Обработка данных. Цели обработки данных. Виды эксперимента. Аппроксимация. Интерполяция. Локальная и глобальная интерполяции

На настоящий момент, единственное, известное человеку, «устройство для обработки информации» – это сам человек. Поэтому, то, что называют «современными информационными технологиями», сводится, по большей части, к обработке данных с помощью различных методов, включая применение современных компьютеров и программ для них, а также – методы создания и издания:

- книг,
- фильмов,
- музыки,
- веб-сайтов,
- справочников,
- учебных пособий.

При этом данные, по сути, являются формой представления информации вне сознания отдельного человека.

Типичные цели обработки данных

- собрать всю доступную информацию, представленную в данных различной природы;
- отделить существенную информацию, представленную данными, от несущественной, для рассмотрения в данный момент;
- представить существенную информацию в виде, наиболее удобном для восприятия человеком.

Эти цели, в свою очередь, приводят к постановке задач обработки данных. Общие задачи:

- сбор данных;
- ввод данных в различные информационные системы;
- накопление данных;
- хранение накопленных данных, в том числе;

- доступ к данным;
- передача данных и обмен данными;
- представление данных.

Экспериментальные данные – все исходные и выходные числовые данные эксперимента, сведенные в таблицу экспериментальных данных.

Обработка экспериментальных данных – различные методы построения математической модели объекта по таблице экспериментальных данных.

Регрессионный анализ – наиболее распространенный метод обработки данных, который включает в себя метод наименьших квадратов. При регрессионном анализе таблица экспериментальных данных обычно отражается алгебраическими степенными полиномами, которые называют полиномами или уравнениями регрессии. Отсюда термины – задача регрессии, коэффициенты регрессии и т.п. Сам термин регрессия отражает тот факт, что с увеличением степени полинома точность отражения таблицы экспериментальных данных обычно возрастает, а ошибка отражения соответственно уменьшается, регрессирует.

Управляемые факторы – это такие воздействия на объект исследования, численные значения которых определяются и контролируются самим экспериментатором.

Активный эксперимент – это эксперимент, в котором задействованы только управляемые факторы. Пример – изучение зависимости урожайности какой-либо сельскохозяйственной культуры от объемов орошения. Эти объемы для различных экспериментальных полей посева назначаются самим исследователем.

Контролируемые факторы – это такие воздействия на объект исследования, численные значения которых экспериментатором не устанавливаются, но значения их исследователь может измерять, контролировать и фиксировать.

Пассивный эксперимент – это эксперимент, в котором задействованы только контролируемые факторы. Пример – изучение зависимости урожайности сельскохозяйственной культуры от объемов атмосферных осадков, которыми экспериментатор управлять не может.

Активно-пассивный (или пассивно-активный**) эксперимент** – это совмещение обоих видов эксперимента, когда зависимость урожайности изучается от совместного объема и орошения и атмосферных осадков.

Основным «рабочим инструментом» и эксперимента и обработки экспериментальных данных является численное значение факторов воздействия и откликов объекта исследования, т.е. число. Какова ни была бы природа факторов и откликов, включая в том числе эмоции или впечатления, они должны быть выражены количественно, числом.

Числа при экспериментировании получают тремя способами:

- **подсчетом,**
- **измерением,**
- **методом экспертных оценок.**

Примером последнего способа является бальная оценка членами жюри выступления спортсменки по художественной гимнастике. Сюда же относится и оценка, выставляемая студенту преподавателем на экзамене.

Обработка данных. Аппроксимация. Интерполяция.

Многим из тех, кто сталкивается с научными и инженерными расчётами часто приходится оперировать наборами значений, полученных экспериментальным путём или методом случайной выборки. Как правило, на основании этих наборов требуется построить функцию, на которую могли бы с высокой точностью попадать другие получаемые значения. Такая задача называется аппроксимацией кривой.

Аппроксимацией (приближением) функции $f(x)$ **называется нахождение такой функции** $F(x)$ **(аппроксимирующей функции), которая была бы близка заданной**. Критерии близости функций $f(x)$ и $F(x)$ могут быть различные.

В том случае, когда приближение строится на дискретном наборе точек, аппроксимацию называют точечной или дискретной. Наиболее часто встречающимся видом **точечной аппроксимации** является **интерполяция** (в широком смысле).

В том случае, когда аппроксимация проводится на непрерывном множестве точек (отрезке), аппроксимация называется непрерывной или интегральной.

Примером такой аппроксимации может служить разложение функции в ряд Тейлора, то есть замена некоторой функции степенным многочленом.

<u>Теорема.</u> Предположим, что $f \in C^{n+1}[a;\ b]$ и $x_0 \in [a;\ b]$ – некоторое фиксированное значение. Если $x \in [a;\ b]$, то

$$f(x) = P_n(x) + E_n(x),$$

где $P_n(x)$ – полином, который можно использовать для приближения $f(x)$**:**

$$f(x) \approx P_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n,$$

ошибка приближения $E_n(x)$ имеет вид

$$E_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1},$$

для некоторого $c = c(x)$, которое лежит между x и x_0.

Необходимыми данными для построения полинома Тейлора являются значение функции $f(x)$ и ее производных в точке x_0. **Недостаток** состоит в том, что **должны быть известны производные высокого порядка** и часто они либо неизвестны, либо сложны для вычислений.

Интерполяцией называют такую разновидность аппроксимации, при которой кривая построенной функции проходит точно через имеющиеся точки данных.

Существует также близкая к интерполяции задача, которая заключается в аппроксимации какой-либо сложной функции другой, более простой функцией. Если некоторая функция слишком сложна для производительных вычислений, можно попытаться вычислить её значение в нескольких точках, а по ним построить, то есть интерполировать, более простую функцию. Разумеется, использование упрощенной функции не позволяет получить такие же точные результаты, какие давала бы первоначальная функция. Но в некоторых классах задач достигнутый выигрыш в простоте и скорости вычислений может перевесить получаемую погрешность в результатах.

<u>Необходимость *интерполяции* функций в основном связана с двумя причинами:</u>

1. **<u>Функция f(x) имеет сложное аналитическое описание, вызывающее определенные трудности при его использовании (например, f(x) является спецфункцией: гамма-функцией, эллиптической функцией и др.).</u>**
2. **<u>Аналитическое описание функции f(x) неизвестно, т. е. f(x) задана таблично. При этом необходимо иметь аналитическое описание, приближенно представляющее f(x) (например, для вычисления значений f(x) в произвольных точках, определения интегралов и производных от f(x) и т. п.)</u>**

Постановка задачи интерполяции

Простейшая задача *интерполяции* заключается в следующем. На отрезке $[a, b]$ заданы $n + 1$ точки $x_i = x_0, x_1, \ldots, x_n$, которые называются *узлами интерполяции,* и значения некоторой функции $f(x)$ в этих точках

$$\boldsymbol{f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, \ldots, f(x_n) = y_n.} \qquad (1)$$

Требуется построить функцию $\mathrm{F}(x)$ (*интерполяционная функция*), принадлежащую известному классу и принимающую в узлах интерполяции те же значения, что и $f(x)$, т. е. такую, что

$$\mathbf{F}(x_0) = y_0, \mathbf{F}(x_1) = y_1, \ldots, \mathbf{F}(x_n) = y_n. \qquad (2)$$

Геометрически это означает, что нужно найти кривую $y = \mathrm{F}(x)$ некоторого определенного типа, проходящую через заданную систему точек $\mathrm{M}(x_i, y_i)$ ($i = 0, 1, \ldots, n$) (Рисунок 1).

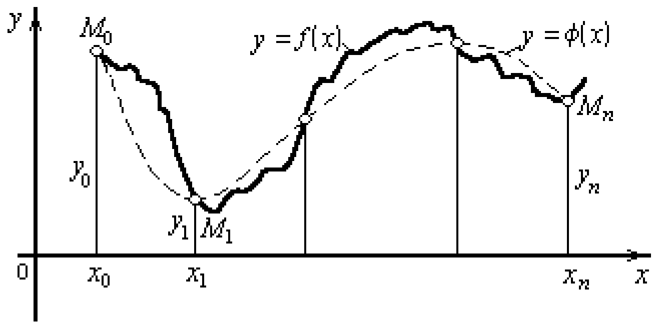


Рисунок 1

В такой общей постановке задача может иметь бесконечное множество решений или совсем не иметь решений. Однако эта задача становится однозначной, если вместо произвольной функции $F(x)$ искать полином $P(x)$ (***интерполяционный полином***) степени не выше n, удовлетворяющий условиям (2), т. е. такой, что

$$P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1, \ldots, P(x_n) = y_n \qquad (3)$$

Полученную интерполяционную формулу

$$\varphi(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0 \qquad (4)$$

обычно используют для приближенного вычисления значений данной функции $P(x)$ для значений аргумента x, отличных от узлов интерполяции. Такая операция называется ***интерполяцией функций***.

Различают два вида интерполяции:

- ***глобальная*** **– соединение всех точек $f(x)$ единым интерполяционным полиномом;**
- ***локальная*** **– соединение точек отрезками прямой (по двум точкам), отрезками параболы (по трем точкам).**

Заметим, что здесь приходится различать два случая:

1) *интерполяцию* (от лат. *interpolar* — подновлять) — восстановление промежуточных значений функции внутри интервала $[x_0, x_n]$ по ряду известных ее значений;

2) *экстраполяцию* (лат. приставка *extra* означает «вне») — когда $[x_0, x_n]$.

Вообще говоря, задачи восстановления непрерывной функции по ее дискретным значениям делятся на задачи экстраполяции и интерполяции. **Экстраполяцией называют определение будущих значений функции с момента очередного отсчета до момента поступления следующего отсчета.** **Интерполяцией называют определение промежуточных значений функции между двумя полученными отсчетами.** Когда хо < х < хn, приближение полиномом Р(х) называется **значением интерполяции**. Если либо х < хц, либо хм < х, то Р(х) называют **значением экстраполяции**. Следует иметь в виду, что точность экстраполяции обычно очень невелика.

Локальная интерполяция.

Линейная интерполяция

Простейшим и часто используемым видом локальной интерполяции является *линейная интерполяция*. Она состоит в том, что заданные точки $M(x_i, y_i)$ ($i = 0, 1, \ldots, n$) соединяются прямолинейными отрезками, и функция $f(x)$ приближается к ломаной с вершинами в данных точках (Рисунок 2).

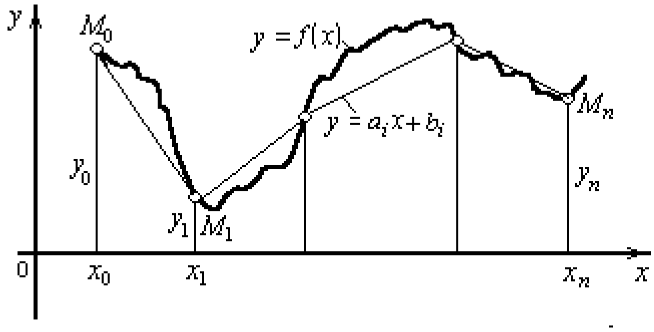


Рисунок 2. Линейная интерполяция

Уравнения каждого отрезка ломаной линии в общем случае разные. Поскольку имеется n интервалов $(x_i\ ,\ x_{i\ +\ 1})$, то для каждого из них в качестве уравнения интерполяционного полинома используется уравнение прямой, проходящей через две точки. В частности, для i – го интервала можно написать уравнение прямой, проходящей через точки $(x_i\,, y_i)$ и $(x_{i\,+\,1}, y_{i\,+\,1})$, в виде:

$$\frac{y - y_i}{y_{i+1} - y_i} = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i},\ x_i \le x \le x_{i+1}.$$

Имея в виду, что $y = m(x - x_1) + y_1$, а $m = \dfrac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$ – тангенс угла наклона касательной, получаем:

$$y = (y_2 - y_1)\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} + y_1. \qquad (5)$$

Такая интерполяция называется кусочно-линейной.

Следовательно, при использовании линейной интерполяции сначала нужно определить интервал, в который попадает значение аргумента x, а затем подставить его в формулу (20) и найти приближенное значение функций в этой точке.

Пример 1. Даны точки $K_1(1,\ 1)$, $K_2(2,\ 2)$, $K_3(3,\ 0)$, $K_4(4,\ -1)$. Произвести кусочно-линейную интерполяцию.

Соединяем каждые две точки. Для нахождения интерполяционных полиномов первой степени применим (5). Тогда получим:

$$y1 = x - 1,\ \ y2 = 4 - 2x,\ \ y3 = 3 - x.$$

Квадратичная интерполяция

В случае *квадратичной интерполяции* в качестве интерполяционной функции на отрезке (x_{i-1}, x_{i+1}) принимается квадратный трехчлен. Уравнения квадратичного трехчлена

$$y_i = a_i x^2 + b_i x + c_i,\ x_{i-1} \le x \le x_{i+1} \tag{6}$$

содержат три неизвестных коэффициента a_i, b_i, c_i, для определения которых необходимы три уравнения. Ими служат условия прохождения параболы (6) через три точки (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1}). Эти условия можно записать в виде:

$$\begin{aligned} a_i x_{i-1}^2 + b_i x_{i-1} + c_i &= y_{i-1}, \\ a_i x_i^2 + b_i x_i + c_i &= y_i, \\ a_i x_{i+1}^2 + b_i x_{i+1} + c_i &= y_{i+1}. \end{aligned} \tag{7}$$

Интерполяция для любой точки $x \in [x_0,\ x_n]$ проводится по трем ближайшим точкам.

Пример 2. Данные из примера 1 применим для построения квадратичных трехчленов. Используя первые три точки $K_1(1, 1)$, $K_2(2, 2)$, $K_3(3, 0)$, составим систему уравнений:

$$\begin{cases} a + b + c = 1 \\ 4a + 2b + c = 2, \\ 9a + 3b + c = 0 \end{cases}$$

Откуда методом Крамера получаем следующие коэффициенты: $a = -1.5,\ b = 5.5,\ c = -3$ и квадратичный трехчлен принимает вид:

$$P(x) = -1.5x^2 + 5.5x - 3.$$

Используя следующие три точки $K_2(2, 2)$, $K_3(3, 0)$, $K_4(4, -1)$, составляя систему и, решая ее, получим:

$$P(x) = 0.5x^2 - 0.5x + 9.$$

Кубическая сплайн-интерполяция

В последние годы интенсивно развивается новый раздел современной вычислительной математики – теория *сплайнов*. Сплайны позволяют эффективно решать задачи обработки экспериментальных зависимостей между параметрами, имеющих достаточно сложную структуру.

Наравне с рациональной интерполяцией, сплайн-интерполяция является одной из альтернатив полиномиальной интерполяции.

В основе сплайн-интерполяции лежит следующий принцип. Интервал интерполяции разбивается на небольшие отрезки, на каждом из которых функция задается полиномом третьей степени. Коэффициенты полинома подбираются таким образом, чтобы выполнялись определенные условия (какие именно, зависит от способа интерполяции). Общие для всех типов сплайнов третьего порядка требования – непрерывность функции и, разумеется, прохождение через предписанные ей точки. Дополнительными требованиями могут быть линейность функции между узлами, непрерывность высших производных и т.д.

Основными достоинствами сплайн-интерполяции являются её устойчивость и малая трудоемкость. Системы линейных уравнений, которые требуется решать для построения сплайнов, очень хорошо обусловлены, что позволяет получать коэффициенты полиномов с высокой точностью. В результате даже про очень больших N вычислительная схема не теряет устойчивость. Построение таблицы коэффициентов сплайна требует O(N) операций, а вычисление значения сплайна в заданной точке – всего лишь O(log(N)).

Рассмотренные выше методы локальной интерполяции, по существу, являются простейшим сплайном первой степени (для линейной интерполяции) и второй степени (для квадратичной интерполяции).

Наиболее широкое практическое применение, в силу их простоты, нашли кубические сплайны. Интерполяция сплайнами третьего порядка – это быстрый, эффективный и устойчивый способ интерполяции функций. Основные идеи теории кубических сплайнов сформировались в результате попыток математически описать гибкие рейки из упругого материала (механические сплайны), которыми издавна пользовались чертежники в тех случаях, когда возникала необходимость проведения через заданные точки достаточно гладкой кривой. Известно, что рейка из упругого материала, закрепленная в некоторых точках и находящаяся в положении равновесия, принимает форму, при которой ее энергия является минимальной. Это фундаментальное свойство позволяет эффективно использовать сплайны при решении практических задач обработки экспериментальной информации.

В общем случае для функции $y = f(x)$ требуется найти приближение $y = P(x)$ таким образом, чтобы $f(x_i) = P(x_i)$ в точках $x = x_i$, а в остальных точках отрезка $[a, b]$ значения функций $f(x)$ и $P(x)$ были близкими между собой. При малом числе экспериментальных точек (например, 6-8) для решения задачи интерполяции можно использовать один из методов построения интерполяционных полиномов. Однако при большом числе узлов интерполяционные полиномы становятся практически непригодными. Это связано с тем, что степень интерполяционного полинома лишь на единицу меньше числа экспериментальных значений функций. Можно, конечно, отрезок, на котором определена функция, разбить на участки, содержащие малое число экспериментальных точек, и для каждого из них построить интерполяционные полиномы. Однако в этом случае аппроксимирующая функция будет иметь точки, где производная не является непрерывной, т. е. график функции будет содержать точки “излома”.

Кубические сплайны лишены этого недостатка. Исследования теории балок показали, что гибкая тонкая балка между двумя узлами достаточно хорошо описывается кубическим полиномом, и поскольку она не разрушается, то аппроксимирующая функция должна быть по меньшей мере непрерывно дифференцируемой. Это означает, что функции $P(x)$, $P'(x)$, $P''(x)$ должны быть непрерывными на отрезке $[a, b]$.

Кубическим интерполяционным сплайном, **соответствующим данной функции $f(x)$ и данным узлам x_i, называется функция $S(x)$, удовлетворяющая следующим условиям:**

1. **на каждом сегменте $[x_i,\ x_{i+1}]$, $i = 1, \ldots, N$ функция $S(x)$ является полиномом третьей степени,**
2. **функция $S(x)$, а также ее первая и вторая производные непрерывны на отрезке $[a, b]$,**
3. **$S(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \ldots, N$.**

На каждом из отрезков $[x_i,\ x_{i+1}]$, $i = 1, \ldots, N$ будем искать функцию $S(x) = S_i(x)$ в виде полинома третьей степени:

$$S(x) = S_i(x) = a_0^{(i)} + a_1^{(i)}(x - x_i) + a_2^{(i)}(x - x_i)^2 + a_3^{(i)}(x - x_i)^3, \qquad (8)$$

$$x_i \le x \le x_{i+1}$$

где $a_0,\ a_1,\ a_2,\ a_3$ – коэффициенты, подлежащие определению на всех n элементарных отрезках и удовлетворяет условиям

$$S(x_i) = y_i.$$

Если всего n узлов, то интервалов $n-1$. Значит, требуется определить $4(n-1)$ неизвестных коэффициентов полиномов. Условие дает нам n уравнений. Условие непрерывности функции и ее первых двух производных во внутренних узлах интервала дает дополнительно $3(n-2)$ уравнений

$$S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1})$$
$$S_i'(x_{i+1}) = S_{i+1}'(x_{i+1})$$
$$S_i''(x_{i+1}) = S_{i+1}''(x_{i+1})$$

Всего имеем $4(n-6)$ различных уравнений. Два недостающих уравнения можно получить, задавая условия на краях интервала. В частности, можно потребовать нулевой кривизны функции на краях интервала, то есть $S''(a) = S''(b) = 0$. Задавая различные условия на концах интервала, можно получить разные сплайны.

Полиномы используются для составления схем алгоритмов для программного обеспечения для приближения функций, численного дифференцирования, численного интегрирования и рисунков кривых на компьютере, которые должны проходить через заданные точки.

Глобальная интерполяция

При глобальной интерполяции ищется единый полином для всего интервала. Если среди узлов {xi,yi} нет совпадающих, то такой полином будет единственным, и его степень не будет превышать n.

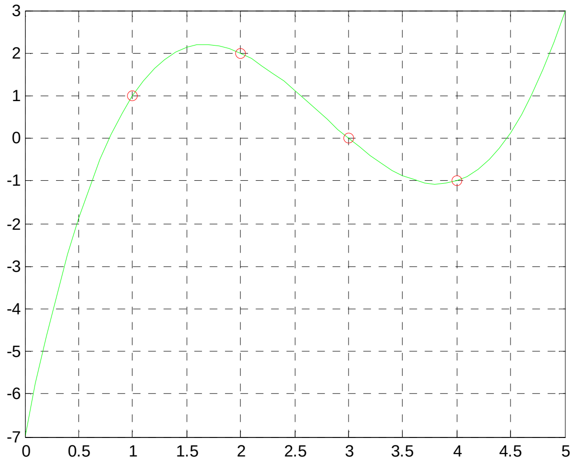
Запишем систему уравнений для определения коэффициентов полинома

$$
\begin{gathered}
c_0 + c_1 x_0 + c_2 x_0^2 + \ldots + c_{n-1} x_0^{n-1} = y_0 \\
c_0 + c_1 x_1 + c_2 x_1^2 + \ldots + c_{n-1} x_1^{n-1} = y_1 \\
\vdots \\
c_0 + c_1 x_1 + c_2 x_{n-1}^2 + \ldots + c_{n-1} x_{n-1}^{n-1} = y_{n-1}
\end{gathered}
$$

Пример 3. Для точек $K_1(1,1)$, $K_2(2,\,2)$, $K_3(3,\,0)$, $K_4(4,\,-1)$ найти интерполяционный полином третьей степени.

Решение можно производить средствами СКМ – MatLab.

```
>> A=[1 1 1 1;8 4 2 1;27 9 3 1;64 16 4 1];
>> b=[1;2;0;-1];x=A\b
x =
   0.666666666666666
  -5.499999999999995
  12.833333333333320
  -6.999999999999991
>> A*x
ans =
   1.000000000000000
   1.999999999999998
   0.000000000000002
  -0.999999999999998
>> x=0:.1:5;p=0.666666666666666*x.^3-…
5.499999999999995*x.^2+12.833333333333320*x…
-6.999999999999991;
>> x1=[1 2 3 4];p1=[1 2 0 -1];
>> plot(x,p,'-g',x1,p1,'or');grid
```



Существуют некоторые стандартные формы записи интерполяционных полиномов. Интерполяционный многочлен в форме Лагранжа имеет вид

$$L_n(x)=\sum_{i=0}^{n}\left[f(x_i)\prod_{j\neq i}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right]$$

Пример 4. Положим $n=1$. Ясно, что мы имеем в этом случае две точки и интерполяционная формула Лагранжа дает уравнение прямой, проходящей через две заданные точки. Обозначив абсциссы этих точек через a и b, получим интерполяционный полином в виде

$$L_1(x)=\frac{x-b}{a-b}y_0+\frac{x-a}{b-a}y_1$$

Примем $n=2$. Тогда получим уравнение параболы, проходящей через три точки $x_0,\ x_1,\ x_2$:

$$L_2(x)=f(x_0)\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\frac{x-x_2}{x_0-x_2}+f(x_1)\frac{x-x_2}{x_1-x_2}\frac{x-x_0}{x_1-x_0}+f(x_2)\frac{x-x_1}{x_2-x_1}\frac{x-x_0}{x_2-x_0}\qquad(*)$$

Пример 5. Пусть заданы значения $x_0=1,\ x_1=2, x_2=3,\ y_0=1,\ y_1=2,\ y_2=0$ (см. пример 1). Определить значение неизвестной функции для $x=2.5$.

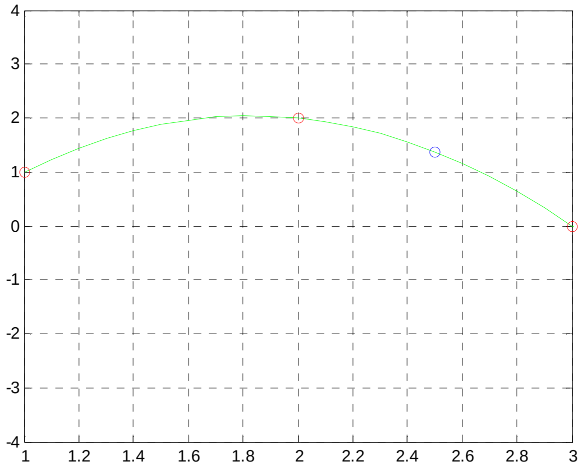
Для данного случая, когда мы имеем три значения функции, интерполяционная формула Лагранжа представляется в виде (*) и, после подстановки заданных значений в формулу Лагранжа получаем:

$$L_2(x)=1\cdot\frac{x-2}{1-2}\cdot\frac{x-3}{1-3}+2\cdot\frac{x-3}{2-3}\cdot\frac{x-1}{2-1}+0\cdot\frac{x-2}{3-2}\cdot\frac{x-1}{3-1}.$$

После преобразований получаем: $L_2(x)=-1.5x^2+5.5x-3$.

Определим значение

$L_2(x)$ при $x = 2.5$: $L_2(2.5) = 1.375$.



Еще один из видов интерполяционных многочленов - многочлен в форме Ньютона имеет вид:

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{i=1}^{n} (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{i-1})\, y(x_0; x_1; \ldots; x_i),$$

где

$$y(x_i; x_j) = \frac{y(x_i) - y(x_j)}{x_i - x_j},$$