Тема 1 АПРОКСИМАЦІЯ ФУНКЦІЙ ОДНІЄЇ ЗМІННОЇ МЕТОДОМ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ. ВИБІР ЕМПІРИЧНОЇ ФУНКЦІЇ

Мета вивчення теми:

– засвоїти поняття апроксимації та інтерполяції чисельних даних;
– засвоїти метод точкового квадратичного апроксимування функцій однієї змінної многочленами, лінійною комбінацією лінійно незалежних функцій;
– знати теоретичні засади вибору вигляду емпіричної формули з двома параметрами;
– вміти застосовувати засоби MS Excel для вибору емпіричних функцій однієї змінної;
– вміти реалізовувати алгоритм методу точкової квадратичної апроксимації функції однієї змінної засобами табличного редактора (зокрема, MS Excel) та за допомогою системи комп’ютерної алгебри (зокрема, Maple).

Основні поняття теми:

– інтерполяція чисельних даних на площині;
– апроксимація чисельних даних на площині;
– квадратичне відхилення методу точкової квадратичної апроксимації функції однієї змінної.

Теоретичні відомості

§1 Апроксимація та інтерполяція чисельних даних

Пропонується студентові самостійно пригадати означення апроксимації та інтерполяції чисельних даних. В допомогу на рис. 1.1 (а) наведено числові дані на площині. На рис. 1.1 (б) і (в) зображено їх апроксимація та інтерполяція деякими функцією однієї змінної.

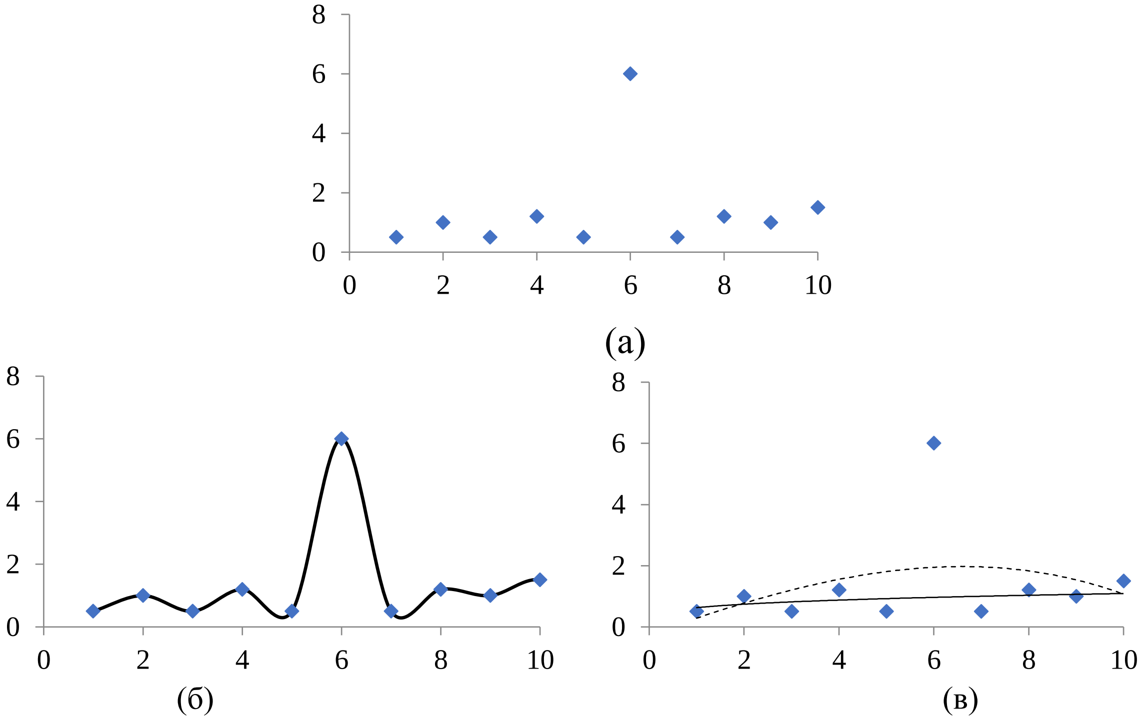

Рис. 1.1

Пропонується дати відповіді на питання:

1. Чим відрізняється інтерполяція від апроксимації?
2. Який саме рисунок серед (рис. 1.1 (а)-(в)) відповідає інтерполяції? апроксимації:
3. Які методи інтерполяції Вам відомі? апроксимації?
4. У яких випадках інтерполяція є невиправданою?
5. На рис. 1.2 показано, до чого призводить фільтрація даних, яку застосовують після процесу апроксимації.

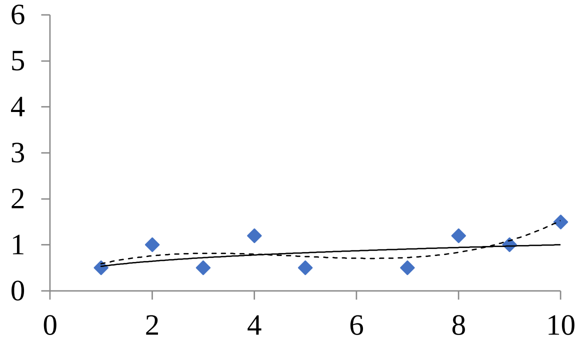

Рис. 1.2

§2 Точкове квадратичне апроксимування функцій однієї змінної. Вибір емпіричної функції.

2.1 Постановка задачі.

Розглянемо сукупність точок на площині $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{n}$, де $y_k = f(x_k),\ k=\overline{1,n}$. Тут функція однієї змінної $f(x)$ визначає емпіричні дані.

Потрібно знайти емпіричну функцію

$$y = \tilde{f}\left(x, a_1, a_2, ..., a_m\right), \tag{1.1}$$

що апроксимує задану множину точок і визначається невідомими параметрами $a_1, a_2, ..., a_m$, при цьому їх кількість $m \ll n$. (Якщо $m = n$, то функція (1.1) є інтерполюючою)

Відхилення в кожній точці визначається як

$$\varepsilon_k = \left|\tilde{f}\left(x_k, a_1, a_2, ..., a_m\right) - y_k\right| = \left|\tilde{f}\left(x_k, a_1, a_2, ..., a_m\right) - f(x_k)\right|, \quad k = \overline{1,n}. \tag{1.2}$$

Загальне відхилення може характеризуватися однією із формул

$$\varepsilon = \max_{k=\overline{1,n}} \varepsilon_k\,, \quad \varepsilon = \sum_{k=1}^{n} \varepsilon_k\,, \quad \varepsilon = \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon_k\right)^2. \tag{1.3}$$

Метою є мінімізація загального відхилення.

Формула $\varepsilon = \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon_k\right)^2$ задає *квадратичне відхилення*. А метод, що дозволяє знайти апроксимуючу функцію (1.1), яка відповідає мінімальному значенню квадратичного відхилення, називають *методом найменших квадратів (МНК)*.

2.2 Точкове квадратичне апроксимування функції однієї змінної многочленом

Розглянемо [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**] сукупність точок на площині $\left\{\left(x_k, y_k\right)\right\}_{k=0}^{n}$, де $y_k = f(x_k), k = \overline{0,n}$. За апроксимуючу функцію оберемо многочлен

$$y = P\left(x, a_0, a_1, ..., a_m\right) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_i x^i + ... + a_m x^m . \tag{1.1a}$$

У загальному випадку, МНК потребує виконання обмеження $m \le n$. Однак на практиці, $m \ll n$. Квадратичне відхилення визначається формулою

$$\begin{aligned} Q\left(a_0, a_1, ..., a_m\right) &= \sum_{k=0}^{n}\left(P\left(x_k, a_0, a_1, ..., a_m\right) - y_k\right)^2 = \\ &= \sum_{k=0}^{n}\left(a_0 + a_1 x_k + a_2\left(x_k\right)^2 + ... + a_i\left(x_k\right)^i + ... + a_m\left(x_k\right)^m - y_k\right)^2 . \end{aligned} \tag{1.4}$$

Потрібно знайти мінімум зазначеної функції.

Знайдемо критичну точку функції багатьох змінних Q:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial Q}{\partial a_0} = \sum_{k=0}^{n}\left(a_0 + a_1 x_k + a_2\left(x_k\right)^2 + ... + a_i\left(x_k\right)^i + ... + a_m\left(x_k\right)^m - y_k\right)\cdot 1 = 0; \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial Q}{\partial a_1} = \sum_{k=0}^{n}\left(a_0 + a_1 x_k + a_2\left(x_k\right)^2 + ... + a_i\left(x_k\right)^i + ... + a_m\left(x_k\right)^m - y_k\right)\cdot x_k = 0; \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial Q}{\partial a_2} = \sum_{k=0}^{n}\left(a_0 + a_1 x_k + a_2\left(x_k\right)^2 + ... + a_i\left(x_k\right)^i + ... + a_m\left(x_k\right)^m - y_k\right)\cdot\left(x_k\right)^2 = 0; \\ \qquad ... \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial Q}{\partial a_i} = \sum_{k=0}^{n}\left(a_0 + a_1 x_k + a_2\left(x_k\right)^2 + ... + a_i\left(x_k\right)^i + ... + a_m\left(x_k\right)^m - y_k\right)\cdot\left(x_k\right)^i = 0; \\ \qquad ... \\ \dfrac{1}{2}\dfrac{\partial Q}{\partial a_m} = \sum_{k=0}^{n}\left(a_0 + a_1 x_k + a_2\left(x_k\right)^2 + ... + a_i\left(x_k\right)^i + ... + a_m\left(x_k\right)^m - y_k\right)\cdot\left(x_k\right)^m = 0. \end{cases} \tag{1.5}$$

Отриману систему можна переписати у вигляді

$$\begin{cases} a_0\cdot(n+1)+a_1\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}x_k+a_2\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^2+\ldots+a_i\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^i+\ldots+a_m\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^m=\sum\limits_{k=0}^{n}y_k; \\ a_0\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}x_k+a_1\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^2+a_2\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^3+\ldots+a_i\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{i+1}+\ldots+a_m\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{m+1}=\sum\limits_{k=0}^{n}x_ky_k; \\ a_0\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^2+a_1\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^3+a_2\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^4+\ldots+a_i\cdot\sum\limits_{k=1}^{n}\left(x_k\right)^{i+2}+\ldots+a_m\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{m+2}=\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^2y_k; \\ \ldots \\ a_0\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^i+a_1\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{1+i}+a_2\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{2+i}+\ldots+a_i\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{2i}+\ldots+a_m\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{m+i}=\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^iy_k; \\ \ldots \\ a_0\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^m+a_1\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{1+m}+a_2\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{2+m}+\ldots+a_i\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{i+m}+\ldots+a_m\cdot\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^{2m}=\sum\limits_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^my_k. \end{cases} \quad (1.6)$$

Уведемо позначення

$$S_r=\sum_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^r,\ r=\overline{0,2m},$$

$$T_p=\sum_{k=0}^{n}\left(x_k\right)^p y_k,\ p=\overline{0,m},$$

тоді система (1.6) набуде вигляду

$$\begin{cases} a_0\cdot S_0+a_1\cdot S_1+a_2\cdot S_2+\ldots+a_i\cdot S_i+\ldots+a_m\cdot S_m=T_0; \\ a_0\cdot S_1+a_1\cdot S_2+a_2\cdot S_3+\ldots+a_i\cdot S_{i+1}+\ldots+a_m\cdot S_{m+1}=T_1; \\ a_0\cdot S_2+a_1\cdot S_3+a_2\cdot S_4+\ldots+a_i\cdot S_{i+2}+\ldots+a_m\cdot S_{m+2}=T_2; \\ \ldots \\ a_0\cdot S_i+a_1\cdot S_{1+i}+a_2\cdot S_{2+i}+\ldots+a_i\cdot S_{2i}+\ldots+a_m\cdot S_{m+i}=T_i; \\ \ldots \\ a_0\cdot S_m+a_1\cdot S_{1+m}+a_2\cdot S_{2+m}+\ldots+a_i\cdot S_{i+m}+\ldots+a_m\cdot S_{2m}=T_m. \end{cases} \quad (1.7)$$

<u>І спосіб.</u> Систему (1.7) можна подати в матричній формі

$$Z\cdot A=B, \quad (1.8)$$

$$Z=\begin{pmatrix} S_0 & S_1 & S_2 & \ldots & S_m \\ S_1 & S_2 & S_3 & \ldots & S_{m+1} \\ S_2 & S_3 & S_4 & \ldots & S_{m+2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ S_m & S_{m+1} & S_{m+2} & \ldots & S_{2m} \end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \ldots \\ a_m \end{pmatrix},\ B=\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ \ldots \\ T_m \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

За допомогою ІІ способу нижче буде доведено, що СЛАР (1.7) має єдиний розв’язок, якщо всі абсциси заданих точок нерівні. Оскільки функція Q додатно визначена, то критична точка може бути лише точкою локального мінімуму даної функції. Відповідну точку мінімуму можна знайти за формулою

$$A=Z^{-1}B. \quad (1.10)$$

Якщо $m=n$, то апроксимуюча функція (1.1а) є інтерполяційним многочленом Лагранжа для заданої системи точок.

Для використання засобів табличного редактора (зокрема, MS Excel) зручно застосувати таблицю 1.1.

Таблиця 1.1

x^0	x^1	x^2	$\dots$	x^{2m}	y	xy	x^2y	$\dots$	$x^m y$
1	x_0	$(x_0)^2$	$\dots$	$(x_0)^{2m}$	y_0	x_0y_0	$(x_0)^2 y_0$	$\dots$	$(x_0)^m y_0$
1	x_1	$(x_1)^2$	$\dots$	$(x_1)^{2m}$	y_1	x_1y_1	$(x_1)^2 y_1$	$\dots$	$(x_1)^m y_1$
1	x_2	$(x_2)^2$	$\dots$	$(x_2)^{2m}$	y_2	x_2y_2	$(x_2)^2 y_2$	$\dots$	$(x_2)^m y_2$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
1	x_n	$(x_n)^2$		$(x_n)^{2m}$	y_n	x_ny_n	$(x_n)^2 y_n$		$(x_n)^2 y_n$
S_0	S_1	S_2		S_m	T_0	T_1	T_2		T_m

<u>II спосіб [</u><u>Ошибка! Источник ссылки не найден.</u>**<u>].</u>** Подамо матричну форму системи (1.7) в інший спосіб. Для цього розглянемо матрицю M, вектор Y та матричні добутки

$$M=\begin{pmatrix} 1 & x_0 & (x_0)^2 & \dots & (x_0)^m \\ 1 & x_1 & (x_1)^2 & & (x_1)^m \\ 1 & x_2 & (x_2)^2 & & (x_2)^m \\ \dots & \dots & \dots & & \\ 1 & x_n & (x_n)^2 & & (x_n)^m \end{pmatrix}, \quad Y=\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{pmatrix}, \tag{1.11}$$

$$M^tM=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ (x_0)^2 & (x_1)^2 & (x_2)^2 & \dots & (x_n)^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ (x_0)^m & (x_1)^m & (x_2)^m & \dots & (x_n)^m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & x_0 & (x_0)^2 & \dots & (x_0)^m \\ 1 & x_1 & (x_1)^2 & \dots & (x_1)^m \\ 1 & x_2 & (x_2)^2 & \dots & (x_2)^m \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & (x_n)^2 & \dots & (x_n)^m \end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix} n+1 & \sum_{k=0}^{n} x_k & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^2 & \dots & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^m \\ \sum_{k=0}^{n} x_k & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^2 & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^3 & \dots & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^{m+1} \\ \sum_{k=0}^{n}(x_k)^2 & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^3 & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^4 & \dots & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^{m+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{k=0}^{n}(x_k)^m & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^{m+1} & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^{m+2} & \dots & \sum_{k=0}^{n}(x_k)^{2m} \end{pmatrix}=Z.$$

$$M^tY = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ (x_0)^2 & (x_1)^2 & (x_2)^2 & \dots & (x_n)^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ (x_0)^m & (x_1)^m & (x_2)^m & \dots & (x_n)^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum\limits_{k=0}^{n} y_k \\ \sum\limits_{k=0}^{n} x_k y_k \\ \sum\limits_{k=0}^{n} (x_k)^2 y_k \\ \dots \\ \sum\limits_{k=0}^{n} (x_k)^m y_k \end{pmatrix} = B.$$

Отже, система (1.7) може бути поданою у матричному вигляді в наступний спосіб:

$$M^tMA = M^tY, \tag{1.12}$$

а її розв’язок –

$$A = \left(M^tM\right)^{-1} M^tY. \tag{1.13}$$

Якщо абсциси заданих точок нерівні, то визначник добутку матриць, утворених із стовпців (рядків) матриці Вандермонда M^tM, не дорівнює нулю, що і доводить існування єдиного розв’язку СЛАР (1.7).

Вибір способу подання системи (1.7) у матричній формі (1.8) або (1.12), а її розв’язку у вигляді (1.9) або (1.13) залежить від Ваших власних пріоритетів.

2.3 Точкове квадратичне апроксимування функції однієї змінної лінійною комбінацією лінійно незалежних функцій

Розглянемо [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**] сукупність точок на площині $\left\{(x_k, y_k)\right\}_{k=0}^{n}$, де $y_k = f(x_k), k = \overline{0,n}$. За апроксимуючу функцію оберемо лінійну комбінацію лінійно незалежних функцій $\left\{\varphi_i(x_k)\right\}_{i=0}^{m}$

$$y = P(x, a_0, a_1, ..., a_m) = a_0\varphi_0(x_k) + a_1\varphi_1(x) + a_2\varphi_2(x) + ... + a_m\varphi_{ь}(x).$$

У загальному випадку $m \le n$. На практиці, $m \ll n$. Квадратичне відхилення визначається формулою

$$\begin{gathered} Q(a_0, a_1, ..., a_m) = \sum_{k=0}^{n} \left(P(x_k, a_0, a_1, ..., a_m) - y_k\right)^2 = \\ = \sum_{k=0}^{n} \left(a_0\varphi_0(x_k) + a_1\varphi_1(x_k) + a_2\varphi_2(x_k) + ... + a_m\varphi_m(x_k) - y_k\right)^2. \end{gathered} \tag{1.14}$$

Потрібно знайти мінімум зазначеної функції.

Введемо позначення

$$S_{r,p} = \sum_{k=0}^{n} \varphi_r(x_k)\varphi_p(x_k),\ T_p = \sum_{k=0}^{n} \varphi_p(x_k) y_k,\ r, p = \overline{0,m},$$

тоді точку мінімуму функції Q можна знайти за формулою

$$A = W^{-1}B, \tag{1.15}$$

де $W = \left(S_{r,p}\right)_{r,p=0}^{m}$, $B = \left(T_0\ T_1\ T_2\ ...T_m\right)^t$.

2.4 Двопараметрична точкова квадратична апроксимація функції однієї змінної

Розглянемо лінійну функцію (1.1а) з двома параметрами a,b [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**], тобто

$$y = P(x,a,b) = a + bx .$$

Це найпростіший випадок МНК. Однак його можна поширити на випадки інших функцій, які після логарифмування і певних замін зводяться до лінійного випадку.

Розглянемо на прикладах. Спочатку оберемо апроксимуючу функцію виду $y = ae^{bx}$. Після логарифмування отримаємо

$$\ln y = \ln a + bx .$$

Позначення $Y = \ln y,\ A = \ln a,\ B = b,\ X = x$ зводять розв'язання до лінійної функції $Y = A + BX$.

Розглянемо іншу функцію $y = ax^b$, тоді $\ln y = \ln a + b\ln x$. Позначення $Y = \ln y,\ A = \ln a,\ B = b,\ X = \ln x$ зводять розв'язання до лінійної функції $Y = A + BX$.

Деякі функції, що дозволяють двопараметричну апроксимацію наведено в табл. 1.2 [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Таблиця 1.2

	Функція	Y	X	A	B
1	$y = a + \frac{b}{x}$	y	$\frac{1}{x}$	a	b
2	$y = \frac{1}{a + bx}$	$\frac{1}{y}$	x	a	b
3	$y = \frac{x}{a + bx}$	$\frac{x}{y}$	x	a	b
4	$y = a\,b^x$	$\ln y$	x	$\ln a$	$\ln b$
5	$y = a\,e^{bx}$	$\ln y$	x	$\ln a$	b
6	$y = \frac{1}{a + b\,e^x}$	$\frac{1}{y}$	e^x	a	b
7	$y = a\,x^b$	$\ln y$	$\ln x$	$\ln a$	b
8	$y = a + b\ln x$	y	$\ln x$	a	b
9	$y = \frac{a}{b + x}$	$\frac{1}{y}$	x	$\frac{b}{a}$	$\frac{1}{a}$
10	$y = \frac{ax}{b + x}$	$\frac{1}{y}$	$\frac{1}{x}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{b}{a}$
11	$y = a\,e^{\frac{b}{x}}$	$\ln y$	$\frac{1}{x}$	$\ln a$	b
12	$y = a + b\,x^n$	y	x^n	a	b