

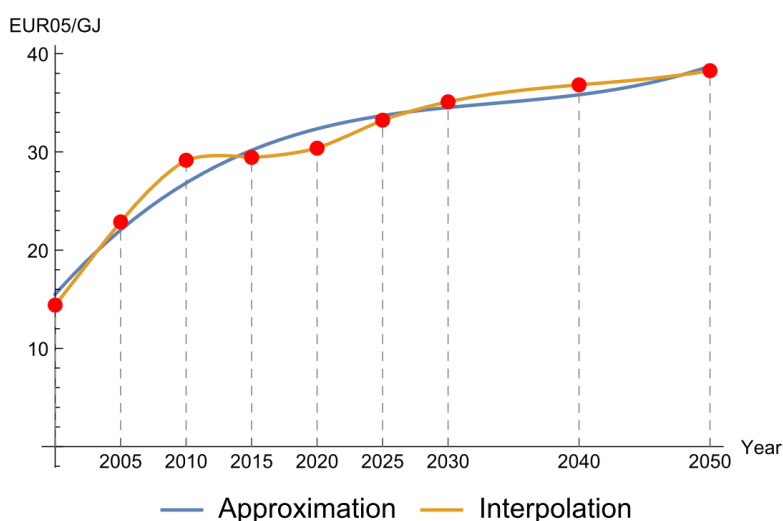
Metody numeryczne

Sprawozdanie nr 9 z zajęć laboratoryjnych

Aproksymacja

1. Wstęp teoretyczny

Aproksymacja jest podobna do interpolacji, chodzi bowiem o przybliżanie wartości funkcji, jednak nie przeprowadza ona krzywej dokładnie w miejscu punktów węzłowych, a dopasowuje do danych krzywą najlepszego dopasowania, tzn. taką, która spełnia odpowiednie zadane warunki. Punkty dane na początku nie zawsze leżą dokładnie na „jednej gładkiej krzywej”, często są „trochę porozrzucane” (tzn. zawierają szum). Wykorzystanie interpolacji skutkowałoby wtedy otrzymaniem „ostrej i poszarpanej” krzywej. Mówiąc prościej, chodzi o wyznaczenie funkcji – „ogólnego trendu” dla punktów, a nie funkcji przebiegającej dokładnie przez wszystkie węzły (rys. 1).

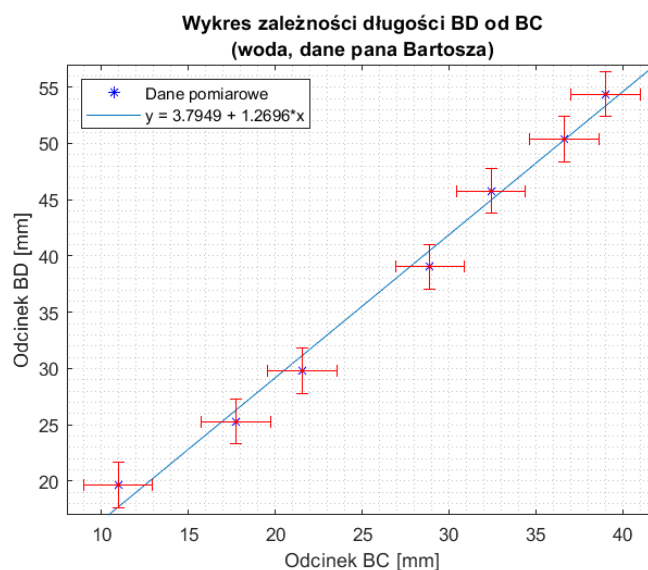


Rysunek 1. Różnica między aproksymacją a interpolacją.

Na niebiesko zaznaczono krzywą aproksymacji, natomiast na pomarańczowo – interpolacji [1].

Innym przykładem może być np. dopasowanie funkcji liniowej (regresja liniowa) do punktów pomiarowych otrzymanych w doświadczeniu, które z reguły zawierają niepewności pomiarowe (punkty takie są właśnie „porozrzucane” wokół prostej, której wzór ogólny próbuje się znaleźć). Przykład taki ilustruje rys. 2 na następnej stronie.

¹ źródło: <https://mathematica.stackexchange.com/questions/72606/calculate-missing-values-interpolation>
[data dostępu: 12 maja 2020]



Rysunek 2. Przykład regresji liniowej jako aproksymacji dla punktów doświadczalnych [2].

Żąda się, aby funkcja postaci:

$$F(x) = \sum_{i=0}^m a_i \varphi_i(x) \quad (1)$$

Oznaczenia:
 $\varphi_i(x)$ – funkcje bazowe
 m – liczba użytych funkcji

spełniała następujący warunek:

$$\|f(x) - F(x)\| = \text{minimum}. \quad (2)$$

Oznaczenia:
 $f(x)$ – aproksymowana funkcja

Jedną z metod jest **aproksymacja wielomianami Grama**. Aby wyznaczyć wzór na funkcję aproksymującą, konieczne jest wprowadzenie kilku definicji oraz wielkości.

Dwie funkcje są ortogonalne na dyskretnym zbiorze punktów x_i wówczas, gdy dla obu funkcji zachodzi warunek mówiący, że suma kwadratów wartości funkcji we wszystkich punktach jest dodatnia. Wtedy:

$$\sum_{i=0}^n f_1(x_i) f_2(x_i) = 0 \quad (3)$$

Powszechnie stosowaną metodą jest aproksymacja średniokwadratowa:

$$\|F(x) - f(x)\| = \sum_{i=0}^n w(x_i) \cdot [F(x_i) - f(x_i)]^2 \quad (4)$$

Oznaczenia:
 $w(x)$ – funkcja wagowa (punkty mają mieć różną wagę, jednak nierzadko przyjmuje się je z wagą równą 1)

² Wykres wygenerowany w programie Matlab na podstawie punktów pomiarowych (długości cięciw) zebranych podczas przeprowadzania doświadczenia fizycznego – badanie współczynnika załamania światła w cieczach; współczynnik kierunkowy prostej wyznacza współczynnik załamania w danym ośrodku – w tym przypadku dla wody (wartość teoretyczna wynosi ok. 1,33; a fakt, że otrzymana wartość „odbiega trochę” od niej, pozostawię bez komentarza ☺).

Niech:

$$D = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_m(x_1) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_m(x_n) \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Jeżeli do ciągu funkcyjnego tej aproksymacji (ozn. jak we wzorze (1)):

$$\{\varphi_m(x)\} = \varphi_i(x), \quad (6)$$

stanowiącego bazę ortogonalną dla węzłów aproksymacji x_i , zostaną narzucone dwa dodatkowe warunki

$$1^\circ \quad \sum_{i=0}^n \varphi_j(x_i) \cdot \varphi_k(x_i) = 0, j \neq k \quad (7)$$

$$2^\circ \quad \sum_{i=0}^n \varphi_j^2(x_i) > 0, \quad (8)$$

to macierz układu ortogonalnego $\mathbf{D}^T \mathbf{D}$ przy aproksymacji wielomianami ortogonalnymi będzie macierzą tylko o elementach diagonalnych, powiązanych zależnością:

$$d_{jj} = \sum_{i=0}^n \varphi_j^2(x_i). \quad (9)$$

Macierz ta jest dobrze uwarunkowana, co zapewnia istnienie dokładnie jednego rozwiązania. Zakładając istnienie węzłów równoodległych:

$$x_i = x_{min} + i \cdot \frac{x_{max} - x_{min}}{n-1}, \quad i = 0, \dots, n-1 \quad (10)$$

oraz przyjmując:

$$q = \frac{x - x_0}{h}, \quad (11)$$

Oznaczenia:
 $h = \frac{x_{max} - x_{min}}{n-1}$

można zacząć poszukiwania ciągu wielomianów $\{F_i^{(n)}(q)\}, i = 0, \dots, n$ (analogicznie jak we wzorze (6)) postaci:

$$F_k^{(n)}(q) = a_0 + a_1 q + a_2 q(q-1) + \cdots + a_k q(q-1) \dots (q-k+1), \quad (12)$$

spełniające warunek ortogonalności (patrz: wzór (3)).

Korzystając z wielomianu czynnikowego zdefiniowanego poniżej jako:

$$q^{[k]} = \prod_{i=0}^{k-1} (q-i), k \geq 1, \quad (13)$$

można uprościć równanie (12):

$$F_k^{(n)}(q) = a_0 + \sum_{i=1}^k a_i q^{[i]}. \quad (14)$$

Aby „zaoszczędzić pracy” z dużymi liczbami, normuje się wielomiany do 1, tzn.:

$$\begin{aligned} \hat{F}_k^{(n)}(0) &= 1, \\ k &= 0, \dots, m \end{aligned} \quad (15)$$

a wzór (14) przyjmuje postać:

$$\hat{F}_k^{(n)}(q) = 1 + \sum_{i=1}^k b_i q^{[i]}. \quad (16)$$

Poszukiwane wielomiany, to właśnie **wielomiany Grama**:

$$\hat{F}_k^{(n)}(q) = \sum_{s=0}^k (-1)^s \binom{k}{s} \binom{k+s}{s} \frac{q^{[s]}}{n^{[n]}}. \quad (17)$$

Mając tak wyznaczoną bazę, można znaleźć wzór funkcji aproksymującej:

$$F(x) = \sum_{i=0}^m a_i \varphi_i(x) = \sum_{k=0}^m \frac{c_k}{s_k} \hat{F}_k^{(n)}(q), m \leq n, \quad (18)$$

gdzie

$$c_k = \sum_{i=0}^n y_i \hat{F}_k^{(n)}(x_i), \quad (19)$$

$$s_k = \sum_{q=0}^n [\hat{F}_k^{(n)}(q)]^2. \quad (20)$$

Wielomianów Grama można też poszukiwać rekurencyjnie, wtedy zależność na φ_i przyjmie postać:

$$\varphi_{i+1}(x) = (x - \alpha_{j+1}) \cdot \varphi_i(x) - \beta_j \cdot \varphi_{i-1}(x) \quad (21)$$

$$\alpha_{j+1} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} x_i \cdot \varphi_j^2(x_i)}{\sum_{i=0}^{n-1} \varphi_j^2(x_i)} \quad (22)$$

$$b_j = \begin{cases} 0, j = 1 \\ \frac{\sum_{i=0}^{n-1} x_i \cdot \varphi_{j-1}(x_i) \cdot \varphi_j(x_i)}{\sum_{i=0}^{n-1} \varphi_{j-1}^2(x_i)}, j \geq 2. \end{cases} \quad (23)$$

Aby powyższe wzory były poprawne wystarczy już tylko wprowadzić początkowe wartości:

$$\varphi_{-1}(x) = 0 \text{ oraz } \varphi_0(x) = 1. \quad (24)$$

Ostatecznie:

$$F(x) = \sum_{i=0}^m \frac{c_i}{s_i} \varphi_i(x), \quad (25)$$

gdzie

$$c_i = \sum_{a=0}^{n-1} y_a \cdot \varphi_i(x_a), \quad (26)$$

$$s_i = \sum_{a=0}^{n-1} \varphi_i^2(x_a). \quad (27)$$

Należy jednak pamiętać, że aproksymację można przeprowadzać tylko w punktach węzłowych $x_i, i = 0, \dots, n$.

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem była aproksymacja funkcji:

$$f(x) = \sin\left(\frac{14\pi x}{x_{\max} - x_{\min}}\right) \left(e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(x+x_0)^2}{2\sigma^2}} \right), \quad (28)$$

Oznaczenia:
 $\sigma = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{16}$
 $x_0 = 2$

do której dodano szum, aby zasymulować (pseudo)losowość danych:

$$f_{\text{szum}}(x) = f(x) + \frac{r - 0,5}{5}, x \in [x_{\min}; x_{\max}], \quad (29)$$

Oznaczenia:

r – pseudolosowa liczba z przedziału $[0; 1]$ (do jej wygenerowania użyto specjalnego makra)

na podstawie $n = 201$ **węzłów równoodległych** (patrz: wzór (10)). Porównane zostało zachowanie **aproksymacji wielomianami Grama** dla funkcji z wygenerowanym szumem oraz bez niego.

W treści zostały podane następujące parametry:

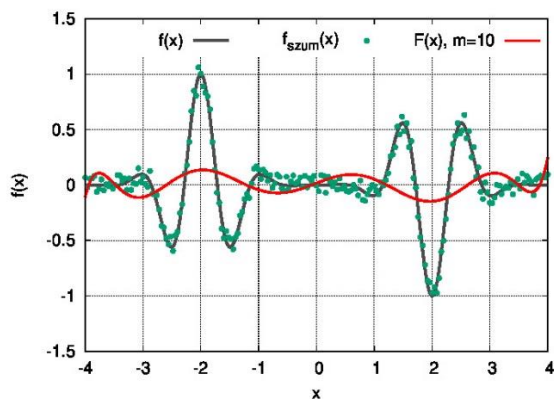
$x_{\min} = -4$	początek przedziału
$x_{\max} = 4$	koniec przedziału
$m = 10, 30, 50$	liczba użytych wielomianów Grama

Tabela 1. Parametry podane w treści zadania.

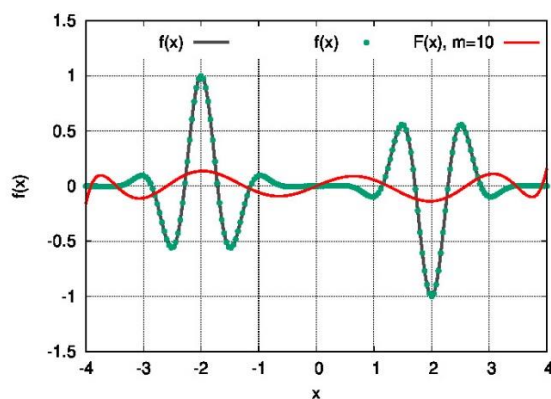
W programie zaimplementowano proste metody liczące wartość funkcji dla punktów węzłowych (zarówno dla szumu, jak i bez niego), współczynniki oraz wartości φ – **wielomianów Grama** (według wzoru (21)), jak i wektory (tablice jednowymiarowe) przechowujące węzły, ich wartości, parametry c_i, s_i (liczone zgodnie ze wzorami (26) i (27)) i wartości **wielomianów Grama** (w tym przypadku użyto do tego tablicy dwuwymiarowej, ponadto zmienna m posłużyła do sterowania liczbą użytych wielomianów).

2.2 Wyniki

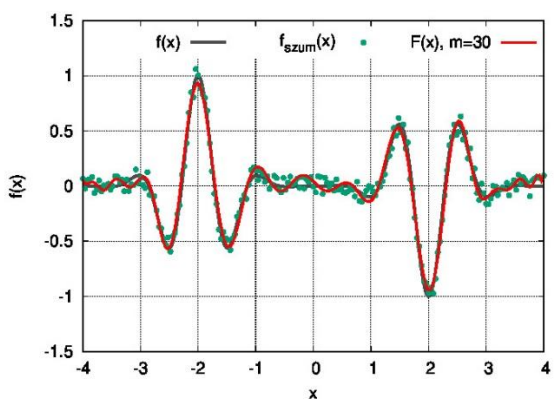
Węzły i ich wartości zostały zapisane do jednego pliku, natomiast do drugiego zapisano węzły i wartości funkcji aproksymującej $F(x)$. Specjalny skrypt umożliwił prezentację graficzną otrzymanych danych w programie Gnuplot. Rezultaty pokazane są na rysunkach poniżej.



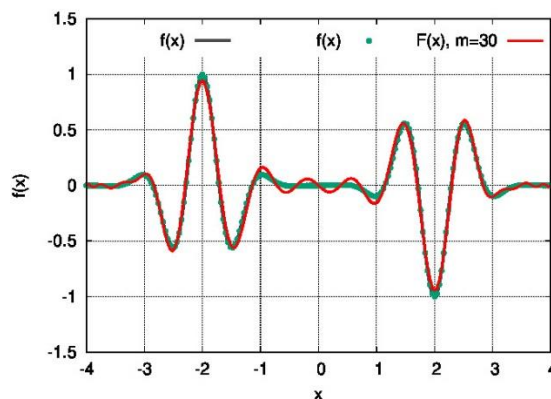
Rysunek 3. Aproksymacja $m=10$ wielomianami Grama (przypadek z szumem).



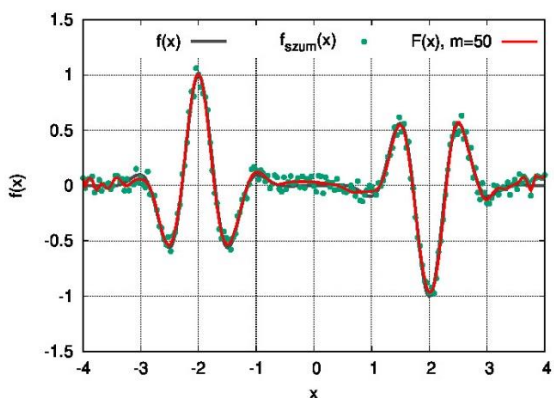
Rysunek 4. Aproksymacja $m=10$ wielomianami Grama (przypadek bez szumu).



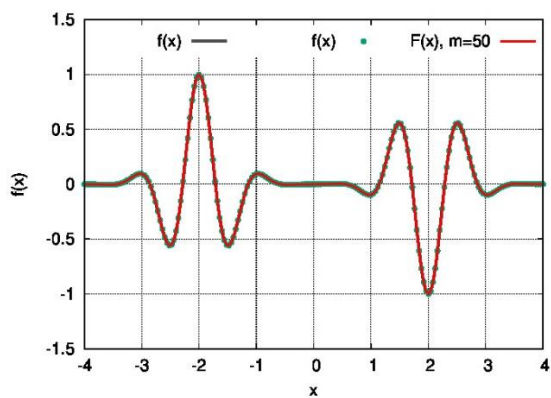
Rysunek 5. Aproksymacja $m=30$ wielomianami Grama (przypadek z szumem).



Rysunek 6. Aproksymacja $m=30$ wielomianami Grama (przypadek bez szumu).

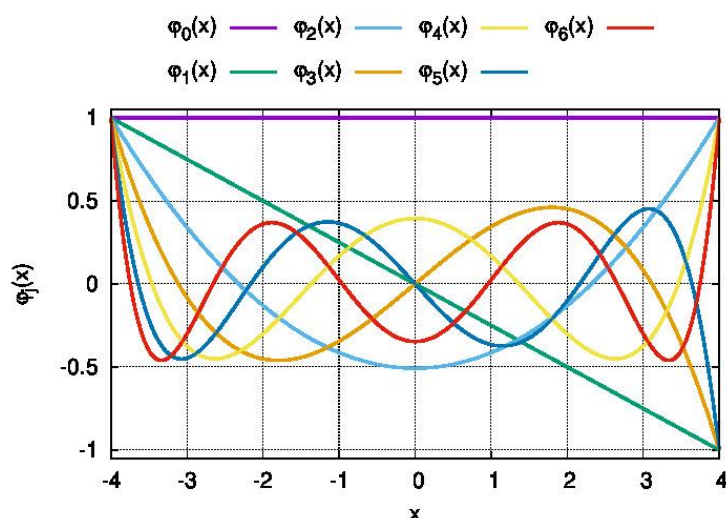


Rysunek 7. Aproksymacja $m=50$ wielomianami Grama (przypadek z szumem).



Rysunek 8. Aproksymacja $m=50$ wielomianami Grama (przypadek bez szumu).

Skrypt wyrysował też pierwsze siedem **wielomianów Grama** (zostały one znormalizowane do przedziału $[-1; 1]$ poprzez podzielenie przez ich pierwszy wyraz), po uprzednim zapisaniu ich wartości do pliku.



Rysunek 9. Pierwszych 7 (znormalizowanych) wielomianów Grama.

3. Wnioski

- Nie zawsze dobrym sposobem jest interpolacja, zwłaszcza jeśli punkty zawierają szum (w praktyce mogą to być np. odchylenia spowodowane przez niepewności pomiarowe) – wtedy lepszym może okazać się aproksymacja („poznanie ogólnego trendu”).
- Wzrost liczby użytych wielomianów Grama prowadzi do lepszego dopasowania funkcji do danych, ponieważ liczba ta odpowiada za stopień aproksymującej funkcji, jednakże tylko do pewnego momentu. Im stopień bliższy liczbie punktów węzłowych (zwłaszcza tych zawierających szum), tym wykres staje się bardziej poszarpany (mniej wygładzony głównie w otoczeniach punktów o największych wahaniach wartości) i przypomina efekt podobny do tego, który zostałby otrzymany metodą interpolacji, dlatego aproksymacja wymaga oszacowania optymalnego stopnia, dla którego trend będzie zachowany, a oscylacje będą do zaakceptowania; a także określenia postaci funkcji aproksymującej (np. na podstawie zależności otrzymanych z modeli teoretycznych).
- Zarówno dla przypadków z szumem jak i bez niego można zaobserwować duże podobieństwo wykresów (rys. 3 – 8), co pozwala stwierdzić, że obecność niewielkiego szumu nie ma dużego wpływu na kształt funkcji aproksymującej. Co prawda można zauważyć oscylacje wokół punktów niezawierających szumu, jednak ogólny trend wydaje się być zachowany.
- Do oceny jakości aproksymacji stosuje się różnorodne wzory statystyczne (np. estymator odchylenia standardowego punktów od dopasowanej krzywej), jednak przy mniej skomplikowanych pomiarach można posłużyć się indywidualną oceną wizualną.