

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Вычислительная математика

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

Санкт-Петербург, 2023



Аппроксимация функций

Постановка задачи

Задачи исследования в большинстве случаев требуют *установить определенный вид функциональной зависимости* между характеристиками изучаемого явления.

Аппроксимацией (приближением) функции называется нахождение такой функции (аппроксимирующей функции), которая была бы близка к заданной.

Задача аппроксимации функции состоит в том, чтобы *данную функцию $f(x)$ приближенно заменить (аппроксимировать) некоторой функцией $\varphi(x)$, значения которой в заданной области мало отличались от опытных данных :*

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

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

Аппроксимация функций. Постановка задачи

Аппроксимация может потребоваться в следующих случаях:

1. Например, из эксперимента, **известны значения функции** $f(x_1) = y_1, f(x_2) = y_2 \dots f(x_n) = y_n$, т.е. функция $y = f(x)$ задана таблично. Требуется найти значение $f(x)$ при таком значении аргумента x^* , которого нет среди узлов x_1, x_2, \dots, x_n , но сделать это по каким-либо причинам затруднительно (экспериментальная установка, на которой выполнены измерения, уже разобрана или дорогостоящий эксперимент)

В таком случае можно найти аппроксимирующую функцию $\varphi(x)$ и если она «близка» к $f(x)$ на множестве узлов $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, то и в нужной точке x^* , вероятно, $f(x^*) \approx \varphi(x^*)$

2. **Функция $f(x)$ задана аналитически**, т.е. формулой, но эта формула слишком сложна для регулярного использования. И в этом случае выгодно аппроксимировать $f(x)$ более простой функцией $\varphi(x)$ и все расчеты выполнять с ней.

Какие функции наиболее «просты» и в силу этого удобны в качестве аппроксимирующих?

Чаще всего используются **полномы** (многочлены), которые легко складывать, умножать, делить, дифференцировать и интегрировать:

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$$

Аппроксимация функций

Если приближение строится на дискретном наборе точек $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, аппроксимацию называют **точечной или дискретной**.

Наиболее часто встречающим видом точечной аппроксимации является интерполяция и среднеквадратичное приближение.

В том случае, когда аппроксимация проводится на непрерывном множестве точек (отрезке), аппроксимация называется **непрерывной или интегральной**. Примером такой аппроксимации может служить разложение функции в ряд Тейлора, то есть замена некоторой функции степенным многочленом.

Аппроксимирующую функцию $\varphi(x)$ строят таким образом, чтобы отклонения $\varphi(x)$ от $f(x)$ в заданной области было наименьшим. Понятие “малого отклонения” зависит от того, каким способом оценивается близость двух функций, поэтому оно будет уточняться в дальнейшем при рассмотрении конкретных методов аппроксимации.



Аппроксимация функций

Постановка задачи

В зависимости от специфики задачи можно выделить два способа определения аналитической функции:

1. с помощью построения интерполяционного многочлена n -степени, который проходит **непосредственно через все точки** заданного массива данных: $\varphi(x_i) = y_i$. В данном случае аппроксимирующая функция представляется в виде:

*интерполяционного многочлена Лагранжа
или интерполяционного многочлена Ньютона (Гаусса,
Бесселя, Стирлинга)*

2. с помощью построения аппроксимирующего многочлена n -степени, который проходит **в ближайшей близости от точек** из заданного массива данных: $\varphi(x_i) \approx y_i$. В данном случае аппроксимирующая функция определяется по **методу наименьших квадратов**.

Аппроксимация функций

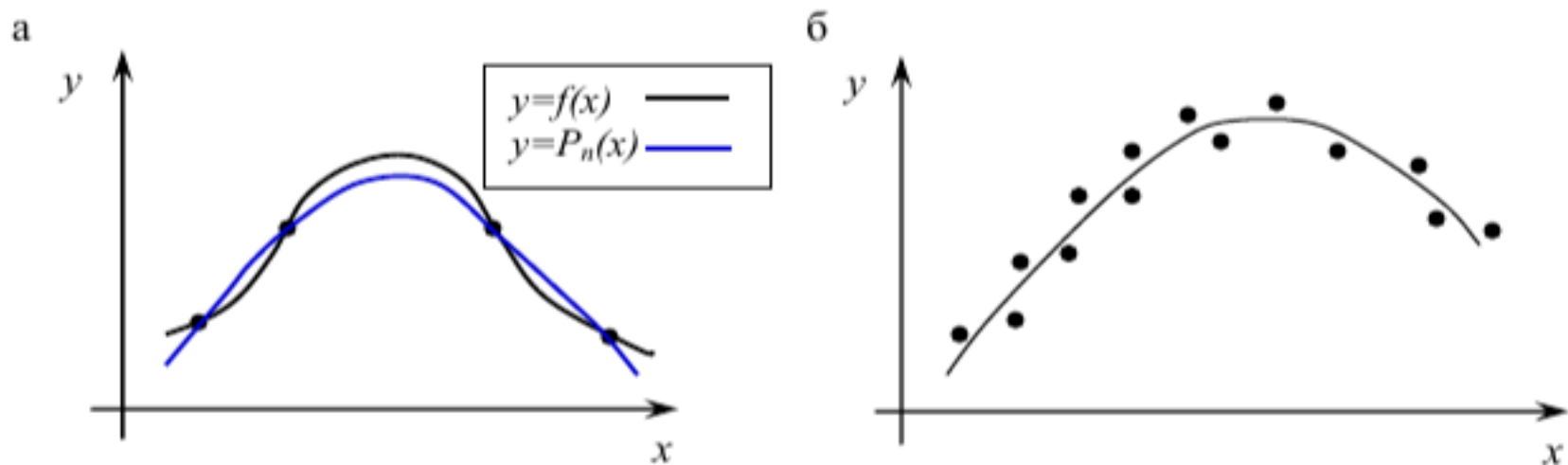


Рис. 1. Графическая интерпретация принципа построения интерполяционного полинома (а) и аппроксимирующей линии (б) для точно заданной функции

Основная задача **интерполяции** — нахождение значения функции в тех точках внутри данного интервала, где она не задана, т.е. для промежуточных аргументов.

Основная задача **аппроксимации** — построение эмпирической формулы, для которой $f(x_i) \approx \varphi(x_i)$.



АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИИ

Построение эмпирической формулы состоит из 2 этапов:

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.

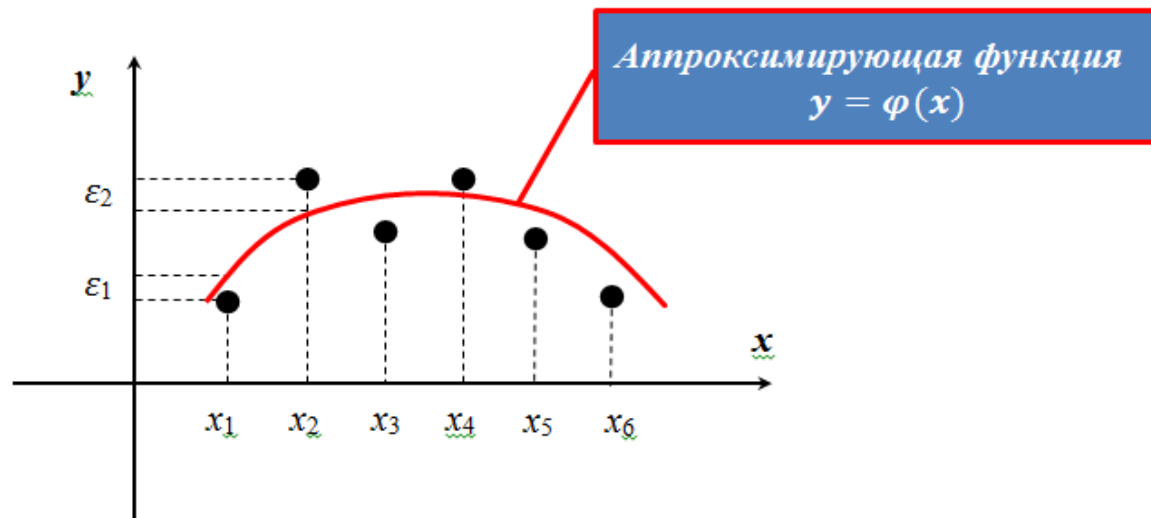
МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

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, \dots, 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, \dots, a_m сводятся к некоторой минимизации отклонений ε_i .

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

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

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

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

... ..

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



МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

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

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i + \dots + a_{m-1} \sum_{i=1}^n x_i^{m-1} + a_m \sum_{i=1}^n x_i^m = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + \dots + a_{m-1} \sum_{i=1}^n x_i^m + a_m \sum_{i=1}^n x_i^{m+1} = \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ \dots \dots \dots \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^{m+1} + \dots + a_{m-1} \sum_{i=1}^n x_i^{2m-1} + a_m \sum_{i=1}^n x_i^{2m} = \sum_{i=1}^n x_i^m y_i \end{array} \right.$$

в матричном виде:

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



Линейная аппроксимация

Рассмотрим в качестве эмпирической формулы линейную функцию:

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

Сумма квадратов отклонений запишется следующим образом:

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

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

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

Упростим полученную систему:

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



Линейная аппроксимация

Введем обозначения:

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

Получим систему уравнений для нахождения параметров a и b :

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

из которой находим:

$$\Delta = SXX \cdot n - SX \cdot SX$$

$$\Delta_1 = SXY \cdot n - SX \cdot SY$$

$$\Delta_2 = SXX \cdot SY - SX \cdot SXY$$

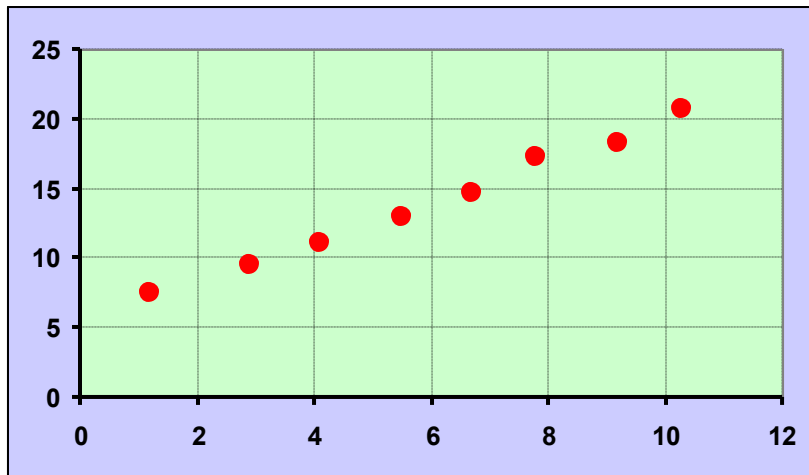
$$a = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad b = \frac{\Delta_2}{\Delta}$$

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 $P_1(x) = ax + b$



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 $P_1(x) = 1,4543x + 5,2911$

№ 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
$P_1(x)=ax+b$	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 $P_1(x) = 1,4543x + 5,2911$, т.к. $P_1(x_i) \approx Y_i$, $\varepsilon_i \rightarrow \min$

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 позволяет определить наличие или отсутствие **линейной** связи между двумя переменными:

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

Средние значения x и y :

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

$$-1 \leq r \leq 1$$

Например, при помощи критерия корреляции Пирсона можно ответить на вопрос о наличии связи между температурой тела и содержанием лейкоцитов в крови при острых респираторных инфекциях, между ростом и весом пациента, между содержанием в питьевой воде фтора и заболеваемостью населения кариесом.



Коэффициент корреляции

При $r = \pm 1$ - строгая линейная функциональная зависимость в зависимости от знака коэффициента a ($f = ax + b$)

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

$r < 0,3$ - связь слабая

$r = 0,3 \div 0,5$ - связь умеренная

$r = 0,7 \div 0,7$ - связь заметная

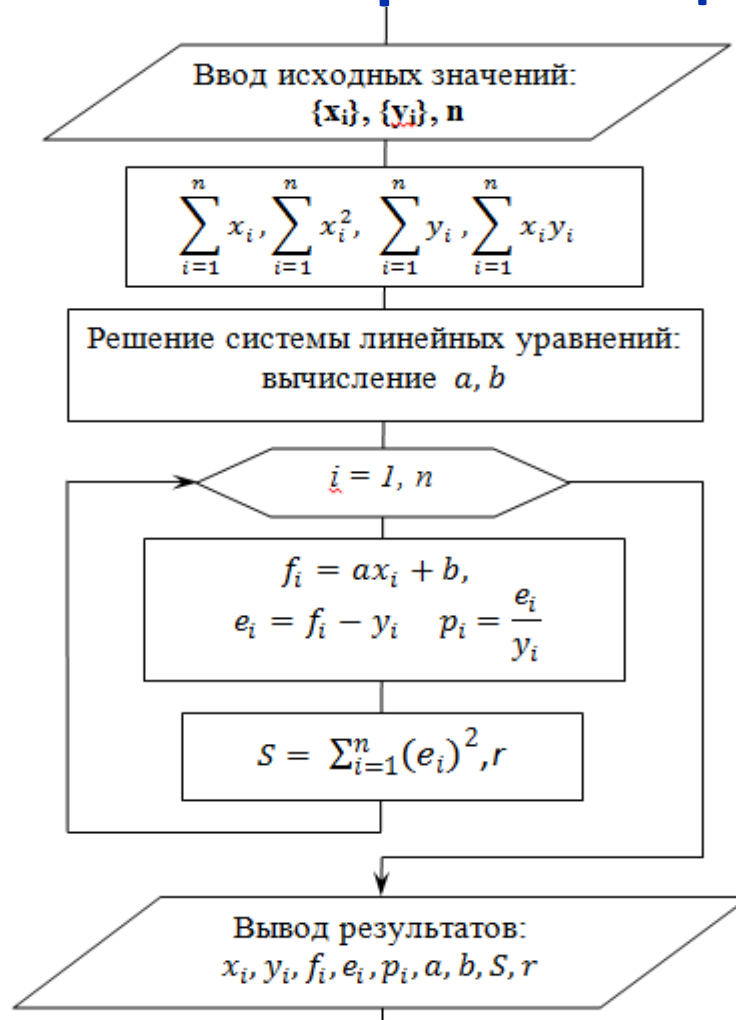
$r = 0,7 \div 0,9$ - связь высокая

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

Вычислим коэффициент корреляции для примера 1:

$r = 0,9909$, 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:

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

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^n (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^n (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i) x_i = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_2} = 2 \sum_{i=1}^n (a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i) x_i^2 = 0 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ a_0 \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \end{array} \right.$$

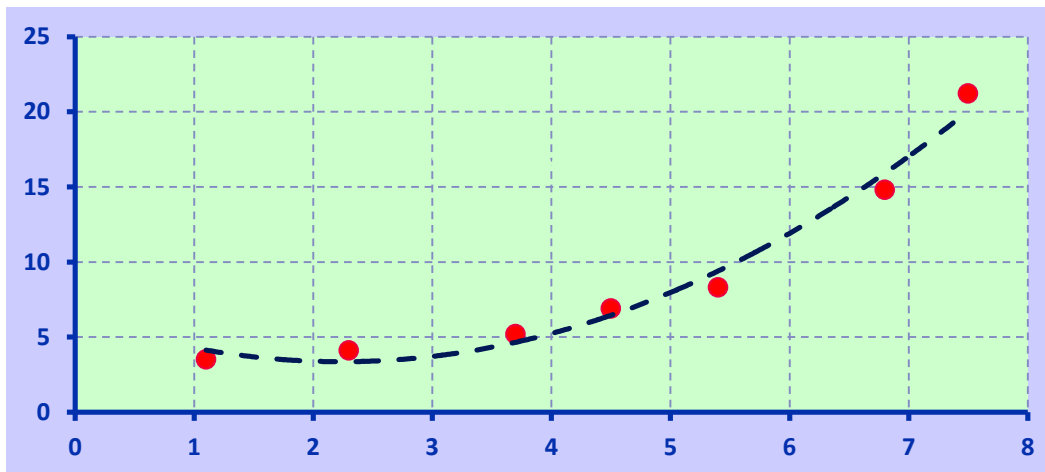


КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

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 $P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$



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:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n x_i &= 31,3 & \sum_{i=1}^n x_i^2 &= 172,09 & \sum_{i=1}^n x_i^3 &= 1049,05 & \sum_{i=1}^n x_i^4 &= 6779,43 \\ \sum_{i=1}^n y_i &= 64 & \sum_{i=1}^n x_i y_i &= 368,03 & \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i &= 2355,72 \end{aligned}$$

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

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

Проверим правильность выбора модели. Для этого вычислим значения аппроксимирующей функции $P_2(x) = 0,602x_i^2 - 2,687x_i + 6,365$

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
$P_2(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$	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.

$$P_2(x_i) \approx Y_i, \varepsilon_i \rightarrow \min$$

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



Среднеквадратичное отклонение

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

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

Наилучшим считается уравнение, для которого значение δ минимально.



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:

$$\varphi(x) = ax^b$$

Для применения метода наименьших квадратов степенная функция *линеаризуется*:

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

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

Получаем линейную зависимость: $Y = A + BX$.

После определения коэффициентов A и B вернемся к принятым ранее обозначениям:

$$a = e^A \quad b = B$$



Аппроксимация с помощью других функций

Аппроксимирующая функция задана экспоненциальной функцией вида:

$$\varphi(x) = ae^{bx}$$

Для применения метода наименьших квадратов экспоненциальная функция линеаризуется:

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

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

Получаем линейную зависимость: $Y = A + Bx$.

После определения коэффициентов A и B вернемся к принятым ранее обозначениям:

$$a = e^A \quad b = B$$

Аппроксимирующая функция задана логарифмической функцией вида:

$$\varphi(x) = a \ln(x) + b$$

Аппроксимация с помощью других функций

Вид функции	Табличный X	Табличный Y
Степенная	$\ln X$	$\ln Y$
Экспоненциальная	X	$\ln Y$
Логарифмическая	$\ln X$	Y



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

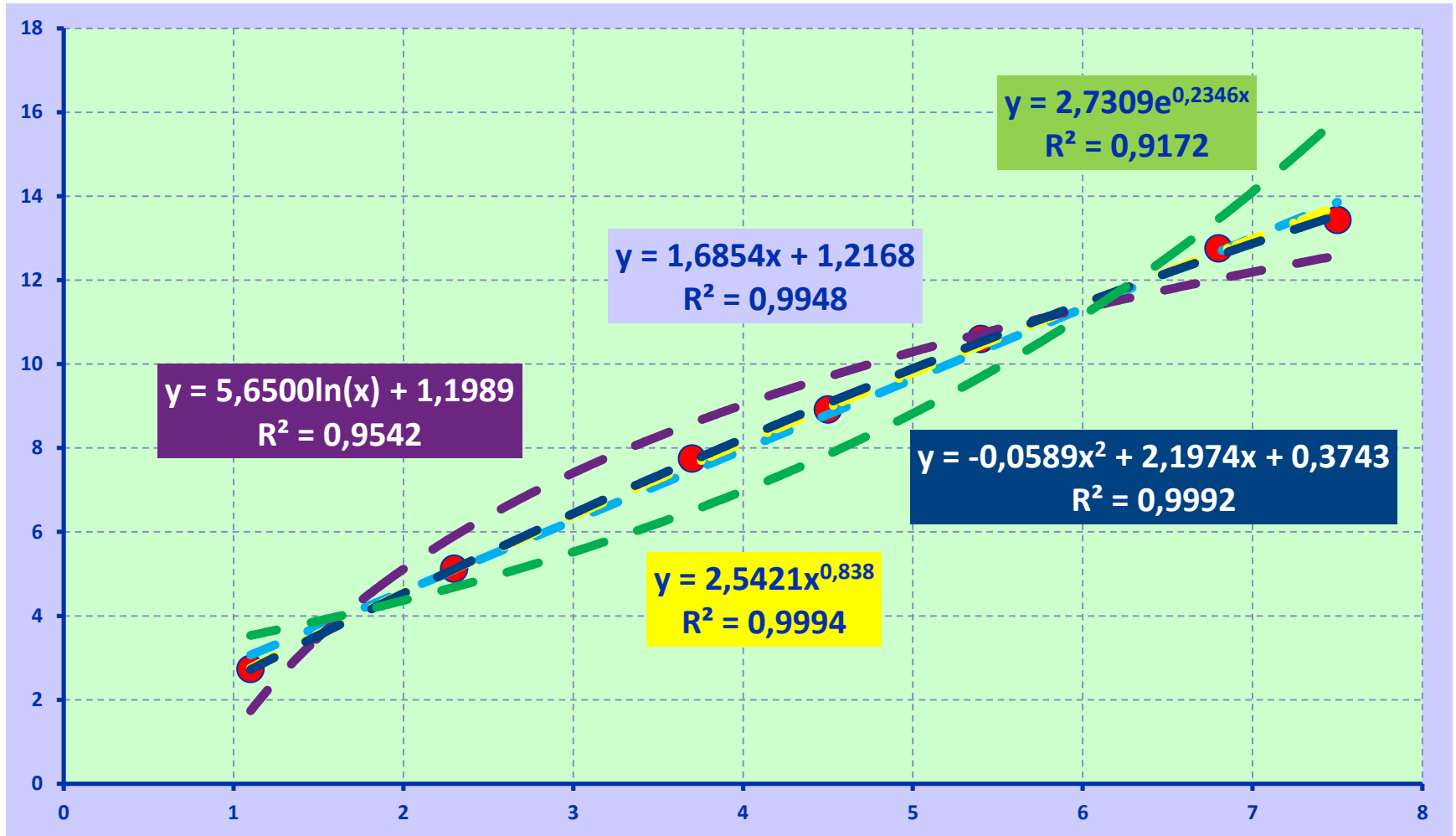
Используя метод наименьших квадратов, вычислим коэффициенты различных аппроксимирующих функций, проанализируем меру отклонения S и среднеквадратичное отклонение δ . Результаты вычислений сведем в таблицу:

Выбор аппроксимирующей функции

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



Выбор аппроксимирующей функции





Выбор аппроксимирующей функции

Достоверность аппроксимации:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \varphi_i)^2}{\sum_{i=1}^n \varphi_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n \varphi_i)^2}$$

Чем ближе значение R^2 к единице ($R^2 \rightarrow 1$), тем надежнее функция φ аппроксимирует исследуемый процесс.



Выбор аппроксимирующей функции

Выбор наилучшей аппроксимирующей функции определяется значением ***среднеквадратического отклонения***. В связи с этим следует:

1. по методу наименьших квадратов определить несколько аппроксимирующих функций,
2. по критерию наименьшего среднеквадратического отклонения выбрать наиболее подходящую функцию.