

PL9700858



PL9700858

RAPORTY IChTJ. SERIA B nr 10/96

**APROKSYMACJA ZA POMOCĄ
WIELOMIANOWYCH REGRESYJNYCH
FUNKCJI SKLEJANYCH**

Piotr Urbański

Warszawa 1996

PL

ZESPÓŁ REDAKCYJNY

dr Wiktor Smulek, Ewa Godlewska, Sylwester Wojtas

WYDAWCA

Instytut Chemii i Techniki Jądrowej

ul. Dorodna 16, 03-195 Warszawa

tel.: (0-22) 11 06 56; telex: 813027 ichtj pl; fax: (0-22) 11 15 32;

e-mail: sekdyrn@orange.ichtj.waw.pl

Raport został wydany w postaci otrzymanej od Autora

Aproksymacja za pomocą wielomianowych regresyjnych funkcji sklepanych

Przedstawiono zasady stosowania wielomianowych funkcji sklepanych, oraz algorytmy i programy ich wyznaczania. Programy opracowane w środowisku MATLAB są głównie przeznaczone do aproksymacji widm promieniowania X i mogą być wykorzystane przy wyznaczaniu wielowymiarowych modeli procedur wzorcowania radiometrycznej aparatury pomiarowej.

Function approximation with polynomial regression splines

Principles of the polynomial regression splines as well as algorithms and programs for their computation are presented. The programs prepared using software package MATLAB are generally intended for approximation of the X-ray spectra and can be applied in the multivariate calibration of radiometric gauges.

SPIS TREŚCI

1. REGRESYJNE FUNKCJE SKLEJANE	7
2. APROKSYMACJA WIDM	7
3. APROKSYMACJA DOWOLNYCH PRZEBIEGÓW	8
WYDRUKI	9

1. REGRESYJNE FUNKCJE SKLEJANE

Równanie regresyjnej wielomianowej funkcji 3 stopnia można przedstawić w postaci:

$$s = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + \sum_{j=1}^k b_{j+k} (x - xw_j)_+^3 \quad (1)$$

gdzie:

$$(x-xw_j)_+ = x - xw_j \text{ dla } x > xw_j, \\ = 0 \text{ dla } x \leq xw_j;$$

xw_j - położenie węzłów;

k - liczba węzłów;

s - funkcja sklejana.

Dla funkcji sklejaney nie wyższego stopnia niż 3 zaleca się aby:

- * węzły znajdowały się w tych samych punktach co dane pomiarowe.
- * co najmniej 4 - 5 obserwacji powinno mieścić się pomiędzy węzłami.
- * nie więcej niż jedno ekstremum i jeden punkt przegięcia powinien wypadać pomiędzy węzłami (ponieważ wielomian 3 - stopnia nie może dopasowywać się do kilku ekstremów).
- * ekstrema powinny znajdować się w środku pomiędzy węzłami, a punkty przegięcia powinny wypadać możliwie blisko węzłów.

2. APROKSYMACJA WIDM

Funkcja sklejan

$$[rk, dz, s] = \text{sklej}(y, w)$$

Jeżeli widmo jest zmierzone w kanałach od 1 do m , a wartości zliczeń w tych kanałach tworzą wektor y to równanie (1) można zapisać w postaci:

$$y = bX' \quad (2)$$

gdzie:

b - wektor współczynników regresji [$1 \times (k+4)$],

X - macierz zmiennych niezależnych [$m \times (k+4)$].

Kolumnami macierzy X są kolejno: wektor $\mathbf{1}$, wektor \mathbf{x} (kolejnych numerów kanałów x od 1 do m), wektory \mathbf{x}^2 , \mathbf{x}^3 oraz wektory $(\mathbf{x} - \mathbf{xw}_j)_+^3$ w ilości zależnej od wyznaczonej ilości węzłów.

Rozwiązanie równania (2) w języku MATLAB jest proste:

$$b = y / X' \quad (3)$$

Szukana funkcja sklejana s wynosi:

$$s = bX' \quad (4)$$

Jako miary jakości dopasowania, można przyjąć:

rk - sumę kwadratów odchylenia funkcji aproksymującej od wartości wektora y,

dz - sumę kwadratów wartości drugiej pochodnej s.

$$rk = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m [(y - s)|_i]^2 \quad (5)$$

$$dz = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^n \left(\frac{d^2 s}{dx^2} \Big|_i \right)^2 \quad (6)$$

Program realizujący powyższy algorytm został napisany w języku MATLAB jako funkcja *sklej.m* o parametrach wyjściowych:

y - wektor wierszowy widm zapisany w kanałach od 1 do m,

w - wektor węzłów.

Wektor węzłów można podać w dwóch postaciach:

- * liczby naturalnej większej od 4 określającej liczbę kanałów pomiędzy węzłami. W tym wypadku węzły będą rozłożone równomiernie.
- * wektora wierszowego zawierającego w kolejności rosnącej numery kanałów, w których mają być umieszczone węzły.

Wektor taki trzeba wprowadzić z klawiatury do przestrzeni roboczej programu.

Parametrami wyjściowymi funkcji są rk, dz i s. W okienku graficznym znajduje się wykres s (linia ciągła) i y (punkty) w funkcji numerów kanałów. Siatka na osi odciętych jest poprowadzona przez punkty węzłowe wektora xw_j .

3. APROKSYMACJA DOWOLNYCH PRZEBIEGÓW

Funkcja *fsklej.m*

$s = fsklej.m [x1, y, x2, k, l]$

Funkcja *fsklej.m* wyznacza współczynnik regresji **b** (1) funkcji sklejanej ze zbiorów $x1$ i y oraz wyznacza wartość tej funkcji dla zmiennej $x2$.

$x1$, y i $x2$ są wektorami wierszowymi, k jest liczbą węzłów, a l stopniem wielomianu.

Węzły są rozmieszczone równomiernie w punktach pomiarowych $x1$, z tym, że między węzłami musi znajdować się co najmniej pięć punktów. Stopień wielomianu l może być równy 1, 2 lub 3.

Wektory $x1$ i y muszą mieć tę samą liczbę elementów, natomiast wektor $x2$ może mieć dowolną liczbę elementów o wartościach w przedziale $(x1_{min} \ x1_{max})$.

W przypadku wprowadzenia $l = 0$, parametrem wyjściowym funkcji będzie $x2$. Gdy $k = 0$ to wszystkie obliczenia zostaną wykonane dla wielomianu stopnia 1.

```

function [rk,d2,s] = sklej(y,w)
%aproxymacja widma - funkcja sklejana 3 stopnia
%-----
m=length(y);
x=1:m;
if length(w)==1
    h=w;
    if h<5
        error('ZA DUZO WEZLOW')
    end
    k=fix((m-1)/h);
    xw=zeros(1,k);
    for i=1:k
        xw(i)=x(1)+i*h;
    end
    if x(m)-xw(k)<5
        xw(k)=0;
        k=k-1;
    end
elseif length(w)>1
    k=length(w);
    xw=w;
end
%formowanie macierzy X
X=zeros(m,k+4);
X(:,1)=ones(m,1);
X(:,2)=x';
X(:,3)=x'.^2;
X(:,4)=x'.^3;
for i=1:m
    for j=1:k
        if x(i)<=xw(j)
            X(i,j+4)=0;
        elseif x(i)>xw(j)
            X(i,j+4)=(x(i)-xw(j)).^3;
        end
    end
end
end
b=y/X';
s=b*X';
rk=sum((y-s).^2)/m;
d2=sum(diff(diff(s)).^2)/m;
close
plot(s)
hold on
plot(y, '.')
hold off
set(gca, 'XTick', xw)
set(gca, 'TickLength', [0.5 0])

```

FSKLEJ.M

```

function s=fsklej(x1,y,x2,k,l)
%wyznacza wsp. regresji funkcji sklejanej do 3 stopnia, ze
%zbiorow x1 i y oraz wyznacza wartosc tej funkcji dla zmiennej x2.
%wektory x1,y,x2 sa wierszowe, k - liczba wezlow,
%l - stopien wielomianu (l<4). s jest wektorem kolumnowym.
%-----
if l>3
    error('ZA WYSOKI STOPIEN WIELOMIANU')
end
if l==0
    s=x2';
else
    n=length(x1);
    if k>=1
        xw=zeros(1,k);
        xx=sort(x1);
        d=fix((n-1)/(k+1));
        if d<5
            error('ZA DUZO WEZLOW')
        end
        alfa=n-d*(k+1);
        iw=zeros(1,k+1);
        iw(1)=1;
        for j=2:k+1
            if alfa>0
                iw(j)=d+1+iw(j-1);
            else
                iw(j)=d+iw(j-1);
            end
        end
        for i=2:(k+1)
            xw(i-1)=xx(iw(i));
        end
    end
    ster=0;
    while ster<2
        if ster==0
            x=x1;
        elseif ster==1
            x=x2;
            n=length(x2);
        end
        X=zeros(n,l+k+1);
        for i=0:l
            X([1:n],i+1)=x'.^i;
        end
        if k>=1
            for i=1:n
                for j=1:k
                    if x(i)<=xw(j)
                        X(i,j+1+1)=0;
                    elseif x(i)>xw(j)
                        X(i,j+1+1)=(x(i)-xw(j))'.^1
                    end
                end
            end
        end
    end
end

```


Symbol UKD: 721.3

Symbol INIS: D22

Słowa kluczowe: APARATURA POMIAROWA, PROGRAMY, WYMIAROWE MODELE
WZORCOWANIA