ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Фёдоров Павел Борисович

Сайт лекций по математике:
Fedorovkniga.jimdo.com

Метод наименьших квадратов приближений функций (МНК).

Решение систем уравнений, сведением её к единичному базису.

Интерполяция и регрессия

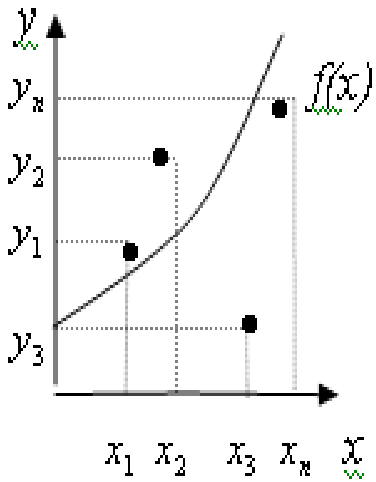
Метод наименьших квадратов приближений функций (МНК).

МНК служит для определения связи между двумя переменными x, y значения, которых получаются из эксперимента.

Дано n значений двух величин x, y:

x	x_1	x_2	...	x_n
y	y_1	y_2	...	y_n

Связь между x и y будет искаться в виде такой функции $f(x)$, которая располагается как можно ближе к экспериментальным данным.



Согласно МНК для нахождения функции $f(x)$, составляется сумма квадратов отклонений этой функции от экспериментальных данных:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[f(x)-y_i\right]^2$$

В качестве функции $f(x)$ чаще всего выбирается многочлен m-ой степени: $P_m(x)=a_0+a_1x+\ldots+a_mx^m$, где $a_0,a_1,\ldots,a_m$ – неизвестные коэффициенты.

Составим функцию многих переменных относительно неизвестных коэффициентов многочлена:

$$S(a_0,a_1,\ldots,a_m)=\sum_{i=1}^{n}\left[a_0+a_1x_i+\ldots+a_mx_i^m-y_i\right]^2 \qquad (1)$$

Вычислим частные производные от функции S по переменным $a_0, a_1, \dots, a_m$ и приравняем их к нулю, чтобы найти критические точки на экстремум:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{n} 2\left[a_0 + a_1 x_i + \ldots + a_m x_i^m - y_i\right] \cdot 1 = 0$$

$$\to \sum_{i=1}^{n} a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i + \ldots + \sum_{i=1}^{n} a_m x_i^m - \sum_{i=1}^{n} y_i = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^{n} 2\left[a_0 + a_1 x_i + \ldots + a_m x_i^m - y_i\right] \cdot x_i = 0$$

$$\to \sum_{i=1}^{n} a_0 x_i + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^2 + \ldots + \sum_{i=1}^{n} a_m x_i^{m+1} - \sum_{i=1}^{n} y_i x_i = 0$$

....

$$\frac{\partial S}{\partial a_m} = \sum_{i=1}^{n} 2\left[a_0 + a_1 x_i + \ldots + a_m x_i^m - y_i\right] \cdot x_i^m = 0$$

$$\to \sum_{i=1}^{n} a_0 x_i^m + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^{m+1} + \ldots + \sum_{i=1}^{n} a_m x_i^{2m} - \sum_{i=1}^{n} y_i x_i^m = 0$$

Из полученных уравнений составим систему:

$$\begin{cases} na_0 + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + \ldots + a_m \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^m = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i \\ a_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + \ldots + a_m \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{m+1} = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i x_i \\ ------------------------ \\ a_0 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^m + a_1 \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{m+1} + \ldots + a_m \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^{2m} = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i x_i^m \end{cases} \qquad (2)$$

Система (2) является линейной системой уравнений относительно $m+1$ уравнений. Коэффициенты системы (2) заполняются симметрично главной диагонали.

Коэффициенты системы (2) удобно считать по следующей таблице:

i	x	x_i^2	…	x_i^{2m}	y_i	$y_i x_i$	…	$y_i x_i^m$
1	x_1	x_1^2	…	x_1^{2m}	y_1	$y_1 x_1$	…	$y_1 x_1^m$
2	x_2	x_2^2	…	x_2^{2m}	y_2	$y_2 x_2$	…	$y_2 x_2^m$
…	…	…	…	…	…	…	…	…
n	x_n	x_n^2	…	x_n^{2m}	y_n	$y_n x_n$	…	$y_n x_n^m$
$\sum$	$\sum x_i$	$\sum x_i^2$	…	$\sum x_i^{2m}$	$\sum y_i$	$\sum y_i x_i$	…	$\sum y_i x_i^m$

Коэффициенты перед неизвестными

правая часть системы

Порядок решения МНК.

1. Выбираем многочлен второй степени

$$P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

2. Составляется таблица расчёта коэффициентов системы (2)
3. Решается система (2) и находятся коэффициенты $a_0, a_1, \ldots$
4. Найденные коэффициенты подставляются в многочлен $P_m(x)$
5. Вычисляется относительная погрешность приближения функции по формуле $\Delta_i = \left|\dfrac{P_m(x_i) - y_i}{y_i}\right| \cdot 100\% \quad (i = 1; n; y_i \neq 0)$
6. Если $\Delta_i > \varepsilon \quad (\varepsilon - \text{точность}, \varepsilon \leq 5\%)$, хотя бы для одного i, то степень многочлена увеличивается на единицу, то есть $m = m + 1$, и расчёты повторяются, начиная с пункта 2. Если $\Delta_i \leq \varepsilon$ для всех i, то многочлен считается найденным с заданной точностью и решение заканчивается.

Замечание: МНК может быть использован для приближения функции только в том интервале, где заданы экспериментальные данные.

Пример:

x	7	8	9	10	11	12	13
y	7,4	8,4	9,1	9,4	9,5	9,5	9,4

$$P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$$

i	x_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	y_i	$y_i x_i$	$y_i x_i^2$
1	7	40	343	2401	7,4	51,8	362,6
2	8	64	512	4096	8,4	67,2	537,6
3	9	81	729	6561	9,1	81,9	737,1
4	10	100	1000	10000	9,4	94	940
5	11	121	1331	14641	9,5	104,5	1149
6	12	144	1728	20736	9,5	114	1368
7	13	169	2197	28561	9,7	122,2	1588,6
$\sum$	70	728	7840	86996	62,7	635,6	6683,4

$$\begin{cases} 7a_0 + 70a_1 + 728a_2 = 62{,}7 \\ 70a_0 + 728a_1 + 7840a_2 = 635{,}6 \\ 728a_0 + 7840a_1 + 86996a_2 = 6683{,}4 \end{cases}$$

$a_0 = -4{,}88 \qquad a_1 = 2{,}54 \qquad a_2 = -0.11 \rightarrow P_2(x) = -4{,}86 + 2{,}54x - 0{,}11x^2$

Самая большая погрешность:

$$\Delta_2 = \frac{(-4{,}86 + 2{,}54 \cdot 13 - 0{,}11 \cdot 13^2) - 9{,}4}{9{,}4} \cdot 100\% = \frac{9{,}57 - 9{,}4}{9{,}4} \cdot 100\% = 1.8\% < 5\%$$

Решение систем уравнений, сведением её к единичному базису.

Алгоритм:

1. Расширенная матрица системы уравнений заносится в таблицу вида:

x_1	x_2	…	x_n	b

2. Среди коэффициентов перед неизвестными выбирается m, n главный элемент.

Лучше всего в качестве главного элемента брать единицу. Для МНК главный элемент выбирается последовательно среди чисел стоящих на главной диагонали.

3. Выделяется главная строка и столбец, на пересечении которых расположен главный элемент.
4. Элементы главной строки делятся на главные элементы.
5. Элементы главного столбца обнуляются кроме главного элемента.

6. Элементы остальных строк и столбцов вычисляются по правилу «прямоугольника»:

главный столбец

a_{pq}		a_{pj}
a_{iq}		a_{ij}

главная строка

где: a_{pq} - главный элемент, a_{ij} - новый элемент, который вычисляет по формуле:

$$a_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{pj} \times a_{iq}}{a_{pq}}$$

7. Расчёты повторяются с пункта 2 с выбором главного элемента в другой строке и другом столбце. Количество шагов решения определяется количеством уравнений.

8. Из последней таблицы выписывается полученная система уравнений, в левой части которой каждая неизвестная в каждом уравнении будет встречаться по одному разу, что даст нам сразу решение системы.

Замечание: Если в главной строке (столбце) стоит 0, то соответствующий столбец (строка) переписываются без изменений.

Интерполяция и регрессия

Исходные данные:
Значения двух переменных

ЛИНЕЙНАЯ И СПЛАЙН-ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
ЛИНЕЙНАЯ и НЕЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИИ

$$X := \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{pmatrix} \qquad Y := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1.5 \\ 1 \\ 2 \\ 2.5 \\ 2 \\ 3.5 \\ 3 \\ 4.0 \end{pmatrix}$$

Число данных $n := 10$

Цикл изменения индекса массивов $i := 0 .. n-1$

Нижняя и верхняя границы изменения переменной X

$xmin := \min(X)$

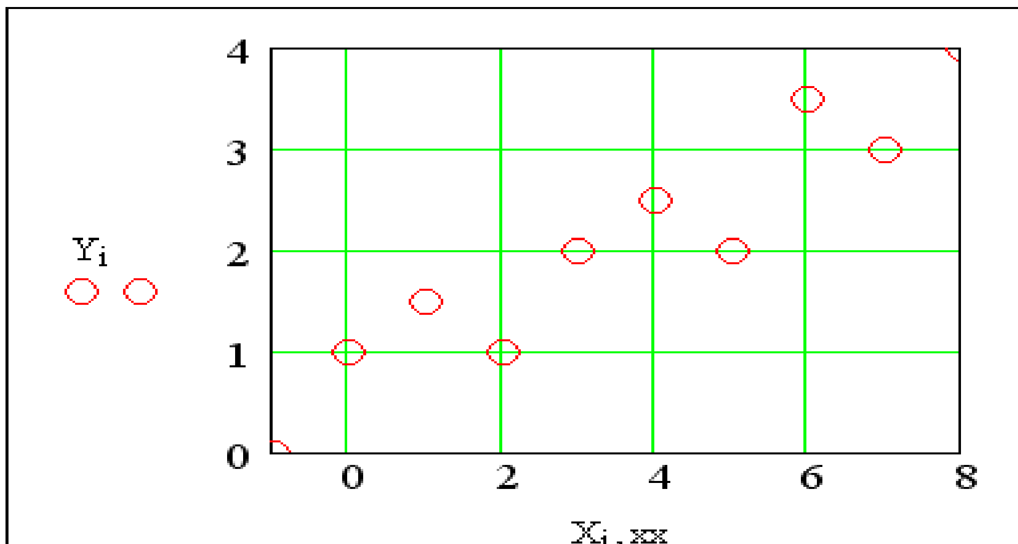
$xmax := \max(X)$

Нижняя и верхняя границы изменения переменной Y

$ymin := \min(Y)$

$ymax := \max(Y)$

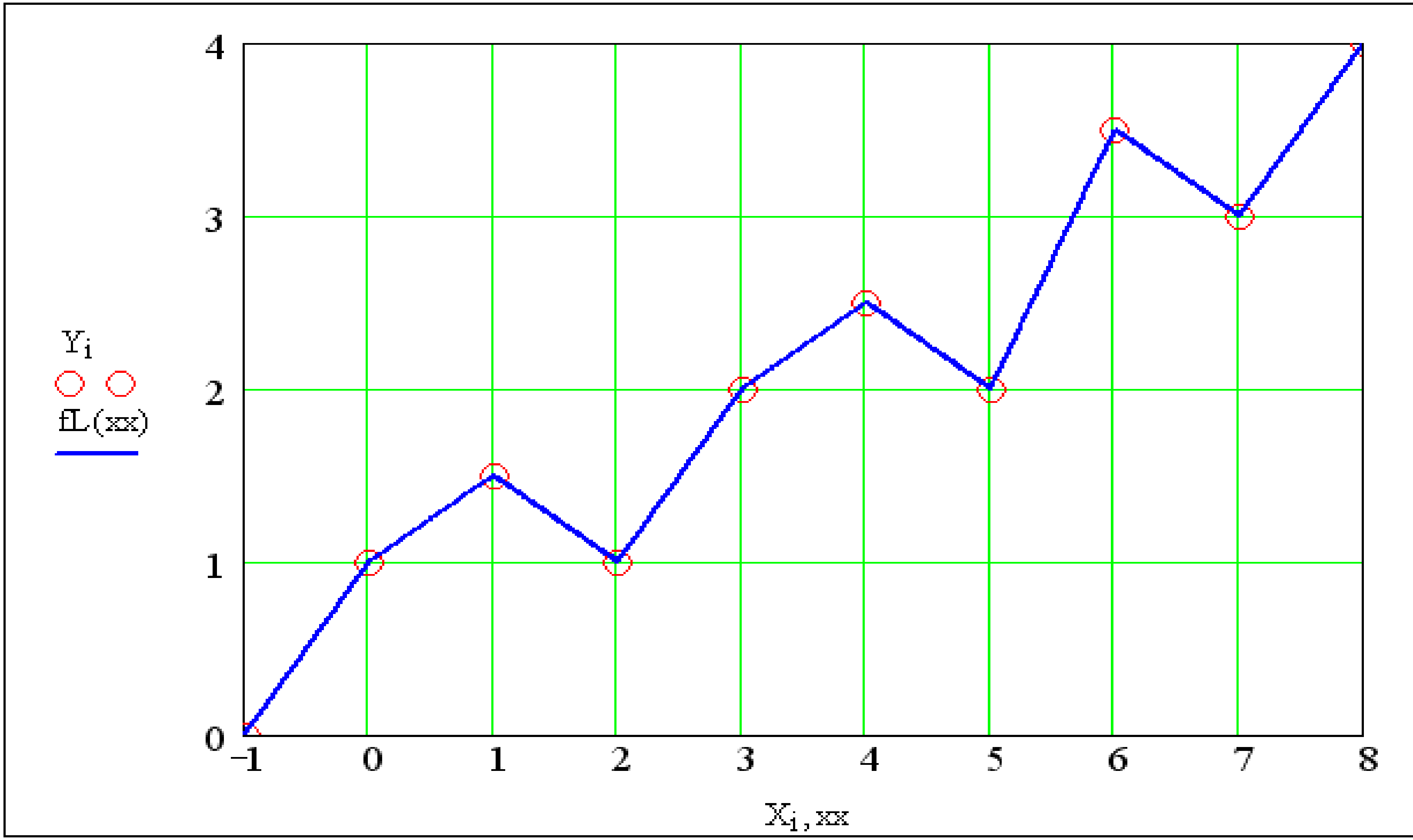
Графическое изображение исходных данных X и Y ⇒



Линейная интерполяция, функция fL(xx)

$$fL(xx) := \text{linterp}(X, Y, xx)$$

Экспериментальные точки соединяются отрезками прямых



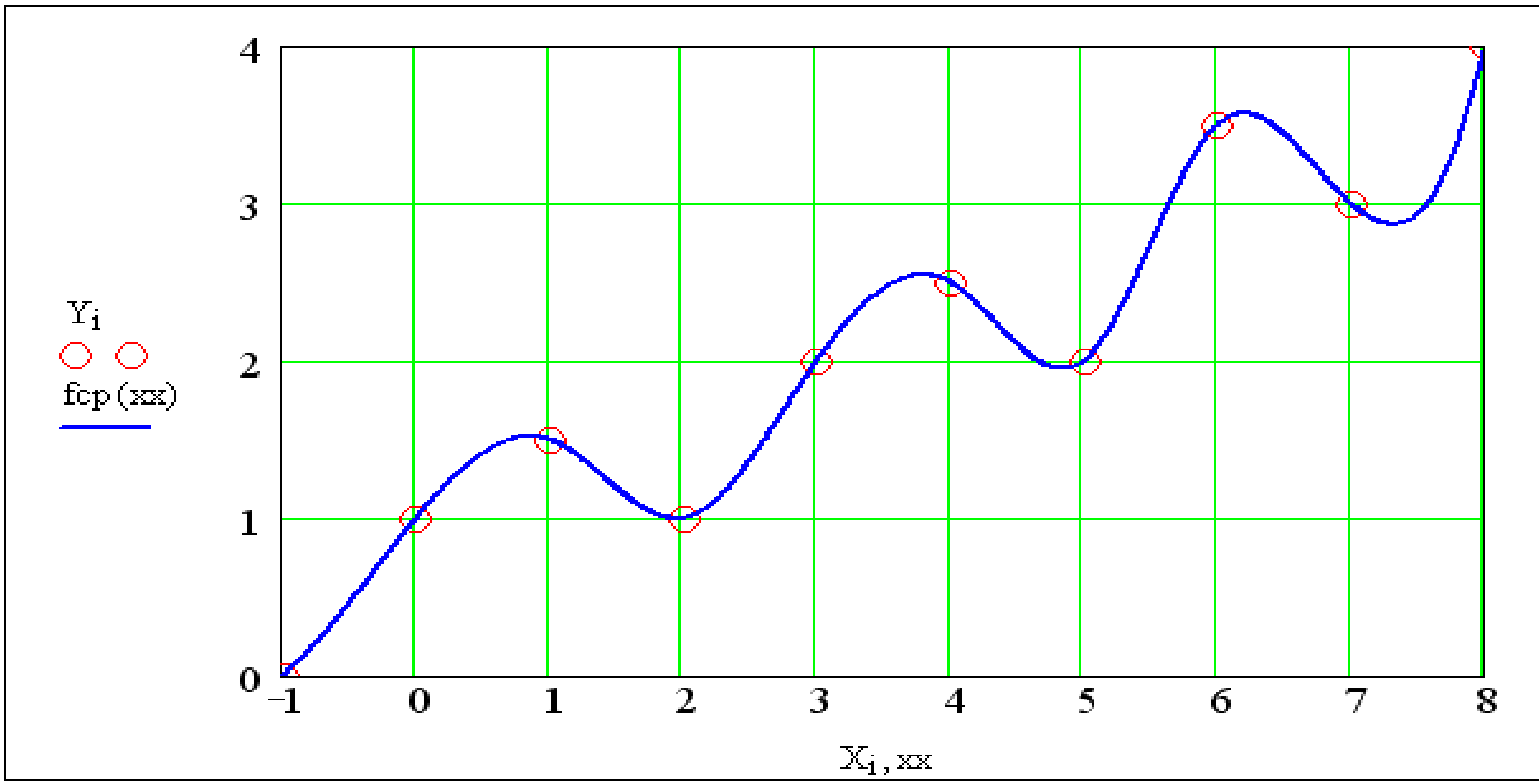
Сплайн- интерполяция, функция fcp(xx)

Вторые производные при приближении в экспериментальных точках к кубическому полиному

$$S := \mathrm{cspline}(X, Y)$$

$$\mathrm{fcp}(xx) := \mathrm{interp}(S, X, Y, xx)$$

Экспериментальные точки соединяются участками кубического полинома

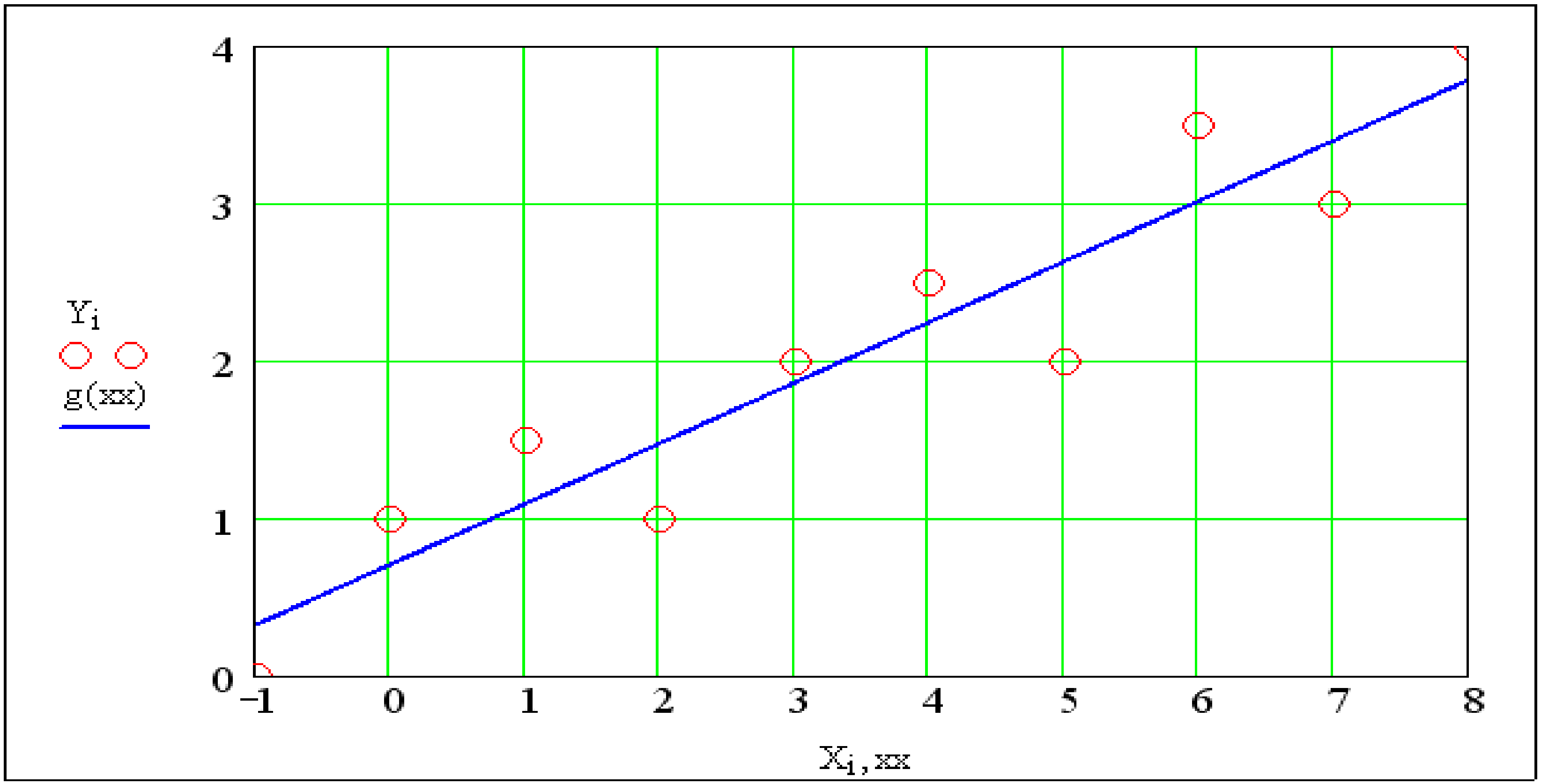


Линейная регрессия, функция $g(xx) = a + bx$

$a := \mathrm{intercept}(X, Y)$ $\boxed{a = 0.703}$ $b := \mathrm{slope}(X, Y)$ $\boxed{b = 0.385}$

$$g(xx) := a + b \cdot xx$$

Методом наименьших квадратов составляется линейная функция, для графика которой сумма квадратов отклонений этой функции от экспериментальных данных будет минимальной.



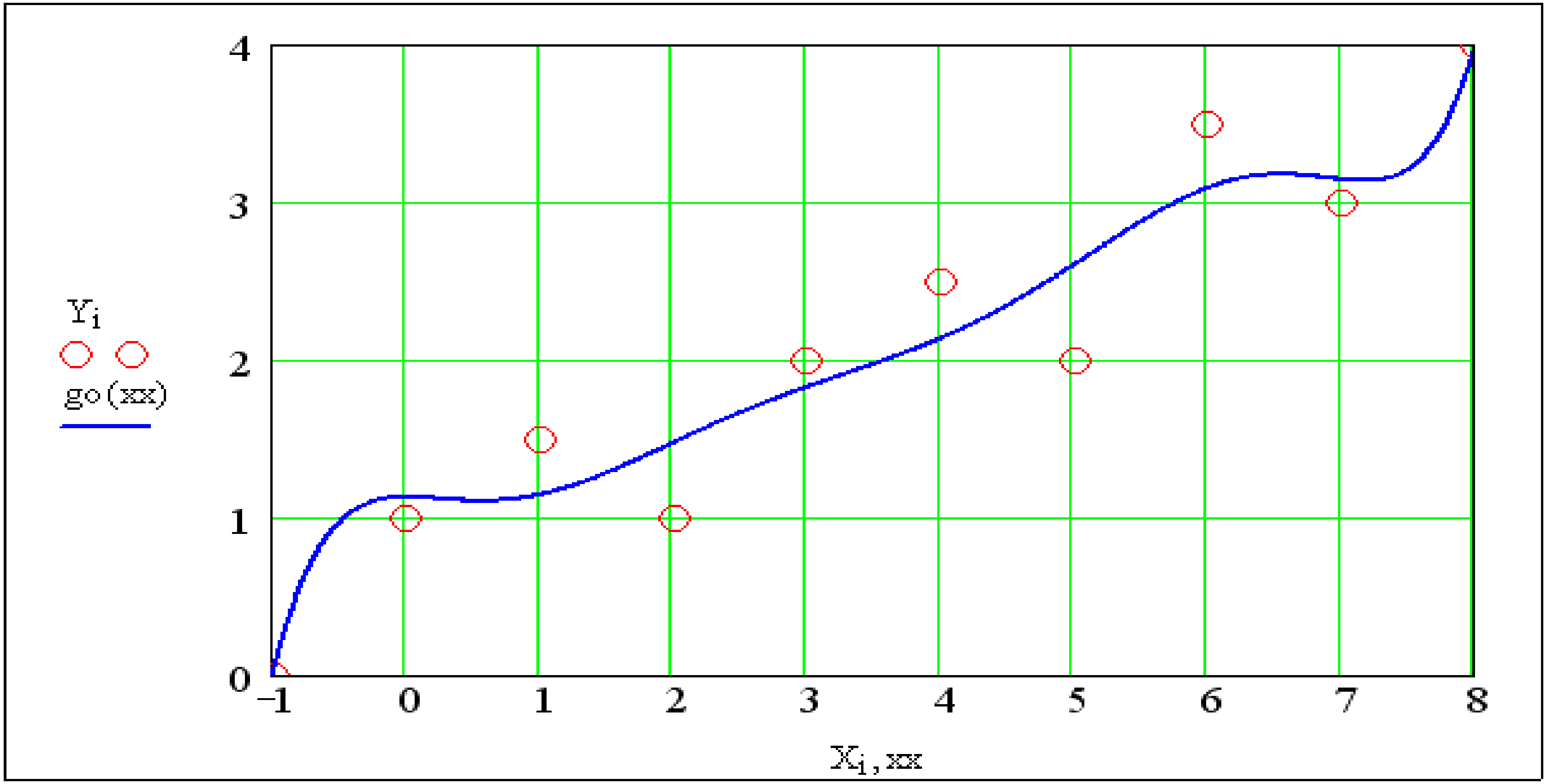
Нелинейная регрессия, функция $go(xx)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots a_mx^m$

$m := 7$ **Коэффициенты полинома** $z := regress(X, Y, m)$

Примечание: $a_0 = z_3$; $a_1 = z_4$; $a_2 = z_5$; …(индекс массива начинается с 0)

$go(xx) := interp(z, X, Y, xx)$

Методом наименьших квадратов составляется нелинейная функция виде полинома степени *m*, для графика которой сумма квадратов отклонений этой функции от экспериментальных данных будет минимальной.



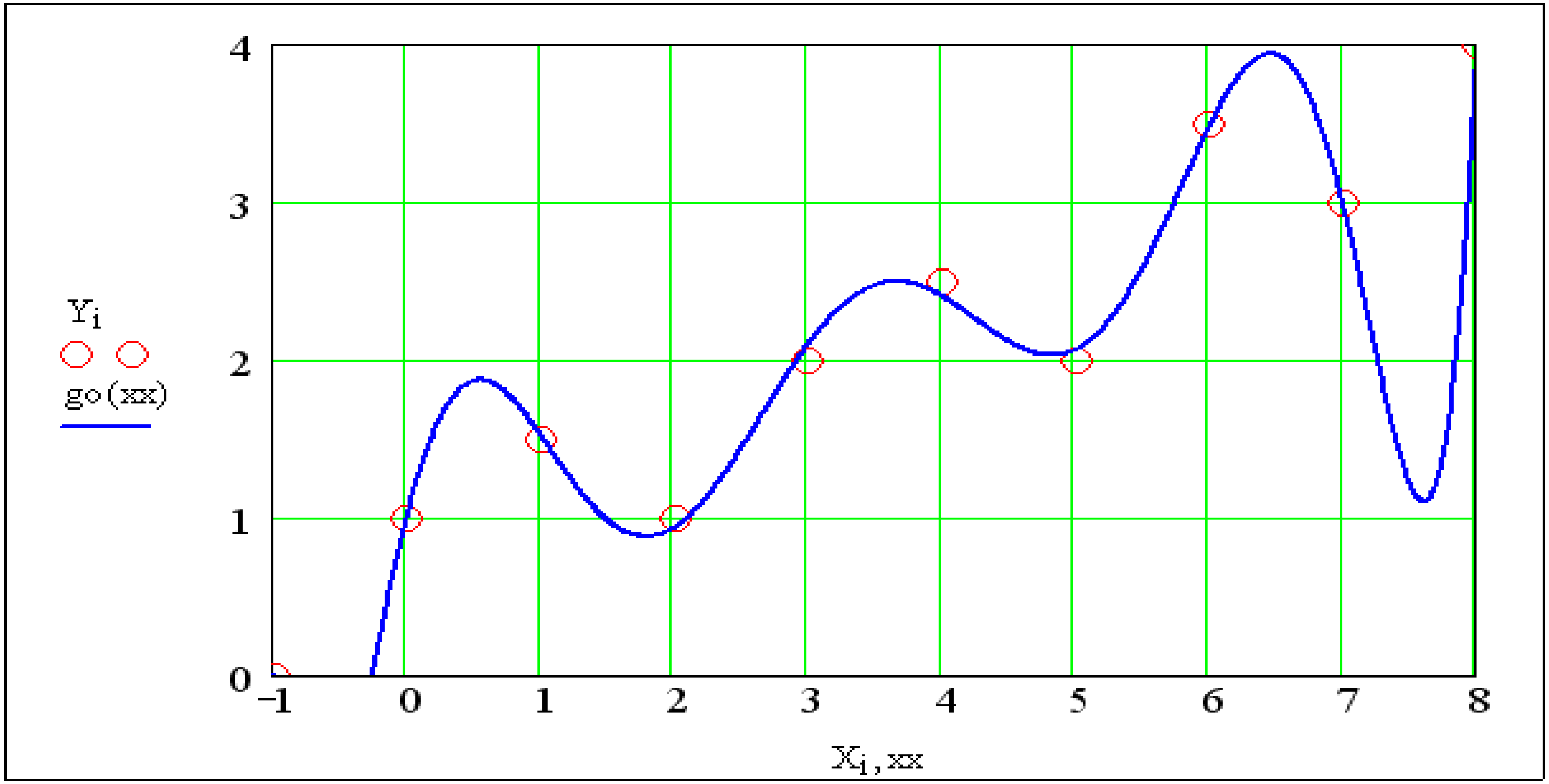
Нелинейная регрессия, функция $go(xx)=a_0+a_1x+a_2x^2+\ldots a_mx^m$

$m := 8$ **Коэффициенты полинома** $z := \mathrm{regress}(X, Y, m)$

Примечание: $a_0 = z_3$; $a_1 = z_4$; $a_2 = z_5$; …(**индекс массива начинается с** 0)

$$go(xx) := \mathrm{interp}(z, X, Y, xx)$$

Методом наименьших квадратов составляется нелинейная функция виде полинома степени *m*, для графика которой сумма квадратов отклонений этой функции от экспериментальных данных будет минимальной.



ВСЕ СЛУЧАИ ВМЕСТЕ

Линейная интерполяция, функция fL(xx)

Сплайн-интерполяция, функция fcp(xx)

Линейная регрессия, функция $g(xx) = a + bx$

Нелинейная регрессия, функция $go(xx)=a_0+a_1x+a_2x^2+\dots a_mx^m$