APROKSYMACJA

1. Wstęp

Aproksymacja jest to przybliżanie funkcji $f(x)$ zwanej **funkcją aproksymowaną** inną funkcją $Q(x)$ zwaną **funkcją aproksymującą**. Aproksymacja bardzo często występuje w dwóch przypadkach: gdy funkcja aproksymowana jest przedstawiona w postaci tablicy wartości i poszukujemy dla niej odpowiedniej funkcji ciągłej lub gdy funkcję o dosyć skomplikowanym zapisie analitycznym chcemy przedstawić w „prostszej” postaci.
Dokonując aproksymacji funkcji $f(x)$ musimy rozwiązać dwa ważne problemy.

A. Dobór odpowiedniej funkcji aproksymującej $Q(x)$. Najczęściej będzie to tzw. **wielomian uogólniony** będący kombinacją liniową **funkcji bazowych** $q_j(x)$

$$Q_m(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j q_j(x). \qquad [1]$$

Jako funkcje bazowe stosowane są:
- jednomiany $1, x, x^2, ..., x^m$,
- funkcje trygonometryczne $1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x, ..., \sin mx, \cos mx$,
- wielomiany ortogonalne.

Przyjęcie odpowiednich funkcji bazowych powoduje, że aby wyznaczyć funkcję aproksymującą należy wyznaczyć wartości współczynników $a_0, a_1, ..., a_m$.

B. Określenie dokładności dokonanej aproksymacji. Aproksymacja funkcji powoduje powstanie błędów i sposób ich oszacowania wpływa na wybór metody aproksymacji. Jeśli błąd będzie mierzony na dyskretnym zbiorze punktów $x_0, x_1, ..., x_n$ to jest to **aproksymacja punktowa,** a jeśli będzie mierzony w przedziale $\langle a, b \rangle$ to jest to **aproksymacja integralna** lub **przedziałowa**.
Najczęściej stosowanymi miarami błędów aproksymacji są:
- dla **aproksymacji średniokwadratowej punktowej**

$$S = \sum_{i=0}^{n} \{ f(x_i) - Q(x_i) \}^2$$

- dla **aproksymacji średniokwadratowej integralnej** lub **przedziałowej**

$$S = \int_a^b \{ f(x) - Q(x) \}^2 dx$$

- dla **aproksymacji jednostajnej**

$$S = \sup_{x \in \langle a, b \rangle} \left| f(x) - Q(x) \right|.$$

We wszystkich tych przypadkach zadanie aproksymacji sprowadza się do takiego optymalnego doboru funkcji aproksymującej (dla wielomianów uogólnionych zaś do optymalnego doboru współczynników $a_0, a_1, ..., a_m$) aby zdefiniowane wyżej błędy były minimalne.

2. Aproksymacja średniokwadratowa punktowa wielomianowa

Sformułowanie problemu

Dane są punkty $x_0, x_1, ..., x_n$ parami różne czyli $x_i \neq x_j \Leftrightarrow i \neq j$ oraz dane są wartości funkcji aproksymowanej w tych punktach $f_o, f_1, ..., f_n$ gdzie $f_i = f(x_i)$ $i = 0,1,...,n$. Zadaniem aproksymacji jest znaleźć wartości współczynników $a_0, a_1, ..., a_m$ wielomianu $Q_m(x)$ stopnia *m*-tego o postaci

$$Q_m(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j \qquad [2]$$

aby błąd średniokwadratowy był najmniejszy czyli

$$\min_{a_0, a_1, ..., a_m} S = \sum_{i=0}^{n} (f_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j)^2 . \qquad [3]$$

Zauważmy, że błąd średniokwadratowy jest funkcją współczynników $a_0, a_1, ..., a_m$ a więc z warunku koniecznego na ekstremum funkcji wielu zmiennych

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = 0 \qquad j = 0,1,...,m \qquad [4]$$

otrzymamy układ $m+1$ równań liniowych o $m+1$ niewiadomych współczynnikach $a_0, a_1, ..., a_m$, który można zapisać w postaci sumy

$$\sum_{j=0}^{m} g_{kj} a_j = r_k \qquad k = 0,1,...,m \qquad [5]$$

gdzie $g_{kj} = \sum_{i=0}^{n} x_i^{k+j}$ $\qquad r_k = \sum_{i=0}^{n} f_i x_i^k$. [6]

Zadanie aproksymacji średniokwadratowej punktowej sprowadza się do rozwiązania $m+1$ równań o $m+1$ niewiadomych.

Rozważmy jeszcze problem doboru liczby punktów $n+1$ i stopnia wielomianu m. Jeśli *n*=*m* to mamy funkcję aproksymowaną określoną w $n+1$ punktach i poszukujemy wielomianu aproksymującego stopnia n. Jest to więc interpolacja i wtedy $f(x_i) = Q_n(x_i)$ czyli błąd średniokwadratowy $S = 0$.

Natomiast jeśli $n > m$, to oznacza to, że mamy więcej punktów niż wynosi stopień wielomianu aproksymującego. W tej sytuacji wielomian aproksymujący nie będzie wiernie odtwarzał wszystkich punktów funkcji aproksymowanej. W sytuacji gdy np. punkty pomiarowe obarczone są błędami, aproksymacja dokonuje „wygładzenia" danych empirycznych.

3. Aproksymacja za pomocą wielomianów ortogonalnych

Definicja 1. Wielomiany są ortogonalne na zbiorze punktów $x_0, x_1, ..., x_n$ jeśli spełniają warunek

$$\sum_{i=0}^{n} P_j(x_i) P_k(x_i) = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ const & j = k \end{cases} \qquad [7]$$

gdzie *j* i *k* określają stopień wielomianu.

Zastosowanie wielomianów ortogonalnych do aproksymacji znacznie upraszcza obliczenia wyznaczające funkcję aproksymującą. Nie trzeba wtedy rozwiązywać układu równań ponieważ macierz współczynników jest macierzą diagonalną.

Niech wielomian uogólniony będzie kombinacją liniową wielomianów ortogonalnych $P_j^{(n)}(x)$ (j określa stopień wielomianu, n związane jest z liczbą punktów a jest ich dokładnie n+1)

$$Q_m(x)=\sum_{j=0}^{m} a_j P_j^{(n)}(x)\ . \qquad [8]$$

Współczynniki wielomianu uogólnionego znajdujemy wg wzoru

$$a_j=\frac{\sum_{i=0}^{n} f_i P_j^{(n)}(x_i)}{\sum_{i=0}^{n}(P_j^{(n)}(x_i))^2}\ . \qquad [9]$$

Jeśli punkty są równoodległe $x_i=x_0+ih \quad i=0,1,...n$ to przekształcenie liniowe

$$q=\frac{x-x_0}{h}$$

przekształci je w liczby całkowite 0,1,...,n.

Wielomianami ortogonalnymi na zbiorze punktów 0,1,...,n są wielomiany Grama zdefiniowane

$$P_k^{(n)}(q)=\sum_{s=0}^{k}(-1)^s\binom{k}{s}\binom{k+s}{s}\frac{q^{[s]}}{n^{[s]}} \qquad [10]$$

gdzie symbol $r^{[s]}$ oznacza iloczyn $r^{[s]}=r(r-1)\Lambda\ (r-s+1)$, zaś $\binom{k}{s}=\frac{k!}{s!(k-s)!}$ jest symbolem Newtona. Niżej przedstawiono wielomiany Grama stopnia 0,1,2,3 i 4.

$$P_0^{(n)}(q)=1$$

$$P_1^{(n)}(q)=1-2\frac{q}{n}$$

$$P_2^{(n)}(q)=1-6\frac{q}{n}+6\frac{q(q-1)}{n(n-1)}$$

$$P_3^{(n)}(q)=1-12\frac{q}{n}+30\frac{q(q-1)}{n(n-1)}-20\frac{q(q-1)(q-2)}{n(n-1)(n-2)}$$

$$P_4^{(n)}(q)=1-20\frac{q}{n}+90\frac{q(q-1)}{n(n-1)}-140\frac{q(q-1)(q-2)}{n(n-1)(n-2)}+70\frac{q(q-1)(q-2)(q-3)}{n(n-1)(n-2)(n-3)}$$

Funkcja aproksymująca zbudowana na wielomianach Grama ma postać

$$F_m(x)=\sum_{j=0}^{m}\frac{c_j}{s_j}P_j^{(n)}(q)=\sum\frac{c_j}{s_j}P_j^{(n)}\left(\frac{x-x_0}{h}\right) \qquad [11]$$

gdzie $m<n$ i $\quad s_j=\sum_{q=0}^{n}(P_j^{(n)}(q))^2, \qquad c_j=\sum_{q=0}^{n} f_q P_j^{(n)}(q)\ .$ [12]

4. Wygładzanie funkcji

Optymalny wielomian w sensie aproksymacji średniokwadratowej powinien posiadać dwie własności:

a) mieć stopień na tyle wysoki by dobrze przybliżać prawdziwą funkcję,
b) nie być ściśle dopasowanym do danych empirycznych, czyli nie powinien odzwierciedlać zakłóceń lub niedokładności pomiarów.

Jeśli przybliżenie średniokwadratowe posiada te dwie własności, to mówimy że „wygładza” (wyrównuje) dane pomiarowe w tym sensie, że zachowuje informacje o funkcji mierzonej ale również eliminuje zakłócenia.

Aproksymacji średniokwadratowej używa się powszechnie do konstrukcji wygładzonych wartości funkcji. Te wygładzone wartości funkcji zależą od stopnia wielomianu wygładzającego oraz od liczby punktów pomiarowych. Nie zawsze do konstrukcji wielomianu wygładzającego muszą być użyte wszystkie punkty pomiarowe. Można budować kilka wielomianów (na ogół niższego stopnia) wykorzystując do konstrukcji każdego z nich część danych. Niżej zostaną przedstawione algorytmy wyznaczające wygładzone wartości funkcji za pomocą różnych wielomianów i różnej liczby punktów pomiarowych.

Algorytm SE13 wygładzania w oparciu o wielomian stopnia 1 i 3 punkty pomiarowe

Algorytm ten wyznacza wektor Z=[$z_0, z_1, ..., z_{n-1}, z_n$] wartości wygładzonej funkcji dla zadanego wektora X=[$x_0, x_1, ..., x_{n-1}, x_n$] wartości argumentów funkcji i wektora Y=[$y_0, y_1, ..., y_{n-1}, y_n$] pomierzonych wartości funkcji odpowiadających argumentom wektora X. Zakłada się, że argumenty funkcji są równoodległe tzn. $x_{i+1} - x_i = h \quad i = 0,1,...,n-1$.

Z wyjątkiem punktów z_0, z_n każdą wartość z_i otrzymuje się obliczając w punkcie x_i wartość wielomianu aproksymującego stopnia pierwszego stosując do tego aproksymację średniokwadratową punktową w oparciu o 3 punkty $(x_{i+k}, y_{i+k}) \qquad k = -1,0,1$.

Każdą wartości z_0, z_n wyznacza się podobnie, w oparciu o 3 punkty: odpowiednio (x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2) i (x_{n-2}, y_{n-2}), (x_{n-1}, y_{n-1}), (x_n, y_n).

Dla punktów $(x_{i+k}, y_{i+k}) \qquad k = -1,0,1$ wielomian aproksymujący ma postać

$$Q_i(x) = m_i x + b_i$$

i aby obliczyć parametry m_i, b_i należy zminimalizować funkcję

$$S(m_i, b_i) = \sum_{k=-1}^{1} (m_i x_{i+k} + b_i - y_{i+k})^2 .$$

Wartości m_i, b_i wyznacza się z warunków

$$\frac{\partial S}{\partial m_i} = \frac{\partial S}{\partial b_i} = 0 .$$

Ostatecznie wygładzone wartości z_i są

$$z_0 = w_1(x_0) = \frac{5y_0 + 2y_1 - y_2}{6}$$

$$z_i = w_i(x_i) = \frac{y_{i-1} + y_i + y_{i+1}}{3} \qquad i = 1,2,...,n-1$$

$$z_n = w_{n-1}(x_n) = \frac{5y_n + 2y_{n-1} - y_{n-2}}{6} .$$

Algorytm SE15 wygładzania w oparciu o wielomian stopnia 1 i 5 punktów pomiarowych

Algorytm ten wyznacza wektor Z=[$z_0, z_1, ..., z_{n-1}, z_n$] wartości wygładzonej funkcji dla zadanego wektora Y=[$y_0, y_1, ..., y_{n-1}, y_n$] pomierzonych wartości funkcji i równoodległych argumentów funkcji.

Wartości z_i otrzymuje się obliczając w punkcie x_i wartość wielomianu aproksymującego stopnia pierwszego stosując do tego aproksymację średniokwadratową punktową w oparciu o 5 punktów (x_{i+k}, y_{i+k}) $k = -2, -1, 0, 1, 2$. Sposób rozwiązania jest podobny jak dla algorytmu z 3 punktami.

Ostatecznie wygładzone wartości z_i są

$$z_0 = w_2(x_0) = \frac{3y_0 + 2y_1 + y_2 - y_4}{5}$$

$$z_1 = w_2(x_1) = \frac{4y_0 + 3y_1 + 2y_2 + y_3}{10}$$

$$z_i = w_i(x_i) = \frac{y_{i-2} + y_{i-1} + y_i + y_{i+1} + y_{i+2}}{5} \quad i = 2,3,...,n-2$$

$$z_{n-1} = w_{n-2}(x_{n-1}) = \frac{4y_n + 3y_{n-1} + 2y_{n-2} + y_{n-3}}{10}$$

$$z_n = w_{n-2}(x_n) = \frac{3y_n + 2y_{n-1} + y_{n-2} - y_{n-4}}{5}.$$

Algorytm SE35 wygładzania w oparciu o wielomian stopnia 3 i 5 punktów pomiarowych

Algorytm ten wyznacza wektor Z=[$z_0, z_1, ..., z_{n-1}, z_n$] wartości wygładzonej funkcji dla zadanego wektora Y=[$y_0, y_1, ..., y_{n-1}, y_n$] pomierzonych wartości funkcji i równoodległych argumentów funkcji.

Wartości z_i otrzymuje się obliczając w punkcie x_i wartość wielomianu aproksymującego stopnia trzeciego stosując do tego aproksymację średniokwadratową punktową w oparciu o 5 punktów (x_{i+k}, y_{i+k}) $k = -2, -1, 0, 1, 2.$

Z wyjątkiem punktów $z_0, z_1, z_{n-1}\ z_n$ każdą wartość z_i otrzymuje się obliczając w punkcie x_i wartość wielomianu aproksymującego stopnia trzeciego stosując do tego aproksymację średniokwadratową punktową w oparciu o 5 punktów (x_{i+k}, y_{i+k}) $k = -2, -1, 0, 1, 2$. Natomiast dla punktów z_0 i z_1 wykorzystuje się 5 pierwszych punktów a dla punktów z_{n-1} i z_n ostatnie 5 punktów.

Dla punktów (x_{i+k}, y_{i+k}) $k = -2,-1,0,1,2$ wielomian aproksymujący ma postać

$$Q_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i$$

i aby obliczyć parametry a_i, b_i, c_i, d_i należy zminimalizować funkcję

$$S(a_i, b_i, c_i, d_i) = \sum_{k=-2}^{2} (a_i x_{i+k}^3 + b_i x_{i+k}^2 + c_i x_{i+k} + d_i - y_{i+k})^2.$$

Wartości a_i, b_i, c_i, d_i wyznacza się z warunków

$$\frac{\partial S}{\partial a_i} = \frac{\partial S}{\partial b_i} = \frac{\partial S}{\partial c_i} = \frac{\partial S}{\partial d_i} = 0.$$

Ostatecznie wygładzone wartości z_i są

$$z_0 = w_2(x_0) = y_0 - \frac{r_2}{70}$$

$$z_1 = w_2(x_1) = y_1 + \frac{2r_2}{35}$$

$$z_i = w_i(x_i) = y_i + \frac{3r_i}{35} \quad i = 2,3,...,n-2$$

$$z_{n-1} = w_{n-2}(x_{n-1}) = y_{n-1} + \frac{2r_{n-2}}{35}$$

$$z_n = w_{n-2}(x_n) = y_n - \frac{r_{n-2}}{70}$$

gdzie $r_i = y_{i-2} - 4y_{i-1} + 6y_i - 4y_{i+1} + y_{i+2} \quad i = 2,3,...,n-2$.

5. Program ćwiczenia

1. Dla podanej przez prowadzącego funkcji aproksymowanej napisać program wyznaczający współczynniki wielomianu aproksymującego stosując aproksymację średniokwadratową punktową (skorzystać z procedury rozwiązującej układ równań np. metodą Choleskiego) oraz błąd aproksymacji wyznaczony wg wzoru
$$\Delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{n}(\sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j - f_i)^2}{n+1}}.$$
Aproksymację wykonać z pomocą kilku wielomianów różnych stopni. Zbadać wpływ liczby węzłów oraz stopnia wielomianu aproksymującego na błąd aproksymacji.
2. Wykonać podobne zadanie jak w pkt.1 ale wykorzystać wielomiany ortogonalne Grama.
3. Napisać program dokonujący wygładzania podanych przez prowadzącego punktów pomiarowych w oparciu o algorytmy SE13, SE15, SE35. Dokonać kilkakrotnego wygładzania stosując ten sam algorytm kilka razy (wygładzanie już „wygładzonych" punktów). Porównać wyniki.
4. Napisać sprawozdanie zawierające:
   a) tekst programu i wyniki przeprowadzonych obliczeń,
   b) opis przeprowadzonych badań,
   c) analizę uzyskanych wyników,
   d) wnioski.

6. Pytania kontrolne

1. Co to jest aproksymacja i po co się ją stosuje?
2. Co to jest wielomian uogólniony? Jakie najczęściej stosuje się funkcje bazowe?
3. Jaka jest miara błędu dla aproksymacji średniokwadratowej punktowej?
4. Jaka jest miara błędu dla aproksymacji średniokwadratowej przedziałowej?
5. Jaka jest miara błędu dla aproksymacji jednostajnej?
6. Sformułuj problem aproksymacji średniokwadratowej, punktowej, wielomianowej.
7. Podaj rozwiązanie problemu aproksymacji średniokwadratowej, punktowej, wielomianowej.
8. Podaj definicję wielomianów ortogonalnych na zbiorze punktów. Jakie korzyści daje stosowanie do aproksymacji wielomianów ortogonalnych?

9. Co to jest wygładzanie funkcji?
10. Podaj ideę wygładzania funkcji wielomianem pierwszego stopnia w oparciu o trzy węzły (algorytm S13).