УДК 517.2

ЗАДАЧА МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ С ОГРАНИЧЕНИЯМИ

В.А. Горелик, Н.В. Самсонова

1. Постановка задачи

Среди способов аппроксимации таблично заданной функции наиболее распространен случай линейной аппроксимации многочленами, когда приближение ищется в виде

$$f(x) = a_0 x^p + a_1 x^{p-1} + \ldots + a_p,$$

где значения коэффициентов a_j определяются из условия минимизации суммы квадратов отклонений табличных значений y_i от соответствующих значений приближаемой функции $f(x_i)$ (так называемая задача метода наименьших квадратов):

$$\Phi = \sum_{i=1}^{p} \varphi_i \to \min, \tag{1}$$

где $\varphi_i = (y_i - f(x_i))^2$.

При наложении дополнительных ограничений на значения переменных, задача поиска экстремума функции Φ усложняется.

Пусть требуется аппроксимировать исходную табличную функцию $y(x)$ многочленом $f(x)$ исходя из условия минимизации суммы квадратов отклонений y_i от $f(x_i)$, то есть

$$\Phi = \sum_{i \in I_1} \varphi_i \to \min, \tag{2}$$

где $\varphi_i = (y_i - f(x_i, a))^2$ при ограничениях

$$\begin{aligned} \varphi_i &= 0, \qquad i \in I_2; \\ I &= I_1 \cup I_2 = \{1,\ 2,\ \ldots,\ n\}. \end{aligned} \tag{3}$$

Положим $|I_1| = k$ и $|I_2| = m, \quad k + m = n$.

Точки функции $y(x)$, индексы которых принадлежат множеству I_1, обозначим через $(\bar{x}_i, \bar{y}_i)$, и через $(\bar{\bar{x}}_i, \bar{\bar{y}}_i)$ – точки множества I_2. Множества I_1, I_2 упорядочены по возрастанию $\bar{x}_i$ и $\bar{\bar{x}}_i$ соответственно.

2. Метод неопределенных коэффициентов

Рассматривая ограничения (3), приходим к задаче интерполирования функции, проходящей через m точек. Решением ее является полином степени не выше $(m-1)$.

Метод решения задачи, при котором коэффициенты a_j определяются непосредственным решением системы (3), называется методом неопределенных коэффициентов.

Как правило, в методе неопределенных коэффициентов число заданных условий равно числу свободных (неизвестных) параметров, подлежащих определению [1], [2], [5]. Отступив от этого правила - внеся в интерполяционную задачу элемент свободы - увеличим степень интерполяционного многочлена на единицу

$$f(x) = a_0 x^m + a_1 x^{m-1} + \ldots + a_m. \tag{4}$$

Применительно к условиям (3) приходим к системе m уравнений с $(m+1)$ неизвестными

$$a_0 \bar{\bar{x}}_i^m + a_1 \bar{\bar{x}}_i^{m-1} + \ldots + a_{m-1} \bar{\bar{x}}_i + a_m = \bar{\bar{y}}_i, \quad i = \overline{1, m}. \tag{5}$$

Решение данной системы не однозначно, но допускает выражение m параметров через какой-либо один – фиксированный. Зафиксируем параметр a_0. Тогда систему (5) можно переписать в виде

$$a_1\bar{\bar{x}}_i^{m-1} + \ldots + a_{m-1}\bar{\bar{x}}_i + a_m = \bar{\bar{y}}_i - a_0\bar{\bar{x}}_i^m, \quad i = \overline{1,m}. \tag{6}$$

Система (6) – m уравнений с m неизвестными a_j ($j = \overline{1,m}$) – однозначно разрешима и решение можно представить в виде

$$\tilde{a}_j = \frac{\Delta_j}{\Delta}, \qquad j = \overline{1,m}, \tag{7}$$

где Δ определитель системы (6), а Δ_j определитель, получаемый из определителя системы заменой j-го столбца (то есть столбца коэффициентов при неизвестном a_j) столбцом свободных членов.

$$\Delta = \begin{vmatrix} \bar{\bar{x}}_1^{m-1} & \bar{\bar{x}}_1^{m-2} & \ldots & \bar{\bar{x}}_1 & 1 \\ \bar{\bar{x}}_2^{m-1} & \bar{\bar{x}}_2^{m-2} & \ldots & \bar{\bar{x}}_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots & \vdots \\ \bar{\bar{x}}_m^{m-1} & \bar{\bar{x}}_m^{m-2} & \ldots & \bar{\bar{x}}_m & 1 \end{vmatrix} = \prod_{1 \le j < i \le m} (\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_j) \tag{8}$$

– так называемый определитель Вандермонда (отличен от нуля, так как в таблице узлов, которыми задана функция $y(x)$, нет повторяющихся).

$$\Delta_j = \begin{vmatrix} \bar{\bar{x}}_1^{m-1} & \ldots & \bar{\bar{x}}_1^{m-(j-1)} & \bar{\bar{y}}_1 - a_0\bar{\bar{x}}_1^m & \bar{\bar{x}}_1^{m-(j+1)} & \ldots & \bar{\bar{x}}_1 & 1 \\ \bar{\bar{x}}_2^{m-1} & \ldots & \bar{\bar{x}}_2^{m-(j-1)} & \bar{\bar{y}}_2 - a_0\bar{\bar{x}}_2^m & \bar{\bar{x}}_2^{m-(j+1)} & \ldots & \bar{\bar{x}}_2 & 1 \\ \vdots & \ldots & \vdots & \vdots & \vdots & \ldots & \vdots & \vdots \\ \bar{\bar{x}}_m^{m-1} & \ldots & \bar{\bar{x}}_m^{m-(j-1)} & \bar{\bar{y}}_m - a_0\bar{\bar{x}}_m^m & \bar{\bar{x}}_m^{m-(j+1)} & \ldots & \bar{\bar{x}}_m & 1 \end{vmatrix}. \tag{9}$$

Разложим определитель (9) по j-му столбцу

$$\Delta_j = (\bar{\bar{y}}_1 - a_0\bar{\bar{x}}_1^m)\Delta_{1j} + (\bar{\bar{y}}_2 - a_0\bar{\bar{x}}_2^m)\Delta_{2j} + \ldots + (\bar{\bar{y}}_m - a_0\bar{\bar{x}}_m^m)\Delta_{mj},$$

Δ_{ij} есть алгебраическое дополнение элемента $(\bar{\bar{y}}_i - a_0\bar{\bar{x}}_i^m)$.

Подставим разложение в формулу (7)

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_j &= \frac{\Delta_{1j}}{\Delta}\bar{\bar{y}}_1 - \frac{\Delta_{1j}}{\Delta}a_0\bar{\bar{x}}_1^m + \ldots + \frac{\Delta_{mj}}{\Delta}\bar{\bar{y}}_m - \frac{\Delta_{mj}}{\Delta}a_0\bar{\bar{x}}_m^m = \\
&= \left(\frac{\Delta_{1j}}{\Delta}\bar{\bar{y}}_1 + \ldots + \frac{\Delta_{mj}}{\Delta}\bar{\bar{y}}_m\right) - \left(\frac{\Delta_{1j}}{\Delta}\bar{\bar{x}}_1^m + \ldots + \frac{\Delta_{mj}}{\Delta}\bar{\bar{x}}_m^m\right)a_0 = \\
&= \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{y}}_i - a_0\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{x}}_i^m, \qquad j = \overline{1, m}.
\end{aligned}$$

Или после введения обозначений

$$z_j^0 = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{y}}_i, \qquad z_j^m = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{x}}_i^m, \qquad j = \overline{1, m},$$

формулы для неизвестных коэффициентов системы (6) можно записать в виде

$$\tilde{a}_j = z_j^0 - a_0 z_j^m, \qquad j = \overline{1, m}. \tag{10}$$

Осталось определить коэффициент a_0.

Подставим найденные выражения для коэффициентов a_j в формулу интерполяционного полинома (4)

$$\begin{aligned}
f(x) &= a_0x^m + (z_1^0 - a_0z_1^m)x^{m-1} + \ldots + (z_m^0 - a_0z_m^m) = \\
&= a_0(x^m - z_1^m x^{m-1} - \ldots - z_m^m) + (z_1^0x^{m-1} + \ldots + z_m^0) = g(x,\ a_0).
\end{aligned}$$

Получили новую функцию $g(x, a_0)$, – линейную относительно a_0.

Сформулируем следующую задачу: требуется аппроксимировать исходную табличную функцию $y(x)$ функцией $g(x, a_0)$ исходя из условия минимизации суммы квадратов отклонений y_i от $g(x, a_0)$

$$\Phi^{(1)} = \sum_{i \in I_1}\varphi_i^{(1)} \to \min, \tag{11}$$

где $\varphi_i^{(1)} = (\bar{y}_i - g(\bar{x}_i,\ a_0))^2$.

Заметим, что решив задачу (11) (вычислив значение параметра a_0), мы тем самым решим исходную задачу (2), получив полином степени не выше m, проходящий через m точек принадлежащих множеству I_2 и дающий минимум сумме квадратов отклонений для точек множества I_1.

Продифференцируем $\Phi^{(1)}$ по a_0 и приравняем нулю полученное выражение (найдем экстремум данной функции)

$$\frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial a_0} = 0. \tag{12}$$

Получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial a_0} &= 2\sum_{i=1}^{k}\Big[\bar{y}_i - a_0(\bar{x}_i^m - \sum_{j=1}^{m} z_j^m \bar{x}_i^{m-j}) - \sum_{j=1}^{m} z_j^0 \bar{x}_i^{m-j}\Big]\cdot \\ &\qquad \cdot\Big[\sum_{j=1}^{m} z_j^m \bar{x}_i^{m-j} - \bar{x}_i^m\Big] = \\ &= 2\sum_{i=1}^{k}\bar{y}_i(\sum_{j=1}^{m} z_j^m \bar{x}_i^{m-j} - \bar{x}_i^m) + 2a_0\sum_{i=1}^{k}(\sum_{j=1}^{m} z_j^m \bar{x}_i^{m-j} - \bar{x}_i^m)^2 - \\ &\qquad -2\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m} z_j^0 \bar{x}_i^{m-j}(\sum_{j=1}^{m} z_j^m \bar{x}_i^{m-j} - \bar{x}_i^m) = 0. \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\nu_i = \sum_{j=1}^{m} z_j^m \bar{x}_i^{m-j} - \bar{x}_i^m, \qquad i = \overline{1,k}.$$

Тогда

$$\frac{\partial \Phi^{(1)}}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{k}\bar{y}_i\nu_i + a_0\sum_{i=1}^{k}\nu_i^2 - \sum_{i=1}^{k}\nu_i\sum_{j=1}^{m} z_j^0 \bar{x}_i^{m-j} = 0.$$

Задача (11) имеет единственное решение, а именно,

$$\tilde{a}_0 = \frac{\sum_{i=1}^{k} \nu_i (\sum_{j=1}^{m} z_j^0 \bar{x}_i^{m-j} - \bar{y}_i)}{\sum_{i=1}^{k} \nu_i^2}.$$

Итак, все коэффициенты полинома $f(x)$, являющегося решением задачи (2) при ограничениях (3), вычислены. Искомый полином степени m построен

$$f(x) = \tilde{a}_0 x^m + \tilde{a}_1 x^{m-1} + \ldots + \tilde{a}_m.$$

Если рассматривать исходную задачу для полинома произвольной степени p ($p > m$), то система ограничений (3) будет эквивалентна системе m уравнений с $(p+1)$ неизвестными

$$a_0 \bar{\bar{x}}_i^p + a_1 \bar{\bar{x}}_i^{p-1} + \ldots + a_{p-1} \bar{\bar{x}}_i + a_p = \bar{\bar{y}}_i, \qquad i = \overline{1, m}. \tag{13}$$

Зафиксировав $(p+1-m)$ параметров a_j, например, $j = \overline{0, p+1-m}$, рассмотрим новую систему

$$\begin{aligned} a_{p+1-m} \bar{\bar{x}}_i^{m-1} + a_{p+2-m} \bar{\bar{x}}_i^{m-2} + \ldots &+ a_{p+(m-1)-m} \bar{\bar{x}}_i + a_p = \\ &= \bar{\bar{y}}_i - \sum_{j=0}^{p-m} a_j \bar{\bar{x}}_i^{p-j}, \quad i = \overline{1, m}, \end{aligned} \tag{14}$$

m уравнений с m неизвестными.

Решением данной системы является набор параметров a_j таких, что

$$\tilde{a}_{p-m+j} = \frac{\Delta_j}{\Delta}, \qquad j = \overline{1, m}, \tag{15}$$

где Δ – определитель системы (14) (определитель Вандермонда),

$$\Delta = \prod_{1 \le j < i \le m} (\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_j),$$

а Δ_j опеределитель, получаемый из определителя системы заменой j-го столбца (то есть столбца коэффициентов при неизвестном a_{p-m+j}) столбцом свободных членов.

$$\Delta_j = \begin{vmatrix} \bar{\bar{x}}_1^{m-1} & \ldots & \bar{\bar{x}}_1^{m-(j-1)} & \bar{\bar{y}}_1 - \sum_{j=0}^{p-m} a_j \bar{\bar{x}}_1^{p-j} & \bar{\bar{x}}_1^{m-(j+1)} & \ldots & 1 \\ \bar{\bar{x}}_2^{m-1} & \ldots & \bar{\bar{x}}_2^{m-(j-1)} & \bar{\bar{y}}_2 - \sum_{j=0}^{p-m} a_j \bar{\bar{x}}_2^{p-j} & \bar{\bar{x}}_2^{m-(j+1)} & \ldots & 1 \\ \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \bar{\bar{x}}_m^{m-1} & \ldots & \bar{\bar{x}}_m^{m-(j-1)} & \bar{\bar{y}}_m - \sum_{j=0}^{p-m} a_j \bar{\bar{x}}_m^{p-j} & \bar{\bar{x}}_m^{m-(j+1)} & \ldots & 1 \end{vmatrix}.$$

Разложив определитель Δ_j по j-му столбцу и подставив в формулу (15), получим

$$\tilde{a}_{p-m+j} = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{y}}_i - a_0\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{x}}_i^p - \ldots - a_{p-m}\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{x}}_i^m, \quad j = \overline{1,m}.$$

Введем обозначения

$$z_j^0 = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{y}}_i, \quad z_j^k = \frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{m}\Delta_{ij}\bar{\bar{x}}_i^k,\ k = \overline{m,p}, \quad j = \overline{1,m}.$$

Тогда формулы для коэффициентов a_{p-m+j} $(j = \overline{1,m})$ можно представить в виде

$$\tilde{a}_{p-m+j} = z_j^0 - a_0 z_j^p - a_1 z_j^{p-1} - \ldots - a_{p-m} z_j^m, \quad j = \overline{1,m}. \tag{16}$$

Подставим полученные выражения в формулу интерполяционного полинома (4)

$$f(x) = a_0 x^p + a_1 x^{p-1} + \ldots + a_{p-m} x^m +$$

$$+ \ (z_{p-m+1}^0 - a_0 z_{p-m+1}^p - a_1 z_{p-m+1}^{p-1} - \ldots - a_{p-m} z_{p-m+1}^m) x^{m-1} +$$
$$+ \ (z_{p-m+2}^0 - a_0 z_{p-m+2}^p - a_1 z_{p-m+2}^{p-1} - \ldots - a_{p-m} z_{p-m+2}^m) x^{m-2} + \ldots +$$

$$+ \ (z_p^0 - a_0 z_p^p - a_1 z_p^{p-1} - \ldots - a_{p-m} z_p^m) =$$

$$= \ a_0(x^p - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^p x^{m-j}) + a_1(x^{p-1} - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^{p-1} x^{m-j}) + \ldots +$$

$$+ \ a_{p-m}(x^m - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^m x^{m-j}) + \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^0 x^{m-j} \ = \ g(x, a_0, \ldots, a_{p-m}).$$

Сформулируем новую задачу: аппроксимировать табличную функцию $y(x)$ функцией $g(x, a_0, \ldots, a_{p-m})$ исходя из условия минимизации суммы квадратов отклонений $\bar{y}_i$ от $g(\bar{x}_i, a_0, \ldots, a_{p-m})$

$$\Phi^{(2)} = \sum_{i \in I_1} \varphi_i^{(2)} \to \min, \tag{17}$$

где $\varphi_i^{(2)} = (\bar{y}_i - g(\bar{x}_i, a_0, \ldots, a_{p-m}))^2$.

Получили обычную задачу метода наименьших квадратов.

$$\Phi^{(2)} = \sum_{i=1}^{k} \Big[\bar{y}_i - a_0(\bar{x}_i^p - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^p \bar{x}_i^{m-j}) - a_1(\bar{x}_i^{p-1} - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^{p-1} \bar{x}_i^{m-j}) -$$

$$- \ldots - a_{p-m}(\bar{x}_i^m - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^m \bar{x}_i^{m-j}) - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^0 \bar{x}_i^{m-j} \Big]^2 \to \min.$$

Введем обозначения

$$\nu_i^r = \bar{x}_i^r - \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^r \bar{x}_i^{m-j}, \quad r = \overline{m, p}, \quad \nu_i^0 = \sum_{j=1}^{m} z_{p-m+j}^0 \bar{x}_i^{m-j}, \quad i = \overline{1, k}.$$

Тогда

$$\Phi^{(2)} = \sum_{i=1}^{k} (\bar{y}_i - a_0 \nu_i^p - a_1 \nu_i^{p-1} - \ldots - a_{p-m} \nu_i^m - \nu_i^0)^2 \to \min.$$

Найдем экстремум данной функции, приравняв нулю частные производные $\Phi^{(2)}$ по переменным a_j, $j = \overline{0, p-m}$.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \Phi^{(2)}}{\partial a_0} &= 2\sum_{i=1}^{k}(\bar{y}_i - a_0\nu_i^p - a_1\nu_i^{p-1} - \ldots - a_{p-m}\nu_i^m - \nu_i^0)(-\nu_i^p) = 0,\\
\frac{\partial \Phi^{(2)}}{\partial a_1} &= 2\sum_{i=1}^{k}(\bar{y}_i - a_0\nu_i^p - a_1\nu_i^{p-1} - \ldots - a_{p-m}\nu_i^m - \nu_i^0)(-\nu_i^{p-1}) = 0,\\
&\vdots\\
\frac{\partial \Phi^{(2)}}{\partial a_{p-m}} &= 2\sum_{i=1}^{k}(\bar{y}_i - a_0\nu_i^p - a_1\nu_i^{p-1} - \ldots - a_{p-m}\nu_i^m - \nu_i^0)(-\nu_i^m) = 0.
\end{aligned}
$$

Или

$$
\begin{cases}
a_0\sum_{i=1}^{k}(\nu_i^p)^2 + \ldots + a_{p-m}\sum_{i=1}^{k}\nu_i^p\nu_i^m = \sum_{i=1}^{k}\nu_i^p(\bar{y}_i - \nu_i^0),\\
a_0\sum_{i=1}^{k}\nu_i^{p-1}\nu_i^p + \ldots + a_{p-m}\sum_{i=1}^{k}\nu_i^{p-1}\nu_i^m = \sum_{i=1}^{k}\nu_i^{p-1}(\bar{y}_i - \nu_i^0),\\
\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\\
a_0\sum_{i=1}^{k}\nu_i^m\nu_i^p + \ldots + a_{p-m}\sum_{i=1}^{k}(\nu_i^m)^2 = \sum_{i=1}^{k}\nu_i^m(\bar{y}_i - \nu_i^0).
\end{cases}
$$

Введем обозначения

$$
S_s^r = \sum_{i=1}^{k}\nu_i^r\nu_i^s, \quad V^r = \sum_{i=1}^{k}\nu_i^r(\bar{y}_i - \nu_i^0), \quad j = \overline{m,p}, \quad r = \overline{m,p}.
$$

Тогда

$$
\begin{cases}
a_0S_p^p + a_1S_{p-1}^p + \ldots + a_{p-m}S_m^p = V^p,\\
a_0S_p^{p-1} + a_1S_{p-1}^{p-1} + \ldots + a_{p-m}S_m^{p-1} = V^{p-1},\\
\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\\
a_0S_p^m + a_1S_{p-1}^m + \ldots + a_{p-m}S_m^m = V^m.
\end{cases} \tag{18}
$$

Получили систему $(p-m+1)$–го уравнения с $(p-m+1)$–им неизвестным.

Запишем формулы для определения коэффициентов a_j, $j = \overline{0, p-m}$.

$$
\tilde{a}_j = \frac{\Delta_j}{\Delta}, \quad j = \overline{0, p-m}, \tag{19}
$$

где Δ определитель системы (18)

$$\Delta = \begin{vmatrix} S_p^p & S_{p-1}^p & \dots & S_m^p \\ S_p^{p-1} & S_{p-1}^{p-1} & \dots & S_m^{p-1} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ S_p^m & S_{p-1}^m & \dots & S_m^m \end{vmatrix} = \sum \pm S_p^\alpha S_{p-1}^\beta \dots S_m^\gamma \qquad (20)$$

– (суммирование производится по всем перестановкам $\alpha, \beta, \dots, \gamma$ чисел m, $m+1, \dots, p$ и перед членом берется знак $+$, если перестановка $\alpha, \beta, \dots, \gamma$ четна, и знак -, если эта перестановка нечетна) – отличен от нуля, а определитель Δ_j получаем из определителя Δ заменой j-го столбца на столбец свободных членов.

$$\Delta_j = \begin{vmatrix} S_p^p & \dots & S_{p-j+1}^p & V^p & S_{p-j-1}^p & \dots & S_m^p \\ S_p^{p-1} & \dots & S_{p-j+1}^{p-1} & V^{p-1} & S_{p-j-1}^{p-1} & \dots & S_m^{p-1} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ S_p^m & \dots & S_{p-j+1}^m & V^m & S_{p-j-1}^m & \dots & S_m^m \end{vmatrix}. \qquad (21)$$

Разложив определитель Δ_j по j-му столбцу

$$\Delta_j = V^p \Delta_{1j} + V^{p-1} \Delta_{2j} + \dots + V^m \Delta_{(p-m+1)j},$$

и подставив разложение в формулу (19), получим

$$\tilde{a} = \frac{\Delta_{1j}}{\Delta} V^p + \frac{\Delta_{2j}}{\Delta} V^{p-1} + \dots + \frac{\Delta_{(p-m+1)j}}{\Delta} V^m, \quad j = \overline{0, p-m}. \qquad (22)$$

Совокупность всех коэффициентов $\tilde{a}_j$, $j = \overline{0, p}$, описываемых формулами (16) и (22), задает интерполяционный полином степени p

$$f(x) = \tilde{a}_0 x^p + \tilde{a}_1 x^{p-1} + \dots + \tilde{a}_{p-1} x + \tilde{a}_p$$

такой, что $f(x_i, \tilde{a}) - y_i = 0$, $\; i \in I_2$; и сумма квадратов отклонений y_i от $f(x_i, \tilde{a})$ для точек с индексами из множества I_1 минимальна.

3. Решение исходной задачи с применением интерполяционного многочлена в форме Лагранжа

Интерполяционный полином может быть записан в форме Лагранжа. Интерполяционные формулы Лагранжа представляют значительный интерес для вычислительной математики и применяются также при исследовании задач вариационного исчисления и математического программирования [4], [5].

Рассмотрим случай $p = m$.

$$f(x) = a_0x^m + a_1x^{m-1} + a_2x^{m-2} + \ldots + a_{m-1}x + a_m.$$

Построим функцию Лагранжа $L_m(x)$ степени m такую, что

$$L_m(\bar{\bar{x}}_i) = \bar{\bar{y}}_i, \qquad i = \overline{1,m}.$$

Запишем совокупность полиномов $p_i(x)$ степени m в количестве m $(i = \overline{1,m})$, каждый из них принимает нулевые значения во всех узлах x_j $(j = \overline{1,n})$, за исключением узла $\bar{\bar{x}}_i$, номер которого совпадает с порядковым номером полинома.

$$p_i(x_j) = \begin{cases} 0, & j \neq i, \\ 1, & j = i,\ j \in I_2. \end{cases} \tag{23}$$

Запишем полиномы $p_i(x)$, удовлетворяющие условию $p_i(x) = 0$, в виде произведения m сомножителей, в котором отсутствует множитель, содержащий узел $\bar{\bar{x}}_i$.

$$p_1(x) = C_1x(x - \bar{\bar{x}}_2)(x - \bar{\bar{x}}_3)\ldots(x - \bar{\bar{x}}_m),$$

$$p_2(x) = C_2 x(x - \bar{\bar{x}}_1)(x - \bar{\bar{x}}_3)\dots(x - \bar{\bar{x}}_m),$$

$$\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot$$

$$p_m(x) = C_m x(x - \bar{\bar{x}}_1)(x - \bar{\bar{x}}_2)\dots(x - \bar{\bar{x}}_{m-1}),$$

Коэффициенты C_i носят название множителей Лагранжа.

Найдем коэффициенты C_i, для чего запишем условие $p_i(x) = 1$ в развернутой форме, подставив в каждый из полиномов $p_i(x)$ значение $\bar{\bar{x}}_i$.

$$C_i \bar{\bar{x}}_i(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_1)\dots(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_{i-1})(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_{i+1})\dots(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_m) = 1$$

откуда,

$$C_i = \frac{1}{\bar{\bar{x}}_i(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_1)...(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_{i-1})(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_{i+1})...(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_m)}$$

Тогда подставляя найденные коэффициенты C_i в формулы полиномов, получим выражения для каждого из $p_i(x)$.

$$p_i(x) = \frac{x(x - \bar{\bar{x}}_1)...(x - \bar{\bar{x}}_{i-1})(x - \bar{\bar{x}}_{i+1})...(x - \bar{\bar{x}}_m)}{\bar{\bar{x}}_i(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_1)...(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_{i-1})(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_{i+1})...(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_m)}.$$

Взяв линейную комбинацию полиномов с коэффициентами $\bar{\bar{y}}_i$, получим полином степени не выше m, который во всех узлах $\bar{\bar{x}}_i$ будет равен значению $\bar{\bar{y}}_i$.

$$L_m(x) = \sum_{i=1}^{m} \bar{\bar{y}}_i p_i(x) = x \sum_{i=1}^{m} \frac{\bar{\bar{y}}_i}{\bar{\bar{x}}_i} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{m} \frac{(x - \bar{\bar{x}}_j)}{(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_j)}.$$

Введем обозначения

$$z_i = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{m} \frac{(x - \bar{\bar{x}}_j)}{(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_j)}, \qquad i = \overline{1, m}.$$

Тогда

$$L_m(x) = x\sum_{i=1}^{m}\frac{\bar{\bar{y}}_i z_i}{\bar{\bar{x}}_i}.$$

Так как $\bar{\bar{y}}_i = a_0\bar{\bar{x}}_i^m + a_1\bar{\bar{x}}_i^{m-1} + \ldots + a_m$ или

$$\bar{\bar{y}}_i = \bar{\bar{x}}_i(b_0\bar{\bar{x}}_i^{m-1} + b_1\bar{\bar{x}}_i^{m-2} + \ldots + b_{m-1}),$$

то интерполяционный полином Лагранжа можно представить в виде

$$\begin{aligned} L_m(x) &= x\sum_{i=1}^{m} z_i(b_0\bar{\bar{x}}_i^{m-1} + b_1\bar{\bar{x}}_i^{m-2} + \ldots + b_{m-1}) = \\ &= b_0 x\sum_{i=1}^{m} z_i\bar{\bar{x}}_i^{m-1} + b_1 x\sum_{i=1}^{m} z_i\bar{\bar{x}}_i^{m-2} + \ldots + b_{m-1}x\sum_{i=1}^{m} z_i. \end{aligned}$$

Решив задачу (2) относительно полинома $L_m(x)$, то есть решив задачу

$$\Phi^{(3)} = \sum_{i\in I_1}\varphi_i^{(3)} \to \min, \tag{24}$$

где $\varphi_i^{(3)} = \left(\bar{y}_i - L_m(\bar{x}_i, a)\right)^2$, построим искомый полином.

$$\Phi^{(3)} = \sum_{s=1}^{k}(\bar{y}_s - b_0\bar{x}_s\sum_{i=1}^{m} z_i^s\bar{\bar{x}}_i^{m-1} - b_1\bar{x}_s\sum_{i=1}^{m} z_i^s\bar{\bar{x}}_i^{m-2} - \ldots - b_{m-1}\bar{x}_s\sum_{i=1}^{m} z_i^s)^2.$$

Или

$$\Phi^{(3)} = \sum_{s=1}^{k}(\bar{y}_s - b_0\omega_s^{m-1} - b_1\omega_s^{m-2} - \ldots - b_{m-1}\omega_s^0)^2,$$

где

$$\omega_s^t = \bar{x}_s\sum_{i=1}^{m} z_i^s\bar{x}_i^t, \quad z_i^s = \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{m}\frac{(\bar{x}_s - \bar{\bar{x}}_j)}{(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_j)}, \quad s = \overline{1,k}.$$

Продифференцируем $\Phi^{(3)}$ по b_j (найдем экстремум данной функции).

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\Phi^{(3)}}{\partial b_0} &= 2\sum_{s=1}^{k}(\bar{y}_s - b_0\omega_s^{m-1} - b_1\omega_s^{m-2} - \ldots - b_{m-1}\omega_s^0)(-\omega_s^{m-1}) = 0,\\
\frac{\partial\Phi^{(3)}}{\partial b_1} &= 2\sum_{s=1}^{k}(\bar{y}_s - b_0\omega_s^{m-1} - b_1\omega_s^{m-2} - \ldots - b_{m-1}\omega_s^0)(-\omega_s^{m-2}) = 0,\\
&\vdots\\
\frac{\partial\Phi^{(3)}}{\partial b_{m-1}} &= 2\sum_{s=1}^{k}(\bar{y}_s - b_0\omega_s^{m-1} - b_1\omega_s^{m-2} - \ldots - b_{m-1}\omega_s^0)(-\omega_s^0) = 0.
\end{aligned}$$

Пришли к системе m уравнений с m неизвестными, следовательно, имеющую единственное решение.

$$\begin{cases}
b_0\sum(\omega_s^{m-1})^2 + b_1\sum\omega_s^{m-1}\omega_s^{m-2} + \ldots + b_{m-1}\sum\omega_s^{m-1}\omega_s^0 = \sum\bar{y}_s\omega_s^{m-1},\\
b_0\sum\omega_s^{m-2}\omega_s^{m-1} + b_1\sum(\omega_s^{m-2})^2 + \ldots + b_{m-1}\sum\omega_s^{m-2}\omega_s^0 = \sum\bar{y}_s\omega_s^{m-2},\\
\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\\
b_0\sum\omega_s^0\omega_s^{m-1} + b_1\sum\omega_s^0\omega_s^{m-2} + \ldots + b_{m-1}\sum(\omega_s^0)^2 = \sum\bar{y}_s\omega_s^0
\end{cases} \tag{25}$$

(суммируем по индексу s, $s = \overline{1,k}$).

Введем обозначения

$$\bar{S}_j^i = \sum_{s=1}^{k}\omega_s^i\omega_s^j, \quad \bar{V}^i = \sum_{s=1}^{k}\bar{y}_s\omega_s^i, \quad i = \overline{0,m-1}, \quad j = \overline{0,m-1}.$$

$$\begin{cases}
b_0\bar{S}_{m-1}^{m-1} + b_1\bar{S}_{m-2}^{m-1} + \ldots + b_{m-1}\bar{S}_0^{m-1} = \bar{V}^{m-1},\\
b_0\bar{S}_{m-1}^{m-2} + b_1\bar{S}_{m-2}^{m-2} + \ldots + b_{m-1}\bar{S}_0^{m-2} = \bar{V}^{m-2},\\
\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\quad\cdot\\
b_0\bar{S}_{m-1}^0 + b_1\bar{S}_{m-2}^0 + \ldots + b_{m-1}\bar{S}_0^0 = \bar{V}^0.
\end{cases} \tag{26}$$

Решением являются коэффициенты b_j такие, что

$$\tilde{b}_{j-1} = \frac{\Delta_j}{\Delta} \qquad j = \overline{1,m}, \tag{27}$$

где Δ– определитель системы (26),

$$\Delta = \begin{vmatrix} \bar{S}_{m-1}^{m-1} & \bar{S}_{m-2}^{m-1} & \dots & \bar{S}_{0}^{m-1} \\ \bar{S}_{m-1}^{m-2} & \bar{S}_{m-2}^{m-2} & \dots & \bar{S}_{0}^{m-2} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \bar{S}_{m-1}^{0} & \bar{S}_{m-2}^{0} & \dots & \bar{S}_{0}^{0} \end{vmatrix} = \sum \pm \bar{S}_{\alpha}^{m-1} \bar{S}_{\beta}^{m-2} \dots \bar{S}_{\gamma}^{0}.$$

Суммирование производится по всем перестановкам $\alpha, \beta, \dots, \gamma$ чисел $0,\ 1,\ 2,\ \dots,\ m-1$ и перед членом берется знак $+$, если перестановка $\alpha, \beta, \dots, \gamma$ четна, и знак $-$, если эта перестановка нечетна.

Δ_j определитель матрицы, получаемой из матрицы системы заменой j-го столбца (столбца коэффициентов при неизвестном b_{j-1}) столбцом свободных членов, то есть

$$\Delta_j = \begin{vmatrix} \bar{S}_{m-1}^{m-1} & \dots & \bar{V}^{m-1} & \dots & \bar{S}_{0}^{m-1} \\ \bar{S}_{m-1}^{m-2} & \dots & \bar{V}^{m-2} & \dots & \bar{S}_{0}^{m-2} \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ \bar{S}_{m-1}^{0} & \dots & \bar{V}^{0} & \dots & \bar{S}_{0}^{0} \end{vmatrix}.$$

Разложим определитель Δ_j по j-му столбцу и подставим в формулу (27) для $\tilde{b}_{j-1}$

$$\tilde{b}_{j-1} = \frac{\Delta_{1j}}{\Delta} \bar{V}^{m-1} + \frac{\Delta_{2j}}{\Delta} \bar{V}^{m-2} + \dots + \frac{\Delta_{mj}}{\Delta} \bar{V}^{0}, \qquad j = \overline{1, m}.$$

Коэффициент Δ_{tj} есть алгебраическое дополнение элемента $\bar{V}^{m-t}$.

Совокупность коэффициентов $\tilde{b}_j$ $(j = \overline{0, m-1})$ задает искомый полином

$$f(x) = \tilde{b}_0 x \sum_{i=1}^{m} z_i \bar{\bar{x}}_i^{m-1} + \tilde{b}_1 x \sum_{i=1}^{m} z_i \bar{\bar{x}}_i^{m-2} + \dots + \tilde{b}_{m-1} x \sum_{i=1}^{m} z_i,$$

являющийся решением задачи (2) для случая $p = m$.

Если рассматривать исходную задачу для полинома произвольной степени p $(p < n)$, то полином Лагранжа степени p можно представить в виде

$$L_p(x) = b_0 x^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i \bar{x}_i^{m-1} + b_1 x^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i \bar{x}_i^{m-2} + \ldots + b_{m-1} x^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i.$$

Решив задачу (2) относительно полинома $L_p(x)$

$$\Phi^{(4)} = \sum_{i \in I_1} \varphi_i^{(4)} \to \min, \tag{28}$$

где $\varphi_i^{(4)} = (\bar{y}_i - L_p(\bar{x}_i, a))^2$, построим искомый полином.

$$\Phi^{(4)} = \sum_{s=1}^{k} (\bar{y}_s - b_0 \bar{x}_s^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i^s \bar{\bar{x}}_i^{m-1} - \ldots - b_{m-1} \bar{x}_s^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i^s)^2.$$

Или

$$\Phi^{(4)} = \sum_{s=1}^{k} (\bar{y}_s - b_0 \omega_s^{m-1} - b_1 \omega_s^{m-2} - \ldots - b_{m-1} \omega_s^{0})^2,$$

где

$$\omega_s^t = \bar{x}_s^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i^s \bar{x}_i^t, \quad z_i^s = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{m} \frac{(\bar{x}_s - \bar{\bar{x}}_j)}{(\bar{\bar{x}}_i - \bar{\bar{x}}_j)}, \quad s = \overline{1, k}.$$

Заметим, что дальнейшее решение задачи аналогично рассмотренному выше случаю для функции $\Phi^{(3)}$.

Проведя соответствующие вычисления и определив коэффициенты b_j, $(j = \overline{0, m-1})$, запишем искомый многочлен

$$f(x) = \tilde{b}_0 x^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i \bar{x}_i^{m-1} + \tilde{b}_1 x^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i \bar{x}_i^{m-2} + \ldots + \tilde{b}_{m-1} x^{p-m+1} \sum_{i=1}^{m} z_i.$$

Отметим, что результаты вычислений и с использованием метода неопределенных коэффициентов так, и с использованием формулы

Лагранжа, должны совпадать в силу теоремы о единственности интерполяционного многочлена и линейности функции $f(x)$ относительно коэффициентов a_j. Решение задачи вторым способом (с использованием формулы Лагранжа) представляется более рациональным, так как необходимо решить только одну систему из m уравнений в отличие от двух систем $m-$ и $(p-m+1)-$ уравнений в первом случае.

Литература

[1] Бахвалов В. И., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. *Численные методы.* М.: Наука, 1987. 598 с.

[2] Березин Н. С., Жидков Н. П. *Методы вычислений.* М.: Наука, 1966. 632 с.

[3] Волков Е. А. *Численные методы.* М.: Наука, 1982. 254 с.

[4] Демидович Б. П., Марон И. А. *Основы вычислительной математики.* М., 1966. 664 с.

[5] Ляшко И. И., Макаров В. Л., Скоробогатько А. А. *Методы вычислений.* Киев: Вища шк., 1977. 405 с.