ZASTOSOWANIA MATEMATYKI
APPLICATIONES MATHEMATICAE
IX, 2 (1967)

S. PASZKOWSKI (Wrocław)

ZASTOSOWANIE METODY NAJMNIEJSZYCH KWADRATÓW DO CAŁKOWANIA FUNKCJI EMPIRYCZNYCH

1. Wstęp. W praktyce trzeba niekiedy obliczać całki oznaczone funkcji empirycznych o wartościach pomierzonych w ustalonych punktach $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Stosowanie przy tym tradycyjnych wzorów całkowania, jak kwadratury Newtona—Cotesa, Gaussa lub Czebyszewa, zwykle nie jest możliwe ze względu na specjalny rozkład węzłów tych kwadratur. Jeśli nawet rozstawienie punktów $x_0, x_1, \ldots, x_n$ pozwala na zastosowanie którejś ze wspomnianych kwadratur, to da ona mało wartościowe wyniki, silnie zależne np. od rzędu wybranej kwadratury. Przyczyną tego są przypadkowe błędy pomiarów. Z tych powodów funkcje empiryczne warto całkować innymi metodami niż funkcje określone wzorami analitycznymi lub tablicami dokładnych wartości. Wykazuję w tej pracy, że metoda całkowania funkcji empirycznych, najmniej czuła na błędy pomiarowe, polega na całkowaniu funkcji aproksymującej daną funkcję empiryczną, a otrzymanej metodą najmniejszych kwadratów. W praktyce zresztą tę metodę stosuje się inaczej (porównaj uwagę na końcu § 3).

2. Opis metody całkowania. Niech funkcje $f_0(x), f_1(x), \ldots, f_m(x)$ (m całkowite nieujemne) będą liniowo niezależne i całkowalne w przedziale skończonym lub nieskończonym $\langle a, b\rangle$. W tym przedziale dane są różne punkty $x_0, x_1, \ldots, x_n$ (n całkowite nieujemne). Jeśli $n \geqslant m$, to istnieją takie współczynniki A_k, że równość przybliżona

$$(1)\qquad \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

jest dokładna dla dowolnej kombinacji liniowej f funkcji $f_0, f_1, \ldots, f_m$. Równość (1) jest taka wtedy i tylko wtedy, gdy

$$(2)\qquad \sum_{k=0}^{n} A_k f_i(x_k) = \int_a^b f_i(x)\,dx \quad (i = 0, 1, \ldots, m).$$

Jeśli $n > m$, to równania (2) nie określają jednoznacznie współczynników A_k i można nałożyć na nie dodatkowy warunek. Sformułujemy go zakładając, że mierzone wartości funkcji f w punkcie x_k są wartościami zmiennej losowej o rozkładzie normalnym z wartością oczekiwaną $f(x_k)$ i odchyleniem standardowym σ (niezależnym od k). Wtedy prawa strona (1) jest wartością zmiennej losowej również o rozkładzie normalnym, z wartością oczekiwaną równą dokładnej wartości tej sumy i z odchyleniem standardowym równym

$$\sigma\Big(\sum_{k=0}^{n} A_k^2\Big)^{1/2} \tag{3}$$

([1], str. 137). Współczynniki A_k, spełniające warunki (2), można uznać za optymalne wtedy, gdy błędy pomiarów wartości funkcji f najmniej wpływają na obliczaną wartość całki, tj. wtedy, gdy odchylenie standardowe (3) jest najmniejsze([1]). Wobec tego współczynniki A_k znajdziemy minimizując funkcję $\sum_{k=0}^{n} A_k^2$ przy dodatkowych warunkach

$$\sum_{k=0}^{n} A_k f_i(x_k) = I_i \quad (i = 0, 1, \ldots, m), \tag{4}$$

gdzie

$$I_i = \int_a^b f_i(x)\,dx. \tag{5}$$

Rozwiązując to zadanie metodą czynników nieoznaczonych Lagrange'a przyrównujemy do zera pochodne cząstkowe funkcji

$$F(A_0, A_1, \ldots, A_n) = \sum_{k=0}^{n} A_k^2 - 2\sum_{j=0}^{m} \lambda_j\Big(\sum_{k=0}^{n} A_k f_j(x_k) - I_j\Big).$$

Daje to równości

$$A_k = \sum_{j=0}^{m} \lambda_j f_j(x_k) \quad (k = 0, 1, \ldots, n). \tag{6}$$

Równania dla wyznaczenia czynników λ_j otrzymamy podstawiając wzory (6) do (4):

$$\sum_{k=0}^{n}\Big(\sum_{j=0}^{m} \lambda_j f_j(x_k)\Big) f_i(x_k) = I_i,$$

([1]) To naturalne żądanie prowadzi do kwadratur Czebyszewa (por. [2], str. 69), jeśli dla osiągnięcia wysokiej dokładności wzoru (1) dobiera się nie tylko współczynniki A_k, ale i węzły x_k.

czyli

$$\sum_{j=0}^{m} s_{ij}\lambda_j = I_i \qquad (i = 0, 1, \ldots, m), \tag{7}$$

gdzie

$$s_{ij} = \sum_{k=0}^{n} f_i(x_k) f_j(x_k) \qquad (i, j = 0, 1, \ldots, m). \tag{8}$$

Tak więc, aby znaleźć współczynniki A_k optymalnego wzoru (1) należy 1° obliczyć macierz współczynników s_{ij} z wzorów (8) i wyrazy wolne I_i z wzorów (5), 2° znaleźć rozwiązania $\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_m$ układu (7), 3° obliczyć A_k z wzorów (6).

3. Metoda najmniejszych kwadratów. Obliczmy teraz całkę funkcji f w inny sposób. Znajdujemy współczynniki $a_0, a_1, \ldots, a_m$ kombinacji liniowej

$$\sum_{j=0}^{m} a_j f_j \tag{9}$$

najlepiej aproksymującej funkcję f w sensie metody najmniejszych kwadratów, tj. takiej, dla której suma

$$\sum_{k=0}^{n} \Big(\sum_{j=0}^{m} a_j f_j(x_k) - f(x_k) \Big)^2 \tag{10}$$

jest najmniejsza. Wiadomo, że współczynniki a_j spełniają układ równań

$$\sum_{j=0}^{m} s_{ij} a_j = t_i \qquad (i = 0, 1, \ldots, m), \tag{11}$$

gdzie

$$t_i = \sum_{k=0}^{n} f_i(x_k) f(x_k).$$

Po rozwiązaniu układu (11), całkę funkcji f można przybliżyć całką kombinacji (9):

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{j=0}^{m} a_j I_j. \tag{12}$$

Łatwo sprawdzić, że prawa strona tego wzoru jest równa prawej stronie wzoru (1) ze współczynnikami A_k zdefiniowanymi w § 2. Istotnie, oznaczając symbolem r_{ij} elementy macierzy odwrotnej do macierzy $\|s_{ij}\|$

stwierdzamy, że

$$\lambda_j = \sum_{i=0}^{m} r_{ji} I_i, \qquad A_k = \sum_{j=0}^{m} f_j(x_k) \sum_{i=0}^{m} r_{ji} I_i,$$

$$\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \sum_{j=0}^{m} f_j(x_k) \sum_{i=0}^{m} r_{ji} I_i, \tag{13}$$

$$\sum_{j=0}^{m} a_j I_j = \sum_{j=0}^{m} I_j \sum_{i=0}^{m} r_{ji} t_i = \sum_{j=0}^{m} I_j \sum_{i=0}^{m} r_{ji} \sum_{k=0}^{n} f_i(x_k) f(x_k). \tag{14}$$

Prawe strony (13) i (14) są identyczne, gdyż $r_{ji} = r_{ij}$.

Zauważmy, że mimo tożsamości obu metod całkowania wzory z § 2 są lepsze od wzoru (12). Dają one współczynniki A_k uniwersalne dla całej klasy funkcji f. Natomiast stosując metodę najmniejszych kwadratów musimy od początku obliczeń ustalić funkcję całkowaną.

4. Przypadek wielomianowy. Załóżmy teraz, że przedział $\langle a, b\rangle$ jest skończony i że wzór (1) ma być dokładny dla dowolnego wielomianu stopnia $\leqslant m$, tj. że funkcje f_i są wielomianami. Jeśli $x_k = k$ (a do tego przypadku można sprowadzić inne, takie że $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \ldots = x_n - x_{n-1}$), to wygodnie jest przyjąć

$$f_i(x) \equiv P_{in}(x) = \sum_{h=0}^{i} (-1)^h \binom{i}{h} \binom{h+i}{h} \frac{x^{(h)}}{n^{(h)}},$$

gdzie $x^{(h)}$ i $n^{(h)}$ są wielomianami czynnikowymi:

$$x^{(h)} = x(x-1)\ldots[x-(h-1)].$$

Wielomian P_{in} stopnia i ma następującą własność ortogonalności:

$$\sum_{x=0}^{n} P_{in}(x) P_{jn}(x) = \begin{cases} 0 & (i \neq j), \\ \dfrac{(j+n+1)^{(j+1)}}{(2j+1)\, n^{(j)}} & (i = j) \end{cases}$$

([3], str. 204). Upraszcza ona rozwiązanie układu (7) i pozwala napisać gotowe wzory na współczynniki A_k:

$$A_k = \sum_{j=0}^{m} \frac{(2j+1)\, n^{(j)}}{(j+n+1)^{(j+1)}} I_j P_{jn}(k) \qquad (k = 0, 1, \ldots, n),$$

gdzie

$$I_j = \int_a^b P_{jn}(x)\, dx.$$

Poniżej podajemy otrzymane stąd wartości A_k dla kilku początkowych wartości parametru m przy naturalnym dodatkowym założeniu, że $a = 0$, $b = n$. Ponieważ wtedy $I_j = 0$ dla nieparzystych j, więc ograniczamy się do wzorów dla nieparzystych m:

$$(m = 1) \qquad A_k = \frac{n}{n+1},$$

$$(m = 3) \qquad A_k = \frac{n}{(n+3)^{(3)}}\left(n^2+6+\frac{30p_k}{n-1}\right),$$

gdzie $p_k = k(n-k)$,

$$(m = 5) \qquad A_k = \frac{n}{(n+5)^{(5)}}\left(n^4+50n^2+120+\frac{210p_k}{(n-1)^{(3)}}[n^4-3n^3+ \right.$$
$$\left. +8n^2-20n+30-(3n^2-8n+18)p_k]\right),$$

$$(m = 7) \qquad A_k = \frac{n}{(n+7)^{(7)}}\left(n^6+196n^4+3234n^2+5040+ \right.$$
$$+\frac{42p_k}{(n-1)^{(5)}}[2(9n^8-82n^7+600n^6-3447n^5+14682n^4-31766n^3+$$
$$+59850n^2-84546n+84840)-11(12n^6-101n^5+675n^4-2306n^3+$$
$$\left. +7920n^2-12600n+16800)p_k+286(n^4-8n^3+50n^2-78n+120)p_k^2]\right).$$

Dla przykładu podajemy jeszcze w poniższej tabeli wartości liczbowe A_k dla $n = 10$.

k		licznik A_k			
		$m = 1$	$m = 3$	$m = 5$	$m = 7$
0	10	10	795	3240	1233165
1	9	10	1020	7650	4630440
2	8	10	1195	8700	3543655
3	7	10	1320	8175	3149520
4	6	10	1395	7350	3745860
	5	10	1420	6990	4151440
mianownik A_k		11	1287	7722	3675672

Prace cytowane

[1] M. Fisz, *Rachunek prawdopodobieństwa i statystyka matematyczna*, wyd. 2, Warszawa 1958.

[2] В. И. Крылов, *Приближенное вычисление интегралов*, Москва 1959.

[3] В. Э. Милн, *Численный анализ*, Москва 1951.

KATEDRA METOD NUMERYCZNYCH UNIWERSYTETU WROCŁAWSKIEGO

Praca wpłynęła 12. 7. 1966

С. ПАШКОВСКИ (Вроцлав)

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ К ИНТЕГРИРОВАНИЮ ЭМПИРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

РЕЗЮМЕ

Рассматриваются формулы интегрирования вида (1), точные для произвольной линейной комбинации f данных линейно независимых функций $f_0, f_1, \ldots, f_m$. Предполагая, что f является эмпирической функцией, проверается, когда ошибки измерения её значений имеют наименьшее влияние на приближенное значение интеграла, вычисленного с помощью (1). Доказывается, что наилучшей в этом смысле является формула, которой правая часть является интегралом комбинации (9), минимизирующей сумму квадратов (10). В конце работы даны выражения для коэффициентов A_k формул (1), точных для многочленов степени не выше $m\,(m = 1, 3, 5, 7)$ при $\langle a, b\rangle = \langle 0, n\rangle$, $x_k = k$, а также численные значения этих A_k для $n = 10$.

S. PASZKOWSKI (Wrocław)

THE APPLICATION OF THE METHOD OF LEAST SQUARES TO THE INTEGRATION OF EMPIRICAL FUNCTIONS

SUMMARY

Integration formulae of type (1) which are accurate for any linear combination f of given linearly independent functions $f_0, f_1, \ldots, f_m$ are considered. Assuming that f is an empirical function one examines in which circumstances the measurement errors of function f have the least influence on the approximate value of the integral calculated from (1). It is proved that best in this sense is a formula the right-hand side of which is an integral of the combination (9) giving a minimum sum of squares (10). At the end of the paper the expressions for the coefficients A_k of formulae (1) accurate for polynomials of degree $\leqslant m$ $(m = 1, 3, 5, 7)$ for $\langle a, b\rangle = \langle 0, n\rangle$, $x_k = k$, and also the numerical values of such A_k for $n = 10$ are given.
