, интерполяционные многочлены имеют высокие степени или вычисляются с большими погрешностями. Во-вторых, при наличии ошибок табличных данных, к примеру, при обработке результатов измерений, статистических испытаний, они переходят в интерполирующую функцию, которая по определению должна точно отслеживать табличные значения. Таким образом, погрешности исходных данных повторяются в решении, а желательно, чтобы они сглаживались. Именно это и происходит при аппроксимации. В общих словах её идею можно сформулировать так. Строится функция, которая приблизительно повторяет табличные данные, отслеживая общую тенденцию изменения неизвестной аппроксимируемой функции.

Теперь поставим задачу более точно. Функция $y = f(x)$ задана таблицей 1.

Табл. 1. Функция $y = f(x)$

i	x_i	y_i
1	x_1	y_1
2	x_2	y_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
n	x_n	y_n

Требуется построить её аналитическое приближение. Для этого по данным таблицы находится функция $y = g(x)$, *аппроксимирующая* исходную**,** т.е. удовлетворяющая условиям

$$g(x_i) \approx y_i, \tag{1}$$

$i = 1, \dots, n$. Точки x_i называются *узлами аппроксимации*. Пусть определён класс $\mathfrak{G}$ функций, в котором ищется g - *класс аппроксимирующих функций*.

В такой постановке задача некорректна. И дело не в том, что она может иметь бесконечное множество решений. Условия (1) не являются математически точными. Как понимать приближённое равенство? Какой уровень погрешности следует считать приемлемым для условий (1)? Эти вопросы и будут рассмотрены в следующем пункте.

2. Метод наименьших квадратов

Аппроксимирующая функция $g \in \mathfrak{G}$ должна быть близка к значениям f во всех узлах, поэтому логично строить её из условия минимума некоторой величины, характеризующей совокупную погрешность приближённых равенств (1). Выберем в качестве таковой *среднеквадратическое отклонение* g от f в узлах $x_1, \dots, x_n$:

$$\delta_2(g) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(y_i - g(\,x_i)\big)^2} \tag{2}$$

(квадратный корень добавлен для того, чтобы размерность $\delta_2(g)$ была та же, что у f). Тогда задача аппроксимации формулируется математически совершенно точно: по таблице 1 построить функцию $g \in \mathfrak{G}$, для которой величина (2) минимальна. Это и есть задача *метода наименьших квадратов* (МНК). Далее приведено её решение в классе *обобщённых многочленов*.

Обобщённым многочленом степени m на системе $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ *базисных функций* (эта система по определению линейно независима) называется

$$\Phi_m(x) = a_0\varphi_0(x) + \dots + a_m\varphi_m(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j\varphi_j(x). \tag{3}$$

Итак, пусть $\mathfrak{G}$ — множество обобщённых многочленов (3). Тогда

$$g(x) = \Phi_m(x) \;\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\ \delta_2(g) = \delta_2(\Phi_m) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(y_i - g(x_i)\big)^2} =$$

$$= \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\big(y_i - \Phi_m(x_i)\big)^2} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)\right)^2}\,. \qquad (4)$$

Понятно, что Φ_m полностью определяется своими коэффициентами $a_0, a_1, \dots, a_m$, поэтому математически рассматриваемая проблема представляет собой задачу безусловной минимизации функции δ_2, зависящей от $m+1$ аргумента $a_0, a_1, \dots, a_m$:

$$\delta_2(\Phi_m) = \delta_2(a_0; \dots;\ a_m) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)\right)^2} \ \longrightarrow \min_{a_0,\dots,a_m}.$$

Перейдём от неё к эквивалентной задаче минимизации функции

$$S(a_0; \dots;\ a_m) = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)\right)^2$$

(то, что задачи эквивалентны, следует из монотонного возрастания квадратного корня).

Метод решения известен из математического анализа: надо взять частные производные, приравнять их к нулям и получить систему уравнений для нахождения критических точек функции S. Проделаем эту операцию:

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)\right)\varphi_k(x_i) = 0 \ \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow\ \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)\right)\varphi_k(x_i) = 0 \ \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow\ \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) = \sum_{i=1}^{n} y_i \varphi_k(x_i) \ \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow\ \sum_{j=0}^{m} a_j \sum_{i=1}^{n} \varphi_j(x_i)\varphi_k(x_i) = \sum_{i=1}^{n} y_i \varphi_k(x_i), \qquad (5)$$

$k = 0, \dots, m$. Получена система $m+1$ уравнения для нахождения $m+1$ неизвестного a_0, $a_1, \dots, a_m$. В развёрнутом виде она записывается так:

$$
\begin{cases}
a_0\sum_{i=1}^{n}\left(\varphi_0(x_i)\right)^2 + a_1\sum_{i=1}^{n}\varphi_1(x_i)\varphi_0(x_i) + a_2\sum_{i=1}^{n}\varphi_2(x_i)\varphi_0(x_i) + \cdots + a_m\sum_{i=1}^{n}\varphi_m(x_i)\varphi_0(x_i) = \\
\qquad = \sum_{i=1}^{n} y_i\varphi_0(x_i)\,, \\
a_0\sum_{i=1}^{n}\varphi_0(x_i)\varphi_1(x_i) + a_1\sum_{i=1}^{n}\left(\varphi_1(x_i)\right)^2 + a_2\sum_{i=1}^{n}\varphi_2(x_i)\varphi_1(x_i) + \cdots + a_m\sum_{i=1}^{n}\varphi_m(x_i)\varphi_1(x_i) = \\
\qquad = \sum_{i=1}^{n} y_i\,\varphi_1(x_i), \\
\qquad \vdots \\
a_0\sum_{i=1}^{n}\varphi_0(x_i)\varphi_m(x_i) + a_1\sum_{i=1}^{n}\varphi_1(x_i)\varphi_m(x_i) + a_2\sum_{i=1}^{n}\varphi_2(x_i)\varphi_m(x_i) + \cdots + a_m\sum_{i=1}^{n}\left(\varphi_m(x_i)\right)^2 = \\
\qquad = \sum_{i=1}^{n} y_i\,\varphi_m(x_i).
\end{cases}
$$

Очевидно, что она линейная и её можно записать в матричном виде:

$$\Gamma\overline{a} = \overline{b}, \tag{6}$$

где $\Gamma = P^T P$,

$$P = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_m(x_1) \\ \varphi_0(x_2) & \varphi_1(x_2) & \cdots & \varphi_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_m(x_n) \end{pmatrix},$$

$$\overline{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}, \overline{b} = P^T\overline{y}, \overline{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

(P^T — транспонированная матрица P); Γ называется *матрицей Грама*, а (6) — *нормальной системой метода наименьших квадратов*. Если матрица Грама невырожденная, то система (6) имеет единственное решение. Можно показать, что это всегда имеет место при попарно несовпадающих узлах. Предположим, что (6) имеет единственное решение. Нужно проверить, будет ли оно точкой минимума функции S. В общем случае это делается довольно сложно. Примем без доказательства тот факт, что если система (6) имеет единственное решение, то оно является точкой минимума S. По найденным коэффициентам a_0, $a_1, \dots,$ a_m далее строится многочлен (3), который называется *многочленом наилучшего среднеквадратического отклонения*. Минимальное отклонение считается по формуле (4). Таким образом, задача полностью решена.

3. Полиномиальная аппроксимация методом наименьших квадратов

Рассмотрим важный частный случай решённой в п. 3 задачи. Пусть система базисных функций $\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_m\}$ — степенная, т.е. $\varphi_j(x) = x^j$, $j = 0, 1, \dots, m$. Тогда обобщённый многочлен превращается в обычный полином $P_m(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m$, и мы приходим к задаче *полиномиальной аппроксимации*:

$$\delta_2(P_m) = \delta_2(a_0; \dots; a_m) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x^j\right)^2} \longrightarrow \min_{a_0, \dots, a_m}.$$

Нормальная система (5) для неё имеет вид

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \sum_{i=1}^{n} x_i^{j+k} = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i^k, \tag{7}$$

$k = 0, \dots, m$, или

$$\begin{cases} a_0 n + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + a_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \dots + a_m \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^m = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i, \\ a_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + \dots + a_m \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{m+1} = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i x_i, \\ \vdots \\ a_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{m+1} + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{m+2} + a_2 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{m+3} + \dots + a_m \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{2m} = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i x_i^m. \end{cases}$$

Если среди узлов нет совпадающих, то система (7) имеет единственное решение, по которому строится полином наилучшего среднеквадратического отклонения P_m.

Замечание. Если $m = n - 1$ (степень аппроксимирующего многочлена на единицу меньше числа узлов), то построенный по решению (7) полином совпадает с интерполяционным многочленом степени $n - 1$, для которого отклонение $\delta_2(P_m)$ равно нулю. Таким образом, задача интерполяции является частным случаем аппроксимации.

В заключение запишем систему (7) для двух частных случаев. Если $m = 1$, то получаем задачу *линейной аппроксимации*. Нормальная система для нахождения коэффициентов $P_1(x) = a_0 + a_1 x$ имеет вид

$$\begin{cases} a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i\,, \\ a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i\, x_i. \end{cases}$$

Наилучшее среднеквадратическое отклонение вычисляется по формуле

$$\delta_2(P_1) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i)^2}\,.$$

При $m = 2$ приходим к задаче *квадратичной аппроксимации*. Нормальная система для нахождения коэффициентов наилучшего многочлена второй степени $P_2(x) = a_0 + $ $+a_1 x + a_2 x^2$:

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

Наилучшее среднеквадратическое отклонение находится по формуле

$$\delta_2(P_2) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2}\,.$$

Геометрически линейная и квадратичная аппроксимация представляют собой наилучшее сглаживание (приближение) набора точек на плоскости прямой и параболой соответственно.

Пример. Для заданной функции $y = \sin x$ построены линейное и квадратичное приближения по 15 точкам отрезка $[1;\ 3{,}8]$, расположенных с шагом $h = 0{,}2$. Аппроксимирующие полиномы $P_1(x) = 1{,}856 - 0{,}586x$, $P_2(x) = 0{,}414 + 0{,}795x - 0{,}288x^2$. Наилучшие среднеквадратические отклонения для прямой и параболы равны $\delta_2(P_1) = 0{,}198$, $\delta_2(P_2) = 0{,}055$.

На графике (рис. 1) синяя линия – это синус, красные точки – парабола P_2, оранжевый штрих – прямая P_1. Необходимые вычисления можно проводить в среде Mathcad. Фрагмент программы приведен ниже (рис. 2). Здесь представлена матрица A системы линейных уравнений (матрица Грама), вектор правой части b и вычисленные коэффициенты прямой (вектор a).

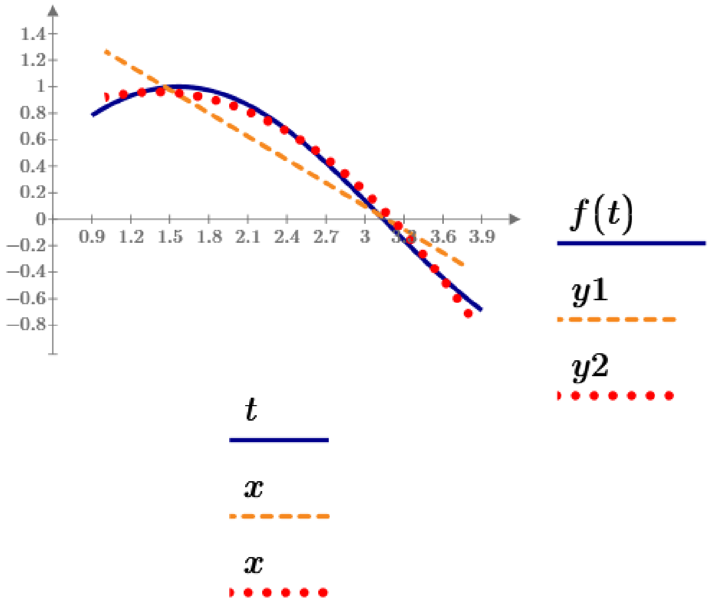

Рис. 1. Графики функции и её приближений в примере на с. 6

$$A := \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} {x_i}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 & 36 \\ 36 & 97.6 \end{bmatrix}$$

$$b := \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6.749 \\ 9.638 \end{bmatrix} \qquad a = \begin{bmatrix} 1.856 \\ -0.586 \end{bmatrix}$$

Рис. 2. Фрагмент программы к примеру на с. 6