Numerická aproximace závislostí z nepřesných dat (měření)

B. Salajová[1] and F. E. Holtslag[2]

[1]G Litoměřická, Praha; salajova.bara@gmail.com
[2]G Jana Opletala, Litovel; felilala@email.cz

J. Pšikal, školitel; KLFF FJFI ČVUT

Abstrakt

Tento miniprojekt se věnuje numerické aproximaci závislosti z nepřesných dat fyzikálního měření. Zpravidla lze naměřená data popsat danou závislostí, která obsahuje určité konstanty. V případě závislosti účinných průřezů rezonančního rozptylu neutronů $g(E_i)$ na jejich energii E_i se v závislosti nachází právě tři konstanty. Ty lze nalézt pomocí metody nejmenších čtverců. Díky ní lze získat soustavu tří nelineárních rovnic, kterou lze následně vyřešit Newton–Raphsonovou metodou pro získání hledaných parametrů.

1 Úvod

Fitování dat je problém, se kterým se setkávají vědci po celém světě. Problém, jak z tabulky plné čísel získat hledanou závislost, je řešitelný numericky. Nejjednodušším řešením je naměřené hodnoty lineárně interpolovat, ale to obvykle nevede k nejpřesnějším výsledkům.

Pokud je možné měřené veličiny matematicky popsat určitým vztahem, tak lze pro aproximaci využít metodu nejmenších čtverců. Tato metoda se řadí mezi jedny z nejpřesnějších. Snaha je, aby byla data proložena funkcí $f(x)$, která minimalizuje velikost funkcionálu S. Pro ten platí [1]:

$$S = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} \left[y_i - f(x_i)\right]^2} \tag{1}$$

σ_i - absolutní chyba měření
y_i - naměřená hodnota pro dané x_i
$f(x_i)$ - hodnota hledané funkce f pro dané x_i
n - počet pozorovaných hodnot

K nalezení minima nelineární funkce se využívá derivace. Pro derivaci dané funkce v minimu platí, že je rovna nule.

Tato práce se věnuje aproximaci dat z měření účinného průřezu rezonančního rozptylu neutronů $g(E_i)$ v závislosti na jejich energii E_i pomocí metody nejmenších čtverců. Tuto závislost popisuje vztah:

$$g(E) = f(E) = \frac{a_1}{(E - a_2)^2 + a_3} \tag{2}$$

kde a_1, a_2 a a_3 zastupují neměnné konstanty. Právě tyto konstanty bylo cílem určit z předem naměřených dat s využitím programu Python a Maple.

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
E_i (MeV)	0	25	50	75	100	125	150	175	200
$g(E_i)$ (MB)	10.6	16.0	45.0	83.5	52.8	19.9	10.8	8.3	4.7
σ_i (MB)	9.34	17.9	41.5	85.5	51.5	21.5	10.8	6.29	4.14

Tabulka 1: Experimentálně změřená data [2]

2 Aproximace dat

Prvním krokem při zpracovávání dat bylo určit, kdy bude funkcionál S nejmenší. To nastane ve chvíli, kdy bude výraz

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sigma_i^2} \left[y_i - f(x_i)\right]^2 \tag{3}$$

v minimu. Jelikož jsou známa z měření právě hodnoty y_i, neboli $g(E_i)$, a hodnoty x_i, neboli E_i, tak hledané neznámé představují konstanty a_1, a_2 a a_3. Hodnoty E_i a $g(E_i)$ se nacházejí v tabulce 1 pro všech devět měření. Výraz (3) lze přepsat do následujícího tvaru:

$$\tilde{S} = \sum_{i=1}^{9} \frac{1}{\sigma_i^2} \left[g(E_i) - f(a_1, a_2, a_3)\right]^2 \tag{4}$$

u kterého jsou hledány koeficienty a_1, a_2 a a_3 takové, aby byl výraz (4) minimální. Jak již bylo řečeno výše, tak tento stav nastane ve chvíli, kdy budou parciální derivace výrazu (4) podle a_1, a_2, a_3 nulové. Proto platí:

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial a_1} = 0, \ \frac{\partial \tilde{S}}{\partial a_2} = 0, \ \frac{\partial \tilde{S}}{\partial a_3} = 0. \tag{5}$$

Tyto derivace byly vyjádřeny v programu (systém počítačové algebry) Maple. Díky tomu byla získána soustava tří rovnic o třech neznámých (6)-(8):

$$h_1 = \sum_{i=1}^{9} \frac{g(E_i) - \frac{a_1}{(E_i - a_2)^2 + a_3}}{\sigma_i^2 \left[(E_i - a_2)^2 + a_3\right]} = 0 \tag{6}$$

$$h_2 = \sum_{i=1}^{9} \frac{\left(g(E_i) - \frac{a_1}{(E_i - a_2)^2 + a_3}\right) a_1 \left(E_i - a_2\right)}{\sigma^2 \left[(E_i - a_2)^2 + a_3\right]^2} = 0 \tag{7}$$

$$h_3 = \sum_{i=1}^{9} \frac{\left(g(E_i) - \frac{a_1}{(E_i - a_2)^2 + a_3}\right) a_1}{\sigma^2 \left[(E_i - a_2)^2 + a_3\right]^2} = 0 \tag{8}$$

Tyto rovnice byly následně řešeny Newton–Raphsonovou metodou. Ta je založena na principu linearizace rovnic pomocí parciálních derivací jejich levých stran. Pro okolí určitého bodu platí tzv. Taylorův rozvoj, kde je pro malou velikost možné zanedbat vyšší členy řady. Díky tomu lze vytvořit lineární soustavu rovnic, kterou lze řešit pomocí matic (9). První matice zleva se nazývá Jacobiho matice a značí se **J**. Pro tento způsob je ale potřeba nejprve určit přibližný odhad neznámých a_1, a_2, a_3, které se budou metodou následně zpřesňovat.

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial a_1} & \frac{\partial h_1}{\partial a_2} & \frac{\partial h_1}{\partial a_3} \\ \frac{\partial h_2}{\partial a_1} & \frac{\partial h_2}{\partial a_2} & \frac{\partial h_2}{\partial a_3} \\ \frac{\partial h_3}{\partial a_1} & \frac{\partial h_3}{\partial a_2} & \frac{\partial h_3}{\partial a_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta a_1^{(k)} \\ \delta a_2^{(k)} \\ \delta a_3^{(k)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} h_1\left(\overrightarrow{a}^{(k)}\right) \\ h_2\left(\overrightarrow{a}^{(k)}\right) \\ h_3\left(\overrightarrow{a}^{(k)}\right) \end{pmatrix} \tag{9}$$

Díky tomu lze zjistit $\overrightarrow{\delta a}$, tedy zpřesnit předchozí řešení.

$$\overrightarrow{a}^{(k+1)} = \overrightarrow{a}^{(k)} + \overrightarrow{\delta a}^{(k)} \tag{10}$$

Nové přesnější řešení získáme:

$$\overrightarrow{a}^{(k+1)} = \overrightarrow{a}^{(k)} - \left[\mathbf{J}\overrightarrow{h}\left(\overrightarrow{a}\right)\right]^{-1} \cdot \overrightarrow{h\left(\overrightarrow{a}^{(k)}\right)} \tag{11}$$

Tato metoda byla provedena v Pythonu s 10 iteracemi. Jacobiho matice **J** byla vypočtena metodou centrální diference. Počáteční hodnoty parametrů byly odhadnuty následovně:

$$\overrightarrow{a}^{(0)} = \begin{pmatrix} 44\,000 \\ 75 \\ 440 \end{pmatrix}$$

Po aplikování metody vyšly konečné hodnoty parametrů:

$$\overrightarrow{a}^{(10)} = \begin{pmatrix} 70878.19256022 \\ 78.1875406 \\ 875.2339167 \end{pmatrix}$$

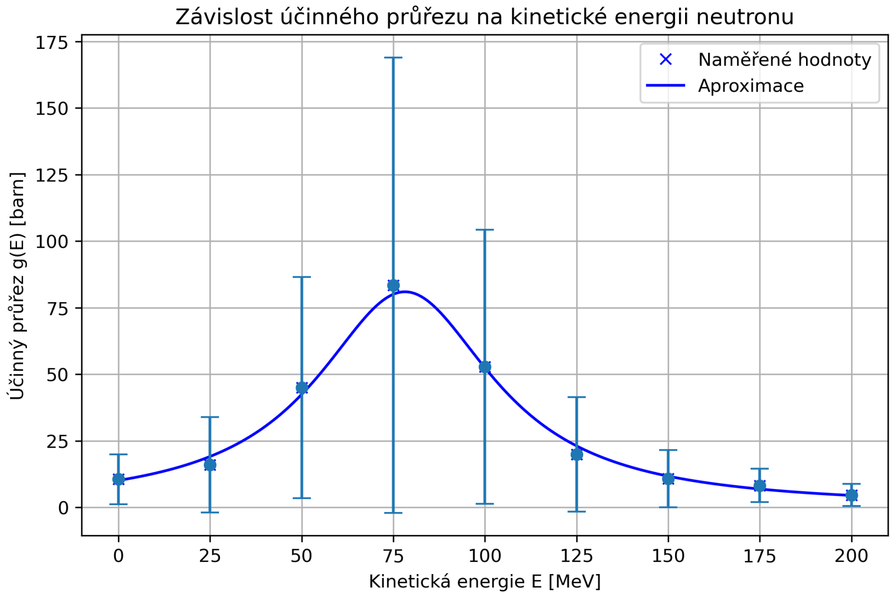
3 Závěr

Pomocí metody nejmenších čtverců a Newton–Raphsonovy metody byla nalezena funkce, která bez velké odchylky fituje naměřená data účinného průřezu rezonančního rozptylu neutronů $g(E_i)$ v závislosti na jejich energii E_i. Hodnoty parametrů byly zpřesněny z prvotního odhadu deseti iteracemi. Výsledný vztah pro hledanou závislost je:

$$f(E) = \frac{70\,878}{(E-78)^2 + 875} \tag{12}$$

Přesné hodnoty parametrů a_1, a_2, a_3 pro naměřená data jsou:

$$\overrightarrow{a}^{(10)} = \begin{pmatrix} 70878.19256022 \\ 78.1875406 \\ 875.2339167 \end{pmatrix}$$



Obrázek 1: Naměřené hodnoty včetně absolutních chyb a graf fitované funkce

Poděkování

Rády bychom poděkovali za možnost účastnit se během TV@J tohoto miniprojektu. Především chceme poděkovat našemu školiteli J. Pšikalovi za všechnu pomoc při řešení a zpracování.

Odkazy

1. PŠIKAL, J. *Aplikované numerické metody - cvičení (12ANM)* [`https://jpsikal.github.io/anm`]. 2025. Accessed: 2025-06-24.
2. R. H. LANDAU M. J. Páez, C. C. B. *Computational Physics (Problem Solving with Python)*. WILEY-VCH GmbH, Německo, 2024.