Метод за апроксимация на данни, зададени с грешки при измерването на двете променливи

Стефан Тодоров и Нина Богданова

Институт за ядрени изследвания и ядрена енергетика,Българска академия на науките, бул. Цариградско шосе 72, 1784 София,
e-mail: todorov_st@yahoo.com nibogd@inrne.bas.bg

РезюмеДискутиран е метод за апроксимация на експериментални данни разработен от авторите. За целта е използвана математична техника за развитие по ортогонални полиноми. Методът е приложим към данни, описващи процес, при който са дадени стойностите на зависимата и на независимата променливи, както и грешките, с които тези стойности са известни. Дискутирани са принципите на метода и критериите за неговото използване. Даден е физически пример за приложение на метода.

1.Увод

При апроксимация на експериментални данни от две променливи x, y свързани с функционална зависимост $y = f(x)$, често се налага използуване на методи, отчитащи наличие на грешки при измерването и на двете променливг. Такъв метод е даден напр. в [1] и др.и сега наричан Метод на ефективната дисперсия (Effective variance method- EVM). Друг е мощният метод MINUIT, [2] прилаган в европейския център CERN. Методът, дискутиран тук, си служи с развитие по ортонормални полиноми (Orthonormal polynomial expansion method-OPEM) на зададената числено функция и за фитиране на данни, свързани с полиномиална зависимост. Предварителен вариант на OPEM се съдържа напр. в препринта [3] и в окончателен вид в [4]. Едно начално развитие на OPEM се отнася за фитиране на данни с грешки само по зависимата променлива за едномерен и многомерен случай, прилаган в работата [5]. Методът OPEM използува идеи на Бевингтон [6] и Форсайт [7].

Поради свои качества от програмен и изчислителен характер OPEM е конкурентно способен с MINUIT и EVM при полиномиално фитиране на данни [4].

2. Същност и приложение на метода OPEM

Изходните данни получени от експеримента, необходими за приложение на метода са следните: x, y и грешките σ_{x}, σ_{y}.: $x = x_i$, $y = y_i$, i = 1, 2, 3, ….M. Прилагатат се следните съотношения на метода OPEM, които след това се допълват с други релации, описващи стандартните отклонения по двете променливи. Използуват се полиномите $\{ P_i^{(0)} ,\ i = 1,2,3,.....\}$ и техните производни $\{ P_i^{(m)} \ ,\ \ m = 1,2,3,.....,\ i = 1,2,3,.....\}\}$. Полиномите и техните производни се генерират с помощта на рекурентно съотношение.

Полиномите удовлетворяват следните съотношения за ортогоналност и нормировка

$$\sum_{i=0}^{N} w_i P_k^{(0)}(h_i) P_l^{(0)}(h_i) = \delta_{kl}$$

върху точковото множество $\{ h_i ,\ i = 1,2,3,.....\ M \}$ където .

$$w_i = \frac{1}{\sigma_y{}^2}\ , \qquad ,\quad i = 1,2,3,.....\ M\ ,$$

са съответните тегла свързани с $i-$та точка.

Апроксимиращата функция y^{appr} и нейната производна $y^{(m)appr}$ се построяват, както следва:

$$y^{(m)appr}(h) = \sum_{i=1}^{N} a_i\ P_i^{(m)}(h) = \sum_{i=1}^{N} c_i h^i\ . \tag{1}$$

Тук коефициентите a_k се пресмятат по формулата:

$$a_i = \sum_{k=1}^{M} y_k w_k P_i^{(m)}(h_k)\,.$$

Познаването на a_k дава възможност да се пресметнат коефициентите c_k в развитие по обикновени полиноми от (1).

Въвежда се и тотална грешка S по формулата:

$$S^2 = \sigma_y^2 + [\partial y^{appr} / \partial x]^2 \sigma_x^2 \tag{2}$$

В израза за квадрата на грешката S присъстват грешките и по двете променливи. Чрез производната във формула (2) грешката по x ефективно се отнася към грешка на зависимата променлива y, следвайки идеи на Бевингтон [6].

Нека с n = 1, 2, 3,…., да означим номера на апроксимацията y_n^{appr} , съответно $y_n^{(m)appr}$ извършена от алгоритъма. Използуват се следните два критерия за избор на оптимална дължина N на сумата в (1) или все едно на оптимална степен на апроксимиращия полином :

Първи критерий:

А) Графиката на апроксимиращата крива при първа апроксимация n = 1 трябва да лежи в коридора на грешките

$$y_1^{appr}(x) \in [\, y-\sigma(y),\ y+\sigma(y)\,]\,,\ x = x_i, y = y_i, \qquad (3)$$

определен от неточностите σ_y само на зависимата променлива y.

Б) Графиката на апроксимиращата крива при втора и следващи апроксимации, т. е. n > 1, трябва да лежи в пълния коридор на грешките (4)

$$y_n^{appr}(x) \in [\, y-S_n(y),\ y+S_n(y)\,]\,,\ x = x_i,\ y = y_i, \qquad (4)$$

където S_n^2 се дава с израза:

$$S_n^2 = \sigma_y^2 + [\partial y_{n-1}^{appr} / \partial x]^2 \sigma_x^2\,. \qquad (5)$$

Забелязваме, че във формула (5) стойността на производната е взета от предишната апроксимация.

Втори критерий:

За всяка апроксимация, n = 1, 2, 3,…., величината

$$\chi_n^2 = \sum_{i=1}^{M} [y_n^{appr}(x_i) - y_i]^2 w_n(x_i)$$

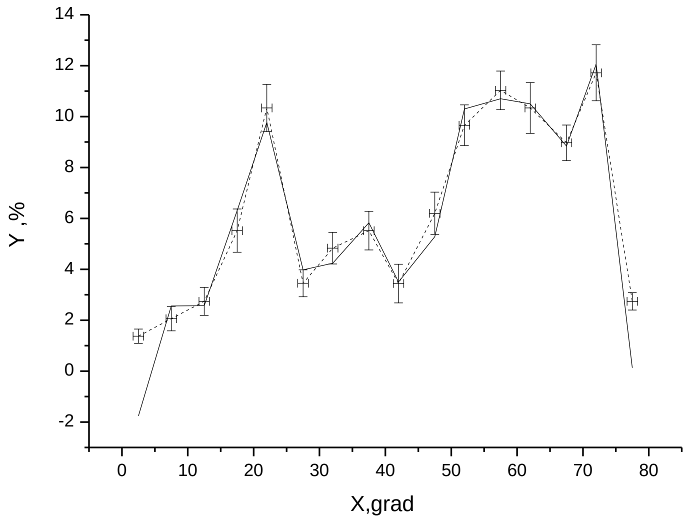
трябва да достига минимум, където теглата се дава със следващата формула:

$$w_n(x_i) = \frac{1}{S_n^2}\ , \quad x = x_i, \quad i = 1,2,3,\ldots.\ M\ ,$$

където S_n^2 се дава с израза (5).

Предимство се дава на първия критерий. Когато той е удовлегворен, алгоритъма спира търсенето на минимума на χ^2.

На фигура 1 е показана графиката на апроксимация на данни с полином от 13 степен. Данните са получени при измерване на контактния ъгъл на водна капка базирана върху неомокряема подложка в процеса на нейното изпарение. По ос x са нанесени стойностите на контактния ъгъл, а по ос y е нанесена вероятността за измерване на даден ъгъл. Около експерименталните точки са показани хоризонтални и вертикални отсечки отговарящи на грешките при измерването по x ,у.Апроксимиращата крива лежи даже в коридора на грешките (3) освен за първата и последна точка, където се намира в пълния коридор на грешките (4) .



Фиг. 1 Апроксимция на данни с полином от 13 степен, получени от измерване на контактния ъгъл на водна капка базирана върху подложка в процеса на нейното изпарение.Експерименталните точки /свързани с пунктирна линия/ са точките на пресичане между хоризонталните и вертикални отсечки, показващи грешките при измерването по x и y По ос x са нанесени стойностите на контактния ъгъл, а по ос y е нанесена вероятността за измерване на даден ъгъл.

3. Заключение

ОРЕМ предлага надежден алгоритъм за полиномиална апроксимация на данни с грешки и по двете променливи. Още при първите няколко апроксимации полученото приближение вече лежи в пълния коридор на грешките. Поради свои качества от програмен и изчислителен характер ОРЕМ е конкурентно способен с други налични апроксимационни методи.

Литература

[1]. J. Orear, Am.J.Phys. **50** (1982) 912.
[2]. F.James and L.M.Roos, MINUIT CERN Report, D506 MINUIT (1989).
[3]. N. Bogdanova, *Commun. JINR*, *Dubna*, **E11-98-3** (1998).
[4]. N. Bogdanova, S. Todorov, *Int. J. Modern Physics C*, **12** (2001) 119-126.
[5]. N. Bogdanova, J. Comp. Applied Mathematics**, 14** (1986) 345.
[6] P.R. Bevington, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*, McGrow-Hill, New York, 1985.
[7]. G.Forsythe, J.Soc. Ind.Appl. Math. **5** (1957) 74.