Metody Numeryczne

Kacper Marchlewicz

Projekt 2 Zadanie 2.22

Dla następujących danych pomiarowych (próbek):

x_i	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
y_i	−20,5411	-9,3720	−3,7894	−0,6924	0,2672	0,0239	1,6401	1,2870	3,1747	1,3525	−3,8802

Metodą najmniejszych kwadratów należy wyznaczyć funkcję wielomianową y=f(x) najlepiej aproksymującą te dane. W sprawozdaniu proszę przedstawić na rysunku otrzymaną funkcję na tle danych. Do rozwiązania zadania najmniejszych kwadratów proszę wykorzystać układ równań normlanych, a następnie układ równań liniowych z macierzą R wynikającą z rozkładu QR macierzy układu równań problemu.

Zadaniem aproksymacji jest przybliżenie funkcji f(x), określonej dokładnie w zadanym przedziale lub jedynie w przybliżeniu, w skończonej liczbie punktów tego przedziału, inną prostszą funkcją F(x), należącą do wybranej klasy funkcji aproksymujących. Aproksymowanie funkcji ciągłej w danym przedziale prostszą funkcją ciągłą stosujemy, gdy skomplikowana postać analityczna tej pierwszej nie pozwala na jej wykorzystanie np. w stosowanych metodach analizy czy projektowania. Z kolei przybliżanie funkcją ciągłą zależności znanej jedynie w skończonej liczbie punktów (aproksymacja dyskretna, punktowa) szeroko wykorzystuje się w technice modelowania.

Niech f (x) przyjmuje na pewnym zbiorze punktów $x_0, x_1, \ldots, x_N$ ($x_i \neq x_j$) znane wartości $y_j = f(x_j)$, j = 0, 1, 2, ..., N. Niech $\varphi_i(x)$, i = 0, 1, ..., n, będzie układem funkcji bazowych przestrzeni funkcji aproksymujących $X_n \subseteq X$, tzn.

$$\forall\, F \in X_n \quad F(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i\varphi_i(x)$$

Na potrzeby zadania przyjmuję bazę wielomianów tzw. naturalną (potęgową):

$$\varphi_0(x) = 1,\ \varphi_1(x) = x,\ \varphi_2(x) = x^2,\ \cdots,\ \phi_n(x) = x^n,$$

tzn.

$$F(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_nx^n$$

Zadaniem aproksymacji jest wyznaczenie wartości współczynników $a_0, a_1, \ldots, a_n$ określających funkcję aproksymującą tak, aby zminimalizować błąd średniokwadratowy zdefiniowany zależnością:

$$H(a_0, \ldots, a_n) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j=0}^{N}\left[f(x_j) - \sum_{i=0}^{n} a_i\varphi_i(x_j)\right]^2$$

Współczynniki szukanego wielomianu wyznaczmy z warunków koniecznych minimum:

$$\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial a_k} = -2\sum_{j=0}^{N}\left[\mathrm{f}(x_j) - \sum_{i=0}^{n} \mathrm{a_i}\varphi_\mathrm{i}(x_j)\right] * \varphi_\mathrm{k}(x_j) = 0, \quad \mathrm{k} = 0,\dots,\mathrm{n}$$

Z czego możemy pokazać, że trzeba rozwiązać układ równań normalnych

$$A^T A a = A^T y$$

Definiując macierz A postaci:

$$\mathrm{A} = \begin{bmatrix} \varphi_0\,(\mathrm{x}_0) & \cdots & \varphi_n\,(\mathrm{x}_0) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0\,(\mathrm{x}_N) & \cdots & \varphi_n\,(\mathrm{x}_N) \end{bmatrix}$$

oraz wektory zmiennych decyzyjnych i wartości funkcji oryginalnej jako:

$a = [a_0 \ \ a_1 \cdots a_n]^T$

$y = [y_0 \ \ y_1 \cdots y_N]^T$, $y_j = f(x_j)$, $j = 0, 1, \dots, N$

Ponieważ macierz A jest pełnego rzędu, $A^T A$ jest nieosobliwa. Stąd również wynika jednoznaczność rozwiązania układu równań normalnych. Natomiast macierz $A^T A$ może być źle uwarunkowana – jej wskaźnik uwarunkowania jest bowiem kwadratem wskaźnika uwarunkowania macierzy A. Zalecanym sposobem rozwiązania zadania aproksymacji przy źle uwarunkowanym układzie równań normalnych jest wykorzystanie rozkładu QR macierzy A, korzystając z rozkładu wąskiego, $A_{m\times n} = Q_{m\times n}R_{n\times n}$, oraz ortonormalności macierzy Q i nieosobliwości macierzy R układ równań normalnych, możemy wówczas zapisać w postaci:

$$\mathrm{A}^T A a = \mathrm{A}^T y \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{R}^T Q^T Q R a = \mathrm{R}^T Q^T y \quad \Longrightarrow \quad R a = Q^T y$$

Definicje i wzory na podstawie książki Metody numeryczne prof. P. Tatjewskiego; OWPW, Warszawa 2013

Rozwiązanie układu równań normalnych w Matlabie:

```
function [a,euk,czeb] = normal_solver(x, y , n)
A = zeros(length(x),n+1);
for j=1:n+1
    for i=1:length(x)
        A(i,j)=x(i)^(j-1);
    end
end
At = A';
a = linsolve(At * A, At * y');
disp('Współczynniki wielomianu wynoszą=')
```

```
disp(a);
euk= norm(A*a-y');
disp('Norma euklidesowa wynosi=');
disp(euk);
czeb= max(abs(A*a-y'));
disp('Norma czebyszewa wynosi=');
disp(czeb);
end
```

Rozwiązanie układu równań liniowych rozkładem QR w Matlabie:

```
function [a,euk,czeb] = qr_solver(x, y , n)
A = zeros(length(x),n+1);
for j=1:n+1
    for i=1:length(x)
        A(i,j)=x(i)^(j-1);
    end
end
[Q,R] = qr(A);
Qt= Q';
a= linsolve(R , Qt * y');
disp('Współczynniki wielomianu wynoszą=')
disp(a);
euk= norm(A*a-y');
disp('Norma euklidesowa wynosi=');
disp(euk);
czeb= max(abs(A*a-y'));
disp('Norma czebyszewa wynosi=');
disp(czeb);
end
```

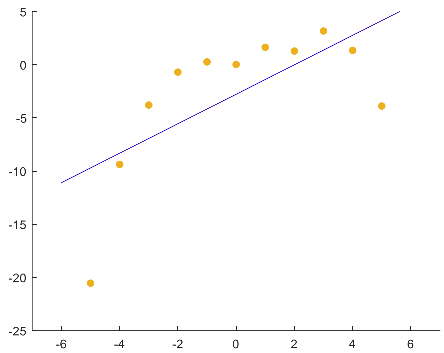
Część programu odpowiadająca za utworzenie wykresu i rozwiązanie równań dla podanego n

```
X=[-5 -4 -3 -2 -1 0 1 2 3 4 5];
Y=[-20.5411 -9.3720 -3.7894 -0.6924 0.2672 0.0239 1.6401 1.2870 3.1747 1.3525
-3.8802];
n=5;

disp('Układ równań normalnych');
[a1,e1,cz1]=normal_solver(X,Y,n);
disp('Układ rónań liniowych z rozkładem QR');
[a2,e2,cz2]=qr_solver(X,Y,n);

hold on
x = linspace(-6,6,120);
plot(x, polyval(flip(a1'), x), 'r');
plot(x, polyval(flip(a2'), x), 'b');
scatter(X,Y,'filled');
xlim([-7 7]);
ylim([-25 5]);
hold off
```

Poniżej zaprezentowane są wykresy oraz obliczone współczynniki wielomianu

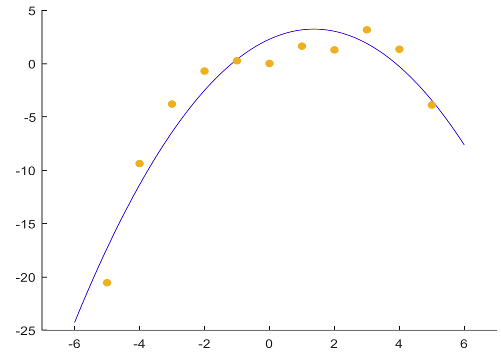
(kolor czerwony wykresu to układ normalny, a niebieski z zastosowaniem QR)

n=1:



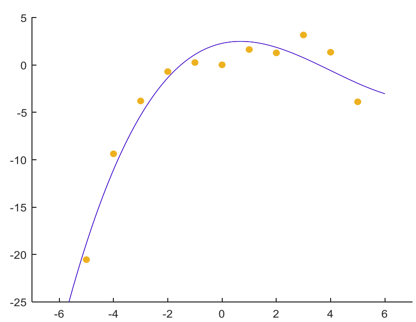
Normalny	Zastosowanie QR
-2.7754272727272	-2.7754272727272
1.38569545454545	1.38569545454546
Norma Euklidesowa	
16.1258384451645	16.1258384451645
Norma Czebyszewa	
10.8371954545455	10.8371954545455

n=2:



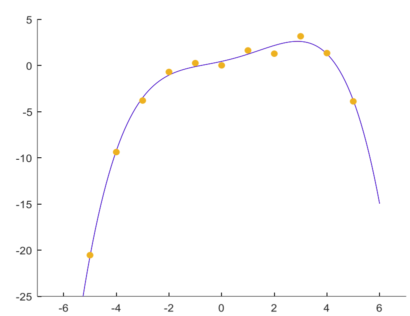
Normalny	Zastosowanie QR
2.29210303030303	2.29210303030303
1.38569545454545	1.38569545454545
-0.506753030303030	-0.50675303030303
Norma Euklidesowa	
6.30154249582328	6.30154249582328
Norma Czebyszewa	
3.23590000000000	3.23590000000001

n=3:



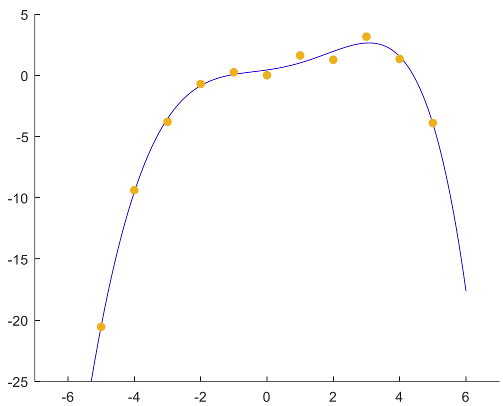
Normalny	Zastosowanie QR
2.29210303030303	2.29210303030303
0.633576301476303	0.633576301476303
-0.506753030303030	-0.506753030303030
0.0422538850038849	0.0422538850038849
Norma Euklidesowa	
5.35537184828715	5.35537184828716
Norma Czebyszewa	
2.40179044289044	2.40179044289044

n=4:



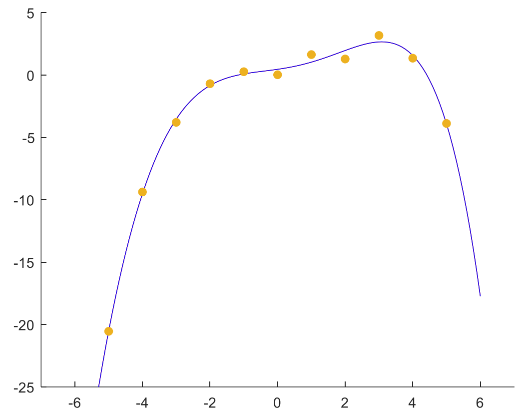
Normalny	Zastosowanie QR
0.455503030303026	0.455503030303031
0.633576301476303	0.633576301476302
0.130955303030304	0.130955303030303
0.0422538850038849	0.0422538850038850
-0.0255083333333334	-0.025508333333333
Norma Euklidesowa	
1.37208074595724	1.37208074595724
Norma Czebyszewa	
0.889374592074592	0.889374592074593

n=5:



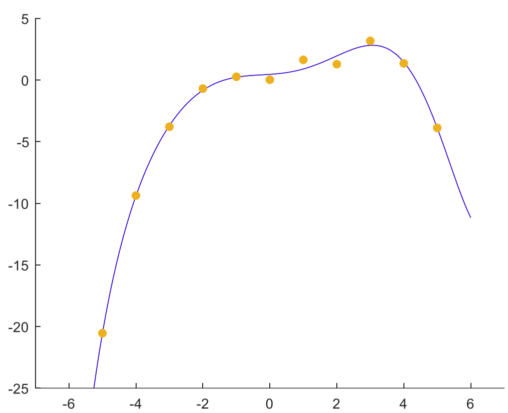
Normalny	Zastosowanie QR
0.455503030303027	0.455503030303032
0.391600745920751	0.391600745920746
0.130955303030304	0.130955303030303
0.0824421328671322	0.0824421328671328
-0.0255083333333333	-0.0255083333333333
-0.00126910256410254	-0.00126910256410256
Norma Euklidesowa	
1.21679681639990	1.21679681639990
Norma Czebyszewa	
0.686318181818185	0.686318181818183

n=6:



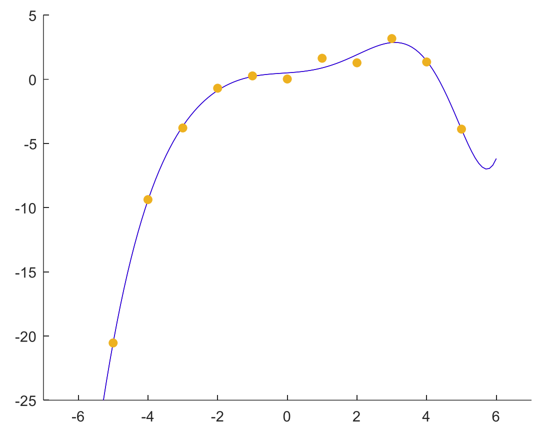
Normalny	Zastosowanie QR
0.461377540106940	0.461377540106952
0.391600745920748	0.391600745920747
0.126348708259070	0.126348708259062
0.0824421328671325	0.0824421328671328
-0.0250004330065369	-0.0250004330065360
-0.001269102564102	-0.001269102564102 5
-1.34624183006276e-05	-1.34624183006521e-05
Norma Euklidesowa	
1.21669737074162	1.21669737074162
Norma Czebyszewa	
0.681031122994663	0.681031122994656

n=7:



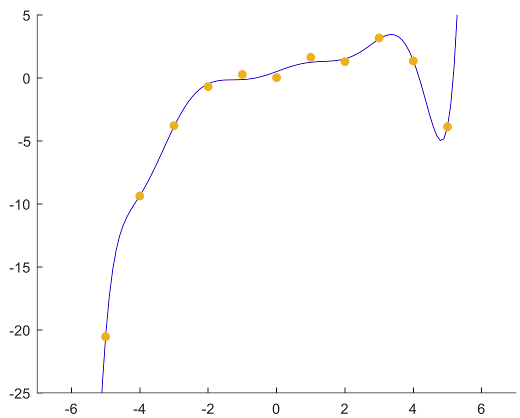
Normalny	Zastosowanie QR
0.461377540106936	0.461377540106956
0.187149762345457	0.187149762345500
0.126348708259072	0.126348708259061
0.154261112053812	0.154261112053795
-0.0250004330065372	-0.0250004330065359
-0.00731643790849811	-0.00731643790849668
-1.34624183006210e-05	-1.34624183006532e-05
0.000140384570494897	0.000140384570494863
Norma Euklidesowa	
1.16675886705854	1.16675886705854
Norma Czebyszewa	
0.743152825997564	0.743152825997526

n=8:



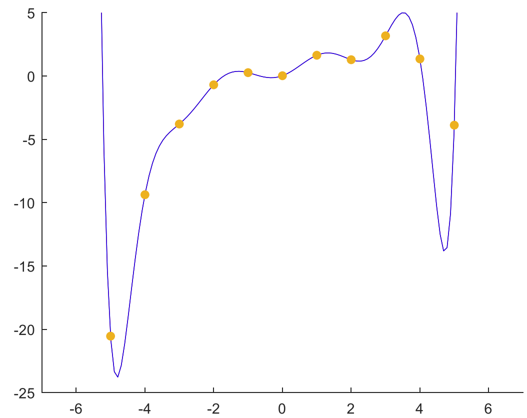
Normalny	Zastosowanie QR
0.503019166900946	0.503019166901212
0.187149762345457	0.187149762345499
0.0629680985249019	0.0629680985244957
0.154261112053812	0.154261112053796
-0.0106065998560424	-0.0106065998559509
-0.00731643790849811	-0.00731643790849671
-0.00101773617560426	-0.00101773617561061
0.000140384570494897	0.000140384570494864
2.10981881786476e-05	2.10981881787806e-05
Norma Euklidesowa	
1.16263118043556	1.16263118043556
Norma Czebyszewa	
0.751481151356356	0.751481151356382

n=9:



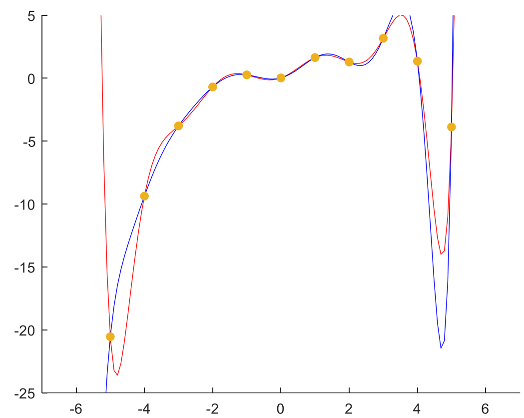
Normalny	Zastosowanie QR
0.503019166900946	0.503019166901206
0.994156468256948	0.994156468253984
0.0629680985249019	0.0629680985244618
-0.388858384040599	-0.388858384038787
-0.0106065998560424	-0.0106065998559438
0.0866493460651103	0.0866493460648113
-0.00101773617560426	-0.00101773617561106
-0.00560979001324510	-0.00560979001322728
2.10981881786476e-05	2.10981881787893e-05
0.000112359733245488	0.000112359733245145
Norma Euklidesowa	
0.817226196575504	0.817226196575505
Norma Czebyszewa	
0.479119166900946	0.479119166901206

n=10:



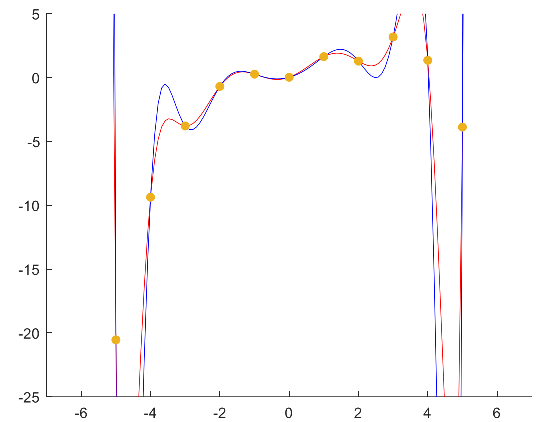
Normalny	Zastosowanie QR
0.0239000000174453	0.0238999999999510
0.994156468256948	0.994156468254160
1.48746745432516	1.48746745436492
-0.388858384040599	-0.388858384038870
-0.644129755550594	-0.644129755566482
0.0866493460651103	0.0866493460648236
0.0914910717570412	0.0914910717592450
-0.00560979001324510	-0.00560979001322796
-0.00517557126310627	-0.00517557126322674
0.000112359733245488	0.000112359733245158
9.68007054651487e-05	9.68007054673581e-05
Norma Euklidesowa	
2.14268326013179e-11	5.14647471514917e-13
Norma Czebyszewa	
1.74453264334407e-11	2.54130050336698e-13

n=11:



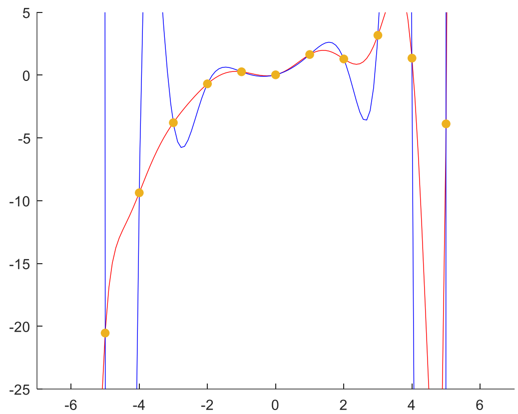
Normalny	Zastosowanie QR
0.0239000000174453	0.0238999999995096
0.987778448102887	0.728472243061427
1.48746745432516	1.48746745436516
-0.379523442880505	0
-0.644129755550594	-0.644129755566528
0.0832632374507776	-0.0544031471016797
0.0914910717570412	0.0914910717592474
-0.00515668483179854	0.0132648601514994
-0.00517557126310627	-0.00517557126322674
8.79992396204425e-05	-0.000902406404643443
9.68007054651487e-05	9.68007054673569e-05
4.42918065898546e-07	1.84502934161567e-05
Norma Euklidesowa	
2.13730352613700e-11	2.01115969633489e-12
Norma Czebyszewa	
1.74453264334407e-11	1.45350398383926e-12
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 3.183481e-26.	

n=12:

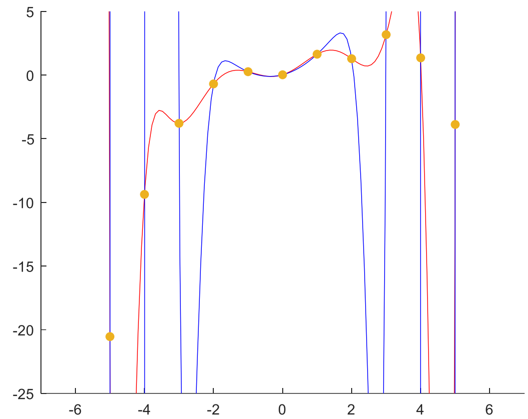


Normalny	Zastosowanie QR
0.0238999995825860	0.0238999999997556
0.987778448102894	0.728472243060666
1.32970472206164	1.04737120839192
-0.379523442880506	0
-0.413226466431492	0
0.0832632374507776	-0.0544031471015622
0.00773439839596166	-0.142157247718419
-0.00515668483179854	0.0132648601514762
0.00603215625736370	0.0260895995445902
8.79992396204425e-05	-0.000902406404641987
-0.000505765290409222	-0.00158412245624359
4.42918065898547e-07	1.84502934161282e-05
1.09557453809726e-05	3.05622393038389e-05
Norma Euklidesowa	
6.53338638388460e-10	3.28166988990365e-12
Norma Czebyszewa	
4.17414037362507e-10	1.60760293965723e-12
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 7.047181e-28.	

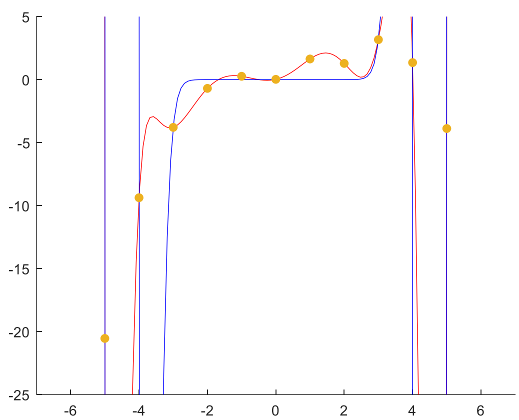
n=15:



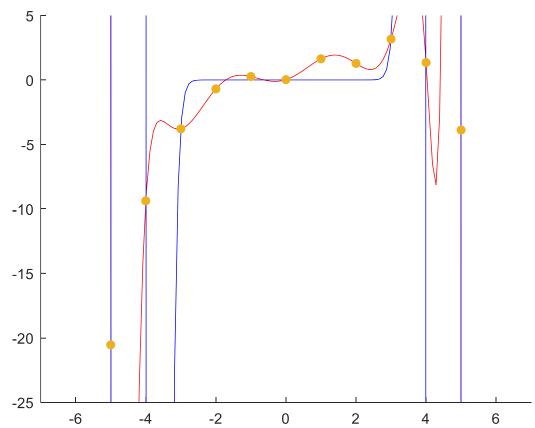
n=20:



n=30:



n=40:



Można zauważyć że dla $n \in [1,9]$ wykresy funkcji pokrywały się, a wyniki liczbowe były bardzo do siebie zbliżone. Wraz ze wzrostem stopnia wielomianu aproksymacja funkcji staje się coraz dokładniejsza, co wynika z coraz większej ilości zmiennych.

Dla n=10 widać znaczne zmniejszenie się błędów, a także różnicę ich wartości dla obu sposobów. Gdy n przyjmuje wartości większe od 10 widoczna jest rozbieżność wykresów funkcji. Ponadto Matlab przed podaniem wyników układu normalnego zwraca nam komunikat:

‘Warning: Matrix is close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 3.183481e-26.’

Wartość RCOND maleje z coraz to większym n. Wartość ta jest swego rodzaju współczynnikiem uwarunkowania macierzy. Dla macierzy dobrze uwarunkowanej wartość ona bliska 1, natomiast dla złej bliska 0. Macierze stopnia większego niż 10 są więc coraz gorzej uwarunkowane, przez co działania na nich nie są dokładne, wyników nie można uznać za poprawne. Zastosowanie metody QR działa poprawnie, z uwagi na lepsze uwarunkowanie. Przy wielomianach stopnia W(x) > 20 Matlab daje kolejne ostrzeżenia.

‘Warning: Rank deficient, rank = 6, tol = 9.066035e+06. ‘

Dotyczą one błędu z rzędem macierzy, co może wynikać z wartości tak małych, że są zaokrąglanie do zera. Dane również są obarczone błędem, co może mieć na to wpływ. Można więc stwierdzić, że dalsza aproksymacja nie będzie poprawna.

Podsumowując, możemy zauważyć, że do przybliżenia wystarczy wielomian stopnia o jeden mniejszy od zadanej ilości punktów. Metody dla wyższych stopni wręcz nie liczą przybliżenia, lecz wielomiany przechodzące przez te punkty. Wykorzystywanie większych zasobów obliczeniowych niż potrzeba jest nieopłacalne.