5) *Многочлены Эрмита* $H_n(x)$ образуют на прямой $(-\infty < x < \infty)$ ортогональную систему полиномов с весом $\rho(x) = e^{-x^2}$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2}\right)$$

Приведенные системы полиномов могут быть получены ортогонолизацией на $[a, b]$ системы функций $\{x^k\}$ с соответствующим весом.

Помимо рассмотренных ортогональных систем многочленов, часто удобной ортогональной системой функций оказываются решения задачи Штурма-Лиувилля для соответствующего дифференциального эллиптического уравнения 2-го порядка.

**Задача.** *Записать для рассмотренных полиномов по три первых представителя. Нормировка рассмотренных полиномов.*

# §5. Метод наименьших квадратов (МНК)

## 5.1 Задача среднеквадратичной аппроксимации сеточных функций

Задача среднеквадратичной аппроксимации в случае заданной таблично на сетке $\overline{\omega}_n$ функции приводит к методу, называемому *метод наименьших квадратов*. (Выбор среднеквадратичной аппроксимации всязан с метрикой соответствующего гильбертова пространства сеточных функций).

Рассмотрим сеточный аналог гильбертова пространства $\mathcal{L}_{2,\rho}[a; b]$ — пространство $\mathcal{H}$ сеточных функций на $\overline{\omega}_n$ (это конечномерное "$n + 1$"-мерное евклидово пространство) , определив в нем скалярное произведение и норму так:

$$(f, g)_{\mathcal{H}} = \sum_{k=0}^{n} \rho_k f(x_k) g(x_k); \quad \rho_k \geq 0; \qquad \|f\|_{\mathcal{H}} = \sqrt{(f, f)_{\mathcal{H}}}.$$

Мы рассмотрим линейно-независимую систему $\{\varphi_i(x) \,|\, \varphi_i(x) \in \mathcal{L}_{2,\rho}[a; b]\}_N$ [*1)] и будем считать, что с их помощью ищется наилучшее среднеквадратичное приближение обобщенным сеточным полиномом

$$F \equiv F_N = \sum_{i=0}^{N} C_i\, \varphi_i(x_p); \quad p = \overline{0, n}; \qquad N \neq n, \text{ как правило, } N < n.$$

Такая постановка приводит нас к задаче на экстремум для среднеквадратичного уклонения $\delta_N^2$ на сетке $\overline{\omega}_n$:

$$\Phi \equiv \Phi(\overline{C}_0, \overline{C}_1, \ldots, \overline{C}_N) = \delta_N^2 = \|f - F_N\|^2_{\mathcal{L}_{2,\rho}(\overline{\omega}_n)} =$$

$$= \inf_{\{C_i\}} \sum_{k=0}^{n} \rho_k \left( f(x_k) - \sum_{i=0}^{n} C_i \varphi_i(x_k) \right)^2;$$

[*1)] но на самом деле $\mathcal{L}_{2,\rho}[a; b]$ "хорошие" в смысле гладкости функции

Необходимое условие экстремума функции $\Phi(C_0,\dots,C_N)$ — $\frac{\partial\Phi}{\partial C_p}=0 \quad \Leftrightarrow$ дает СЛАУ (т.к. $\Phi$ – квадратичная функция) для определения коэффициентов $\{C_i\}_N$. Имеем:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial C_p}=\sum_{k=0}^{n}2\rho_k\cdot\left(f(x_k)-\sum_{i=0}^{N}C_i\varphi_i(x_k)\right)\cdot(-\varphi_p(x_k))=0,\ \text{или}$$

$$\Updownarrow$$

$$\sum_{i=0}^{N}C_i(\varphi_i,\varphi_p)_{\mathcal{L}_{2,\rho}(\overline{\omega}_n)}=(f,\varphi_p);\quad p=\overline{0,N} \tag{10}$$

Определитель Грамма $G(\varphi_0,\dots,\varphi_N)\neq 0$ для системы линейно-независимых сеточных функций $\{\varphi_i(x_k)\}_{\substack{i=\overline{0,N}\\ k=\overline{0,n}}}$ следовательно решение задачи (10) существует и единственно. (матрица СЛАУ (10) положительная $G>0$; $(Gx,x)>0$; $x\neq 0$) Естественно, что трудность решения задачи (10) зависит от системы $\{\varphi_i(x_k)\}$.

Из многочисленных примеров использования метода НК остановимся на его использовании в задаче обработки экспериментальных данных. Рассмотрим сначала

## 5.2 Обработка экспериментальных кривых методом НК

МНК широко используется в обработке экспериментальных кривых, т.е. таких кривых, точки которых измерены с *известной* погрешностью $\varepsilon_k$ — $\{x_k;\ f(x_k)=y_k;\ \varepsilon_k\}$.

В таком случае обычно весу $\rho_k$ придают смысл *точности* измерения отдельной точки, полагая

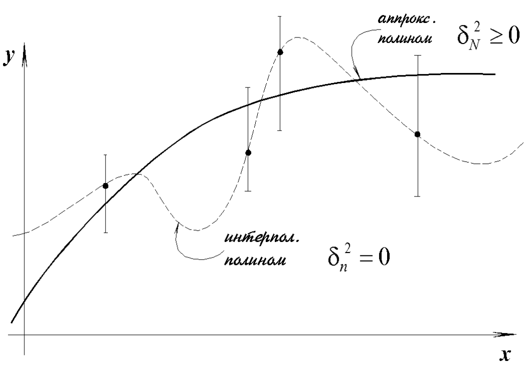
$$\rho_k=\frac{1}{\varepsilon_k^2};$$

Тогда аппроксимирующая кривая будет проходить "ближе" к точкам с бо́льшим весом (где выше точность) ибо каждое слагаемое в $\delta_N^2=\|f-F_N\|^2$ заведомо не превосходит $\varepsilon^2$ и в произведении

$$\rho_k(f_k-F_N(x_k))^2$$

второй сомножитель должен быть существенно меньше для получения той же величины результата.

Естественную интерпретацию получает при этом и проблема выбора числа $N$ членов обобщенного полинома для $F_N$.




Если число $N$ коэффициентов аппроксимации взять равным числу узлов $n$ сетки $\overline{\omega_n}$, то мы получим задачу интерполяции, как решение задачи об $\inf\delta_{N=n}^2$. Но это при наличии больших экспериментальных ошибок неприемлемо (см. рисунок).

Хорошее "сглаживание" эксперимента будет при $N<n$. Но, если $N$ слишком мало, то коэффициентов (членов ряда для $F_N$) может не хватить для описания сложной кривой (т.е. $\delta_N^2$ велико).

На практике оптимальное число коэффициентов $N$ определяют следующим образом:

1. Выбирают некоторое $N$ и из системы (10) находят $\left\{ \overset{(N)}{C}_i \right\}_{i=\overline{0,N}}$;

2. Вычисляют получившееся при этом среднеквадратичное уклонение, т.е. величину $\inf \delta_N^2$:
$$\delta_N^2 = \inf_{\{C_i\}} \|f - F_N\|^2 = \Phi\left(\overset{(N)}{C}_0, \dots, \overset{(N)}{C}_N\right);$$

3. Сравнивают её с известной погрешностью экспериментальных данных $\varepsilon = \max\limits_{k=\overline{0,n}} |\varepsilon_k|$

Если $\delta_N \gg \varepsilon$, т.е. "математическая" погрешность много больше "физической" погрешности данных, то число коэффициентов $N$ *недостаточно* для "хорошего" описания $f(x)$ и его нужно *увеличить*: — $N \uparrow$. Если $\delta_N \ll \varepsilon$, то старшие (особенно для ортогональной системы) коэффициенты ненадежны и нужно уменьшить $N$ — $N \downarrow$.

*Оптимально то значение $N$, при котором $\delta_N \approx \varepsilon$, но $N < n$ (!)*

Начинают с $N = 1$. Тогда заведомо $\delta_1 \gg \varepsilon$ и увеличивя $N$ добиваются выполнения условия $\delta_N \approx \varepsilon$, если при этом $N < n$ – то *аппроксимация* достигнута, в противном случае необходим более разумный выбор системы функций $\{\varphi_i(x_k)\}$.

Замечания:

1. В качестве системы сеточных функций $\{\varphi_i(x_k)\}$ часто используют неортогональную систему полиномов $\{(x_k)^i\}$. Соответствующие формулы (10) носят достаточно простой вид. Однако, вычисления по ним не лишены общего недостатка неортогональных систем $\{\varphi_i(x_k)\}$, связанного с потерей устойчивости нахождения $\{C_i\}_N$ из-за плохой обусловленности СЛАУ (10). Поэтому практически ограничиваются значениями $N \approx 2 \div 5$.

2. Наиболее разумно в методе МНК использовать подходящую ортогональную систему сеточных функций.

**Пример.** *В качестве примера рассмотрим задачу среднеквадратичной аппроксимации МНК $2\pi$–периодической (или периодического продолжения) функции на равномерной сетке $\overline{\omega}_n^{(h)}$, покрывающей её период $T = [0; 2\pi)$.*

Итак, на отрезке $[0; 2\pi)$ рассматривается сетка $\overline{\omega}_{n-1}$ с узлами $x_p = \frac{2\pi}{n}p$; $p = \overline{0, n-1}$

Покажем, что с весом $\rho_p \equiv 1$ система "тригонометрических" сеточных функций $\varphi_k(x) = exp(ikx)$ ортогональна на $\overline{\omega}_{n-1}^{(h)}$.


Имеем:

$$k \neq m, \quad (\varphi_k, \varphi_m) = \sum_{p=0}^{n-1} \varphi_k(x_p)\overline{\varphi_m(x_p)} \cdot \rho_p^{(\equiv 1)} = \sum_{p=0}^{n-1} \exp\left\{ i\frac{2\pi}{n}p(k-m) \right\} =$$

$$= 1 + e^{i\frac{2\pi}{n}(k-m)} + e^{i\frac{2\pi}{n}\cdot 2\cdot(k-m)} + \dots + e^{i\frac{2\pi}{n}(k-m)\cdot(n-1)} = \left| \begin{array}{l} \text{геом. прогрессия с} \\ q = e^{i\frac{2\pi}{n}(k-m)} \end{array} \right| =$$

$$= \left| S_n = \frac{a_1 - q a_n}{1 - q} \right| = \frac{1 - e^{i\frac{2\pi}{n}(k-m)\cdot n}}{1 - e^{i\frac{2\pi}{n}(k-m)}} = \begin{cases} 0, \quad k \neq m \\ \text{при } k = m \\ (\varphi_m, \varphi_m) = n \text{ (одна и та же} \\ \text{норма у всех функций)} \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{(\varphi_k, \varphi_m)_{\overline{\omega}^{(h)}_{n-1}} = n\delta_{k,m}.}$$

В таком случае (10) легко решается

$$\left.\begin{aligned} (\varphi_k,\varphi_k)C_k = (f,\varphi_k) \;\Leftrightarrow\; C_k = \frac{1}{n}\sum_{p=0}^{n-1} f(x_p)e^{i(\frac{2\pi}{n}k)\cdot p^{*0)}} \\ \overline{F}(x) = \sum_{k=0}^{N} C_k e^{ikx}. \end{aligned}\right\}\text{формулы Бесселя} \tag{11}$$

Благодаря ортогональности систем $\{e^{ikx}\}$ эти функции можно использовать при больших $N$ и $n$ (разумеется нужно стремиться $N \le n-1$). Достаточно просто они выглядят при $n = 12$ (простая тригонометрия,что часто используется).

## 5.3 Сглаживание (фильтрация) экспериментальных таблиц методом наименьших квадратов

В качестве второй иллюстрации применения МНК в обработке экспериментальных данных рассмотрим задачу сглаживания (или "фильтрации") экспериментальных данных, полученных с *большими ошибками*. При этом поступают так:

Возьмем несколько точек $x_i$ в таблице и в выбранном интервале сетки построим среднеквадратичную аппрксимацию $\varphi(x)$ с одним или двумя параметрами (обычно полиноминальную, т.е. полином невысокой степени).

Центральной точке системы узлов припишем то значение, которое дает аппроксимация.

Для трех точек $x_{k-1}, x_k, x_{k+1}$ при аппроксимации полиномом 1-ой степени (2 параметра) получим(ограничимся случаем *равномерной* сетки $h - const$):

$$\varphi(x) = C_0 + C_1(x - x_k); \qquad x \in [x_{k-1}, x_{x+1}]$$

Погрешность на этих узлах ($\rho_k \equiv 1$):

$$\delta^2 = (\varphi(x_{k-1}) - f(x_{k-1}))^2 + (\varphi(x_k) - f(x_k))^2 + (\varphi(x_{k+1}) - f(x_{k+1}))^2 =$$

$$= (C_0 - hC_1 - y_{k-1})^2 + (c_0 - y_k)^2 + (C_0 + hC_1 - y_{k+1})^2 \equiv \Phi(C_0, C_1)$$

СЛАУ (10) в частном случае для $C_0, C_1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial\Phi}{\partial C_0} = \frac{\partial\Phi}{\partial C_1} = 0$. Имеем:

$$\begin{cases} \cancel{2}(C_0 - \cancel{h}\,\cancel{C_1} - y_{k-1}) + \cancel{2}(C_0 - y_k) + \cancel{2}(C_0 + \cancel{h}\,\cancel{C_1} - y_{k+1}) = 0 \\ \cancel{2}(C_0 - hC_1 - y_{k-1})\cdot(-h) + 0 + \cancel{2}(C_0 + hC_1 - y_{k+1})\cdot h = 0 \end{cases}$$

Её решение

$$\begin{cases} 3C_0 = y_{k-1} + y_k + y_{k+1} \\ 2h^2C_1 = h(y_{k+1} - y_{k-1}) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} C_0 = \dfrac{y_{k-1} + y_k + y_{k+1}}{3} \\ C_1 = \dfrac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h} \end{cases}$$

$^{*0)} \equiv ik \cdot \frac{2\pi}{n}p \qquad ("ikx")$

Окончательно

$$\varphi(x) = \frac{y_{k-1} + y_k + y_{k+1}}{3} + (x - x_k)\frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h}; \quad k = 1, 2, \ldots, (n-1) \tag{12}$$

$$\varphi(x_k) = \frac{y_{k-1} + y_k + y_{k+1}}{3}; \tag{*}$$

осреднение по 3-м точкам (простейший линейный фильтр)

- В рассмотренном случае сглаживание свелось к *осреднению* табличных значений по соседним узлам;

- В радиотехнике такой способ обработки периодического сигнала называют *фильтрацией*. Можно показать, что формула (*) ослабляет высокочастотную составляющую в спектре сигнала примерно в 3 раза, не изменяя практически его низкочастотной составляющей*1).

## 5.4 О равномерном приближении функций

Заканчивая частичное рассмотрение вопроса среднеквадратичной аппроксимации функций, хотелось бы остановиться на комментарии к равномерному приближении функции. Ищется $\overline{F}$ такая, что

$$\|f - \overline{F}\|_c = \inf_{F \in \mathcal{F}} \sup_{[a,b]} |f(x) - F(x)|$$

Формально теорема Вейерштрасса решает вопрос о существовании полинома $P_n(x)$ равномерного приближения с заданной точностью непрерывной на $[a,b]$ функции$f(x)$, т.е. $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists\, n = n(\varepsilon) > 0$ и $P_n(x)$ такие, что

$$\|f - P_n\|_c = \max_{[a,b]} |f(x) - P_n(x)| < \varepsilon.$$

Мы ограничимся констатацией двух <u>*но*</u>:

1) Пусть для $2\pi$-периодической функции $f(x)$ *тригонометрический* полином наилучшего равномерного приближения есть $P_n(x)$. Доказано, что *тригонометрический* полином среднеквадратичного приближения того же порядка $n$ — $Q_n(x)$ имеет в $C[a,b]$ погрешность не хуже

$$\|f - Q_n(x)\|_{C[a,b]} \leq \left(\frac{9}{2} + \ln n\right) \cdot \|f - P_n(x)\|_{C[a,b]}.$$

Тем самым, при разумных $n$, $Q_n(x)$ ненамного, в смысле приближения, хуже чем $P_n(x)$. Аналогичная по смыслу оценка имеется и для алгебраических полиномов на $[-1, 1]$.

2) Для построения полинома $P_n(x)$ наилучшего равномерного приближения известны *лишь итерационные способы*. В то время как $Q_n(x)$ строится почти явно при решении СЛАУ (10).

---

*1)[3 (Самарский и др.)]