ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS FAKULTETAS
MATEMATIKOS KATEDRA

Dianos Baltrušaitytės Šukutienės
matematikos magistrantūros studentės

Didelių masyvų matavimų rezultatų aproksimavimas Kvazi-Gauso funkcijomis

Magistro darbas

Darbo vadovas:
doc. Mindaugas Stakvilevičius

Šiauliai, 2008

TURINYS

ĮVADAS

Matematinės statistikos metodai eksperimento duomenų analizei pirmiausia pritaikyti fizikos moksle ir jų taikymo ypatybėms atskirose srityse atskleisti skirtos išsamios monografijos. Pažymėtina, kad šių metodų taikymas susijęs su nemažais matematiniais skaičiavimais ir tik kompiuterijos laimėjimai sudarė sąlygas jiems paplisti technikos mokslų, inžinerijos ir kitose srityse, susijusiose su duomenų vertinimu. Taikant praktiškai dažnai atsisakoma eksperimento savitumo analizės, pirmumą teikiant vertinimų unifikavimui naudojant kompiuterinių programų paketus. Toks supaprastintas statistinių metodų taikymo duomenų analizei požiūris gali gerokai pakeisti eksperimento duomenų apdorojimą ir skatinti klaidingas prognozes, ypač kai jos sudaromos iš mažos duomenų imties arba skirtos eksperimentui, kurio atlikti negalima, pavyzdžiui, molekulių struktūrų įvertinimui, molekulių fizikinių parametrų nustatymui. Iš čia išplaukia statistinės duomenų analizės teorinių pagrindų poreikis.

Eksperimentu gautas matuojamojo dydžio įvertis, be naudingos informacijos, visuomet turi ir šalutinę, kurios įtaką vertinant eksperimento rezultatą stengiamasi sumažinti taikant matematinės statistikos metodus. Čia susiduriama su idealizuotų matematinės statistikos modelių ir jų pagrindu gautų metodų pritaikymo realiam eksperimentui problema, kuri beveik visuomet turi būti sprendžiama kūrybiškai ir dažnai savitai atskirose mokslo srityse.

Darbo aktualumas:

Lietuvos fizikos instituto darbuotojai pasiūlė sudaryti programą, kuri pakankamai tiksliai nustatytų kokiomis Gauso funkcijomis išreikšti aukštos klasės prietaisais gauti eksperimentiniai duomenys.

Atskirų tos programos fragmentų efektyvumas ištirtas 2007m. matematikos specialybės studentų bakalauro darbuose.

Mes ėmėmės susisteminti tuos darbus ir sudaryti galutinę programą ir ją aprobuoti.

Darbo tikslas :

- Išbandyti naujai pasiūlytą „splainą“, kuris sudarytas iš polinomų ir Gauso funkcijų sandaugų sumos.
- Išbandyti jo efektyvumą apdorojant didelius konkrečius eksperimentinių duomenų masyvus.
- Turėdami taip suglodintus eksperimentinius duomenis iššifruojame, iš kokių Gauso funkcijų su iš anksto nežinomais puspločiais, viršūnių taškais ir aukščiais sudaryta visa eksperimentinė kreivė, tai yra turime aproksimuoti eksperimentinius duomenis Gauso funkcijų su neapibrėžtais parametrais suma.

Darbo uždaviniai :

- Sudaryti eksperimentinių duomenų glodinimo algoritmą;
- Sudaryti suglodintų eksperimentinių duomenų aprašymą Gauso funkcijomis algoritmą;
- Realizuoti šiuos algoritmus MATHCAD'o programiniu paketu, kad aproksimavimo funkcijos paklaida (standartinis nuokrypis) būtų minimali.

Uždavinio formulavimas – formuluojant uždavinius yra apdorojami fizikos eksperimentų rezultatai, kuriuose taikomi matematikos ir skaičiavimo metodai: mažiausių kvadratų metodas, normalinio skirtinio tankio funkcija (Gauso funkcija), variaciniais iteraciniais metodais: didžiausio nuolydžio metodas, jungtinių gradientų metodas. Taip pat, pasinaudodami MATHCAD'o programiniu paketu, sukūrėme konkrečią eksperimentinių duomenų apdorojimo programą.

1. APROKSIMAVIMAS

Funkcijų aproksimavimo uždavinių gausu įvairiose matematikos, fizikos ir technikos srityse. Literatūroje nagrinėjama daugybė funkcijų aproksimavimo uždavinio sprendimo metodų. Tai paaiškinama tuo, kad praktikoje susiduriama su daugeliu skirtingų šio uždavinio formuluočių. Sudarysime metodą, kuriuo eksperimento duomenims – taškams plokštumoje – randama tiesė (arba kreivė), einanti arčiausiai visų taškų (tam tikra prasme). Ši tiesė ir jos lygtis vartojama prognozuoti – apskaičiuoti būsimas reikšmes arba interpoliuoti – rasti tarpines reikšmes, nerastas eksperimento metu.

Praktikoje dažnai reikia žinoti daugelį funkcijos reikšmių. Tačiau daugumos funkcijų reikšmių paprastai apskaičiuoti negalima. Tada naudojamės lentelėmis funkcijos reikšmėmis arba interpoliacine funkcija. Bet interpoliacinė funkcija, sutampanti su duotąją interpoliavimo taškuose, ne visada yra jai artima kituose intervalo (a,b) taškuose. Mus dažnai domina kaip tik toks klausimas: rasti f-ją $\varphi(x)$, kurios reikšmės būtų kuo artimesnės $f(x)$ reikšmėms intervale (a,b). Šis uždavinys paprastai sprendžiamas tokiu būdu. Parenkama funkcijų klasė M. Klasės M funkcijos išreiškiamos nesudėtinga analizinė formule. Tarp funkcijų $\varphi(x) \in M$ ieškoma tokia, kad dydis $\rho(x,\varphi) = |f(x) - \varphi(x)|$ būtų mažiausias intervale (a,b). Funkcija, kuri minimizuoja $\rho(x,\varphi)$, vadinama aproksimacine funkcija, o jos radimas – aproksimavimu.

Jei minimizuojamas dydis $\max\limits_{a \le x \le b} \rho(x,\varphi)$, tai tai aproksimavimas vadinamas tolydiniu, o jei minimizuojamas dydis $\int\limits_a^b \rho^2(x,\varphi)dx$, tai aproksimavimas vadinamas kvadratiniu. Tokiu būdu, tolydinio aproksimavimo atveju ieškome f-jos $\varphi_0(x) \in M$, kuri tenkina sąlygą:

$$\delta(\varphi_0) = \min_{\varphi(x)\in M} \max_{a \le x \le b} |f(x) - \varphi(x)|,$$

o kvadratinio aproksimavimo atveju-

$$\delta(\varphi_0) = \min_{\varphi(x)\in M} \int\limits_a^b p(x)|f(x) - \varphi(x)|^2 dx \quad (1);$$

čia p(x)>0 yra svorio funkcija.

Jei funkcija $f(x)$ išreikšta lentele, tai ieškome funkcijos $\varphi(x) \in M$, minimizuojančios dydį

$$\sum_{i=1}^{n} pi\left|f(x_i)-\varphi(x_i)\right|^2;$$

čia p_i vadinami svoriais ir tenkina sąlygas

$$0 \le pi \le 1, \sum_{i=1}^{n} p_i = 1.$$

Jeigu klasę M sudaro n tiesiškai nepriklausomų funkcijų $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \ldots, \varphi_n(x)$ tiesinė daugdara, o $f(x)$ yra duota jos reikšmių lentelė, tai $f(x)$ nesutampa su interpoliacine funkcija, jei $f(x) \notin M$

Apibendrintai funkcijų aproksimavimo uždavinį galima suformuluoti taip: turint funkcijos $y = f(x)$ reikšmių lentelę (x_i, y_i) (čia $i = \overline{0, n}$, $y_i = f(x_i)$ ir $x_i \neq x_j$, kai $i \neq j$), reikia rasti funkcijos $f(x)$ reikšmę, kai $x = t$, o $t \in [x_0; x_n]$.

Funkcijos $f(x)$ analizinė išraiška paprastai yra nežinoma arba pernelyg sudėtinga.

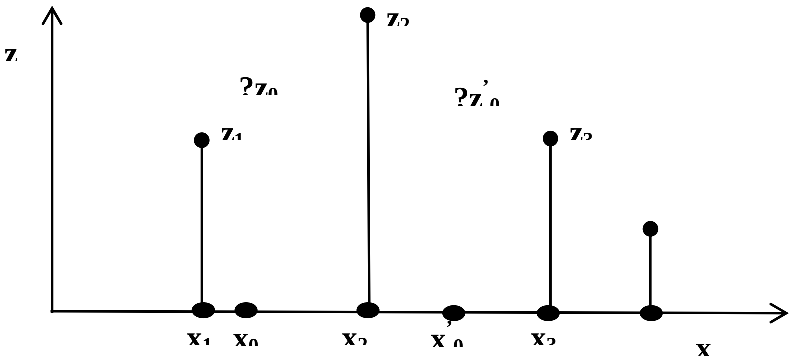
Atsižvelgiant į y_i reikšmių tikslumą, taikomi du šio uždavinio sprendimo metodai:

- interpoliavimo metodas,
- suglodinimo metodas.

2. INTERPOLIAVIMAS

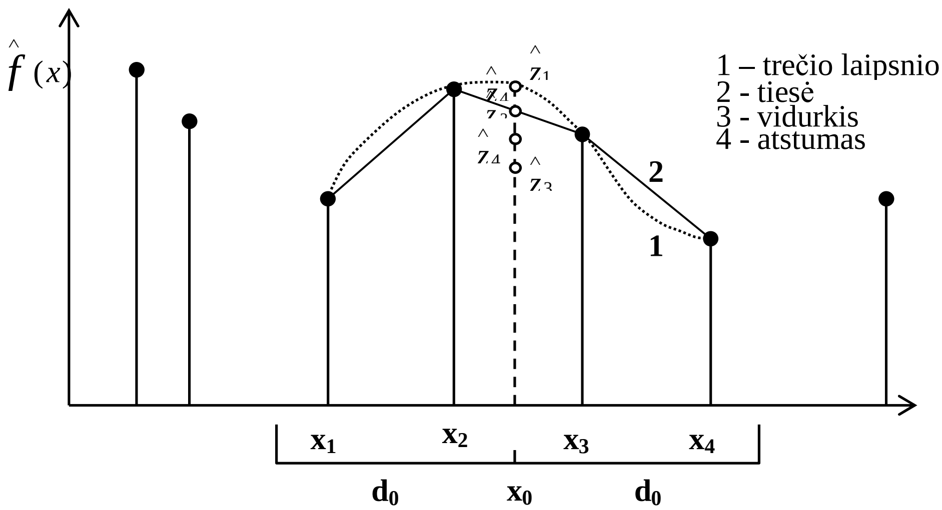
Pagal šiuos taškinius vertinimus informacija dažnai norima paskleisti visam analizuojamam paviršiui. Lotyniškai *inter* reiškia *tarp, tarpe*, o *polire – suderinti*.

2.1 Interpoliavimo principai



2.1.1 pav. Interpoliavimo uždavinys

Interpoliavimo principai trumpai gali būti nusakomi 2.1.1 pav. pateikiamu pavyzdžiu. Logiška manyti, kadangi taškas x'_0 yra atstumo tarp x_2 ir x_3 viduryje, tai ir jo z'_0 reikšmė bus ½(z_2+z3), o z_0 bus artimesnė z_1 nei z_2, kadangi x_0 arčiau x_1 nei x_2.



2.1.2 pav. Įvairių interpoliavimo schemų įtaka gaunamiems rezultatams

Nežinomos taško reikšmės suradimui dažniausia naudojamos tik tam tikru požiūriu artimiausių taškų reikšmės. Pvz. 2.1.2 pav. interpoliavime dalyvauja taškai, nutolę nuo x_0 nedaugiau kaip atstumas d_0. Tikrasis, tačiau nežinomas paviršius yra aprašomas f(x), o interpoliavimo metu gaunama funkcija - $\hat{f}(x)$.

1. $\hat{f}(x)$ yra polinominė funkcija, pravedanti kreivę per 4 analizuojamo lango taškus. Gaunama atributo reikšmė taške x_0 bus $\hat{z}_1$. Tokia funkcija gali būti naudojama jei žinoma, kad rodiklio reikšmių kintamumas erdvėje pasižymi švelniai banguojančiu paviršiumi ir taškų su žinomomis reikšmėmis tankumas pakankamai didelis. Modeliuojamas paviršius turi liesti duomenų taškus. Daroma prielaida, kad nėra jokių matavimo paklaidų ir jokio atsitiktinumo komponento turimuose duomenyse, arba to įtaka ignoruojama. Kiekvienas duomenų taškas turi vienodą svorį nustatant regresijos koeficientų reikšmes.
2. $\hat{f}(x)$ yra tiesė, jungianti taškus (pirmo laipsnio polinomas intervale tarp 2 taškų). Naudojamas paprasčiausias tiesinio interpoliavimo metodas. Rezultatui įtakos turi tik 2 artimiausi taškai (svoris w_i=1, kitų 0).
3. $\hat{f}(x)$ yra nulinio laipsnio polinomas, arba x_0 reikšmė yra visų keturių interpoliavime dalyvaujančių (šiuo atveju) taškų reikšmių aritmetinis vidurkis. Visų taškų įtaka vienoda (w_i=1). Ši interpoliavimo schema naudotina esant matavimų klaidoms, aukštos bei žemos reikšmės niveliuojasi.
4. Šiuo atveju (kreivė pav. neatvaizduota) duomenų taškai, esantys arčiau dominančios vietos, turi daugiau įtakos interpoliavimo rezultatams nei tolimesni. Pvz. x_2 ir x_3 w_i=1, o x_1 ir x_4 w_i=1/3, nes $(x_0-x_1)=3(x_0-x_2)$. Taigi, taško svarba interpoliuojamai kito taško reikšmei atvirkščiai proporcinga atstumui tarp taškų. $\hat{z}_4$ reikšmė apskaičiuojama taško reikšmių ir svertų (w_i) sandaugų sumą dalijant iš $\sum w_i$.

Bendriausiu atveju taško reikšmės interpoliavimo formulė yra:

$$\hat{z} = \hat{z}_0 = \sum_{i=1}^{n} w_i z_i$$

čia: $\hat{z}_0$ - bet kuriame taške su koordinatėmis x_0 ir y_0 apskaičiuoto taško reikšmė;

w_i - duomenų taško reikšmės svertas;

z_i – reikšmė duomenų taške i, kurio koordinatės x_i ir y_i.

n – interpoliavimo procese naudojamų duomenų taškų skaičius, n=1, 2, …n.

Interpoliavimo algoritmai skiriasi tik svertų w_i įvertinimo metodais.
Šiems metodams priklauso polinominiai splainai, kurie taip pat grindžiami atstumo tarp duomenų ir interpoliuojamų taškų įtaka.

1.2 Splainai

Funkcijos panašios į dabar apdorojamas splainais, matematikams buvo žinomos jau seniai net nuo Oilerio laikų. Tik jų intensyvus analizavimas prasidėjo XX amžiaus viduryje.1946 m. Isaakas Šionbergas pirmasis panaudojo terminą nusakantį polinominių splainų klasę . Iki to. splainai buvo teorinių tyrinėjimų instrumentas. Po 1960 m. vystantis skaičiavimo technikos pasiekimams splainai pradėti naudoti kompiuterinėje grafikoje ir modeliavime.

Splaino pavadinimas kilęs iš anglų kalbos žodžio *spline*, reiškiančio standžią liniuotę.

Splainas – tai tolydžioji iki p-tosios eilės išvestinės imtinai funkcija, sudaryta iš kurios nors funkcijos dalių. Istoriškai splainai pradėti konstruoti iš n-tosios eilės polinomo dalių, todėl čia, kalbėdami apie splainus, laikysime juos funkcijomis, sudarytomis iš polinomų dalių.
Dar naudojami splainai, angliškai vadinami gyvatėmis (*snakes*). Jie konstruojami dviem etapais:

1. pasirenkama tikslo funkcija – funkcionalas;
2. taikant variacinio skaičiavimo metodus, apskaičiuojama kreivė, minimizuojant pasirinktą funkcionalą;
3. Paprasčiausias ir seniausiai naudojamas splainas yra laužtė. Tai pirmosios eilės splainas, kurio $p = 0$.

Splainas, sudarytas, pavyzdžiui, iš kubinio polinomų dalių, vadinamas kubiniu; jo $0 \le p \le 2$.

Splaino apibrėžimas. Tarkime, kad intervale $[a, b]$ duotas tinklelis $\Delta : a = x_0 < x_1 < ... < x_N = b$. Tada $n-$tosios eilė defekto k splainas yra funkcija $y = g(x)$, tenkinanti šias sąlygas:

1. kiekviename intervale $[x_{i-1}; x_i]$ $\left(i = \overline{1, N}\right)$ $g(x)$ yra n-tojo laipsnio polinomas;
2. kiekviename vidiniame tinklelio taške x_i $\left(i = \overline{1, N-1}\right)$ galioja lygybė $g^{(l)}(x_i - 0) = g^{(l)}(x_i + 0)$, $l = \overline{0, n-k}$.

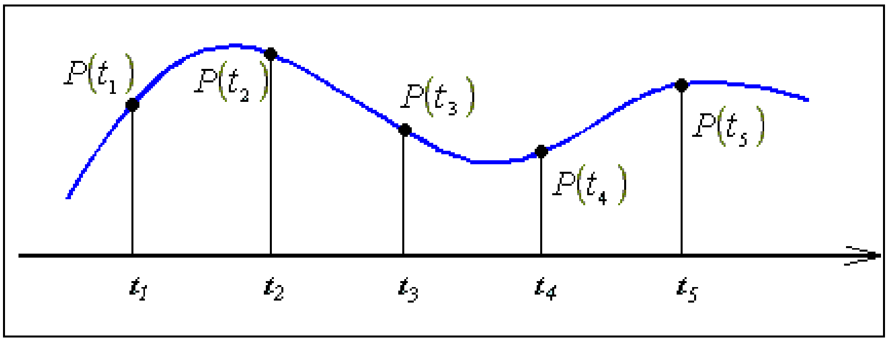
2.3 Splainų metodas

Funkcijų aproksimavimo metodai splainais pirmą kartą buvo pasiūlyti 1940 metais, tačiau plačiau pradėti naudoti tik pastaruoju metu.

Pagrindinis aproksimuojamų polinomų trūkumas tas, kad funkcijos, aprašančios duomenis kažkurio taško aplinkoje, įneša pastebimą paklaidą ir tolimesniuose taškuose. Todėl panaudoję polinomų interpoliavimą duomenų intervale, tikslių rezultatų negausime.

Angliškas žodis „spline“ reiškia „lanksčią liniuotę“. Tokia, lankstoma pagal eksperimentinius duomenų taškus funkciją gali būti aprašoma polinomais, su sąlyga, kad jų srities galuose, funkcijos galai „suklijuojami“ taip kad sujungimas nebūtų užlūžęs.

Toliau aptarsime splaino pritaikymo idėją. Visą aproksimavimo intervalą, kuriame ieškome atkuriamąją funkciją, suskaidome į mažesnius intervalus (zonas). Kiekvienoje zonoje aproksimavimo funkcija išreiškiama žemo laipsnio polinomu. Be to, pareikalaujama, kad polinominės funkcijos ir jų išvestinės besiribojančių zonų kraštuose sutaptų (2.3.1 pav.).



2.3.1 pav. Splainu pavaizduoti duomenys

Polinomų „suklijavimo“ galuose sąlyga:

$$P_{ni}(t_i) = P_{n(i-1)}(t_i)\,,$$

t. y. n-tojo laipsnio splaino funkcijos, susidedančios iš duoto laipsnio polinomų „gabalėlių“, kurie sujungti taip, kad gauta funkcija būtų tolydi ir turėtų keletą tolydžių išvestinių.

Tokio vaizdo splainas vadinamas „gabalais“ polinomine funkcija. Nulinio laipsnio splainas sutampa su laipsnine interpoliuojama funkcija, o pirmo laipsnio splainas – su tiesiškai interpoliuojama funkcija.

Pavyzdžiui, vienalytė liniuotė tvirtinama kokiuose nors 2 taškuose ir jai duodame polinkį pagal tuos taškus. Tokios formos kreivės strypą nusako trečio laipsnio polinomas.

Tarkime, kad kubinė parabolė duota parametrine forma

$$P(t) = a_3t^3 + a_2t^2 + a_1t + a_0 \quad (8)$$

praeina per 2 taškus $P(t_1)$ ir $P(t_2)$, kuriuose žinomos išvestinių $P'(t_1)$ ir $P'(t_2)$ reikšmės. Tai reiškia, kad yra duotos 4 būtinos ir pakankamos sąlygos tam, kad apibrėžtume keturis nežinomus koeficientus (8) išraiškoje. Šitokį polinomą vadiname kubiniu Ermito interpoliaciniu polinomu.

Parametrinė kreivės išraiška turi privalumą, kad galime laisvai išsirinkti norimą diapazoną, keičiant kreivės parametrus. Norėdami, kad skaičiavimo procesas būtų paprastesnis, laikysime, kad parametras t, apibrėžtas kiekviename segmente, kinta nuo 0 iki 1 $(0 \le t \le 1)$.

Nesunku pastebėti, kad $P(0) = a_0$, $P(1) = a_0 + a_1 + a_3$.

Apibrėšime išvestinę $P'(t) : P'(t) = 3a_3t^2 + 2a_2t + a_1$.

Iš to seka, kad $P'(0) = a_1$, $P'(1) = 3a_3 + 2a_2 + a_1$.

Iš šių išraiškų galime rasti nežinomuosius a_0, a_1, a_2, a_3 :

$$\begin{aligned}
a_0 &= P(0), \\
a_1 &= P'(0), \\
a_2 &= 3[P(1) - P(0)] - 4P'(0) - P'(1), \\
a_3 &= 2[P(0) - P(1)] + P'(0) + P'(1).
\end{aligned}$$

Tokia procedūra yra atliekama kiekvienai taškų porai. Tokiu būdu nustačius parabolės reikšmes $P(t_1)$ ir $P(t_2)$ intervalo t_1 t_2 galuose, reikia tas reikšmes sulyginti su intervalo t_2, t_3 galuose esančiomis reikšmėmis. Tokia procedūra vadinama susiuvimu arba suklijavimu.

2.4 Splainų interpoliavimas

Tarkime, kad funkcija $y = f(x)$ yra aprėžta reikšmių lentele, $y_i = f(x_i)$, $i = 0,1,...,N$, ir visame funkcijos $f(x)$ apibrėžimo intervale $[x_0; x_N]$ sudarykime jos interpoliacinę funkciją iš neaukšto, pirmojo arba antrojo, laipsnio interpoliacinių daugianarių, kurių kiekvienas yra aprėžtas atitinkamoje intervalo $[x_0; x_N]$ dalyje. Toks interpoliavimas vadinamas *dalimis daugianarių funkcijų interpoliavimu.* Jis pravartus tuo atveju, kai didinant interpoliacinio daugianario laipsnį (įtraukiant naujus mazgus), interpoliavimo paklaida didėja arba nemažėja; antra vertus, šio interpoliavimo formulės yra nesudėtingos. Pažymėsime, kad dalimis daugianarė interpoliacinė funkcija yra tolydi visame intervale $[x_0; x_n]$, tačiau nėra diferencijuojama interpoliavimo mazguose.

Interpoliavimo uždavinio formulavimas. Duota funkcijos $y = f(x)$ reikšmių lentelė (x_i, y_i); čia $i = \overline{0, n}$, y_i reikšmės yra tikslios arba paklaidos tokios mažos, kad praktiškai jų galima nepaisyti. Reikia rasti aproksimuojančiąją funkciją $y = F(x)$, priklausančią funkcijų klasei K ir tenkinančią sąlygas

$$F(x_i) = y_i, \quad i = \overline{0, n}. \qquad (2.4.1)$$

Šios sąlygos vadinamos Lagranžo interpoliavimo sąlygomis, o pati funkcija $y = F(x)$ — Lagranžo interpoliacine funkcija, arba tiesiog interpoliacine funkcija.

Jei, be $f(x_i)$ reikšmių, taške x_i yra žinomos funkcijos $f(x)$ išvestinių iki $(m_i - 1)$-osios eilės imtinai reikšmės, tai galima reikalauti, kad aproksimuojančioji funkcija $y = F(x)$ tenkintų sąlygas

$$F^{(l)}(x_i) = f^{(l)}(x_i), \quad i = \overline{0, n}, \quad l = \overline{0,\ m_i - 1}. \quad (2.4.2)$$

Simbolis (l) žymi *l*-tosios eilės išvestinę. Šios sąlygos vadinamos Ermito interpoliavimo sąlygomis, o funkcija $F(x)$ — Ermito interpoliacine funkcija.

Kaip matyti iš interpoliavimo uždavinio formuluotės, keičiant aproksimuojančiųjų funkcijų klasę *K* bei interpoliavimo sąlygas, galima rasti įvairias interpoliacines funkcijas.

Istoriškai pirmoji aproksimuojančiųjų funkcijų klasė buvo *n*-tosios eilės polinomų klasė. Pastaruoju metu plačiai naudojama splainų klasė. Toliau nagrinėsime interpoliacinių polinomų ir interpoliacinių splainų konstravimo bei jų reikšmių apskaičiavimo uždavinius.

2.5 Interpoliacinių polinomų konstravimas ir jų reikšmių apskaičiavimas

Uždavinio formulavimas. Duota funkcijos $f(x)$ reikšmių lentelė (x_i, y_i); čia $i = \overline{0, n}$. Reikia rasti *n*-tosios eilės polinomą $y = F(x)$, tenkinantį Lagranžo interpoliavimo sąlygas.

Šis uždavinys labai svarbus istoriškai, mat jį sprendė daugelis įžymių matematikų, kaip antai: K. F. Gausas (K. F. Gauss), I. Niutonas (I. Newton), F. V. Beselis (F. V. Bessel), Dž. Stirlingas (J. Stirling) ir kt.

Interpoliaciniai polinomai paprastai naudojami funkcijos reikšmėms tabuliuoti. Pavyzdžiui, elementariosios funkcijos reikšmės apskaičiuojamos keliuose taškuose, o jos reikšmės kituose taškuose randamos pagal interpoliacinį polinomą. Pastaruoju metu, kai skaičiuojama kompiuteriais, toks elementariųjų funkcijų reikšmių ieškojimo būdas taikomas retai. Todėl gali kilti klausimas, kodėl čia nagrinėjamas interpoliacinių polinomų apskaičiavimas. Atsakymai gali būti keli:

- interpoliaciniai polinomai naudojami ne tik elementariųjų funkcijų reikšmėms apskaičiuoti, bet ir eksperimento duomenims apdoroti;
- interpoliaciniai polinomai naudojami skaitiniam integravimui, diferencijavimui, diferencialinėms lygtims spręsti ir kt.;
- interpoliaciniai polinomai yra puikus glodžiųjų kreivių konstravimo uždavinio sprendimo įvadas.

Pirmasis klausimas, į kurį reikia atsakyti, yra toks: ar interpoliacinio polinomo konstravimo ir jo reikšmės apskaičiavimo uždavinys turi sprendinį ir ar šis sprendinys yra vienintelis?

Tarkime, kad taškai x_i $\left(i=\overline{0,n}\right)$ yra skirtingi, t. y. $x_i \neq x_j$, kai $i \neq j$. Tada n-tosios eilės interpoliacinis polinomas egzistuoja ir yra vienintelis.

Sakykime,

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

yra ieškomasis interpoliacinis polinomas. Jis turi tenkinti (2.4.1) sąlygas, t. y.

$$a_n x_i^n + a_{n-1}x_i^{n-1}+\ldots+a_1 x_i + a_0 = y_i, \quad i=\overline{0,n}. \qquad (2.5.1)$$

Iš šios tiesinių lygčių sistemos apskaičiuojami interpoliacinio polinomo koeficientai. Kadangi sistemos determinantas yra Vandermondo determinantas, kuris nelygus nuliui, kai $x_i \neq x_j$ $\left(i \neq j\right)$, tai sistemos sprendinys egzistuoja ir yra vienintelis.

Nors interpoliacinis polinomas yra vienintelis, tačiau istoriškai susiformavo nemažai jo išraiškų: Lagranžo, Aitkeno, Niutono, Gauso ir kt. Skaičiuojant kompiuteriais, ši įvairovė praktiškai nėra labai svarbi.

2.6 Interpoliacinių polinomų konvergavimas

Skaičiuotojas, naudojantis interpoliacinius polinomus, yra linkęs manyti, kad, didinant interpoliacinio polinomo $F(x)$ eilę, tas polinomas ir aproksimuojamoji funkcija $f(x)$ vis geriau sutampa. Tačiau taip esti ne visada. Yra žinomos dvi teoremos, kurias sąlygiškai galime pavadinti „optimistine“ ir „pesimistine“.

1 (Vejerštraso) teorema („optimistinė“)**.** Kad ir kokia būtų funkcija $y=f(x)$ $\left(x\in\left[a;b\right]\right)$, visada galima rasti tokius taškus $x_i \in\left[a;b\right]$, su kuriais

$$\lim_{n\to\infty}\max_{x\in[a;b]}\left|f(x)-F(x)\right|=0.$$

2 (Fabero) teorema („pesimistinė“)**.** Kad ir kokie būtų taškai $x_i \in [a;b]$, visada galima rasti tokią funkciją $y = f(x)$, su kuria

$$\lim_{n\to\infty}\max_{x\in[a;b]}\left|f(x)-F(x)\right|\to\infty.$$

Pirmasis šiuos reiškinius 1901 metais pastebėjo K. Rungė (K. Runge). Jis nagrinėjo funkciją $y=\frac{1}{1+25x^2}$, kurios $x\in[-1;1]$. Jei interpoliacinis polinomas bus konstruojamas imant vienodai nutolusius vienas nuo kito taškus, tai, didinant polinomo eilę, centrinėje intervalo dalyje interpoliacinio polinomo ir funkcijos reikšmės praktiškai sutaps, tačiau intervalo galuose jų skirtumo modulis artės prie begalybės.

Tačiau jei taškai bus sutapatinami su Čebyšovo polinomo šaknimis, tai, didinant interpoliacinio polinomo eilę, funkcija ir polinomas praktiškai sutaps visame intervale. Analogišką rezultatą 1916 m. gavo S. Bernšteinas, nagrinėdamas funkciją $y=|x|$, kurios $x\in[-1;1]$. šie rezultatai ir buvo viena iš priežasčių, dėl kurių XX amžiaus šeštajame dešimtmetyje funkcijoms aproksimuoti vietoj polinomų pradėtos naudoti naujos funkcijos — splainai.

3. EKSPERIMENTINIŲ DUOMENŲ YPATYBĖS

3.1. Eksperimento esmė

Norint išsiaiškinti, duotuoju atveju, šviesą surenkančių kompleksų, išskirtų iš fotosintezuojančių bakterijų membranų, sugerties spektrų fizikinius parametrus, kurie aprašomi kvantinės fizikos dėsniais, per bandinį yra apšviečiamas įvairaus bangos ilgio šviesa. Registruojama, kokia šviesos energijos dalis buvo sugerta. Šie bandymai buvo atlikti Prancūzijoje Paryžiuje pagal Lietuvos fizikos instituto specialią programą. Šių tyrimų vykdytoja - fizikinių mokslų daktarė Vidita Urmonienė. Bandymų metu buvo tikslinga išgauti kuo daugiau ir tikslesnės tų matavimų informacijos, nes Lietuvoje tokių įrengimų šiems bandymas atlikti nėra.

3.2. Specifika

Išmatuojamas perėjusios ir kritusios šviesos energijų santykis, kuris visuomet yra teigiamas ir ne didesnis už vienetą. Pagal kvantinius fizikos dėsnius visos šios sugerties juostos turi normalinio skirstinio (Gauso skirstinio) formą. Apdorojant tokius eksperimento duomenis žinomais būdais, fizikams kilo įtarimų, kad tos juostos nėra Gauso skirstinio formos, o jos aprašomos kitomis funkcijomis: viršutinė juostos dalis primena Gauso funkciją, o apatinė dalis primena vadinamasias Lorenco funkcijas; be to ši forma keičiasi priklausomai nuo bandinio temperatūros. Mūsų uždavinys – pabandyti išreikšti eksperimentinių duomenų grafikus tik per Gauso funkcijas. Tuo tikslu buvo pasiūlytas metodas, kuris duotų panašius rezultatus, kuriuos duoda „splainai“, bet be „splainams“ būdingų trūkumų. Šitas metodas būtų naudingas sugerties spektrų identifikavimui spręsti bei minėtiems fizikiniams uždaviniams spręsti. Tyrimui pateikti eksperimentiniai duomenys pagal 18 skirtingų temperatūrų: pradedant 4 K ir baigiant 300 K , buvo atlikta 2900 matavimų.

4. SUGLODINIMAS

Nagrinėdami interpoliavimo uždavinį, funkciją *f(x)*, apibrėžtą reikšmių lentele, stengėmės pakeisti tokia aproksimuojančiąja funkcija *F(x)* (n – tojo laipsnio polinomu, splainu ir pan.), kad taškuose x_i ($i = \overline{0,n}$) $F(x_i)$ reikšmės būtų lygios $f(x_i)$ reikšmėms.

Labai dažnai $f(x_i)$ reikšmės yra eksperimento rezultatai ir turi matavimo bei metodo paklaidų. Todėl reikalauti, kad aproksimuojančioji funkcija *F(x)* tenkintų sąlygą $F(x_i) = f(x_i)$ ($i = \overline{0,n}$), būtų neprotinga. Geriau rasti tokią funkciją *F(x)*, kuri pagal pasirinktą kriterijų geriausiai aproksimuotų *f(x)*. Toks funkcijos *F(x)* apskaičiavimo metodas vadinamas suglodinimu. Atsižvelgiant į suglodinimo kriterijų, galima gauti įvairias *F(x)* išraiškas.

Suglodinimo uždavinio formulavimas. Sakykime, funkcija *y=f(x)* nusakyta reikšmių lentele $\left(x_i, \tilde{y}_i\right)$; čia $i = \overline{1,m}$. Simbolis $\tilde{y}_i$ rodo, kad *f(x)* reikšmės taškuose x_i yra apytikslės. Taip pat žinoma aproksimuojančiosios funkcijos *F(x)* analizinė išraiška: $F(x, a_0, ..., a_n)$; čia a_i $(i = \overline{0,n})$ - nežinomi parametrai ir n<<m. Reikia rasti tokias parametrų a_i reikšmes, su kuriomis *F(x)* geriausiai aproksimuotų funkciją *f(x)*.

Sprendžiant šį uždavinį, taikomi įvairūs suglodinimo kriterijai, o kartu ir įvairūs suglodinimo metodai.

4.1 Pasirinktų taškų metodas

Taikant šį metodą, iš lentelės $\left(x_i, \tilde{y}_i\right)$ (čia $i = \overline{1,m}$) pasirenkamas n+1 taškas $\left(x_{i_k}; \tilde{y}_{i_k}\right)$ (čia $k = \overline{1,n}$), kurio y_{i_k} reikšmės yra tiksliausios, ir parametrai a_k $\left(k = \overline{0,n}\right)$ apskaičiuojami atsižvelgiant į sąlygą

$$F(x_{i_k}) = \tilde{y}_{i_k}\ ,\ k = \overline{0,n}.$$

Aišku, kad taip apskaičiuota funkcija *F(x)* sutampa su interpoliuojančiąja funkciją, einančia per taškus

$$\left(x_{i_k}; \tilde{y}_{i_k}\right),\ k = \overline{0,n}.$$

4.2 Vidurkių metodas

Šiuo metodu parametrai a_k $\left(k = \overline{0, n}\right)$ apskaičiuojami taip, kad *f(x_i) ir F(x_i)* skirtumų suma būtų lygi nuliui, t.y.

$$z = \sum_{i=1}^{m} \left(f\left(x_i\right) - F\left(x_i\right)\right) = 0 .$$

4.3 Mažiausių kvadratų metodas

Tai dažniausiai taikomas suglodinimo metodas. Jis formuluojamas taip: koeficientus a_k $\left(k = \overline{0, n}\right)$ reikia apskaičiuoti taip, kad *f(x_i)ir F(x_i)* skirtumų kvadratų suma būtų pati mažiausia, t.y. minimizuoti

$$z = \sum_{i=1}^{m} \left(F\left(x_i, a_0, ..., a_n\right) - \tilde{y}_i \right)^2 .$$

Toliau nagrinėsime mažiausių kvadratų metodą.

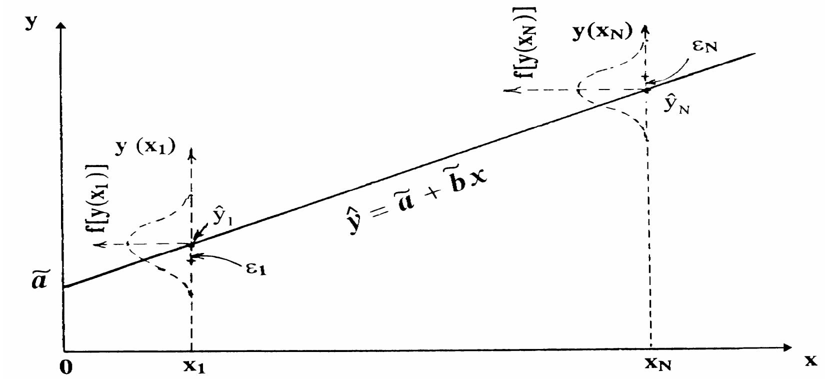
Jei kuris nors fizikinis dydis priklauso nuo kito dydžio, tai tą priklausomybę galima išreikšti matuojant y, esant skirtingoms x reikšmėms. Matavimų sekoj gaunama eilė reikšmių:

$x_1, x_2, ..., x_i, ..., x_n$
$y_1, y_2, ..., y_i, ..., y_n.$

Iš tokių eksperimento rezultatų, galime sudaryti priklausomybę $y = f(x)$. Gauta kreivė leidžia spręsti apie funkcijos f(x) vaizdą. Tačiau pastovūs koeficientai, įeinantys į funkciją, lieka nežinomi. Juos nustatyti leidžia mažiausių kvadratų metodas. Eksperimentiniai taškai paprastai tiksliai nesutampa su kreive. Mažiausių kvadratų metodas reikalauja, kad nukrypusių nuo kreivės $[y_i - f(x)]^2$ eksperimentinių taškų kvadratų suma būtų mažiausia.

Praktikoje šis metodas dažniausiai (ir paprasčiausiai) taikomas, esant tiesinei priklausomybei, t. y. kada

y = kx arba y = a + bx.



4.3.1 pav. Regresijos lygties sudarymas, kai priklausomybė *y=f(x)* tiesinė

Užrašytoji lygtis išreiškia geometrinę vietą taškų, atitinkančių vidutines $\hat{y}_i$ vertes, ir vadinama regresijos lygtimi (4.3.1 pav.).

Tiesinė priklausomybė plačiai taikoma fizikoje, netgi tada, kai ji nėra tiesinė, dažnai stengiamasi sudaryti grafiką taip, kad jau išreiškus kita funkcija, grafikas būtų artimas tiesei.

Pavyzdžiui, jei teigiame, kad stiklo lūžio rodiklis n yra susietas su ilgiu λ šviesos bangos santykiu $n = a + \frac{b}{\lambda^2}$, toks priklausomybės n nuo λ^{-2} grafikas nėra tiesinis.

Išnagrinėkime priklausomybę y = kx (tiesė, einanti per koordinačių centrą). Įveskime dydį φ, charakterizuojančių nukrypimų nuo tiesės kvadratų sumą.

$$\varphi = \sum_{i=1}^{n} (y_i - kx_i)^2 .$$

Dydis φ visada teigiamas ir jis tuo mažesnis, kuo arčiau tiesėje yra nagrinėjami taškai. Mažiausių kvadratų metodas tvirtina, kad reikia išrinkti tokias k reikšmes, su kuriomis φ tampa minimaliu:

$$\frac{d\varphi}{dk} = -2\sum x_i (y_i - kx_i) = 0 \text{ arba } k = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2} \quad (4.3.1).$$

Skaičiavimai parodo, kad vidutinė kvadratinė nustatomo dydžio paklaida k nustatoma tokia išraiška:

$$S_k = \sqrt{\frac{1}{(n-1)} \left(\frac{\sum (y_i - kx_i)^2}{\sum x_i^{\,2}} \right)} \quad (4.3.2).$$

Išanalizuokime kiek sudėtingesnį atvejį, kai taškus galime apskaičiuoti formule y = a + bx (tiesiai neinat per koordinačių pradžią).

Užduotis yra tokia: iš turimo reikšmių rinkinio x_i, y_i, reikia rasti geriausias a ir b reikšmes.

Vėliau sudarome kvadratinę funkciją φ, lygią nukrypimų nuo taškų x_i, y_i kvadratų sumai:

$$\varphi = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2 .$$

Iš minimumo sąlygos, diferencijuodami φ pagal parametrus, gauname 2 lygtis:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial a} = -2\sum (y_i - a - bx_i) = 0 \qquad \frac{\partial \varphi}{\partial b} = -2\sum x_i (y_i - a - bx_i) = 0 .$$

Bendri šių lygčių sprendiniai:

$$b = \frac{\sum [(x_i - \bar{x}) y_i]}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \quad (4.3.3)$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x} \quad (4.3.4).$$

Vidutinės parametrų a ir b paklaidos:

$$S_b = \sqrt{\frac{\sum (y_i - bx_i - a)^2}{(n-2)\sum (x - x_i)^2}} \ , (4.3.5)$$

$$S_a = \sqrt{\left(\frac{\sum (y_i - bx_i - a)^2}{n-2}\right)\left(\frac{1}{2} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}\right)} . \ (4.3.6).$$

Apdorojant rezultatus šiuo metodu, patogu visus duomenis suvesti į lentelę, prieš tai apskaičiuojant visas (4.3.1) – (4.3.6) į formules, įeinančias sumas.

4.4 Suglodinančiųjų splainų konstravimas mažiausių kvadratų metodu

Uždavinio formulavimas. Tarkime, kad funkcija *y=f(x)* yra nusakyta reikšmių lentele $\left(x_j , \tilde{y}_j \right)$ (čia $j = \overline{1, M}$) ir visi x_j tenkina sąlygą $a \le x_j \le b$. Segmentą *[a;b]* aprioriškai suskaidome į N segmentų, $N{<<}M : [x_0 ; x_1], [x_1 ; x_2], ... [x_{N-1} ; x_N]$; čia *a=x₀ ir b=x_N*. Reikia rasti tokį suglodinantįjį kubinį splainą *y=g(x)*, kuris minimizuotų funkcionalą

$$\Phi(g) = \sum_{j=1}^{M} p_j (g(x_j) - \tilde{y}_j)^2 . (4.4.1)$$

Aišku, kad suglodninantysis splainas *g(x)* priklauso nuo apriorinio tinklelio $\Delta : x_0 < x_1 < ... < x_N$, taip pat nuo parinktų koeficientų p_j .

Autorius tyrinėjo, kaip apskaičiuojami tokie kubiniai splainai, esant natūralioms kraštinėms sąlygoms, ir nustatė, kad:

1) esant toms pačioms p_j reikšmėms, (4.4.1) funkcionalo reikšmė labai priklauso nuo pasirinkto tinklelio Δ;
2) y_i $\left(i = \overline{0, N}\right)$ reikšmės apskaičiuojamos iš tiesinės lygčių sistemos su sistemine matrica, kuri nėra juostinė;
3) svoriniai koeficientai p_j neturi aiškios geometrinės prasmės, t. y. visi p_j padeda apskaičiuoti 2 punkte nurodytos matricos elementus.

Didžiausias pranašumas yra tas, kad tenka formuoti ir spręsti mažesnės apimties lygčių sistemą.

5. GAUSO (NORMALINIS) SKIRSTINYS

Gauso (normalinis) skirstynis:

$$\lim_{N\to\infty} P_N(k) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma} exp\left[-\frac{(k-\hat{k})^2}{2\sigma^2}\right] \quad ,$$

čia

$$\sigma^2 = E\left\{(k-\hat{k})^2\right\} = Np(1-p) \qquad \text{ir} \qquad \hat{k} = Np\,.$$

Tai simetrinis $\hat{k}$ atžvilgiu skirstinys, ir vadinamas Gauso arba normaliniu (normaliuoju) skirstiniu. Jis užima pagrindinę vietą matematinėje statistikoje ir ypač – paklaidų teorijoje.

Kai kalbame apie Gauso skirstinį, įvertindami, kad N – didelis skaičius, ir domimės tik netoli $\hat{k}$ esančiomis vertėmis (taigi k kaip ir $\hat{k}$ artimi ir kartu dideli skaičiai), tai jau iš binominio skirstinio išeina, kad k pakitus per vienetą $P_N(k)$ kinta nežymiai (yra lėtai nuo k kintanti funkcija). Todėl ją galima laikyti tolydžiai kintančia netrūkiojo (tolydžiojo) kintamojo k funkcija. Tada tikimybė patekti į intervalą $[k; k+dk]$ $dF_N(k)=P_N(k)dk$ ir $P_N(k) = \frac{dF_N(k)}{dk} = f(k)$. Taigi šiuo atveju $P_N(k)$ turi tikimybės tankio prasmę.

Praktiškai nustatyta, kad kai yra pakankamai daug **nepriklausomų matavimo duomenų:**

1) jie išsidėsto simetriškai vidutinės vertės atžvilgiu, kai matuojamas parametras turi pastovią vertę (pvz., matuojant daug kartų tą patį fizikinį kūno parametrą; tomis pačiomis priemonėmis gaminant daug detalių ir tiriant joms būdingus parametrus);
2) didesni nuokrypiai nuo vidurkio pasitaiko rečiau negu maži, ir eksperimento duomenų skirstinys artėja prie normalinio (Gauso) skirstinio.

5.1 Pagrindinės Gauso skirstinio savybės

Normalusis skirstinys (angl. normal distribution) arba Gauso skirstinys (Gaussian distribution) – tai tolydžiųjų požymių reikšmių skirstinys (pasiskirstymo dėsnis), atitinkantis tokias sąlygas:

- vidurkio (m), modos ir medianos reikšmės sutampa,
- skirstinio kreivė yra simetriška, o simetrijos ašis yra ties vidurkiu,
- skirstinio kreivės forma priklauso nuo vidurkio ir standartinio nuokrypio (σ),
- normalųjį skirstinį turinčių atsitiktinių dydžių suma taip pat turi normalųjį skirstinį.

Normalusis (Gauso) skirstinys taikomas labai plačiai ir atlieka ypatingą vaidmenį tarp visų skirstinių.

Vėliau bus įrodyta, kad tikimybės tankis sumos nepriklausomų arba silpnai priklausomų, mažų (t. y. atliekančių maždaug vienodą vaidmenį) sandų (dedamųjų), be galo didinat jų skaičių, gali priartėti kiek norima arti prie normaliojo skirstinio, nepriklausomai nuo to, kokį skirstinį turėjo šie sandai (centrinė ribinė teorema).

Jei turėsime galvoje, kad tikimybinis aprašymas taikomas dažniausiai kaip tik tada, kai reikia įstatyti didžiulių skaičių įvairių atsitiktinių poveikių, turinčių maždaug vienodą įtaką, tai paaiškės, kaip dažnai tenka, aprašant atsitiktinius dydžius, susidurti su normaliuoju skirtiniu.

Atsitiktinio dydžio, pasiskirsčiusio pagal normalųjį dėsnį, tikimybės tankis nenormuotu pavidalu išreiškiamas taip:

$$w(x) = C\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right],$$

čia m, σ ir C – skirstinio parametrai.

Suraskime šiuos parametrus. Atliekame skirstinio normavimą:

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x)dx = C\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dx = 1.$$

Pakeitę $t = \dfrac{(x-m)}{\sigma\sqrt{2\pi}}$, gausime:

$$C\sigma\sqrt{2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2}\,dt = 1.$$

Tada skirstinio tikimybės tankis įgauna įprastinį savo pavidalą:

$$w(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (5.1.1).$$

Parodysime, kad parametras m atitinka vidurkį, o σ^2 – dispersiją.

Tuo tikslu susirasime atsitiktinio dydžio X, kurio tikimybės tankis aprašomas formule (5.1.1), vidurkį:

$$M(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dx = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dx +$$

$$+\frac{m}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dx.$$

Pirmasis integralas lygus nuliui, nes pointegralinė funkcija yra nelyginė. Išraiška

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dx=1$$

pagal normavimo sąlygą.

Tokiu būdu,

$$M(X)=m,$$

t. y. parametras m atitinka vidurkį. Surasime normaliojo atsitiktinio dydžio dispersiją:

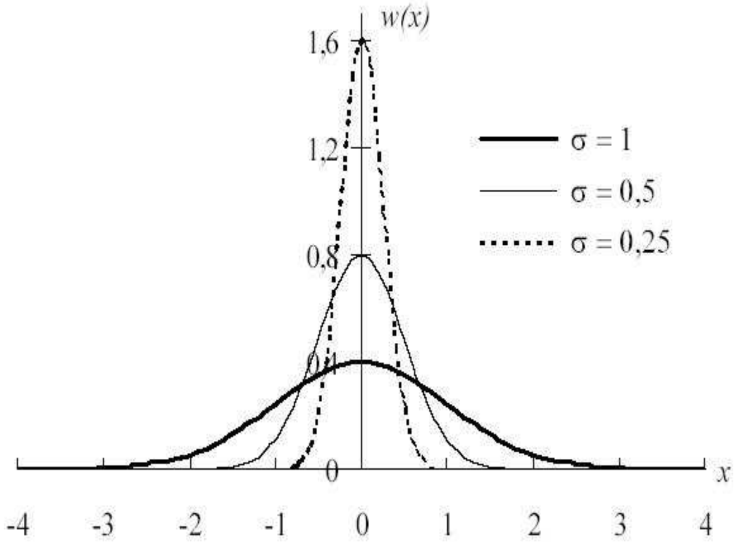
$$D(X)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)^2\exp\left[-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right]dx\,.$$

Pakeitę $t=\dfrac{(x-m)}{\sigma\sqrt{2\pi}}$, gauname

$$D(x)=\frac{2\sigma^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}t^2e^{-t^2}dt=\frac{\sigma^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}td(e^{-t^2})=\frac{\sigma^2}{\sqrt{\pi}}\left(-te^{-t^2}\right)\Big|_{-\infty}^{\infty}+\frac{\sigma^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-t^2}dt=\sigma^2\,.$$

Vadinasi, parametras σ atitinka vidutinį kvadratinį nuokrypį, o σ^2 – dispersiją.

Tikimybės tankio (5.1.1) grafikas parodytas 5.1.1 pav.



5.1.1 pav. Normaliojo tolydžiojo atsitiktinio dydžio tikimybės tankio grafikai, esant skirtingiems σ:1,0; 0,5; 0,25

6. PIRMOJO ETAPO ALGORITMAS

Mums pasiūlyta aproksimuoti realaus eksperimento, kuriame pateiktas 2900 duomenų masyvu, rezultatus. Aproksimuoti eksperimentinius duomenis taip, kad paklaidos f-ja (arba standartinis nuokrypis) būtų minimali. Be to aproksimavimo funkcija būtų analitiškai integruojama ir bent du kartus diferencijuojama, o jos parametrų skaičius neviršytų 120.

Užduoties vykdymo teorija

Tarkime, kad turime eksperimentinius taškus:

x	y
x_1	y_1
x_2	y_2
.....	......
x_i	y_i
.....	......
x_m	y_m

ir ieškome funkcijos $f(a,x)$, kuri yra artima eksperimentiniams taškams. Tam tikslui naudojami įvairaus tipo splainai, kurių metodo esmė – suskirstyti visą X ašies reikšmių intervalą į atskiras zonas ir kiekvienoje zonoje aproksimuoti polinominėmis funkcijomis, kad visur, t.y. ir besiribojančių zonų ribose aproksimavimo funkcijos ir jų išvestinės būtų ne tik tolydžios, bet ir patenkinančios „suklijavimo“ sąlygą: ir funkcijos, ir jų išvestinės, apskaičiuotos zonų susilietimo taškuose, turi sutapti.

$$f(a_n, x_{n+1}) = f(a_{n+1}, x_{n+1}), \quad (6.1)$$

funkcijoms zonų sandūros taškuose x_n

$$f`(a_n, x_{n+1}) = f`(a_{n+1}, x_{n+1}) \quad (6.2)$$

jų išvestinėms,

Tačiau mes, įsitikinę, kad splaininis aproksimavimo metodas neduoda tenkinančių sąlygų, aproksimacinės funkcijos ieškome tokiu pavidalu:

$$Y(x) = \sum_{n=0}^{N} \sum_{l=0}^{L} C_{n,l} \cdot (x - X_l)^n \cdot e^{-\frac{|x_m - X_l|^p}{2 \cdot \delta_l^2}}; \quad (6.3)$$

čia p — eksponentės argumento laipsnio rodiklis,

X_l — vienos zonos vidurio koordinatė,

δ_l — Gauso funkcijos standartinis nuokrypis, fizikų dar vadinamas juostos puspločiu.

$C_{n,l}$ — neapibrėžtieji koeficientai, (jų bus tiek: *(N + 1)(L + 1)*).

N — polinominių daugiklių prie Gauso funkcijos aukščiausias laipsnis;

L +1 — zonų skaičius.

Kadangi visos ieškomos aproksimacijos funkcijos dedamosios yra tolydžios visame duotųjų argumentų X intervale, tai aproksimavimo funkcijos ir jos išvestinės yra tolydžios ir vienareikšmės, kitaip sakant ši funkcija patenkina visus pirmosiomis formulėmis išreikštus reikalavimus.

Nuo $C_{n,l}$ ieškoma funkcija priklauso tiesiškai. Kad aproksimavimo funkciją *f(x)* nusakytų tik tiesinės lygtys, turime p, X_l, δ_l pasirinkti patys, ir tada aproksimavimo funkcija *f(x)* bus priklausoma tik nuo parametrų $C_{n,l}$. Zonų vidurio koordinates parenkam vienodais intervalais taip, kad kraštiniai taškai būtų ir intervalo galuose, pagal formulę:

$$X_l = X_1 + \frac{(X_2 - X_l)\cdot l}{L}; (6.4)$$

δ_l parenkamas tokiu būdu, kad jis būtų artimas Gauso funkcijos „puspločiui“, t.y. tokiam atstumui nuo centro, kuriame Gauso funkcijos reikšmė būtų maždaug du kartus mažesnė negu maksimali. Uždavinys sprendžiamas MKM (mažiausių kvadratų metodu), tai yra formuojant paklaidos (optimizavimo) funkcijas, sudarytas iš komponenčių

$$F(C_{n,l}) = \left(C_{0l} + C_{1l}\cdot(x - X_l) + C_{2l}(x - X_l)^2 + ... + C_{Nl}(x - X_l)^N\right)\cdot e^{-\frac{(x_m - X_l)^p}{2\cdot\delta_l^2}};$$

čia yra viena aproksimavimo funkcijos dedamoji - polinomas, padaugintas iš eksponentės. Visa paklaidos funkcija formuojama iš šių komponenčių sumos:

$$F(C_{n,l}) = \sum_{m=0}^{M} F(Y_m - y_m)^2.$$

Suformuluokime paklaidos funkciją, susumuodami paklaidų kvadratus visiems eksperimentiniams taškams:

$$F(C_{n,l}) = \sum_{m=0}^{M}\left[\sum_{n=0}^{N}\sum_{l=0}^{L} C_{nl}(x_m - X_l)^n \cdot e^{-\frac{(x_m - X_l)^p}{2\cdot\delta_l^2}} - y_m\right]^2.$$

Kadangi šioje sumoje yra kvadratas, tai jį mes detalizuojame, kad palengvintume tolimesnius skaičiavimus, perrašydami jį kaip vienodų sumų, bet su skirtingais indeksais, sandaugą:

$$\left(\sum_k a_k\right)^2 = \sum_k a_k \cdot \sum_i a_i.$$

Taikydami šia formulę, sumos kvadratą pakeičiame sumų sandauga, kai antrajame daugiklyje $n \to k$, $l \to i$, tada:

$$F(C_{n,l}) = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\sum_{l=0}^{L}\sum_{k=0}^{K}\sum_{i=0}^{I}\left\{C_{nl}\cdot(x_m - X_l)^n \cdot e^{-\frac{(x_m-X_l)^p}{2\cdot\delta_l^2}} - y_m\right\}\left\{C_{ki}\cdot(x_m - X_i)^k \cdot e^{-\frac{(x_m-X_i)^p}{2\cdot\delta_i^2}} - y_m\right\}. \quad (6.5)$$

Kai $F(C_{nl})$ yra minimali, tai aproksimavimo paklaida bus mažiausia (sumuojami paklaidų kvadratai). Kadangi δ_l, X_l yra eksponentės rodiklyje, tai nuo šitų dydžių (parametrų) funkcijos $F(C_{n,l})$ priklausomybė nėra kvadratinė, o kvadratinė yra tik nuo $C_{n,l}$. Tai reiškia, kad ieškoma funkcija $F(C_{n,l}, X_l, \sigma)$ gali turėti didelį skaičių lokalinių minimumų daugiamatėje erdvėje. Ir tik fiksavus δ_l ir X_l bus vienintelis minimumas, nusakomas konkrečiomis $C_{n,l}$ matricos reikšmėmis.

Kadangi funkcija F(C) išreikšta per C kvadratiniu pavidalu, tai ši funkcija turi tik vieną minimumą, kuriame visomis kryptimis išvestinės yra lygios nuliui. Norint rasti to minimumo vietą, funkciją $F(C_{nl})$ diferencijuojame pagal visus C_{nl} ir tas dalines išvestines prilyginame nuliui:

$$\frac{\partial F}{\partial C_{nl}} = 0;$$

arba

$$\frac{\partial F}{\partial C_{ki}} = 0.$$

Diferencijavus pagal $C_{k,i}$, turėsime:

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\sum_{l=0}^{L}\left[C_{nl}(x_m - X_l)^n e^{\frac{(x_m-X_l)^p}{-2\delta_l^2}} - y_m\right](x_m - X_i)^k e^{\frac{(x_m-X_i)^p}{-2\delta_i^2}} = 0 \quad (6.6)$$

arba

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\sum_{l=0}^{L}\left[C_{nl}(x_m - X_l)^n \cdot (x_m - X_i)^k \cdot e^{-\frac{(x_m-X_l)^p}{2\cdot\delta_l^2}-\frac{(x_m-X_i)^p}{2\cdot\delta_i^2}}\right] - \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\sum_{l=0}^{L} y_m \cdot (x_m - X_i)^k \cdot e^{-\frac{(x_m-X_i)^p}{2\cdot\delta_i^2}} = 0.$$

Įveskime (6.6) lygčių sistemos koeficientų prie nežinomųjų $C_{n,l}$ matricą A:

$$\sum_{m=0}^{M}(x_m - X_l)^n \cdot (x_m - X_i)^k \cdot e^{-\frac{(x_m-X_l)^p}{2\cdot\delta_l^2}-\frac{(x_m-X_i)^p}{2\cdot\delta_i^2}} = A. \quad (6.7)$$

Ši matrica A turės net 4 indeksus *i, k, l, n*.

Užrašykime (5) lygčių sistemos laisvųjų narių stulpelio matricą B:

$$\sum_{m=0}^{M} y_m \cdot (x_m - X_i)^k \cdot e^{-\frac{(x_m-X_i)^p}{2\cdot\delta_i^2}} = B. \quad (6.8)$$

Ši matrica turės 2 indeksus i, k.

Tokiu būdu (6.6) tiesinių lygčių sistemą simboliškai galime užrašyti taip:

A*C=B.

Čia A ir B yra (6.7) ir (6.7) formule apskaičiuotos matricos, o C (6.6) lygčių sistemos nežinomųjų matrica.

Suradę visus C, jau turėsime konkrečią duotojo eksperimentinio masyvo (x_m,y_m) aproksimavimo funkciją:

$$Y(x) = \sum_{l=0}^{L} \sum_{n=0}^{N} C_{\mathrm{ln}} (x - X_l)^n \cdot e^{-\frac{(x-X_l)^p}{2\cdot\delta_l^2}} .$$

Čia ir kitur funkcija su argumentu: Y(x).

7. ANTROJO ETAPO ALGORITMAS

Antrasis etapas , kai suglodintos kreivės aproksimuojamos Gauso funkcijų rinkiniu. Skirtingai nuo pirmosios dalies glodinimo čia aproksimuojančios Gauso funkcijos be polinominių daugiklių ,o jų parametrai nusakantys pusplotį ir argumento centrą išanksto nepasiekiami.

$$S(N, x, c) := c_0 + \frac{x - Xv}{0.5Ga} \cdot c_1 + \sum_{n=0}^{N} \left[\left(c_{2+3n}\right)^2 \cdot \exp\left[\left(x - c_{3+3n}\right)^2 \cdot \frac{1 + \left(c_{4+3n}\right)^2}{-2 \cdot H^2} \right] \right].$$

Juos, kad aproksimavimo paklaida būtų minimali, parenka pats programos algoritmas. Aproksimavimas vyksta keliais etapais. Nuliniu etapu dviem Gauso funkcijomis po to Gauso funkcijų skaičius didinamas arba viena arba dviem funkcijom. O tų Gauso funkcijų vieta parenkama ten, kur paklaida yra labiausiai neigiama, o paklaidos grafikas yra žemiausiai. Aproksimavimo metu kuriama paklaidos funkcija sudaryta iš paklaidų kvadratų sumos, kuri gaunama priklausomai nuo Gauso funkcijų parametro reikšmių. Pirmuoju etapu, kai Gauso funkcijų puspločiai ir jų viršūnės duotos: paklaidos funkcijos minimali sąlyga išreiškiama taip, kad visos išvestinės pagal ieškomus parametrus lygios nuliui kitaip uždavinys suvedamas į tiesinių lygčių sistemos sprendimą. Antrajame etape vėl sudaroma paklaidos funkcija

$$F(c) = \frac{1}{n} \sum_{n=0}^{N} [S(N, X_n, C - Y_n]^2 \cdot$$

Iš paklaidos funkcijos minimumo sąlygų tiesinių lygčių negauname, todėl paklaidos funkcijos minimumai ieškomi skaitiniais metodais: didžiausio nuolydžio metodas, jungtinių gradientų metodas. Šiš metodas reikalauja, kad po kiekvieno paieškos etapo būtų apskaičiuotas gradientas pasirinktame taške. Kadangi gradientas nukreiptas sparčiausio funkcijos augimo kryptimi, tai minimumu ieškome priešinga gradiento augimo kryptimi. Patį gradientą sudaro ieškomos funkcijos išvestinės pagal kiekvieną neapibrėžtą parametrą, kad veiktų gradientų (didžiausio nuolydžio) metodas.

Pačioje programoje reikia nurodyti visas gradiento sudarančias dalinės išvestinės, o iš jų jau formuojama aproksimuojančios funkcijos parametrų paieškos matrica. Be to reikia žinoti pačią funkcijos reikšmę kiekviename taške, todėl į paieškos matricą įeina ir funkcijos reikšmės ir dalinių išvestinių reikšmės.

8. VARIACINIAI ITERACINIAI METODAI

8.1 Didžiausio nuolydžio metodas

$AY = F$ tiesinių lygčių sistemos sprendimas yra ekvivalentus kvadratinio funkcionalo

$$Q(F) = (A(X - Y), X - Y)), \qquad (1)$$

minimumo radimui. Sakykime, kad jau žinomas sprendinio artinys Y^n. Tikslesnį artinį Y^{n+1} ieškosime tokio pavidalo

$$B \frac{Y^{n+1} - Y^n}{\tau_{n+1}} + AY^n = F.$$

Jeigu B =1, tai turime *išreikštinį didžiausiojo nuolydžio* metodą, priešingu atveju– *neišreikštinį didžiausiojo nuolydžio* metodą. Paaiškinsime metodo sudarymo būdą. Iš matematinės analizės kurso žinome, kad funkcija lokaliai didžiausiu greičiu mažėja kryptimi, priešinga gradiento krypčiai, todėl imame krypties vektorių

$$Q(Y^n) = AY^n - F.$$

Iteracinį parametrą τ_{n+1} rasime minimizuodami vieno kintamojo funkciją

$$q_n(\tau) = Q(Y^n - \tau B^{-1}(AY^n - F)).$$

Iš (1) formulės gauname kvadratinę funkciją

$$q_n(\tau) = (AP^n, P^n)\,\tau^2 - 2(AY^n - F, P^n)\,\tau + (AY^n - F, Y^n - Y),$$

$$P^n = B^{-1}(AY^n - F).$$

Savo mažiausią reikšmę ji įgyja taške

$$\tau_{n+1} = \frac{(AY^n - F,\ P^n)}{(AP^n, P^n)}.$$

Matome, kad didžiausiojo nuolydžio metode nereikia žinoti matricos $B^{-1}A$ spektro, nes iteracinis parametras skaičiuojamas kaip dviejų skaliarinių sandaugų santykis. Dėl to dvigubai padidėja skaičiavimų apimtis, kadangi kiekvienoje iteracijoje du kartus skaičiuojame matricos A ir vektoriaus sandaugą ir du kartus sprendžiame tiesinių lygčių sistemas su matrica *B.*

5.1 teorema Didžiausio nuolydžio metodas konverguoja, o jo konvergavimo greitis įvertinamas nelygybę

$$\|Y^n - Y\|_A \le q^n \|Y^0 - Y\|_A,$$

$$q = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_1}{\lambda_M},$$

čia λ_1 *ir* λ_M *yra matricos* $B^{-1}A$ *spektriniai įverčiai*

$$\lambda_1 B \le A \le \lambda_M B,$$

o norma $\|.\|_A$ *apibrėžiama nelygybę*

$$\|Y\|_A^2 = (AY, Y).$$

Įrodymas. Pažymėsime n-ojo artinio paklaidą $Z^n = Y^n - Y$,ji tenkina lygtį

$$B\ \frac{Z^{n+1} - Z^n}{\tau_{n+1}} + AZ^n = 0.$$

Dviejų gretimų artinių paklaidos susijusios lygybe

$$Z^{n+1} = (I - \tau_{n+1}B^{-1}A)\, Z^n .$$

Apibrėžkime matricą C ir vektorių X^n taip:

$$C = A^{1/2}B^{-1}A^{1/2}, \quad X^n = A^{1/2}Z^n .$$

Matrica C tenkina nelygybes

$$\lambda_1 I \le C \le \lambda_M I .$$

Apibrėždami parametrą τ_{n+1} leistinų vektorių aibėje minimizuojame paklaidos normą $\|Z^{n+1}\|_A$, todėl (n+1)-ojo artinio paklaidą galime įvertinti nelygybę

$$\|Z^{n+1}\|_A^2 = \min_\tau (A(I - \tau B^{-1}A)\, Z^n, (I - \tau B^{-1}A)\, Z^n) = \min_\tau ((I - \tau C)\, X^n, (I - \tau C)\, X^n)$$

$$\le \min_\tau \|I - \tau C\|^2 \|X^n\|^2 = q^2 \|Z^n\|_A^2 .$$

Kadangi C yra simetrinė matrica, tai:

$$q = \min_\tau \max_{\lambda_1 \le \lambda \le \lambda_M} |1 - \tau\lambda| .$$

O šį uždavinį jau išsprendėme įvertindami paprastųjų iteracijų metodo konvergavimo greitį :

$$q = \frac{1-\xi}{1+\xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_1}{\lambda_M}.$$

Teorema įrodyta.

Pastebėsime, kad viršutinis konvergavimo greičio įverčio rėžis yra tiktai gaunamas tuo atveju, kai pradinio artinio paklaida Z^0 yra lygi :

$$Z^0 = \frac{1}{\sqrt{\xi}} W_1 + \sqrt{\xi}\, W_M ,$$

čia W_1 ir W_M yra matricos $B^{-1}A$ tikriniai vektoriai, atitinkantys mažiausiąją ir didžiausiąją tikrines reikšmes.

Iš įrodytos teoremos išplaukia, kad blogiausiu atveju didžiausiojo nuolydžio metodas konverguoja tokiu pačiu greičiu kaip ir neišreikštinis stacionarusis metodas su optimaliuoju parametru. Galima įrodyti, kad teisingos tokios nelygybės:

$$\|Z^{n+1n}\|_A \le q_n \|Z^n\|_A, \quad q_1 \le q_2 \le \dots \le \tilde{q} \le q = \frac{1-\xi}{1+\xi} ,$$

t.y. pirmosiose iteracijose paklaida mažėja greičiau nei q kartų. Be to, esant pakankamai dideliems n paklaidos Z^n skleidinyje lieka tik du esminiai vektoriai: W_1 ir W_M , todėl $q_n \approx \tilde{q}$.

8.2 Jungtinių gradientų metodas

Taikydami didžiausio nuolydžio metodą funkcionalą Q(X) kiekvienoje iteracijoje minimizavome priešinga gradientui kryptimi:

$$P^n = -(AY^n - F) .$$

Tačiau parinkdami P^n nesinaudojome informacija apie ankstesnius vektorius

$$P^0, P^1, \dots, P^{n-1} .$$

Dabar vektorius P^n parinksime taip, kad jie tenkintų vieną svarbią papildomą sąlygą. Du vektorius P ir Q vadiname *jungtiniais* matricos A atžvilgiu, jei:

$$(AP, Q) = 0.$$

Sakysime , kad vektoriai $P^0, P^1, \dots, P^{n-1}$ sudaro jungtinių matricos A atžvilgiu vektorių sistemą, jei:

$$(AP^m, P^k) = 0, \quad \text{kai} \quad m \neq k.$$

Jungtinių vektorių sis tema $\{P^0, P^1, \dots, P^{M-1}\}$ yra pilnoji erdvėje R^M, todėl variaciniu metodu

$$Y^{n+1} = Y^n - \tau_{n+1} P^n , \quad n = 0,1,\dots, M-1 , \ (7.2)$$

$$\tau_{n+1} = \frac{(AY^n - F, \ P^n)}{(AP^n, \ P^n)}$$

su bet kuriuo pradiniu vektoriumi Y^0 gauname tikslųjį AY = F tiesinių lygčių sistemos sprendinį. Tačiau toks metodas yra taikomas ir kaip iteracinis metodas, nes reikiamas tikslumas pasiekiamas daug greičiau negu per M iteracijų. Tai išplaukia iš tokios jungtinių gradientų metodų savybės.

5.2teorema *Jungtinių gradientų metodo parametrą n-ojo artinio paklaida* $\|Z^n\|_A$ *yra minimali erdvėje* $X^0 + \text{span} \{P^0, P^1, \dots, P^{n-1}\}$.

Pastebėsime, kad (7.2) formulėje parametrą τ_{n+1} parenkame minimizuodami paklaidą lokalia P^n kryptimi, tačiau taip randame ir globalųjį minimumą. Tokio tipo algoritmai vadinami gobšiaisiais (angl. greedy algorithms).

Taigi jungtinių gradientų metodo konvergavimo greitis yra nemažesnis už neišreikštinio nestacionaraus iteracinio metodo su Čebyševo parametrais konvergavimu greitį.

Dabar pateiksime neišreikštinio jungtinių gradientų metodų algoritmą. Tarkime, kad pasirinkome simetrinę, teigiamai apibrėžtą matricą B. Tada padauginkime AY = F lygtį iš $B^{-1/2}$ ir pažymėkime:

$$\tilde{A} = B^{-1/2} A B^{-1/2} , \quad \tilde{Y} = B^{-1/2} Y , \quad \tilde{F} = B^{-1/2} F .$$

Gausime tiesinių lygčių sistemą:

$$\widetilde{AY} = \tilde{F} .$$

Šią sistemą sprendžiame išreikštiniu jungtinių gradientų metodu. Atitinkamai parinkus matricą B , naujos matricos $\tilde{A}$ sąlygotumo skaičius gali būti daug didesnis už pradinės matricos a sąlygotumo skaičių.

Suformuluosime teoremą apie jungtinių gradientų metodo konvergavimo greitį.

5.3 teorema *Jungtinių gradientų metodo n-ojo artinio paklaida įvertinama nelygybe*:

$$\|Y^n - Y\|_{\tilde{A}} \le 2\left(\frac{1-\sqrt{\xi}}{1+\sqrt{\xi}}\right)^n \|Y^0 - Y\|_{\tilde{A}} ,$$

čia ξ *yra matricos* $\tilde{A}$ *sąlygotumo skaičius:*

$$\lambda_1 B \le A \le \lambda_m B , \quad \xi = \frac{\lambda_1}{\lambda_M}.$$

Nagrinėdami neišreikštinį paprastųjų iteracijų metodą ir neišreikštinį nestacionarų iteracinį metodą su Čebyševo iteraciniais parametrais, naudojame pakaitomis trikampę matricą B :

$$B = (I + \omega R^T) (I + \omega R),$$

Čia R yra apatinė trikampė matrica, tokia, kad:

$$A = R + R^T .$$

Tačiau optimalaus parametro ω pasirinkimas galimas tik tada, kai žinomi spektriniai įverčiai:

$$\delta I \le A , \qquad R^T R \le \frac{\Delta}{4} A.$$

Galimybė spręsti tiesinių lygčių sistemas, kai nežinome matricos $B^{-1}A$ spektrinių įverčių, yra svarbi variacinių metodų savybė. Todėl yra pasiūlyta daug kitų matricų B, kurios sėkmingai naudojamos sprendžiant tiesinių lygčių sistemas. Pateiksime tokios matricos pavyzdį.

Išskaidykime matricą A į apatinės trikampės, įstrižainės ir viršutinės trikampės matricų sumą:

$$A = L + D + R , \qquad L^T = R .$$

Tada sudarykime matricą B :

$$B = (G^{-1} + R)^T G(G^{-1} + R),$$

Čia G yra įstrižainė matrica. Ją parinksime taip, kad sutaptų matrica A ir B eilučių elementų sumos:

$$AE = BE .$$

Čia E yra vektoriaus, kurio visos komponentės lygios vienetui:

$$E = (1,1,...,1)^T .$$

9. MATHCAD MATEMATINIS PAKETAS

Mathcad – tai matematinis redaktorius, leidžiantis atlikti įvairiausius mokslinius ir inžinerinius skaičiavimus, pradedant elementariąja aritmetika ir baigiant sudėtingiausiais skaičiavimo metodais. Mathcad naudotojai – studentai, mokslininkai, inžinieriai, įvairiausi technikos specialistai. Programa labai paprasta, turi didelę matematinių metodų biblioteką, puikias rezultatų vaizdavimo galimybes (grafikai, animacijos ir t.t.). Todėl Mathcad netruko tapti populiariausia matematinių skaičiavimų programa.

Matematinis programų paketas MATHCAD yra bene universaliausias - t.y., jis tinka tiek mokymuisi, tiek moksliniam darbui. Be to, nereikalauja ypatingų kompiuterio išteklių (spartos bei atmintinės talpos). Tačiau matematinio programų paketo MATHCAD simbolinių skaičiavimų ir programavimo galimybės yra ribotos (t.y. labai sunku kurti savo programas ir funkcijas).

Pagrindinės MATHCAD'o funkcijos yra šios:

1) skaičiavimo atlikimas su realaus tipo bei kompleksiniais kintamaisiais, su vektoriais, skaliarais ir matricomis;
2) specialiųjų, elementariųjų, vartotojo, ir statistinių funkcijų panaudojimas;
3) lygčių sprendimas;
4) sumų ir integralų apskaičiavimas;
5) simboliniai skaičiavimai;
6) grafikų braižymas;
7) programavimas.

MATHCAD'u galima apskaičiuoti įvairias kombinatorines išraiškas (pvz. faktorialą, derinių skaičių), integralus, eilučių sumų skaičių, nubraižyti 7 tipų grafikus ir kt. Taip pat MATCHAD'as leidžia atlikti turimų duomenų analizę ir parinkti geriausią nagrinėjamo objekto modelį. Galima įvesti bei išvesti skaitinius it tekstinius duomenis bei dirbti su kintamųjų dimensijomis. Kartu su standartinėmis MS-OFFICE funkcijomis (FILE, EDIT, VIEW, INSERT, WINDOWS) galima naudoti MATHCAD-o įrankių juostas MATH, MATRIX, CALCULUS, CALCULATOR, GRAPH, SYMBOLICS ir kt.

MATHCAD'e galima apibrėžti ir įvesti įvairiausias funkcijas:

1) trigonometrines;
2) hiperbolines;
3) atvirkštines trigonometrines;
4) atvirkštines hiperbolines;

5) rodyklines;

6) logaritmines.

Be elementariųjų ir specialiųjų funkcijų dar yra ir vartotojo funkcijos. Funkcijos apibrėžiamos rašant funkcijos identifikatorių ir lokalinius bei globalinius kintamuosius. Vartotojo funkcijos lokaliniai kintamieji aprašomi specialiosios funkcijos aprašymo viduje, o globaliniai - išorėje (t.y. kintamasis, kuriam priskiriama reikšmė - globalinis kintamasis). Kiekviena funkcija turi savo identifikatorių, pvz:

y : = sin (x).

10. DARBO REALIZAVIMAS MATHCAD‘U

Pateiksime bendrą, modeliavimui naudotą programos aprašymą. Didelio nepriklausomo kintamo argumento intervalo funkciją išreikšti polinomu neįmanoma. Todėl didelį intervalą sudaliname į daug mažų intervalų. Kiekvienoje zonoje aproksimuojame polinomu. Kad nebūtų trūkios funkcijos, gautos atskiruose intervaluose, yra taikomos papildomos funkcijų „ suklijavimo“ sąlygos: būtina, kad sujungimas nebūtų „užlūžęs“ ir išvestinių reikšmės, gautos iš skirtingų intervalų, zonų kraštuose sutaptų.

Mūsų tikslas - pasiekti ,kad aproksimacijos kreivės eitų kuo arčiau eksperimentinių taškų kai tų taškų kiekvieno intervalo zonoje daug daugiau, nei juos aprašančių parametrų. Susiduriame su problemomis- sprendžiant šį uždavinį klasikiniu splainu metodu –nepatenkiname sąlygos du ir daugiau kartų diferencijuoti, nes išvestinės nebus tolydžios zonų ribose, gausime lūžio taškus. Todėl mūsų darbe buvo pasiūlytas doc. Mindaugas Stakvilevičius kitas metodas – ieškoti aproksimuojančios funkcijos iškart visame intervale. Buvo pasinaudota Gauso funkcija, nes ji patogi tuo, kad esminiai skiriasi nuo nulių tik tam tikroje viršūnės aplinkos zonoje, todėl vaidina tą patį, kaip intervalo dalinimas į mažesnius intervalus, vaidmenį. Pasinaudojus mažiausių kvadratu, glodinimo ir aproksimovimo metodais gauname algebrinių tiesinių lygčių sistemą, kur nežinomieji - polinomų dauginamų iš Gauso funkcijų koeficientai C_{kl} . Radę juos žinome aproksimavimo funkciją. Mūsų programa susideda iš dviejų etapų:

1 etapas –glodinimo funkcijos radimas,

2 etapas –aproksimavimo funkcijos radimas.

11. METODO – PROGRAMOS APRAŠYMAS

11.1 Pirmojo etapo aprašymas

Šis skaičiavimas atliktas iš duomenų gautū matuojant 300 K temperatūrai. Analogiškas darbas su 200K temperatūra ir kita medžiaga detaliau aprašyta priede (pusl. 48).

D – gautas iš eksperimentatorių matavimų masyvas, užrašytas matricos dviejų stulpelių D pavidalu.

$D := READPRN("Data300mol.dat)$ – komanda READPRN nuskaitome duomenis iš masyvo „Data300mol.dat“.

Paskaičiuojame, kuriuo numeriu yra pažymėtas matricos D stulpelio paskutinis elementas: $M := rows(D) - 1$, čia rows(D) – matricos D stulpelio elementų skaičius.

$m := 0..M$ sunumeruojame masyvą,

$M + 1 = 2900$ masyvo taškų skaičius,

$x'_m := \frac{300000}{D_{m,0}}$ perveda bangos ilgį D į dažnius teregercais,

padidiname 1000 intensyvumo reikšmes, kad būtų didesnė sveiko skaičiaus dalis,

$X1 := x'_0$ užfiksuojame pirmojo masyvo elementą, $X1 = 326.087$,

$X2 := x'_M$ paskutinį masyvo elementą, $X2 = 476.115$,

$Ga := X2 - X1$ intervalo X plotis,

$Xv := \frac{X1 + X2}{2}$ intervalo vidurys,

$N' := 3$ polinomo, dauginamo iš Gauso funkcijos, laipsnis,

$N1 := N' + 1$ polinomo narių skaičius pirmoje dalyje,

$n := 0..N'$ $j := 0..N'$ sunumeruojamų polinomo narių numeriai,

$L1 := 11$ dalinamų intervalinių zonų - Gauso funkcijų skaičius kairioje intervalo dalyje,

$L' := L1 - 1$ paskutinė intervalo zona,

$l := 0..L$ polinomo, kuriuo aproksimuojame, laipsnai,

$X_l := Ga \cdot \frac{l}{2L'} + X1$ intervalinių zonų – gauso funkcijų centrų koordinatės kairiajai pusei,

$q := 0.65$ puspločio koregavimo koeficientas- pasirinktas taip, kad glotninimo paklaida būtų mažiausia,

$s_l := \frac{q\,Ga}{2L1}$ Gauso funkcijos puspločio išraiška,

$L2 := 5 \quad L'' := L2 - 1 \quad l := 0..L'$

$X_{l+L1} := Ga \cdot \frac{l}{2L''} + X1 + \frac{Ga}{2}$

$s_{l+L1} := \frac{q\,Ga}{2L2}$ analogiškai dešiniajai pusei, kur Gauso funkcijų rečiau,

$L3 := L1 + L2$ bendras Gauso funkcijų skaičius,

$L := L3 - 1$ paskutinis numeris,

$l := 0..L \quad i := 0..L$ numeriai,

$L = 15 \quad L3 \cdot N1 = 64$ apibrėžtų parametrų skaičius,

$$A1_{j+N1\cdot i,\, n+N1\cdot l} := \left[\sum_{m=0}^{M}\left[\left(x'_m - X_i\right)^j \cdot \left(x'_m - X_l\right)^n \cdot \exp\left[-\left(\left|\frac{x'_m - X_i}{s_i}\right|\right)^2 - \left(\left|\frac{x'_m - X_l}{s_l}\right|\right)^2\right]\right]\right]$$

Tiesinių lygčių sistemos gaunamos iš mažiausių kvadratų metodu koeficientų prie nežinomųjų C matrica A.

$$B1_{j+N1\cdot i} := \sum_{m=0}^{M}\left[\left(x'_m - X_i\right)^j \cdot \exp\left[-\left(\left|\frac{x'_m - X_i}{s_i}\right|\right)^2\right] \cdot y'_m\right]$$

Lygčių sistemos dešiniosios pusės stulpelis.

$c1 := \mathrm{lsolve}(A1, B1)$ sprendinių paieškos komanda lygčių sistemos AC=B sprendimas,

$C1_{i,j} := c1_{j+N1\cdot i}$ sprendiniai užrašomi ne stulpelio, o matricos pavidalu,

$Z1(x) := \sum_{l=0}^{L}\left[\sum_{n=0}^{N'}\left[C1_{l,n} \cdot \left(x - X_l\right)^n \cdot \exp\left[-\left(\left|\frac{x - X_l}{s_l}\right|\right)^2\right]\right]\right]$ suglodinti sprendiniai,išreikšti per argumentų x funkciją U(x),

$y1_m := Z1\left(x'_m\right)$ suglodintų sprendinių reikšmės duotase taškuose X_m,

$\sigma 1 := \mathrm{stdev}(y1 - y')$ glodinimo paklaidos standartinio nuokrypio skaičiavimo komanda,

$\sigma 1 = 0.16754$ standartinis nuokrypis,

$L1 := 900$ keliuose taškuose pateiksime suglodinančią funkciją,

$L' := L1 - 1$ pirmoje zonoje,

$k := 0..L$ numeriai,

$x_k := Ga \cdot \frac{k}{2L'} + X1$ pirmosios zonos suglodintų taškų X koordinatės,

Analogiškai antojoje zonoje,

$L2 := 300$

$L'' := L2 - 1$

$k := 0..L'$

$x_{k+L1} := Ga \cdot \frac{k}{2L''} + X1 + \frac{Ga}{2}$

$L3 := L1 + L2$ zonų suma visam intervalui,

$K := L3 - 1$

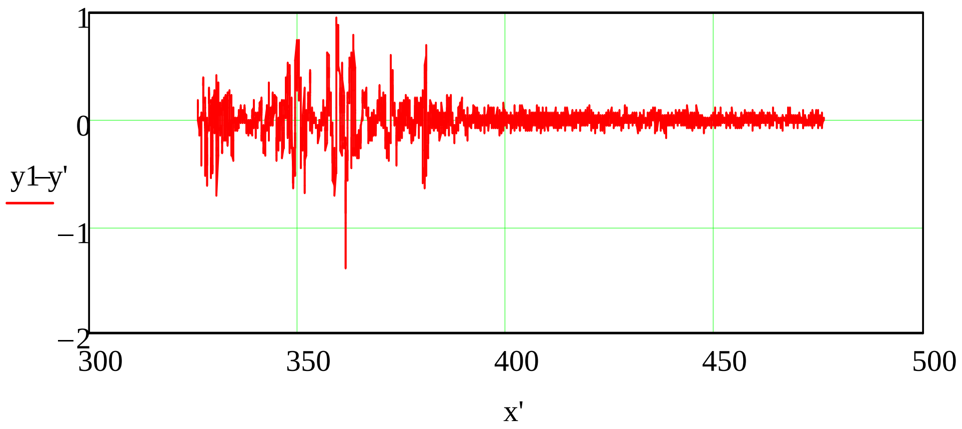
$k := 0..K$ numeriai,

$K + 1 = 1200$

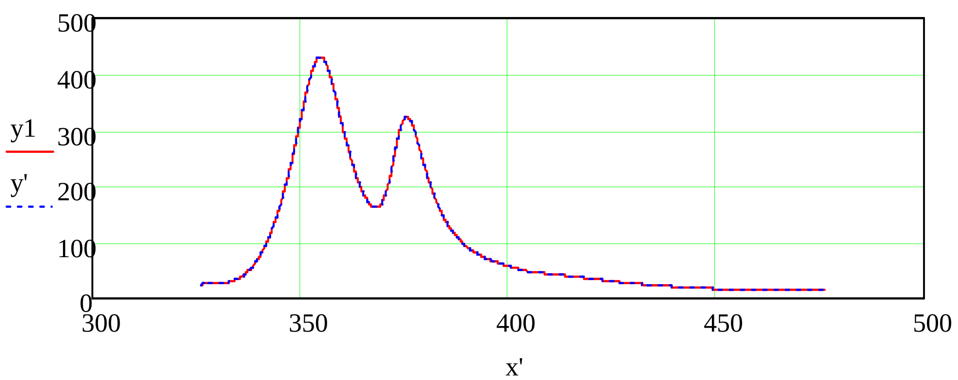
$x_K = 476.115$

$y_k := Z1(x_k)$

Glodinimo paklaidų grafikas



Eksperimentinė kreivė uždėta ant glodinančios kreivės



$H := 45$ puspločio dydžio apribojimo parametras,
$H0 := 2$ pradinis puspločio paieškos parametras,

$ka := 364$ kairioji ir
$de := 372$ dešinioji uždrausto intervalo dalys, kuriuose, eksperimentatorių pageidavimu,negalima ieškoti Gauso funkcijų.

11.2 Antrojo etapo aprašymas

$$S(N,x,c) := c_0 + \frac{x - Xv}{0.5Ga}\cdot c_1 + \sum_{n=0}^{N}\left[\left(c_{2+3n}\right)^2\cdot\exp\left[\left(x - c_{3+3n}\right)^2\cdot\frac{1+\left(c_{4+3n}\right)^2}{-2\cdot H^2}\right]\right]$$

S funkcija aproksimuojame matavimo rezultatus

1-ais ir 2 –asis narys yra tam, kad aprašytume foną: dėl įvairių eksperimentinių trukdžių eksperimento duomenys iš tikrųjų yra pakelti arba nuleisti pagal tiesinės priklausomybės dėsnį. Pirmasis c_0 – nusako vidutinį trikdžių foną. Antrasis c_1- nusako trikdžių tiesės pasvirimą. Po sumos ženklu yra jau tik Gauso funkcija.

Pirmasis daugiklis skliausteliuose ($c_{2+3n})^2$ pakeltas kvadratu , kad Gauso funkcijos amplitudės pagal eksperimento sąlygą gali būti tik teigiama.

Pirmasis daugiklis eksponentėje $(X – C_{3+3n})^2$ - ieškomas koeficientas B, o antrasis daugiklis - trupmena nusako Gauso funkcijos pusplotį, kuris taip pat gali būti tik teigiamas ir nemažesnis už H.

$$p(N,x,c) := \begin{pmatrix} S(N,x,c) \\ 1 \\ \frac{x - Xv}{0.5Ga} \end{pmatrix}$$

matricą sudaro aproksimavimo funkcija S, išvestinė pagal c_0=1 ir išvestinė pagal c_1.

$$P(n,x,c) := \begin{bmatrix} 2c_{2+3n}\cdot\exp\left[\left(x - c_{3+3n}\right)^2\cdot\frac{1+\left(c_{4+3n}\right)^2}{-2\cdot H^2}\right] \\ \left(x - c_{3+3\cdot n}\right)\cdot\left(c_{2+3\cdot n}\right)^2\cdot\exp\left[\left(x - c_{3+3n}\right)^2\cdot\frac{1+\left(c_{4+3n}\right)^2}{-2\cdot H^2}\right]\cdot\frac{1+\left(c_{4+3n}\right)^2}{H^2} \\ \left(x - c_{3+3\cdot n}\right)^2\cdot\left(c_{2+3\cdot n}\right)^2\cdot\exp\left[\left(x - c_{3+3n}\right)^2\cdot\frac{1+\left(c_{4+3n}\right)^2}{-2\cdot H^2}\right]\cdot\frac{c_{4+3n}}{-H^2} \end{bmatrix}$$

aproksimavimo funkcijų išvestinės pagal Gauso funkcijų parametrus.

$d := \sqrt{\frac{H^2}{H0^2} - 1}$ pradinė pusploČio reikšmė,

$Y_k := 0$ pradžioje tariame ,kad aproksimavimo funkcija lygi 0.

Paklaidos:

$v_k := (Y_k - y_k)\cdot(X1 < x_k < ka)$ kairioji pusė,

$v_k := (Y_k - y_k)\cdot(de < x_k < X2)$ dešnioji pusė,

$v1 := \text{augment}(x, v)$

$v2 := \text{augment}(x, v)$ - x reikšmes ir paklaidas sujungiame į vieną matricą,

$V1 := \text{csort}(v1, 1)$

$V2 := \text{csort}(v2, 1)$ - surūšiuojame paklaidas didėjimo tvarka,

$$g := \begin{pmatrix} 10 \\ 0 \\ \sqrt{-V1_{0,1}} \\ V1_{0,0} \\ d \\ \sqrt{-V2_{0,1}} \\ V2_{0,0} \\ d \end{pmatrix}$$ formuojame paieškos koeficientus C pirmajam etapui,

$N := 1$ pirmame etape ieškome per dvi Gauso funkcijas (kur 0 ir 1),

$n := 0..N$ numeriai,

$G'(x, c) := \text{stack}(P(0, x, c), P(1, x, c))$

$G(x, c) := \text{stack}(p(N, x, c), G'(x, c))$ jungiame matricas į sprendinių paieškos matricą, kad galėtume ieškoti sprendinio,

$c := \text{genfit}(x, y, g, G)$ sprendinių paieškos matrica randa koeficientus C,

$\text{stdev}(Y - y) = 121.9697$ sprendinio paklaida,

$Z(x) := S(N, x, c)$ užrašome sprendinį,

$Y_k := Z(x_k)$ sprendinio reikšmės glodinimo taškuose,

Iššifruojame C reikšmes:

$An(c) := c^2$

$Cn(c) := \frac{H}{\sqrt{1 + c^2}}$

$A_n := An(c_{2+3n})$

$B_n := c_{3+3n}$

$C_n := Cn(c_{4+3n})$

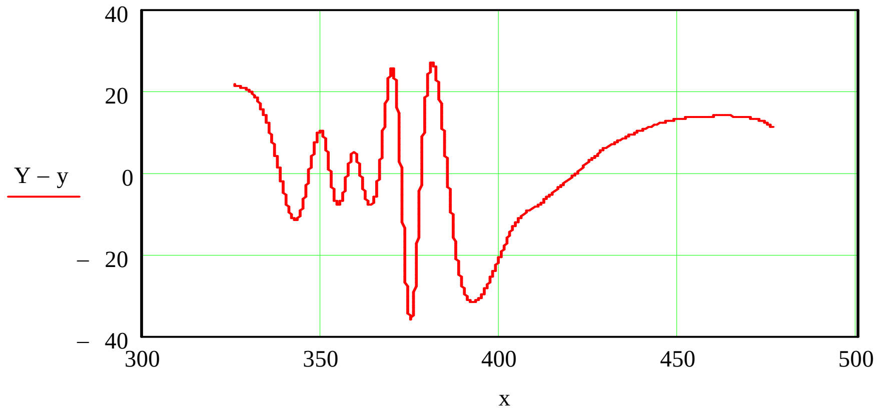
$c_0 = 37.1331$ fono lygis,

$c_1 = -9.9116$ fono pasvirimas,

$q := \mathrm{augment}(A, B, C)$ sujungiame rastus parametrus į vieną matricą q ir pavaizduojame paklaidos grafiku.

$$q = \begin{pmatrix} 379.4285 & 354.7791 & 6.2138 \\ 250.8908 & 376.6427 & 6.2353 \end{pmatrix}$$

Paklaidų grafikas



$v1_k := (Y_k - y_k) \cdot [1 - (ka < x_k < de)]$ sudarome paklaidų vektorių, išmesdami uždraustą intervalą,

$v := \mathrm{augment}(x, v1)$ sujungiame koordinačių vektorius su paklaidos vektoriumi,

$V := \mathrm{csort}(v, 1)$ surūšiuojame gautą matricą pagal paklaidų stulpelį,

$$w := \begin{pmatrix} \sqrt{-V_{0,1}} \\ V_{0,0} \\ d \end{pmatrix} \qquad w = \begin{pmatrix} 5.9898 \\ 375.1506 \\ 22.4778 \end{pmatrix}$$

sukuriame papildomų C paieškos matricos dalį,

$g := \mathrm{stack}(c, w)$ sujungiame anksčiau gautą parametrų matricą,

$g_1 := 0$ pasvirimo koeficientas lygus 0,

$N := N + 1$ padidiname vienetų Gauso funkcijų skaičių,

$n := 0..N$ numeriai,

$G'(x,c) := \mathrm{stack}(G'(x,c), P(N,x,c))$ prijungiame naują paieškos matricą naujam numeriui,

$G(x,c) := \mathrm{stack}(p(N,x,c), G'(x,c))$ pateikiame skaičiavimui matricą sekančiam skaičiavimo etapui,

$c := \mathrm{genfit}(x,y,g,G)$ sprendimo komandos,

$Z(x) := S(N,x,c)$ aproksimuotos funkcijos reikšmių komanda,

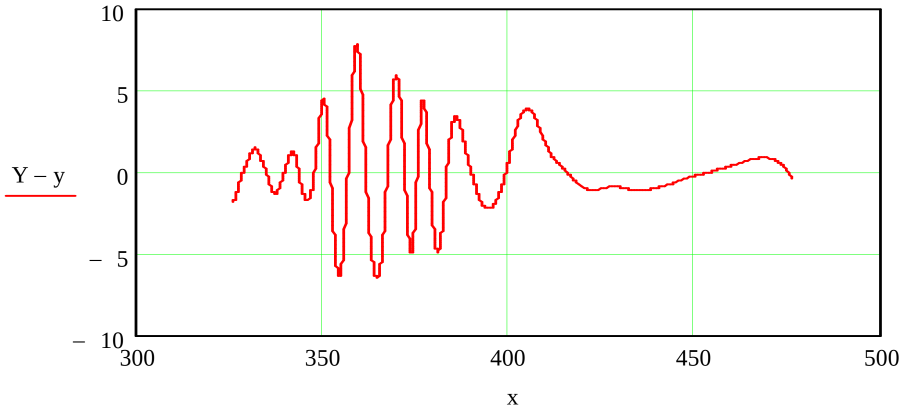
$Y_k := Z(x_k)$ aproksimuotos funkcijos rekšmės glodninimo taškuose,

$\mathrm{stdev}(Y - y) = 16.0613$ aproksimavimo paklaida,

$N = 2$ trys gauso funkcijos.

Kai N=4

Paklaidų grafikas

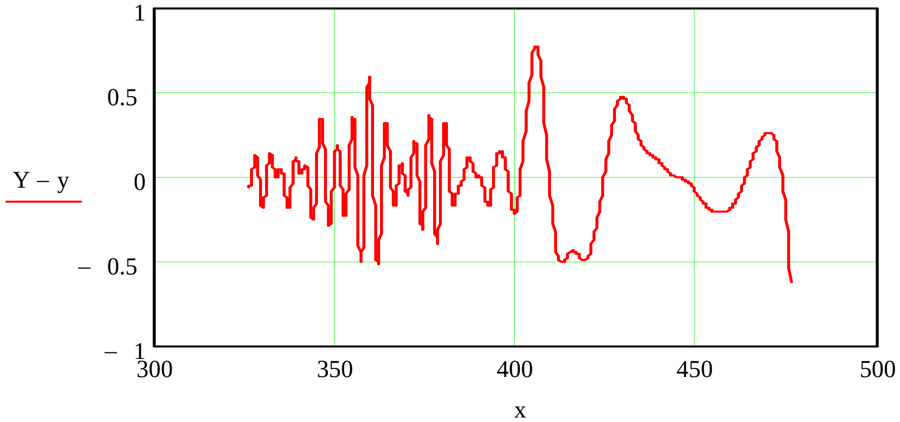


$\mathrm{stdev}(Y - y) = 2.7187$

$c_0 = 11.4126$ $c_1 = 3.7145$

Kai N=10

Paklaidų grafikas



$\mathrm{stdev}(Y - y) = 0.2051$

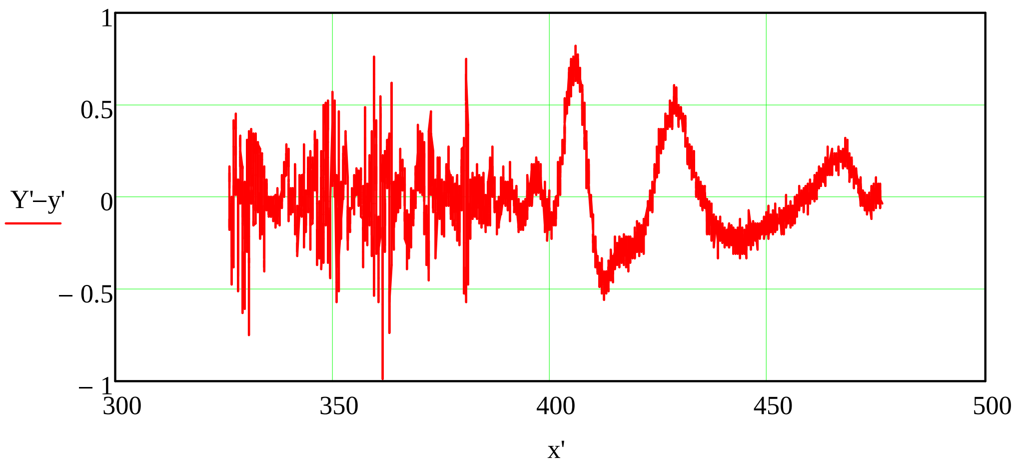
$c_0 = -20.3482$ $c_1 = 21.0525$

Kai N=16

$\sigma = 0.1743$ $\sigma' = 0.2303$

$c_0 = 13.5891$ $c_1 = 0.5215$

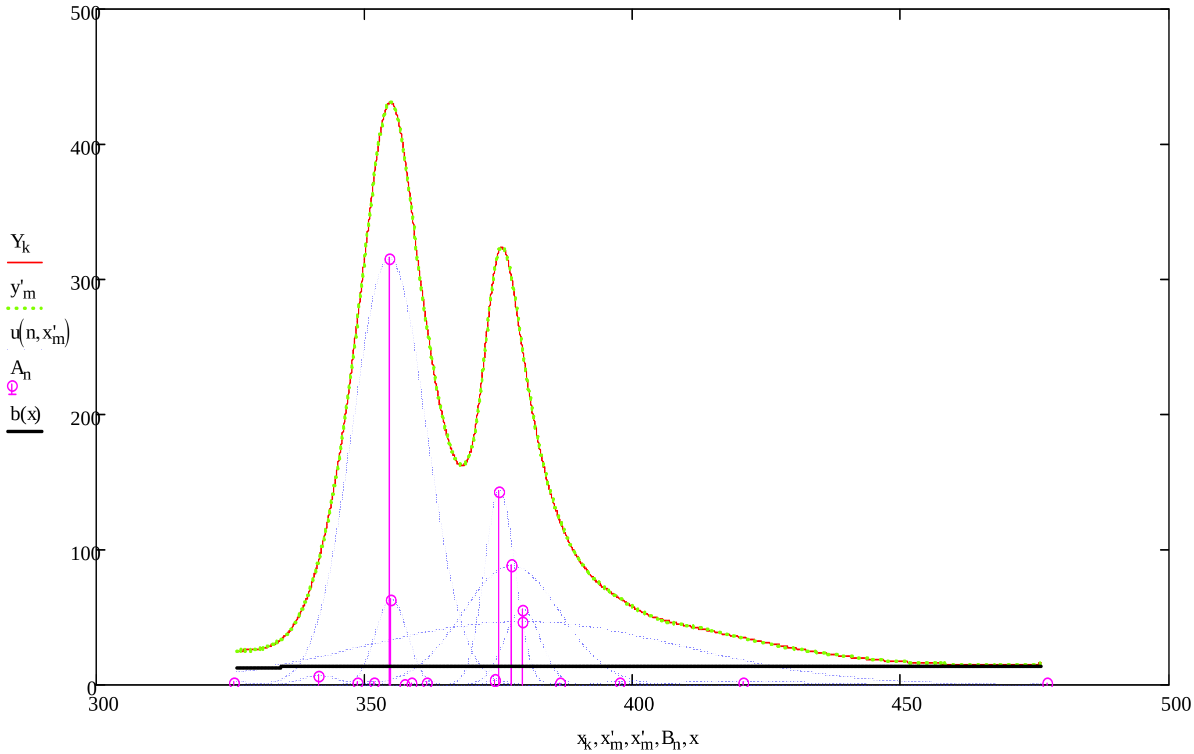
Paklaidų grafikas



$c_0 = 13.5891$ $c_1 = 0.5215$

$\sigma' = 0.2303$

Visus eksperimentinius duomenys gauname sudėję į čia pavaizduotą grafiką



pavaizduota, kaip atrodo kiekviena Gauso funkcija mėlina spalva, aproksimavimo kreivė- raudona spalva, ant jos uždėti žali eksperimentiniai taškai. Juoda linija – nurodytas pašalinis prietaiso fonas.

Y' – eksperimentinė kreivė iš eksperimentinių taškų,

Y_k – aproksimuota kreivė,

$u(n, x_m)$ – atskirų Gauso funkcijų kreivės,

– Gauso funkcijų viršūnių vietos.

Chronologine tvarka

Q=

	0	1	2	3
0	315.8898	354.5501	6.8662	2168.957
1	47.1692	379.4738	30	1415.0759
2	88.4208	377.3295	9.112	805.6912
3	7.1214	341.5258	3.4679	24.6968
4	143.9845	375.1125	2.8357	408.29
5	63.7586	354.9117	2.9614	188.8124
6	2.3904	325.7374	2.6884	6.4265
7	56.1372	379.4082	3.3888	190.2381
8	2.0595	361.4817	0.8049	1.6576
9	1.8916	348.6904	0.8312	1.5723
10	1.5434	477.2664	2.3189	3.579
11	3.0868	397.4294	2.9217	9.0187
12	2.7362	351.8206	1.5954	4.3652
13	2.6708	420.5768	13.6024	36.3288
14	4.0068	374.1934	1.2163	4.8736
15	0.9847	358.7944	0.3869	0.381
16	1.4227	386.5037	1.9364	2.755
17	0.5975	357.3415	0.8184	0.489
18				

Dažnių didėjimo tvarka

Q1=

	0	1	2	3
0	2.3904	325.7374	2.6884	6.4265
1	7.1214	341.5258	3.4679	24.6968
2	1.8916	348.6904	0.8312	1.5723
3	2.7362	351.8206	1.5954	4.3652
4	315.8898	354.5501	6.8662	2168.957
5	63.7586	354.9117	2.9614	188.8124
6	0.5975	357.3415	0.8184	0.489
7	0.9847	358.7944	0.3869	0.381
8	2.0595	361.4817	0.8049	1.6576
9	4.0068	374.1934	1.2163	4.8736
10	143.9845	375.1125	2.8357	408.29
11	88.4208	377.3295	9.112	805.6912
12	56.1372	379.4082	3.3888	190.2381
13	47.1692	379.4738	30	1415.0759
14	1.4227	386.5037	1.9364	2.755
15	3.0868	397.4294	2.9217	9.0187
16	2.6708	420.5768	13.6024	36.3288
17	1.5434	477.2664	2.3189	3.579
18				

11. Išvados

1. Naujai išbandytu Kvazi- Gauso funkcijų splainu apdoroti didelio masyvo eksperimentiniai duomenys ;
2. 2900 eksperimentiniai duomenys suglodinti 120 parametrų (kiekvienoje iš 15 Gauso funkcijų zonų po keturis kubinio polinomo parametrus) taip, kad gauta paklaida neviršija matavimo prietaise nurodytos paklaidos;
3. Realizavus didžiausio nuolydžio metodą MATHCAD'u, nustatyta iš kokių konkrečių 17 Gauso funkcijų sudaryta eksperimentinių duomenų kreivė.
4. Programą pavyko sudaryti taip, kad Gauso funkcijų spektras buvo nustatytas atsižvelgiant į papildomas eksperimentatorių sąlygas.

Literatūra

1. Martinėnas, B. Eksperimento duomenų statistinė analizė. Mokomoji knyga. 2-asis pataisytas ir papildytas leidimas. Vilnius: Technika, 2004. 101 p.
2. Višniakas, I., Slivinskas K.. Patikimumo teorija. Vilnius: „Technika“, 2005. 90 p.
3. Kulbilius, J., Tikimybių teorija ir matematinė statistika. Vilnius: „Vilniaus universiteto leidykla“, 1996. 440p.
4. Plukas, K., Skaitiniai metodai ir Algoritmai. Kaunas: „Naujasis lankas“ 2001. 272,410-420p.
5. Kvedaras, B., Sapagovas M., Skaičiavimo metodai. Vilnius: „Mintis“ 1974. 516p.
6. Palenskis, V., Maknys K., Atsitiktiniai vyksmai. Vilnius: „Vilniaus universiteto leidykla“ 1996. 170 p.
7. Čiegis, R.,Diferencialinių lygčių skaitiniai sprendimo metodai. Vilnius: „Vilniaus universiteto leidykla“ 2003.400-406 p.
8. Дьяконов В., MATHCAD 2001. Москва: „Питер Бук” 2002. 832 с.:
9. http://bspu.ab.ru/~pvv/mathpage/
10. http://teachmen.csu.ru/methods/
11. http://wikipedia.org
12. http://planet_math.org

Priedas