Лекция **12 (продолжение лекции 11)**

МЕТОДЫ ИНТЕГРАЛЬНОГО СГЛАЖИВАНИЯ

А. ТОЧЕЧНЫЙ МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ МНОГОЧЛЕНОВ

Пусть на множестве $\Omega = [a,b]$ задана сетка $\Omega_n = \left\{x_i,\, i = \overline{0,n}\right\}$, определяемая $n+1$ точкой $x_0, x_1, \ldots, x_n$, а на сетке задана сеточная функция $y_i = f(x_i),\ i = \overline{0,n}$:

$$y_0 = f(x_0),\ y_1 = f(x_1), \ldots,\ y_n = f(x_n).$$

Как и ранее, будем использовать обозначение $f_i = f(x_i)$.

На практике сглаживающую функцию удобно представить в виде *обобщенного многочлена*

$$f_m(x,\overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j\ \varphi_j(x) = a_0\,\varphi_0(x) + a_1\,\varphi_1(x) + \ldots + a_m\,\varphi_m(x),$$

где $\overline{a} = \{a_0, a_1, \ldots, a_m\}^T$ – вектор неизвестных коэффициентов, $\{\varphi_j\} = \{\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m\}$– заданная *система базисных функций*, степень многочлена удовлетворяет условию $0 \le m \le n$. В качестве базисных функций могут выбираться, например, степенные функции $\{\varphi_j\} = \{x^j\}$, многочлены Чебышева, тригонометрические функции $\{\varphi_j\} = \{\cos jx\}$. Требуется найти такие коэффициенты многочлена $a_0, a_1, \ldots, a_m$, обеспечивающие минимум среднеквадратичной погрешности:

$$\delta_m(\overline{a}) = \sqrt{\frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n}\left[f_m(x_i,\overline{a}) - f_i\right]^2} \to \min_{a_0, a_1, \ldots a_m}.$$

т.е. такой вектор $\overline{a} = \{a_0, a_1, \ldots, a_m\}^T$, который обеспечивает минимум величины $\delta_m(\overline{a})$.

В соответствии с постановкой задачи найдем коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$ многочлена, обеспечивающие минимум критерия.

Очевидно, минимум критерия достигается, если

$$\Delta = \sum_{i=0}^{n}\left[\varphi_0(x_i)\,a_0 + \varphi_1(x_i)\,a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\,a_m - f_i\right]^2 \to \min_{a_0, a_1, \ldots a_m}.$$

Так как на коэффициенты не наложено никаких ограничений, применим необходимые условия безусловного экстремума:

$$\frac{\partial\,\Delta}{\partial\,a_j} = 0, \quad j = 0,1,\ldots,m.$$

В результате получаем систему

$$\frac{\partial\Delta}{\partial a_0} = 2\sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\,a_0 + \varphi_1(x_i)\,a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\,a_m - f_i \right] \cdot \varphi_0(x_i) = 0\,,$$

$$\frac{\partial\Delta}{\partial a_1} = 2\sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\,a_0 + \varphi_1(x_i)\,a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\,a_m - f_i \right] \cdot \varphi_1(x_i) = 0\,,$$

....

$$\frac{\partial\Delta}{\partial a_m} = 2\sum_{i=0}^{n} \left[\varphi_0(x_i)\,a_0 + \varphi_1(x_i)\,a_1 + \ldots + \varphi_m(x_i)\,a_m - f_i \right] \cdot \varphi_m(x_i) = 0\,.$$

Для компактной записи полученного результата удобно использовать скалярное произведение.

Скалярным произведением функций $\varphi_k(x)$ и $\varphi_l(x)$ на множестве точек $\{x_i,\, i = \overline{0,n}\}$ называется сумма произведений значений функций, вычисленных во всех точках, т.е.

$$(\varphi_k, \varphi_l) = \sum_{i=0}^{n} \varphi_k(x_i)\; \varphi_l(x_i)\,.$$

Число $\|\varphi_k\| = \sqrt{(\varphi_k, \varphi_k)}$ называется *нормой* функции $\varphi_k(x)$ на множестве точек $\{x_i,\, i = \overline{0,n}\}$.

Тогда полученную систему можно переписать в форме:

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

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

....

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

где $(f, \varphi_k) = \sum\limits_{i=0}^{n} f_i\;\varphi_k(x_i)$. Таким образом, получена система $(m+1)$ линейных уравнений с $(m+1)$ неизвестными $a_0, a_1, \ldots, a_m$. В силу равенства $(\varphi_k, \varphi_l) = (\varphi_l, \varphi_k)$ матрица

$$A = \begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) \;\ldots\ldots\ldots\; (\varphi_0, \varphi_m) \\ (\varphi_1, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_1) \;\ldots\ldots\ldots\; (\varphi_1, \varphi_m) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ (\varphi_m, \varphi_0) & (\varphi_m, \varphi_1) \;\ldots\ldots\ldots\; (\varphi_m, \varphi_m) \end{pmatrix}$$

системы является симметрической. Если базисные функции $\varphi_0, \varphi_1, \ldots, \varphi_m$ линейно независимы, определитель матрицы A не равен нулю (он называется определителем Грама). Тогда решение системы существует и единственно. Аналогичный вывод можно сделать и о задаче определения многочлена наилучшего среднеквадратичного приближения.

Метод решения поставленной задачи называется *методом наименьших квадратов* или *методом наилучшего среднеквадратичного приближения*, поскольку величина критерия представляет собой сумму квадратов отклонений значений аппроксимирующей функции $f_m(x, \overline{a})$ от заданных значений f_i на множестве точек $\{x_i,\, i = \overline{0,n}\}$. Согласно приведенной классификации метод является сглаживающим.

В качестве базисных функций используем степенные: $\varphi_j(x) = x^j,\ j = \overline{0,m}$. В этом случае обобщенный многочлен имеет вид

$$f_m(x,\overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m .$$

Тогда $(f,\varphi_j) = \sum_{i=0}^{n} f_i x_i^j$, $(\varphi_k,\varphi_l) = \sum_{i=0}^{n} x_i^{k+l}$, $(\varphi_k,\varphi_k) = \sum_{i=0}^{n} x_i^{2k}$ и система для нахождения коэффициентов имеет вид

$$\left(\sum_{i=0}^{n} 1\right)a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right)a_2 + \ldots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^m\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} f_i ,$$

$$\left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^3\right)a_2 + \ldots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1}\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i f_i ,$$

....

$$\left(\sum_{i=0}^{n} x_i^m\right)a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1}\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2}\right)a_2 + \ldots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{2m}\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i^m f_i .$$

Обозначим

$$s_0 = n+1, \quad t_0 = f_0 + f_1 + \ldots + f_n ,$$

$$s_k = x_0^k + x_1^k + \ldots + x_n^k , \quad k = 1,\ldots,2m;$$

$$t_k = x_0^k f_0 + x_1^k f_1 + \ldots + x_n^k f_n , \quad k = 1,\ldots,m .$$

Тогда система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} s_0 a_0 &+ s_1 a_1 + \ldots + s_m a_m = t_0 , \\ s_1 a_0 &+ s_2 a_1 + \ldots + s_{m+1} a_m = t_1 , \\ &\vdots \\ s_m a_0 &+ s_{m+1} a_1 + \ldots + s_{2m} a_m = t_m . \end{aligned} \tag{5.5}$$

Решая систему линейных алгебраических уравнений, находим неизвестные коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Подставляя решение в $f_m(x,\overline{a})$, получаем искомую формулу, которая сглаживает экспериментальные данные.

Методика решения задачи сглаживания

Шаг 1. Вычислить коэффициенты $s_k, k = \overline{0,2m}$; $t_k, k = \overline{0,m}$, по заданной сеточной функции и записать систему (5.5).

Шаг 2. Решить полученную систему одним из методов решения СЛАУ и найти коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Шаг 3. Записать искомую сглаживающую функцию

$$f_m(x,\overline{a}) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m .$$

З а м е ч а н и я. Если для сеточной функции, заданной в $(n+1)$-й точке $x_0, x_1, ..., x_n$, определять многочлен степени $m = n$ методом наименьших квадратов, то тогда $f_m(x, \overline{a})$ совпадает с интерполяционным многочленом и метод становится эквивалентным методу интерполяции. При этом $\Delta = 0$ и $\delta_m(\overline{a}) = 0$.

Б. ИНТЕГРАЛЬНЫЙ МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

ПРИМЕНЕНИЕ ОБОБЩЕННЫХ МНОГОЧЛЕНОВ

Пусть на отрезке $[a,b]$ задана интегрируемая с квадратом функция $y = f(x)$ ($\int_a^b f^2(x)dx < \infty$), которая по каким-либо причинам трудна для использования (например, трудно вычислить производные). Тогда может быть поставлена задача ее приближенной замены (аппроксимации) более простой функцией $y = F(x, \overline{a})$. Вектор неизвестных параметров $\overline{a}$ ищется из условия минимального расстояния $d(f,F)$ между функциями $y = f(x)$ и $y = F(x, \overline{a})$:

$$d(f,F) = \sqrt{\int_a^b [F(x,\overline{a}) - f(x)]^2 dx} \to \min_{\overline{a}}.$$

Эта задача называется задачей *наилучшего интегрального среднеквадратичного приближения* (*аппроксимации*) *на отрезке* $[a,b]$. Она эквивалентна проблеме нахождения функции $y = F(x, \overline{a})$ из *интегрального условия*:

$$\Delta = \int_a^b [F(x,\overline{a}) - f(x)]^2 dx \to \min_{\overline{a}},$$

где Δ – *погрешность аппроксимации*. Искомая функция $y = F(x, \overline{a})$ называется *аппроксимирующей функцией*, а метод аппроксимации – *интегральным методом наименьших квадратов*. При решении этой задачи минимизируется заштрихованная площадь на рис.1, *в*.

На практике аппроксимирующую функцию удобно искать в виде *обобщенного многочлена*

$$F(x,\overline{a}) = f_m(x,\overline{a}) = \sum_{j=0}^{m} a_j\,\varphi_j(x) = a_0\,\varphi_0(x) + a_1\,\varphi_1(x) + ... + a_m\,\varphi_m(x),$$

где $\overline{a} = \{a_0, a_1, ..., a_m\}^T$ – вектор неизвестных коэффициентов, $\{\varphi_j\} = \{\varphi_0, \varphi_1, ..., \varphi_m\}$ – заданная *система базисных функций*, степень многочлена удовлетворяет условию $0 \le m \le n$. В качестве базисных функций могут выбираться, например, степенные функции $\{\varphi_j\} = \{x^j\}$, ортогональные многочлены и др. Функции, входящие в систему, должны быть линейно независимыми.

Требуется найти такие коэффициенты многочлена $a_0, a_1, ..., a_m$, обеспечивающие минимум погрешности аппроксимации:

$$\Delta = \int_a^b [f_m(x,\overline{a}) - f(x)]^2 dx \to \min_{a_0, a_1, ... a_m}.$$

т.е. такой вектор $\overline{a} = \{a_0, a_1, ..., a_m\}^T$, который обеспечивает минимум величины Δ.

В соответствии с постановкой задачи найдем коэффициенты $a_0, a_1, ..., a_m$ обобщенного многочлена, обеспечивающие минимум критерия:

$$\Delta = \int_a^b [\,\varphi_0(x)a_0 + \varphi_1(x)a_1 + ... + \varphi_m(x)a_m - f(x)]^2 dx \to \min_{a_0, a_1, ... a_m}.$$

Так как на коэффициенты не наложено никаких ограничений, применим необходимые условия безусловного экстремума:

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_j} = 0, \quad j = 0,1,...,m.$$

В результате получаем систему

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_0} = 2\int_a^b [\,\varphi_0(x)a_0 + \varphi_1(x)a_1 + ... + \varphi_m(x)a_m - f(x)] \cdot \varphi_0(x)\,dx = 0,$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_1} = 2\int_a^b [\varphi_0(x)a_0 + \varphi_1(x)a_1 + ... + \varphi_m(x)a_m - f(x)] \cdot \varphi_1(x)\,dx = 0,$$

....

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a_m} = 2\int_a^b [\,\varphi_0(x)a_0 + \varphi_1(x)a_1 + ... + \varphi_m(x)a_m - f(x)] \cdot \varphi_m(x)\,dx = 0.$$

Для компактной записи полученного результата удобно использовать скалярное произведение.

Скалярным произведением функций $\varphi_k(x)$ и $\varphi_l(x)$ на отрезке $[a,b]$ называется интеграл от их произведения на этом отрезке

$$(\varphi_k, \varphi_l) = \int_a^b \varphi_k(x)\,\varphi_l(x)\,dx.$$

Число $\|\varphi_k\| = \sqrt{(\varphi_k, \varphi_k)} = \sqrt{\int_a^b \varphi_k^2(x)dx}$ является *нормой функции* $\varphi_k(x)$ на отрезке $[a,b]$.

Тогда полученную систему можно переписать в форме:

$$(\varphi_0, \varphi_0)\,a_0 + (\varphi_0, \varphi_1)\,a_1 + ... + (\varphi_0, \varphi_m)\,a_m = (f, \varphi_0),$$

$$(\varphi_1, \varphi_0)\,a_0 + (\varphi_1, \varphi_1)\,a_1 + ... + (\varphi_1, \varphi_m)\,a_m = (f, \varphi_1),$$

....

$$(\varphi_m, \varphi_0)\,a_0 + (\varphi_m, \varphi_1)\,a_1 + ... + (\varphi_m, \varphi_m)\,a_m = (f, \varphi_m),$$

где $(f,\varphi_k)=\int\limits_a^b f(x)\,\varphi_k(x)\,dx$. Таким образом, получена система $(m+1)$ линейных уравнений с $(m+1)$ неизвестными $a_0, a_1,\ldots,a_m$. В силу равенства $(\varphi_k,\varphi_l)=(\varphi_l,\varphi_k)$ матрица

$$A=\begin{pmatrix} (\varphi_0,\varphi_0) & (\varphi_0,\varphi_1) \ldots\ldots\ldots & (\varphi_0,\varphi_m) \\ (\varphi_1,\varphi_0) & (\varphi_1,\varphi_1) \ldots\ldots\ldots & (\varphi_1,\varphi_m) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots \\ (\varphi_m,\varphi_0) & (\varphi_m,\varphi_1) \ldots\ldots\ldots & (\varphi_m,\varphi_m) \end{pmatrix}$$

системы является симметрической. Если базисные функции $\varphi_0,\varphi_1,\ldots,\varphi_m$ линейно независимы, то определитель матрицы *A* не равен нулю (он называется определителем Грама). Тогда решение системы существует и единственно. Аналогичный вывод можно сделать и о задаче определения обобщенного многочлена.

ПРИМЕНЕНИЕ СТЕПЕННЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

В качестве базисных функций используем степенные: $\varphi_j(x)=x^j,\ j=\overline{0,m}$. В этом случае обобщенный многочлен имеет вид

$$f_m(x,\overline{a})=\sum_{j=0}^{m} a_j x^j = a_0+a_1x+\ldots+a_m x^m .$$

Тогда $(f,\varphi_j)=\int\limits_a^b f(x)\,x^j dx$, $(\varphi_k,\varphi_l)=\int\limits_a^b x^{k+l}dx$, $(\varphi_k,\varphi_k)=\int\limits_a^b x^{2k}dx$ и система имеет вид

$$\left(\int_a^b 1\,dx\right)a_0+\left(\int_a^b x\,dx\right)a_1+\left(\int_a^b x^2dx\right)a_2+\ldots+\left(\int_a^b x^m dx\right)a_m=\int_a^b f(x)\,dx,$$

$$\left(\int_a^b x\,dx\right)a_0+\left(\int_a^b x^2\,dx\right)a_1+\left(\int_a^b x^3dx\right)a_2+\ldots+\left(\int_a^b x^{m+1}dx\right)a_m=\int_a^b f(x)\,x\,dx,$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$\left(\int_a^b x^m\,dx\right)a_0+\left(\int_a^b x^{m+1}\,dx\right)a_1+\left(\int_a^b x^{m+2}dx\right)a_2+\ldots+\left(\int_a^b x^{2m}dx\right)a_m=\int_a^b f(x)\,x^m\,dx.$$

Обозначим

$$s_0=b-a, \qquad s_k=\int_a^b x^k\,dx,\ \ k=1,\ldots,2m;$$

$$t_0=\int_a^b f(x)\,dx, \qquad t_k=\int_a^b f(x)\,x^k\,dx,\ \ k=1,\ldots,m.$$

Тогда полученная система преобразуется к виду

$$\begin{aligned} s_0 a_0 + s_1 a_1 + \ldots + s_m a_m &= t_0 , \\ s_1 a_0 + s_2 a_1 + \ldots + s_{m+1} a_m &= t_1 , \\ &\vdots \\ s_m a_0 + s_{m+1} a_1 + \ldots + s_{2m} a_m &= t_m . \end{aligned} \tag{5.6}$$

Решая систему линейных алгебраических уравнений, находим неизвестные коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Методика решения задачи аппроксимации

Шаг 1. Вычислить коэффициенты $s_k, k = \overline{0,2m}$; $t_k, k = \overline{0,m}$, по заданной функции и записать систему (5.6).

Шаг 2. Решить полученную систему одним из методов решения СЛАУ и найти коэффициенты $a_0, a_1, \ldots, a_m$.

Шаг 3. Записать искомую функцию $f_m(x, \overline{a}) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m$.

З а м е ч а н и я.

1. К недостаткам описанного метода относится необходимость вычисления определенных интегралов, которые могут быть весьма сложными. Для их нахождения часто используются методы численного интегрирования.

2. Реализация интегрального метода наименьших квадратов с использованием степенных функций связана с решением системы линейных алгебраических уравнений относительно неопределенных коэффициентов. Этот недостаток устраняется выбором ортогональных базисных функций $\varphi_j(x)$.

ПРИМЕНЕНИЕ ОРТОГОНАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

При нахождении коэффициентов обобщенного многочлена с помощью ортогональных базисных функций нет необходимости решать систему (5.6).

Функции $\varphi_k(x)$ и $\varphi_l(x)$ называются *ортогональными* на отрезке $[a,b]$, если их скалярное произведение равно нулю: $(\varphi_k, \varphi_l) = \int\limits_a^b \varphi_k(x) \cdot \varphi_l(x)\, dx = 0, \quad k \neq l$.

Система функций $\left\{ \varphi_j(x) \right\}, j = 0,1,\ldots,m$, *называется ортогональной* на отрезке $[a,b]$, если все функции этой системы попарно ортогональны на этом отрезке. При этом $(\varphi_k, \varphi_k) = \int\limits_a^b \varphi_k(x) \cdot \varphi_k(x)\, dx \neq 0$.

Так, если в обобщенном многочлене

$$f_m(x, \overline{a}) = Q_m(x) = a_0\, \varphi_0(x) + a_1\, \varphi_1(x) + \ldots + a_m\, \varphi_m(x)$$

система базисных функций ортогональная, то система (5.6) перепишется в виде

$$(\varphi_0, \varphi_0)\, a_0 = (f, \varphi_0),$$
$$(\varphi_1, \varphi_1)\, a_1 = (f, \varphi_1),$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$(\varphi_m, \varphi_m)\, a_m = (f, \varphi_m),$$

т.е. все недиагональные элементы в матрице системы становятся равными нулю. Следовательно, коэффициенты обобщенного многочлена находятся по формуле

$$a_j = \frac{(f, \varphi_j)}{(\varphi_j, \varphi_j)} = \frac{(f, \varphi_j)}{\left\| \varphi_j \right\|^2} = \frac{\int\limits_a^b f(x) \cdot \varphi_j(x)\, dx}{\int\limits_a^b \varphi_j^2(x)\, dx}, \quad j = 0, 1, \ldots, m.$$

Коэффициенты обобщенного многочлена называются *коэффициентами Фурье* функции $y = f(x)$ относительно ортогональной на отрезке $[a, b]$ системы функций.

ПРИМЕНЕНИЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ ФОРМУЛ

Подбирается одна из двухпараметрических формул:

$$f(x, a_0, a_1) = a_0 + \frac{a_1}{x}; \qquad f(x, a_0, a_1) = \frac{1}{a_0 + a_1 x}; \quad f(x, a_0, a_1) = \frac{x}{a_0 + a_1 x};$$

$$f(x, a_0, a_1) = a_0\, a_1^x; \qquad f(x, a_0, a_1) = a_0\, e^{a_1 x}; \qquad f(x, a_0, a_1) = \frac{1}{a_0 + a_1 e^{-x}};$$

$$f(x, a_0, a_1) = a_0 + a_1 \ln x; \quad f(x, a_0, a_1) = \frac{a_0}{a_1 + x}, \quad f(x, a_0, a_1) = \frac{a_0 x}{a_1 + x}, \ldots.,$$

где a_0, a_1 – неизвестные коэффициенты.

Требуется найти коэффициенты a_0, a_1, обеспечивающие минимум погрешности аппроксимации на основе метода наименьших квадратов:

$$\Delta = \int\limits_a^b \left[f(x, a_0, a_1) - f(x) \right]^2 dx \to \min_{a_0, a_1}.$$

Для нахождения коэффициентов a_0, a_1 применяются необходимые условия экстремума: $\dfrac{\partial \Delta}{\partial a_0} = 0$, $\dfrac{\partial \Delta}{\partial a_1} = 0$. В отличие от применения степенных функций, нахождение неизвестных коэффициентов сводится к решению двух нелинейных уравнений.