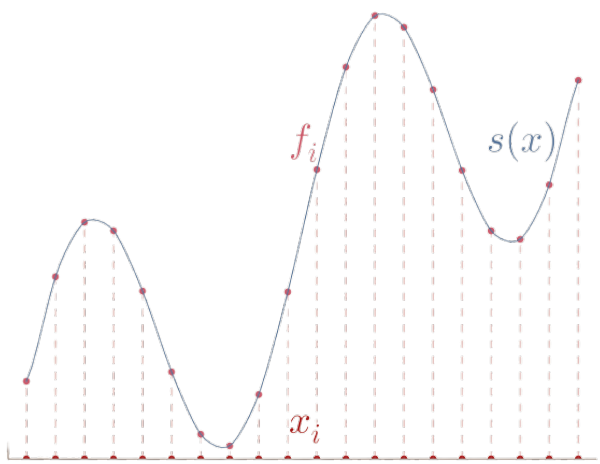
2η Εργασία Στο Μάθημα Της Αριθμητικής Ανάλυσης

Ονοματεπώνυμο : Παπαδόπουλος Αναστάσιος

AEM : 3654

Διδάσκων : Τέφας Αναστάσιος

5 Ιανουαρίου 2021



ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ

Περιεχόμενα

1 Εισαγωγή

Η εργασία αυτή αναπτύχθηκε κατά την παρακολούθηση του μάθηματος της Αριθμητικής Ανάλυσης του 3ου εξαμήνου του τμήματος Πληροφορικής ΑΠΘ. Περιλαμβάνει υλοποιήσεις και πειραματισμούς με αλγορίθμους Αριθμητικής Ανάλυσης που αναφέρονται σε θεματικές ενότητες όπως της προσέγγισης συναρτήσεων (**Άσκηση 5 και 7**) για παράδειγμα η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων και της αριθμητικής ολοκλήρωσης (**Άσκηση 6**) για παράδειγμα η μέθοδος της **Simpson**. Οι αλγόριθμοι αυτοί καθώς και οι γραφικές παραστάσεις που περιέχονται στο παρόν έγγραφο έχουν υλοποιηθεί με την γλώσσα προγραμματισμού **Python** με χρήση των βιβλιοθηκών **NumPy** και **Matplotlib**. Στα παραδοτέα περιλαμβάνεται το παρόν **pdf** αρχείο καθώς και το αντίστοιχο **.tex** και για κάθε μία άσκηση υπάρχει ένας υποφάκελος όπου περίεχει τα αντίστοιχα **.py** αρχεία με τον πηγαίο κώδικα.

2 Άσκηση 5

Στην **5η άσκηση** ζητείται να προγραμματιστεί μία συνάρτηση που να υπολογίζει το ημίτονο μιας οποιασδήποτε γωνίας. Για να δημιουργηθεί αυτή η συνάρτηση θα χρησιμοποιηθούν 10 τιμές του ημιτόνου με πλήρη ακρίβεια που υποστηρίζει το μηχάνημα που τρέχει ο κώδικας για την ανεξάρτητη μεταβλητή και 10 ψηφία ακρίβεια για την εξαρτημένη μεταβλητή. Η συνάρτηση του ημιτόνου θα προσεγγιστεί με τις παρακάτω μεθόδους :

- Με πολυωνυμική προσέγγιση
- Με την μέθοδο Splines
- Με την μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων

Τα σημεία που θα χρησιμοποιηθούν είναι τα παρακάτω:

x	$sinx$
0.0	0.0
0.65	0.6051864057
1.3	0.9635581854
1.9500000000000002	0.9289597150
2.6	0.5155013718
3.25	-0.1081951345
3.9000000000000004	-0.6877661591
4.55	-0.9868438585
5.2	-0.8834546557
6.283185307179586	0

Τα σημεία επιλέχθηκαν στο διάστημα $[0, 2\pi]$ καθώς το ημίτονο είναι περιοδική συνάρτηση με περίοδο $T = 2\pi$ και σε διάστημα μήκους ίσο με την περίοδο η συνάρτηση περιέχει όλη την πληροφορία που χρειάζεται. Στην συνέχεια γίνεται σύγκριση των παραπάνω προσεγγίσεων στο διάστημα $[-\pi, \pi]$ όσον αφορά την ακρίβεια προσέγγισης και προβάλλεται σε διάγραμμα το σφάλμα προσέγγισης για 200 σημεία στο διάστημα $[-\pi, \pi]$ και αναφέρεται ο αριθμός των ψηφίων ακρίβειας που πετυχαίνονται.

2.1 Πολυωνυμική Προσέγγιση

Για την πολυωνυμική προσέγγιση χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton. Για n σημεία εκπαίδευσης η μέθοδος αυτή παράγει ένα πολυώνυμο βαθμού $n-1$, το οποίο μάλιστα είναι και μοναδικό. Αρχικά υποθέτουμε ότι τα σημεία εκπαίδευσης προέρχονται από μία συνάρτηση $f(x)$, οπότε στόχος μας είναι να προσεγγίσουμε τα σημεία $(x_1, f(x_1)), ..., (x_n, f(x_n))$. Ορίζουμε ως

$$f[x_1 \ \dots \ x_n]$$

τον συντελεστή του όρου x^{n-1} στο πολυώνυμο που προσεγγίζει τα παραπάνω σημεία.

Ορίζοντας λοιπόν τα παραπάνω η μέθοδος Newton ορίζει το ζητούμενο πολυώνυμο ως

$$P(x) = f[x_1] + f[x_1 \ \ x_2](x - x_1) + f[x_1 \ \dots \ x_n](x - x_1)(x - x_{n-1})$$

Όπου τα $f[x_1 \ \dots \ x_n]$ υπολογίζονται αναδρομικά ως εξής

$$f[x_k \ \ x_{k+1}] = \frac{f[x_{k+1}] - f[x_k]}{x_{k+1} - x_k}$$

Στο αρχείο **polynomial.py** υπάρχουν τρεις συναρτήσεις. Η συνάρτηση *polynomial_interpolation* δέχεται ως ορίσματα τα σημεία εκπαίδευσης και επιστρέφει τους συντελεστές του πολυωνύμου που προσεγγίζει αυτά τα σημεία. Οι συντελεστές του πολυωνύμου υπολογίζονται χρησιμοποιώντας το λεγόμενο τρίγωνο Newton, το οποίο μοιάζει όπως το *Σχήμα 1*.

$$
\begin{array}{r|ccccc}
-1 & -5 & & & \\
 & & 4 & & \\
0 & -1 & & -1 & \\
 & & 1 & & 1 \\
2 & 1 & & 3 & \\
 & & 10 & & \\
3 & 11 & & &
\end{array}
$$

Σχήμα 1: Τρίγωνο Newton για 4 σημεία εκπαίδευσης (Αριστερή στήλη η τιμή της ανεξάρτητης μεταβλητής των σημείων εκπαίδευσης)

Από το οποίο παίρνουμε τα στοιχεία της πρώτης διαγωνίου ως συντελεστές του πολυωνύμου με τον σταθερό όρο του πολυωνύμου να είναι ο πρώτος όρος αυτής της διαγωνίου.Στην συνέχεια, η συνάρτηση *calculate_polynomial* υπολογίζει και επιστρέφει την τιμή του πολυωνύμου στην τιμή x που δέχεται ως παράμετρο χρησιμοποιώντας τον βαθμό του πολυωνύμου, τις τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής των σημείων εκπαίδευσης και τους συντελεστές του πολυωνύμου που υπολογίσθηκαν προηγουμένως. Τέλος, η συνάρτηση *custom_sin* ορίζει αρχικά τα σημεία που αναφέρθηκαν στην παράγραφο της εισαγωγής της *Άσκησης 1* και στην συνέχεια χρησιμοποιεί τις άλλες δύο συναρτήσεις για να προσεγγίσει την τιμή του ημιτόνου στο σημείο που δέχεται ως παράμετρο, αφού πρώτα το μεταφέρει στο διάστημα $[0, 2\pi]$.

2.2 Προσέγγιση με Splines

Για την προσέγγιση με την μέθοδο Splines χρησιμοποιούνται φυσικές κυβικές Splines. Αρχικά, στην γενικότερη μορφή η μέθοδος Splines προσεγγίζει με μία καμπύλη (ευθεία, πολυώνυμο 2ου ή 3ου βαθμού) ανά δύο τα σημεία εκπαίδευσης, δηλαδή χρησιμοποιεί διαφορετικούς τύπους για να προσεγγίσει αυτά τα σημεία εκπαίδευσης. Ο όρος κυβικές που χρησιμοποιήθηκε παραπάνω αναφέρεται στο ότι η καμπύλη που θα προσεγγίσει ανά δύο τα σημεία εκπαίδευσης είναι 3ου βαθμού. Επομένως, αφού έχουμε ανάφερει τα παραπάνω καταλήγουμε στον παρακάτω ορισμό για την κυβική Spline για n σημεία εκπαίδευσης

$$
\begin{gathered}
S_1(x) = y_1 + b_1(x - x_1) + c_1(x - x_1)^2 + d_1(x - x_1)^3, \;\; x_1 \le x \le x_2 \\
S_2(x) = y_2 + b_2(x - x_2) + c_2(x - x_2)^2 + d_2(x - x_2)^3, \;\; x_2 \le x \le x_3 \\
\vdots \\
S_{n-1}(x) = y_{n-1} + b_{n-1}(x - x_{n-1}) + c_{n-1}(x - x_{n-1})^2 + d_{n-1}(x - x_{n-1})^3, \;\; x_{n-1} \le x \le x_n
\end{gathered}
$$

Με τις εξής ιδιότητες

- $S_i(x_i) = y_i$ και $S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$ για $i = 1, \dots, n-1$
- $S'_{i-1}(x_i) = S'_i(x_i)$ για $i = 2, \dots, n-1$
- $S''_{i-1}(x_i) = S''_i(x_i)$ για $i = 2, \dots, n-1$

Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω λαμβάνουμε $3n-5$ εξισώσεις ενώ έχουμε $3n-3$ αγνώστους. Επομένως, υπάρχουν άπειρες κυβικές Splines που προσεγγίζουν τα n σημεία εκπαίδευσης. Εδώ εισέρχεται ο όρος φυσικές κυβικές Splines που εισάγει τις δύο παρακάτω εξισώσεις

$$S_1''(x_1) = 0$$

$$S_{n-1}''(x_n) = 0$$

και επομένως πλέον έχουμε $3n-3$ εξισώσεις με $3n-3$ αγνώστους. Για να λύσουμε το σύστημα αρχικά ορίζουμε ως $c_n = S_{n-1}''(x_n)/2$, $\delta_i = x_{i+1} - x_i$ και $\Delta_i = y_{i+1} - y_i$. Τελικά, με τους παραπάνω συμβολισμούς οι συντελεστές υπολογίζονται ως εξής

$$d_i = \frac{c_{i+1} - ci}{3\delta_i}$$

$$b_i = \frac{\Delta_i}{\delta_i} - \frac{\delta_i}{3}(2c_i + c_{i+1})$$

για $i = 1, \ldots, n-1$ και χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις των κυβικών Splines έχουμε ότι $2c_1 = 0$ και $2c_n = 0$. Οπότε, καταλήγουμε στο παρακάτω σύστημα προς επίλυση

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & & & \\ \delta_1 & 2\delta_1 + 2\delta_2 & \delta_2 & \ddots & & \\ 0 & \delta_2 & 2\delta_2 + 2\delta_3 & \delta_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \delta_{n-2} & 2\delta_{n-2} + 2\delta_{n-1} & \delta_{n-1} \\ & & & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \\ \\ \vdots \\ \\ c_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 \\ 3(\frac{\Delta_2}{\delta_2} - \frac{\Delta_1}{\delta_1}) \\ \\ \vdots \\ \\ 3(\frac{\Delta_{n-1}}{\delta_{n-1}} - \frac{\Delta_{n-2}}{\delta_{n-2}}) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Στο αρχείο **splines.py** υπάρχουν 4 συναρτησεις. Η συνάρτηση *splines_interpolation* δέχεται ως ορίσματα τα σημεία εκπαίδευσης και επιστρέφει τους συντελεστές της φυσικής κυβικής Splines που προσεγγίζει τα σημεία αυτά, οι οποίοι υπολογίζονται σύμφωνα με αυτά που αναφέρθηκαν παραπάνω. Στην συνέχεια, η συνάρτηση *find_interval_index* επιστρέφει την θέση που θα έπρεπε να μπει το όρισμα search_value στον πίνακα array, ενώ η συνάρτηση *calculate_polynomial* υπολογίζει την τιμή της φυσικής κυβικής Spline στην θέση x που δέχεται σαν παράμετρο. Τέλος, η συνάρτηση *custom_sin* ορίζει αρχικά τα σημεία που αναφέρθηκαν στην παράγραφο της εισαγωγής της *Άσκησης 1* και στην συνέχεια χρησιμοποιεί τις άλλες τρεις συναρτήσεις για να προσεγγίσει την τιμή του ημιτόνου στο σημείο που δέχεται ως παράμετρο, αφού πρώτα το μεταφέρει στο διάστημα $[0, 2\pi]$.

2.3 Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων

Για την προσέγγιση με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων χρησιμοποιείται πολυώνυμο 10ου βαθμού. Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων προσεγγίζει ένα σύνολο σημείων εκπαίδευσης έτσι ώστε το άθροισμα των τετραγώνων του σφάλματος σε κάθε σημείο να είναι ελάχιστο. Για παράδειγμα αν έχουμε n σημεία εκπαίδευσης $(x_i, f_i))$ και θέλουμε να τα προσεγγίσουμε με ένα μοντέλο της μορφής $y = at + b$ πρέπει το

$$\sum_{k=1}^{n}(f_i - (at_i + b))^2$$

να γίνει ελάχιστο ως προς a και b. Το σύστημα που προκύπτει από την παραπάνω απαίτηση δεν έχει πάντα λύση και επομένως υπάρχει ανάγκη για την εισαγωγή του όρου της κοντινότερης λύσης προς την ιδανική (που δεν μπορεί να βρεθεί) λύση. Η κοντινότερη λύση ως προς την Ευκλείδια απόσταση μπορεί να βρέθει λύνοντας το παρακάτω σύστημα αντί το αρχικό $(Ax = b)$ που δεν έχει λύση

$$A^T A\overline{x} = A^T b$$

Οι οποίες ονομάζονται και κανονικές εξισώσεις. Τέλος, για να μετρήσουμε την απόδοση του μοντέλου μας υπολογίζουμε το σφάλμα ως εξής

$$r = b - A\overline{x}$$

Αν το διάνυσμα r είναι το μηδενικό τότε έχουμε λύσει το αρχικό σύστημα $Ax = b$ ακριβώς. Αν όχι, το Ευκλείδιο μέτρο του διανύσματος r είναι μία μετρική για το σφάλμα στην λύση $\overline{x}$. Υπάρχουν τουλάχιστον τρεις μετρικές για να εκφράσουμε το μέγεθος του σφάλματος.

- Το Ευκλείδιο μέτρο

$$\|r\| = \sqrt{r_1^2 + \cdots + r_m^2}$$

- Το τετραγωνικό σφάλμα (**Squared Error - SE**)

$$SE = r_1^2 + \cdots + r_m^2$$

- **Root Mean Squared Error - RMSE**

$$RMSE = \sqrt{SE/m} = \sqrt{(r_1^2 + \cdots + r_m^2)/m}$$

Από τα οποία μπορούμε να συμπεράνουμε ότι αν ελαχιστοποιήσουμε το ένα ελαχιστοποιούνται και τα υπόλοιπα.

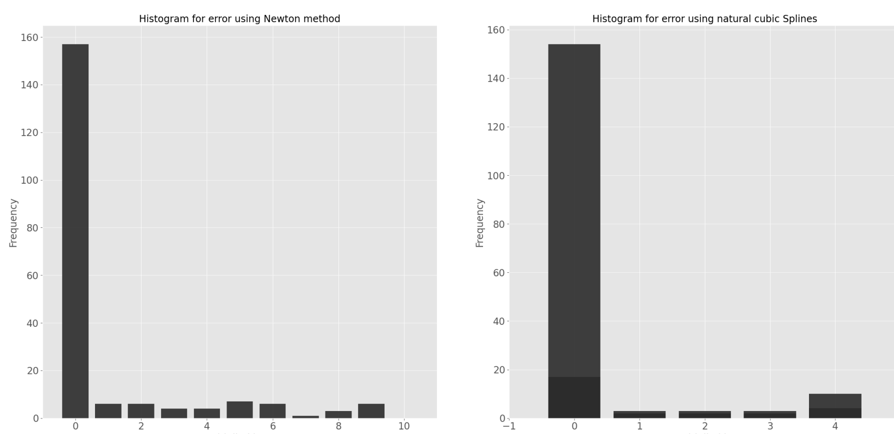
Στο αρχείο **leastSquares.py** υπάρχουν τρεις συναρτήσεις. Η συνάρτηση *least_squares_fit* δέχεται ως ορίσματα τα σημεία εκπαίδευσης και τον βαθμό του πολυωνύμου με το οποίο θα προσεγγιστούν τα σημεία εκπαίδευσης με την διαδικάσια που αναφέρθηκε παραπάνω, δηλαδή λύνοντας το σύστημα $A^T A\overline{x} = A^T b$ και επιστρέφει την λύση $\overline{x}$. Στην συνέχεια, η συνάρτηση *calculate_polynomial* υπολογίζει και επιστρέφει την τιμή του πολυωνύμου στην τιμή x που δέχεται σαν παράμετρο σε συνδυασμό με τον βαθμό του πολυωνύμου που έγινε η εκπαίδευση τον οποίο δέχεται κι αυτόν σαν παράμετρο. Τέλος, η συνάρτηση *custom_sin* ορίζει αρχικά τα σημεία που αναφέρθηκαν στην παράγραφο της εισαγωγής της *Άσκησης 1* και στην συνέχεια χρησιμοποιεί τις άλλες δύο συναρτήσεις για να προσεγγίσει την τιμή του ημιτόνου στο σημείο που δέχεται ως παράμετρο, αφού πρώτα το μεταφέρει στο διάστημα $[0, 2\pi]$. Το μοντέλο επιλέχθηκε να είναι πολυώνυμο 10ου βαθμού καθώς είναι αυτό που ελαχιστοποιεί το **RMSE** από όλα τα μοντέλα που δοκιμάστηκαν (πολυώνυμα βαθμού από 1 έως και 30).

2.4 Σύγκριση των προσεγγίσεων και ψηφία ακρίβειας

Για την σύγκριση των παραπάνω προσεγγίσεων υπολογίζουμε το **RMSE** και για τις τρεις μεθόδους για 200 σημεία στο $[-\pi, \pi]$ και καταλήγουμε στον παρακάτω πίνακα

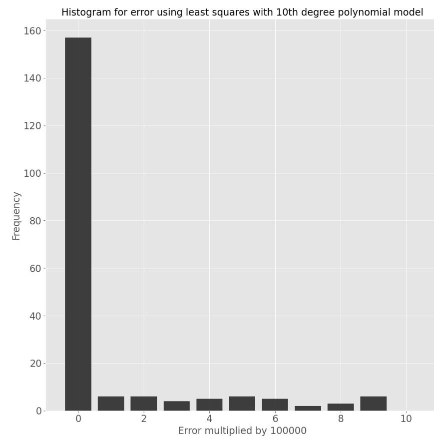
Μέθοδος Προσέγγισης	RMSE
Πολυωνυμική (Newton)	$2.644882474077062e-05$
Φυσικές Κυβικές Splines	0.0012736124616251868
Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων	$2.6267765538364208e-05$

Απ΄ όπου παρατηρούμε ότι το μικρότερο **RMSE** το πετυχαίνει η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων με μοντέλο ένα πολυώνυμο 10ου βαθμού. Στην συνέχεια, την αμέσως καλύτερη επίδοση έχει η πολυωνιμκή προσέγγιση με την μέθοδο του Newton ενώ το μεγαλύτερο **RMSE** το πετυχαίνουν οι φυσικές κυβικές Splines.



Σχήμα 2: Ιστογράμματα συχνοτήτων του σφάλματος προσέγγισης για 200 σημεία στο [-π, π] για τις μεθόδους **Newton** και **Splines**.

Από τα ιστογράμματα των *Σχημάτων 2* και *3* παρατηρούμε ότι οι μέθοδοι Newton και ελαχίστων τετραγώνων προσεγγίζουν το ημίτονο με το σφάλμα να κυμαίνεται



Σχήμα 3: Ιστογράμματα συχνοτήτων του σφάλματος προσέγγισης για 200 σημεία στο [-π, π] για την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων με πολυώνυμο 10ου βαθμού.

από -0.00009 εώς και 0.00009, ενώ οι φυσικές κυβικές Splines προσεγγίζουν το ημίτονο με το σφάλμα να κυμαίνεται από -0.004 έως 0.004. Το μέγιστο σφάλμα που κάνει η μέθοδος Newton είναι $9.727780525789487e-05$ ενώ το ελάχιστο $1.6041064032634722e-09$, επομένως η μέθοδος Newton έχει ακρίβεια από 3 έως 8 ψηφία. Αντίστοιχα, οι φυσικές κυβικές Splines έχουν μέγιστο σφάλμα ίσο με 0.004398121629302976 και ελάχιστο $2.547804256458619e-08$, επομένως η μέθοδος αυτή έχει ακρίβεια από 2 εώς 7 ψηφία. Τέλος, η μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων έχει μέγιστο σφάλμα ίσο με $9.656790921613867e-05$ και ελάχιστο $5.535089053765319e-10$, επομένως η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων έχει ακρίβεια από 3 έως 8 ψηφία. Τα παραπάνω αποτελέσματα φαίνονται συγκεντρωτικά και στον παρακάτω πίνακα

Μέθοδος Προσέγγισης	Ψηφία Ακρίβειας
Πολυωνυμική (Newton)	3 έως 8
Φυσικές Κυβικές Splines	2 έως 7
Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων	3 έως 8

3 Άσκηση 6

Στην **6η άσκηση** μας δίνεται αρχικά η συνάρτηση

4 Άσκηση 7

Στην **7η άσκηση** μας δίνεται αρχικά η συνάρτηση