Методы аппроксимации функций

1.Метод наименьших квадратов

1.1Аппроксимация линейной зависимостью

Метод наименьших квадратов (МНК) минимизирует среднеквадратичные невязки в узлах сетки. Рассмотрим МНК на примере построения линейной аппроксимационной зависимости для табличной функции.

x_i	x_0	x_1	x_2	…	x_n
y_i	y_0	y_1	y_2	…	y_n

Результирующая функция должна удовлетворять зависимости:

$$\mathbf{y(x)=a\cdot x+b} \quad (1)$$

Подставляя табличную функцию в зависимость (1) имеем систему **(n + 1)** уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{gathered}
\mathbf{a\cdot x_0+b=y_0} \\
\mathbf{a\cdot x_1+b=y_1} \\
\mathbf{a\cdot x_2+b=y_2} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\mathbf{a\cdot x_n+b=y_n} \quad (2)
\end{gathered}$$

Введем невязку в узлах сетки как квадрат разностей левой и правой частей системы (2): $\mathbf{r_i=(a \cdot x_i+b-y_i)^2}$ (3) Тогда задаче нахождения коэффициентов a и b ставится в соответствие задача минимизации суммы невязок (3):

$$\sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{r_i} \to \boldsymbol{min} \quad (4)$$

Дифференцируя функцию (4) по независимым переменным a и b, получаем систему из двух уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{n} \mathbf{2} \cdot (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b} - \boldsymbol{y_i}) \cdot \boldsymbol{x_i} = \mathbf{0} \\ \sum_{i=0}^{n} \mathbf{2} \cdot (\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b} - \boldsymbol{y_i}) \cdot \mathbf{1} = \mathbf{0} \end{cases} \quad (5)$$

Приводя к стандартному для СЛАУ виду, имеем:

$$\begin{cases} \boldsymbol{a} \sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{x_i}^{\mathbf{2}} + \boldsymbol{b} \sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{x_i} = \sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{y_i} * \boldsymbol{x_i} \\ \boldsymbol{a} \sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{x_i} + \boldsymbol{b}(\boldsymbol{n} + \mathbf{1}) = \sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{y_i} \end{cases} \quad (6)$$

Или в матричной форме: **Y=B·X** (7) Где:

$$\boldsymbol{Y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{pmatrix} \ \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \boldsymbol{x_0} \\ \mathbf{1} & \boldsymbol{x_1} \\ \mathbf{1} & \boldsymbol{x_2} \\ \cdots & \cdots \\ \mathbf{1} & \boldsymbol{x_n} \end{pmatrix} \boldsymbol{B} = \binom{b}{a} \quad \mathbf{(8)}$$

Решением системы (7) будет вектор: $\mathbf{B=(X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot Y}$

1.2 Аппроксимация нелинейной зависимостью.

- Если принять более общий случай, когда конкретный вид аппроксимирующей функции не задан, т.е.: **$y(x)=f(x)$** (9)

Условие минимизации среднеквадратичной невязки запишется в виде:
$\sum_{i=0}^{n}(f(x_i)-y_i)^2 \rightarrow min$ (10)

Рассмотрим случай когда искомая функция представляет линейную комбинацию базисных функций: **$f(x)=c_0 \cdot \varphi_0(x)+c_1 \cdot \varphi_1(x)+\ldots+c_m \cdot \varphi_m(x)$** (11)

Набор базисных функций **$\{\varphi_i(x)\}_i^m=0$** задан изначально, и задача сводится к определению коэффициентов **$\{c_i\}_i^m=0$**.

Аналогично предыдущему пункту, условие минимума функции нескольких переменных сводится к условию гладкого экстремума, что для задачи (10-11)приводит к системе уравнений:

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{n}\varphi_0(x_i)\left(c_0\varphi_0(x_i)+c_1\varphi_1(x_i)+\ldots+c_m\varphi_m(x_i)-y_i\right)=0 \\ \sum_{i=0}^{n}\varphi_1(x_i)\left(c_0\varphi_0(x_i)+c_1\varphi_1(x_i)+\ldots+c_m\varphi_m(x_i)-y_i\right)=0 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \sum_{i=0}^{n}\varphi_m(x_i)\left(c_0\varphi_0(x_i)+c_1\varphi_1(x_i)+\ldots+c_m\varphi_m(x_i)-y_i\right)=0 \end{cases} \qquad (12)$$

Переходя к скалярным произведениям имеем:

$$\begin{cases} c_0\cdot(\varphi_0, \varphi_0)+c_1\cdot(\varphi_0, \varphi_1)+\ldots+c_m\cdot(\varphi_0, \varphi_m)=(\varphi_0, y) \\ c_0\cdot(\varphi_1, \varphi_0)+c_1\cdot(\varphi_1, \varphi_1)+\ldots+c_m\cdot(\varphi_1, \varphi_m)=(\varphi_1, y) \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ c_0\cdot(\varphi_m, \varphi_0)+c_1\cdot(\varphi_m, \varphi_1)+\ldots+c_m\cdot(\varphi_m, \varphi_m)=(\varphi_m, y) \end{cases} \quad (13)$$

Форма записи (13) удобна тем, что ее можно использовать как для аппроксимации как сеточной, так и непрерывной функции.

Для сеточной функции скалярные произведения вычисляются по формуле:

$$\left(\boldsymbol{\varphi_k}, \boldsymbol{\varphi_j}\right) = \sum_{i=0}^{n} \boldsymbol{\varphi_k}(\boldsymbol{x_i}) - \boldsymbol{\varphi_j}(\boldsymbol{x_i}) \quad (14)$$

Для непрерывной функции, аппроксимируемой на интервале x∈[a,b]:

$$\left(\boldsymbol{\varphi_k}, \boldsymbol{\varphi_j}\right) = \int_a^b \boldsymbol{\varphi_k}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{\varphi_j}(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{dx} \quad (15)$$

Из свойств скалярных произведений вытекает одно важное следствие – если система базисных функций **$\{\varphi_i(x)\}_i^m = 0$** ортогональна, т.е. удовлетворяет условию: **$(\varphi_k, \varphi_j)=0, k\neq j$** (16)

Все коэффициенты зависимости (11) можно найти в явном виде:

$$\begin{cases} c_0 = \dfrac{(\varphi_0,\ y)}{||\varphi_0||^2} \\ c_1 = \dfrac{(\varphi_1,\ y)}{||\varphi_1||^2} \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ c_m = \dfrac{(\varphi_m,\ y)}{||\varphi_m||^2} \end{cases} \qquad (17)$$

Такие коэффициенты называются **коэффициентами Фурье**, а комбинация базисных функций (11) – **обобщенным многочленом Фурье**.

2.Линейная аппроксимация

- Рассмотрим в качестве эмпирической формулы линейную функцию:

φ(x, a, b)=xa + b

Сумма квадратов отклонений запишется следующим образом:

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

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

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

Упростим полученную систему:

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

- 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:

$$\begin{cases} aSXX+bSX=SXY \\ aSX+bn=SY \end{cases} \quad (18)$$

из которой находим: $a = \frac{SXY*n-SX*SY}{SXX*n-SX*SX}$, $b = \frac{SXX*SY-SX*SXY}{SXX*n-SX*SX}$

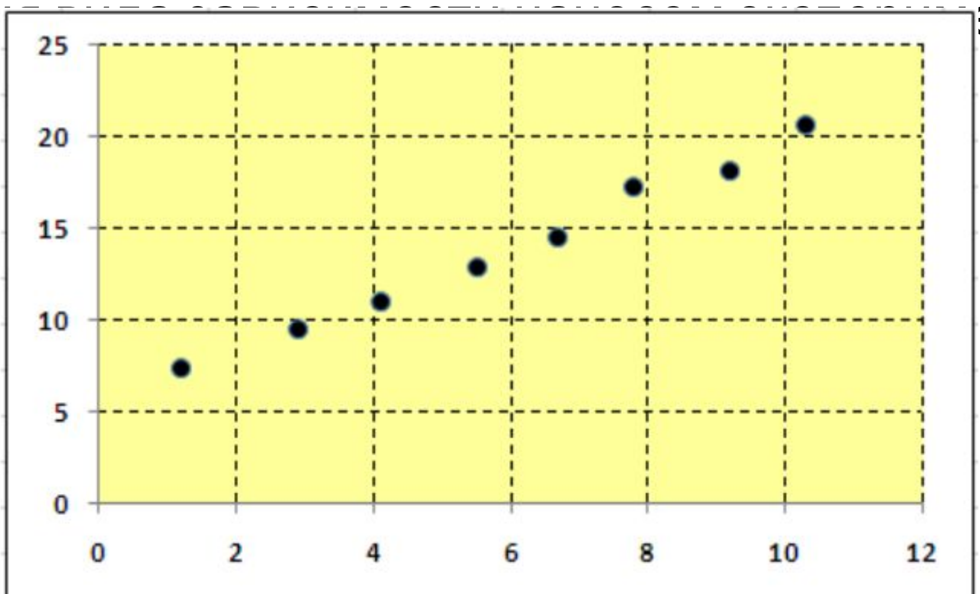
Пример. Пусть, изучая неизвестную функциональную зависимость между x и y, в результате серии экспериментов, была получена таблица значений (табл. 1). Необходимо найти приближенную функциональную зависимость и определить значения параметров аппроксимирующей функции.

Данные эксперимента

Таблица 1.

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 определени ентальные
точки на график



Далее, используя метод наименьших квадратов, найдем значения коэффициентов аппроксимирующей функции: a и b. Для этого вычислим:

$$SX = \sum_{i=1}^{n} x_i = 1,2 + 2,9 + 4,1 + 5,5 + 6,7 + 7,8 + 9,2 + 10,3 = 47,7\,;$$

$$SXX = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 1,2^2 + 2,9^2 + 4,1^2 + 5,5^2 + 6,7^2 + 7,8^2 + 9,2^2 + 10,3^2 = 353,37\,;$$

$$SY = \sum_{i=1}^{n} y_i = 7,4 + 9,5 + 11,1 + 12,9 + 14,6 + 17,3 + 18,2 + 20,7 = 111,7\,;$$

$$SXY = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 1,2 \cdot 7,4 + 2,9 \cdot 9,5 + 4,1 \cdot 11,1 + 5,5 \cdot 12,9 + 6,7 \cdot 14,6 +$$

$$+ 7,8 \cdot 17,3 + 9,2 \cdot 18,2 + 10,3 \cdot 20,7 = 766,3.$$

Система уравнений (18) для нахождения параметров a и b будет иметь вид: $\begin{cases} 353,37a + 47,7b = 766,3 \\ 47,7a + 8b = 111,7. \end{cases}$

Решая систему, получим значения коэффициентов: a = 1,4543 и b=5,2911. Проверим правильность выбора линейной модели. Для этого вычислим значения аппроксимирующей функции f = 1,4543x + 5,2911 и внесем полученные значения в табл. 2.

Результаты вычислений

Таблица2

№ пп	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
F = 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

Из таблицы видно, что значения аппроксимирующей функции приблизительно совпадают с Y для всех точек X. Следовательно, дела- ем вывод: исследуемая функциональная зависимость может быть приближенно описана линейной моделью f = 1,4543x + 5,2911. Определим меру отклонения S: $\boldsymbol{S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^{2} = 1,3459}$

Вычисленное значение S (небольшое $\rightarrow min$), что еще раз подтверждает правильность выбора модели

3. КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

- Рассмотрим в качестве эмпирической формулы квадратичную функцию:

$\varphi(x, a_0, a_1, a_2) = a_2x^2 + a_1x + a_0$

Сумма квадратов отклонений запишется следующим образом:

$S = S(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n} (a_2x^2 + a_1x + a_0 - y_i)^2 \to min$

Приравниваем к нулю частные производные S по неизвестным параметрам:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial a_0} = 2\sum_{i=1}^{n} a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0 - y_i = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_1} = 2\sum_{i=1}^{n} (a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0 - y_i)x_i = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial a_2} = 2\sum_{i=1}^{n} (a_2x_i^2 + a_1x_i + a_0 - y_i)x_i^2 = 0 \end{cases}$$

Введем обозначения:

$$X_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i, \quad X_2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2, \quad X_3 = \sum_{i=1}^{n} x_i^3, \quad X_4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^4,$$

$$Z_1 = \sum_{i=1}^{n} y_i, \quad Z_2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, \quad Z_3 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i.$$

Получим систему уравнений для нахождения параметров a_0, a_1, a_2:

$$\begin{cases} a_0 n + a_1 X_1 + a_2 X_2 = Z_1 \\ a_0 X_1 + a_1 X_2 + a_2 X_3 = Z_2 \\ a_0 X_2 + a_1 X_3 + a_2 X_4 = Z_3 \end{cases}$$

Используя правило Крамера, находим $a_0 = \frac{\Delta_0}{\Delta}$, $a_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}$, $a_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta}$,
где

$$\Delta_0 = \det\begin{pmatrix} Z_1 & X_1 & X_2 \\ Z_2 & X_2 & X_3 \\ Z_3 & X_3 & X_4 \end{pmatrix} \quad \Delta_1 = \det\begin{pmatrix} n & Z_1 & X_2 \\ X_1 & Z_2 & X_3 \\ X_2 & Z_3 & X_4 \end{pmatrix}$$

$$\Delta_2 = \det\begin{pmatrix} n & X_1 & Z_1 \\ X_1 & X_2 & Z_2 \\ X_2 & X_3 & Z_3 \end{pmatrix} \quad \Delta = \det\begin{pmatrix} n & X_1 & X_2 \\ X_1 & X_2 & X_3 \\ X_2 & X_3 & X_4 \end{pmatrix}$$