Laboratorio di Informatica T (Ch10)

Interpolazione Polinomiale Esatta

Interpolazione Polinomiale Esatta

Per il composto acido formico:

- Vogliamo determinare come varia la pressione di saturazione P^*…
- …In funzione della temperatura T, sopra il punto di fusione

Abbiamo a disposizione i seguenti dati sperimentali:

	Pressione, mmHg										Punto di fusione, °C
	1	5	10	20	40	60	100	200	400	760	
	Temperatura, °C										
acido formico	-20.0	-5.0	2.1	10.3	24.0	32.4	43.8	61.4	80.3	100.6	8.2

- Vogliamo determinare la pressione per ogni temperatura

Un possibile approccio:

- Possiamo provare a tracciare una curva…
- …Che soddisfi tutte le osservazioni sperimentali

Interpolazione Polinomiale Esatta

Innanzitutto preparo i dati:

```
% Temperatura (°C) e Pressione (Torr)
T = [-20,-5,2.1,10.3,24,32.4,43.8,61.4,80.3,100.6];
P = [1, 5, 10, 20, 40, 60, 100, 200, 400, 760];
Tf = 8.2; % Temperatura di fusione (°C)
% Trasformo le temperature in °K
T = T + 273.15;
Tf = Tf + 273.15;
% Considero i punti sopra la temperatura di fusione
P = P(T > Tf) % Uso T per selezione una parte di P
T = T(T > Tf) % Quindi rimpiazzo T
```

- **Nota:** per restringere il campo ai valori sopra la temperature di fusione…
- …Abbiamo usato una indicizzazione con vettore di valori logici

Interpolazione Polinomiale Esatta

Che tipo di curva andremo a costruire?

- Potremmo usare un polinomio…
- …Con un parametro per ogni osservazione sperimentale

Ragionando così, dovremmo usare un polinomio di 7° grado

$$\alpha_7 t_0^7 + \alpha_6 t_0^6 + \alpha_5 t_0^5 + \alpha_4 t_0^4 + \alpha_3 t_0^3 + \alpha_2 t_0^2 + \alpha_1 t_0 + \alpha_0 = p_0$$

$$\alpha_7 t_1^7 + \alpha_6 t_1^6 + \alpha_5 t_1^5 + \alpha_4 t_1^4 + \alpha_3 t_1^3 + \alpha_2 t_1^2 + \alpha_1 t_1 + \alpha_0 = p_1$$

$$\alpha_7 t_2^7 + \alpha_6 t_2^6 + \alpha_5 t_2^5 + \alpha_4 t_2^4 + \alpha_3 t_2^3 + \alpha_2 t_2^2 + \alpha_1 t_2 + \alpha_0 = p_2$$

$$\ldots$$

- Un parametro $\boldsymbol{\alpha_j}$ per ogni monomio
- Una equazione per ogni coppia $\boldsymbol{t_i}, \boldsymbol{p_i}$ di misurazioni

Interpolazione Polinomiale Esatta

A questo punto possiamo impostare un sistema lineare:

- Per costruire la matrice dei coefficienti…
- …Sfruttiamo il fatto che tutte le equazioni hanno la stessa struttura

Possiamo costruirla per concatenazione di colonne!

```
T = T' % T diventa un colonna
A = [T.^7, T.^6, T.^5, T.^4, T.^3, T.^2, T, T.^0]
```

A questo punto possiamo risolvere il sistema:

```
P = P' % il vettore delle pressioni diventa una colonna
x = A \ P
```

Interpolazione Polinomiale Esatta

Questo tipo di problema è molto comune

Si parla di interpolazione polinomiale esatta

- Trovare una curva polinomiale…
- …Che intercetti una serie di punti noti…
- …E non debba soddisfare alcuna condizione addizionale

Matlab mette a disposizione una funzione per risolverli:

```
P = polyfit(X, Y)
```

- `X` è il vettore con le coordinate x
- `Y` è il vettore con le coordinate y
- `P` contiene i coefficienti del polinomio interpolante

Interpolazione Polinomiale Esatta

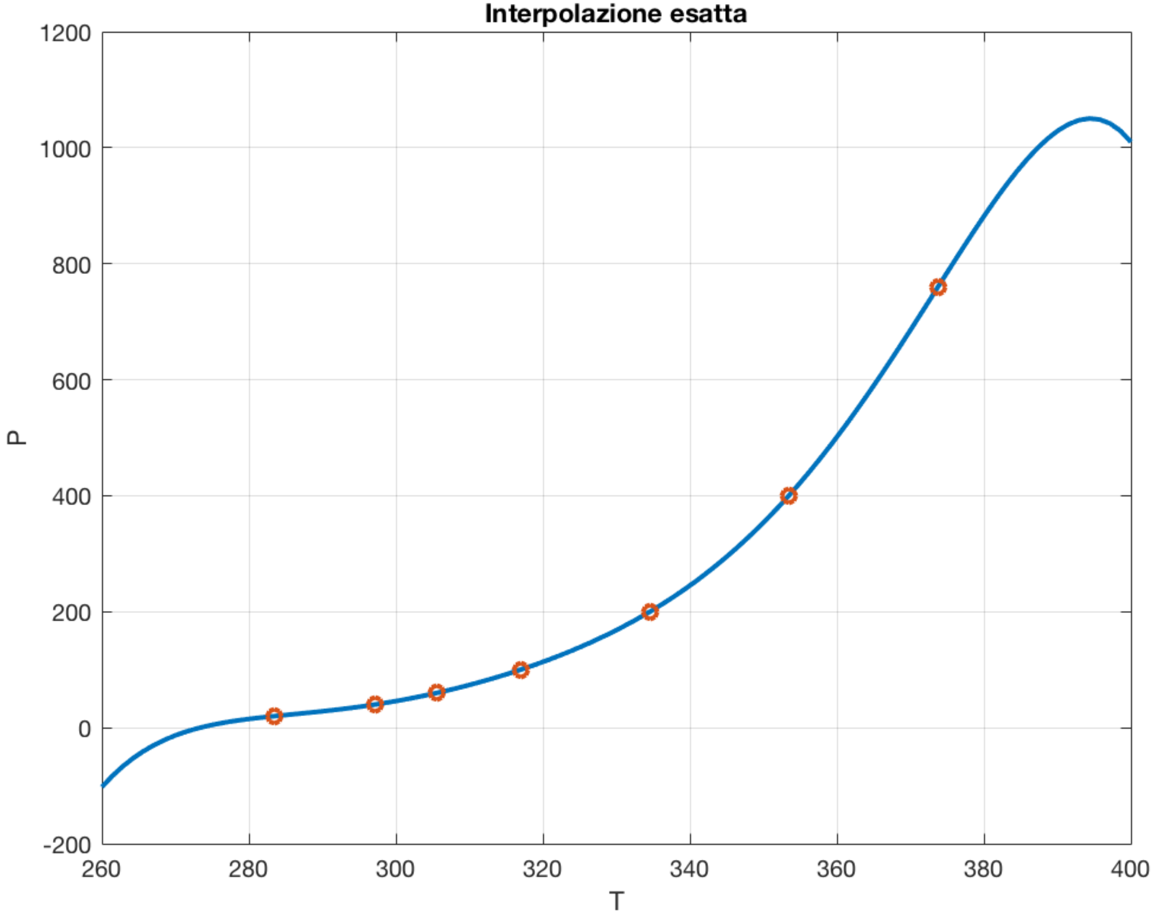
Proviamo ad usarla:

```
p = polyfit(T, P, length(T)-1);

figure();
t = linspace(260, 400);
plot(t, polyval(p, t), 'linewidth', 2);
hold on
scatter(T, P, 'linewidth', 2);
hold off
grid()
xlabel('T')
ylabel('P')
```

Interpolazione Polinomiale Esatta

Purtroppo, il risultato lascia desiderare…



- All'"esterno" dei punti noti, l'andamento non ha senso fisico
- Il polinomio è di grado alto e può variare in modo troppo brusco

Interpolazione Lineare a Tratti

Interpolazione Lineare a Tratti

Come possiamo ovviare il problema?

Un primo approccio semplicissimo:

- Tra ogni coppia di misurazioni…
- …Assumiamo che la funzione sia lineare

Così otteniamo una approssimazione lineare a tratti

In Matlab la possiamo calcolare con:

```
y = interp1(X, Y, x)
```

- `X`, `Y` sono le coordinate x ed y dei punti noti
- `x` contiene i valori di x per cui si desidera la valutazione
- `y` è il valore dell'approssimazione nei punti desiderati

Interpolazione Lineare a Tratti

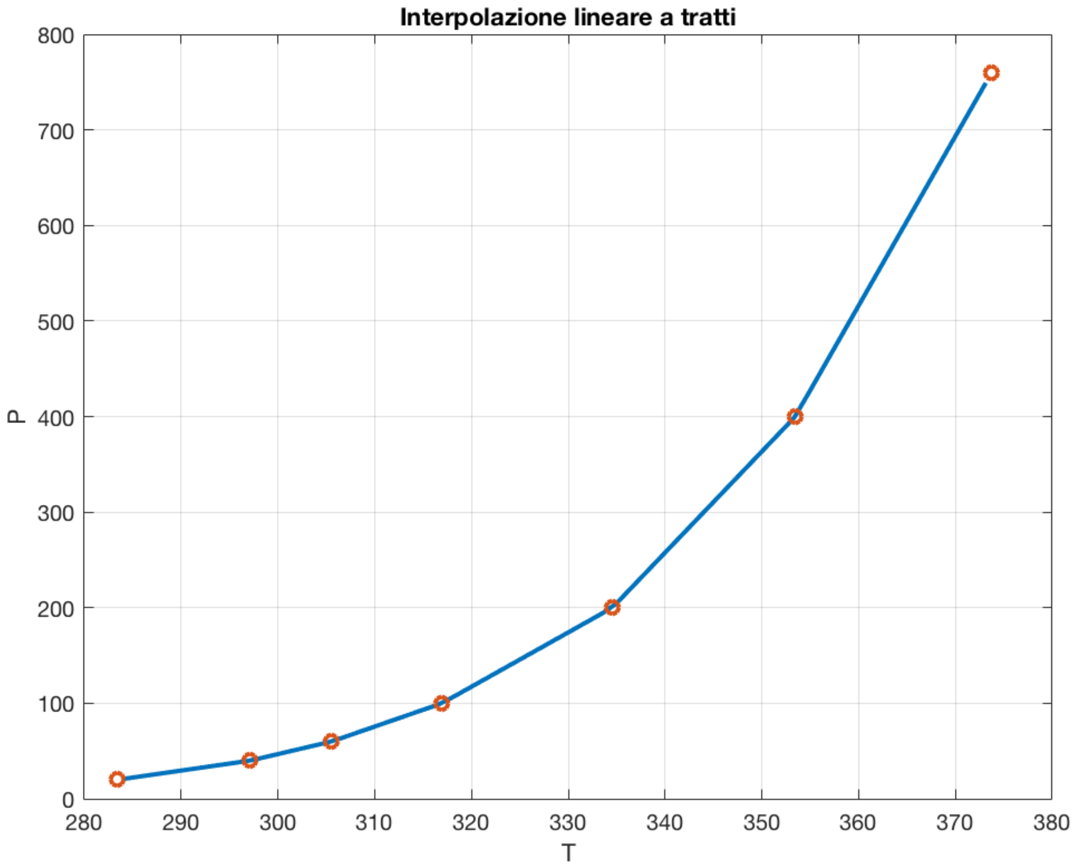
Nel nostro caso, potremmo avere:

```
% Funzione che calcola l'approssimazione
f = @(t) interp1(T, P, t)

figure();
t = linspace(260, 400);
plot(t, f(t), 'linewidth', 2);
hold on
scatter(T, P, 'linewidth', 2);
hold off
grid()
xlabel('T')
ylabel('P')
title('Interpolazione lineare a tratti');
```

Interpolazione Lineare a Tratti

Va molto meglio!



- Ma cosa succede all'esterno del range?
- E se abbiamo poche misurazioni? O se sono inaffidabili?

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Idealmente, dovremmo limitare il grado dell'approssimazione

Per esempio, potremmo impostare:

$$\begin{aligned}
\alpha_2 t_0^2 + \alpha_1 t_0 + \alpha_0 &= p_0 \\
\alpha_2 t_1^2 + \alpha_1 t_1 + \alpha_0 &= p_0 \\
\alpha_2 t_2^2 + \alpha_1 t_2 + \alpha_0 &= p_0 \\
\alpha_2 t_3^2 + \alpha_1 t_3 + \alpha_0 &= p_0 \\
&\dots
\end{aligned}$$

Alle equazioni corrisponde un sistema:

$$Ax = b$$

- Purtroppo il sistema che si ottiene è tipicamente sovradeterminato
- Troppe equazioni, pochi gradi di libertà $\Rightarrow$ nessuna soluzione

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Metodo dei minimi quadrati

Potremmo però risolvere il sistema in senso approssimato:

- Misuriamo l'errore in base ai residui del sistema lineare

$$E = Ax - b$$

- Minimizziamo il quadrato della norma dell'errore:

$$\min_x \|E\|^2 = \min_x \|Ax - b\|^2$$

Perché il quadrato dell'errore?

- Considera come errore sia i residui positivi che quelli negativi
- Penalizza i grandi errori in modo maggiore
- Ma soprattutto, si deriva facilmente!

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Il problema di minimizzazione:

$$\min_x \|Ax - b\|^2$$

Si riduce ad un secondo sistema lineare:

$$A^T A x = A^T b$$

Da cui si ottengono le cosiddette equazioni normali:

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b$$

- Il risultato è il vettore $\boldsymbol{x}$ di coefficienti…
- …Che minimizza la somma dei quadrati dei residui

Intuitivamente: i coefficienti di una buona approssimazione

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Quindi, possiamo impostare il problema come al solito

- Otteniamo una matrice **`A`** con più righe che colonne
- Otteniamo una colonna **`b`** dei termini noti

A questo punto, in teoria ci basta risolvere le equazioni normali:

```
x = (A' * A) \ (A * b)
```

In pratica, è ancora più semplice. Basta calcolare:

```
x = A \ b
```

- Matlab si accorge che **`A`** non è quadrata...
- ...E risolve le equazioni normali (senza dirci niente)

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Quindi, possiamo impostare il problema come al solito

- Otteniamo una matrice **`A`** con più righe che colonne
- Otteniamo una colonna **`b`** dei termini noti

A questo punto, in teoria ci basta risolvere le equazioni normali:

```
x = (A' * A) \ (A * b)
```

In pratica, è ancora più semplice. Basta calcolare:

```
x = A \ b
```

- **Attenzione:** La sintassi utilizzata è la stessa della divisione sinistra
- Può trarre in inganno (e.g. e se il sistema è davvero sovradeterminato?)

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

In realtà, il metodo funziona se il sistema di partenza è lineare

Questo è vero se la funzione approssimante è nella forma:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j g_j(x)$$

- I.e. una somma pesata di "funzioni base" $g_j(x)$

In generale, la nostra matrice dei coefficienti avrà questa struttura:

$$\begin{pmatrix} g_{n-1}(x_0) & g_{n-2}(x_0) & \dots & g_0(x_0) \\ g_{n-1}(x_1) & g_{n-2}(x_1) & \dots & g_0(x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n-1}(x_{m-1}) & g_{n-2}(x_{m-1}) & \dots & g_0(x_{m-1}) \end{pmatrix}$$

- Una colonna per funzione base, una riga per data point

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Torniamo a noi

Nel nostro esempio, sappiamo che vale l'equazione di Antoine:

$$P^* = e^{\left(a-\frac{b}{T}\right)}$$

- Dove $\boldsymbol{a}$ e $\boldsymbol{b}$ sono parametri da determinare empiricamente
- $\boldsymbol{a}$ è un coefficiente lineare, ma $\boldsymbol{b}$ no
- Quindi l'equazione non è nella forma corretta!

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Torniamo a noi

Nel nostro esempio, sappiamo che vale l'equazione di Antoine:

$$P^* = e^{\left(a - \frac{b}{T}\right)}$$

- Dove $\boldsymbol{a}$ e $\boldsymbol{b}$ sono parametri da determinare empiricamente
- $\boldsymbol{a}$ è un coefficiente lineare, ma $\boldsymbol{b}$ no
- Quindi l'equazione non è nella forma corretta!

Fortunatamente, è facile adattarla:

$$\ln P^* = a - \frac{b}{T} \qquad \longrightarrow \qquad \ln P^* = a + b\left(-\frac{1}{T}\right)$$

- In questo modo sia $\boldsymbol{a}$ che $\boldsymbol{b}$ sono coefficienti lineari
- Quindi possiamo applicare il metodo dei minimi quadrati!

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Impostiamo un sistema come per l'interpolazione esatta

Quindi avremo:

$$a + b\left(-\frac{1}{T_0}\right) = \ln P_0^*$$

$$a + b\left(-\frac{1}{T_1}\right) = \ln P_1^*$$

$$\ldots$$

In forma matriciale:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{T_0} \\ 1 & -\frac{1}{T_1} \\ \ldots & \ldots \end{pmatrix}}_{A} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \ln P_0^* \\ \ln P_1^* \\ \ldots \end{pmatrix}}_{b}$$

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Nel codice:

Costruiamo la matrice $\boldsymbol{A}$ e la colonna $\boldsymbol{b}$ dei termini noti:

```
T = T' % Vettore delle temperature come colonna
A = [T.^0, -1./T]
b = log(P)' % Logaritmo delle temp. come colonna
```

Risolviamo le equazioni normali:

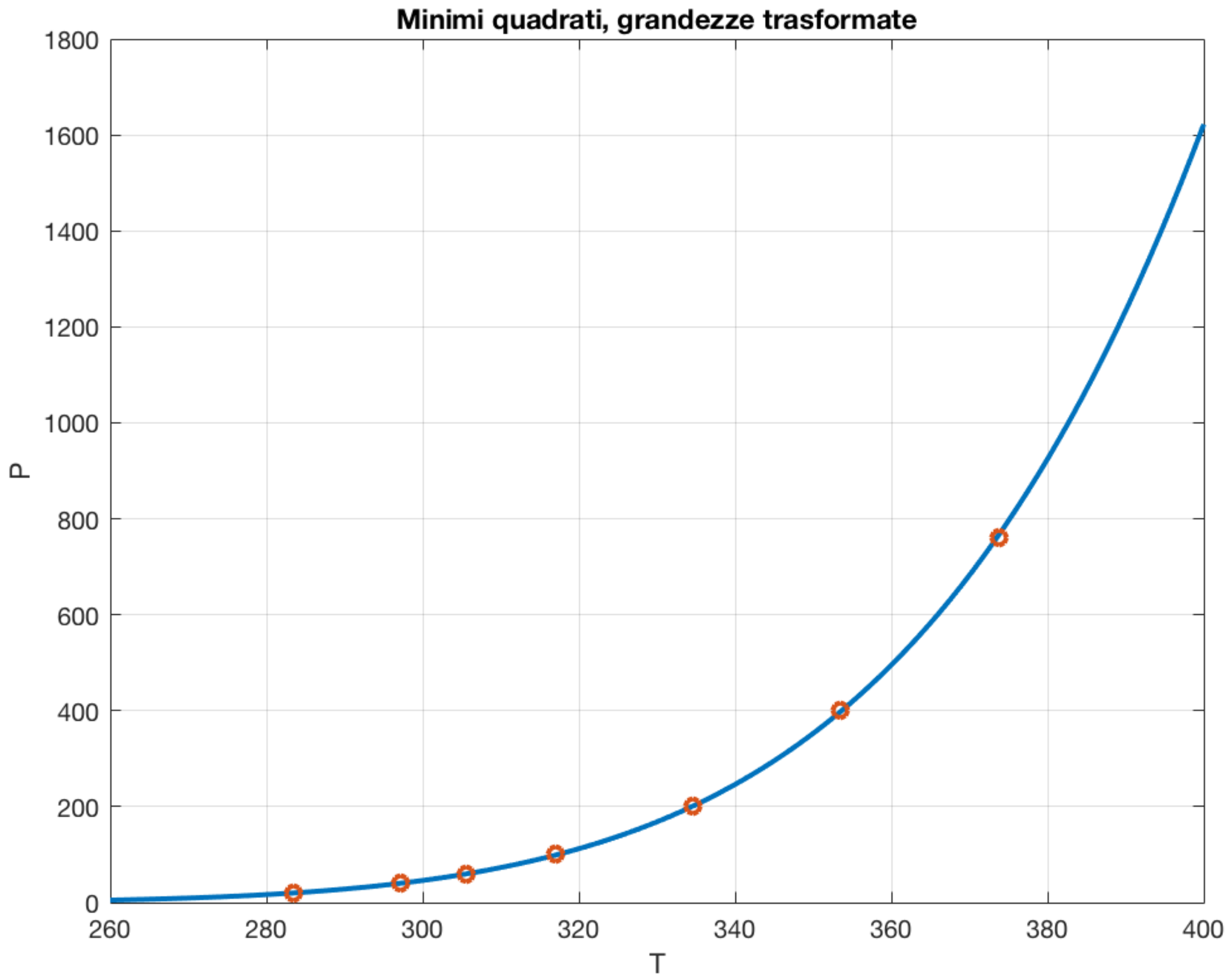
```
x = A \ b
```

- **`x(1)`** corrisponde ad **a**, **`x(2)`** a **b**
- Possiamo definire la funzione e disegnarla, e.g.

```
f = @(t) exp(a - b ./ t)
plot(T, f(T))
```

Metodo Lineare dei Minimi Quadrati

Nel nostro caso otteniamo:

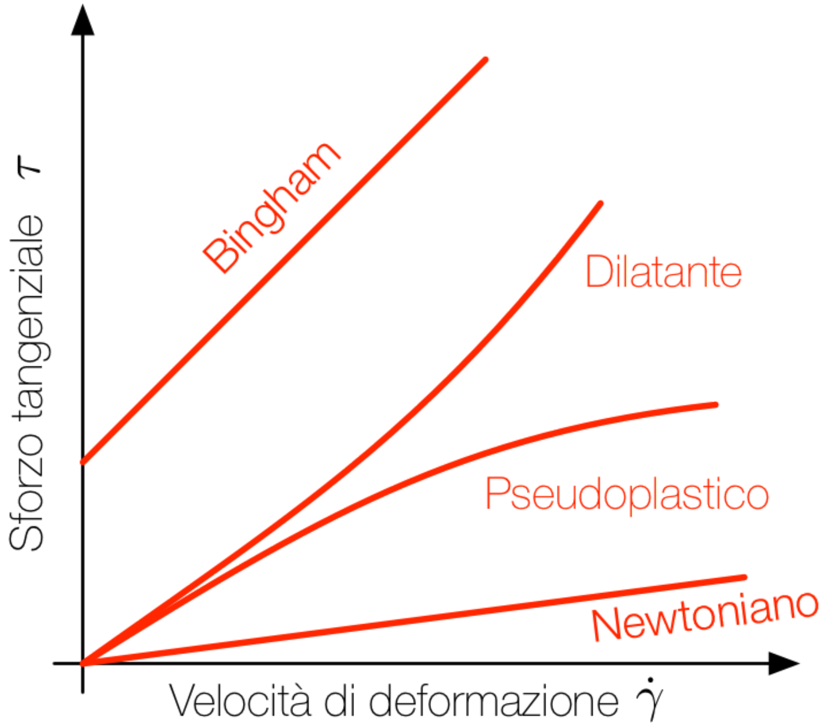


Es: Comportamento Reologico di un Fluido

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Si possono dividere i fluidi in diverse categorie…

- …In base alla relazione tra la velocità di deformazione $\dot{\gamma}$…
- …E lo sforzo tangenziale τ



Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

In particolare, distinguiamo:

Fluidi Newtoniani, per cui:

$$\tau = a\dot{\gamma}$$

Fluidi di Bingham, per cui:

$$\tau = a\dot{\gamma} + b$$

Fluidi pseudoplastici e dilatanti, per cui:

$$\tau = b\dot{\gamma}^a$$

- Se $a > 1$ il fluido è dilatante
- Se $a < 1$ il fluido è pseudoplastico

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Per due fluidi, sono stati misurati i valori di $\dot{\gamma}$ e τ

- I dati sono disponibili nei file `fluid1.xlsx` e `fluid2.xlsx`
- In Matlab si possono importare matrici da file Excel!
- Il file di script `es_fluidbehavior.m` contiene già il codice di lettura

Vogliamo determinare il tipo dei due fluidi. Per farlo:

Otterremo delle funzioni approssimanti f (via minimi quadrati)

- Verificheremo il valore del Mean Squared Error:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\tau_i - f(\dot{\gamma}_i))^2$$

È semplicemente la media dei residui al quadrato

- L'approssimazione con il minor MSE sarà tendenzialmente corretta

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Prima parte: verifica se il fluido sia di Bingham

Nel file `es_fluidbehavior.m` nello start-kit, definite la funzione:

```
function [MSE, f] = check_Bingham(DGAMMA, TAU)
```

Che prenda come parametri:

- Un vettore riga **`DGAMMA`** con i valori noti di $\dot{\gamma}$
- Un vettore riga **`TAU`** con i valori noti di τ

La funzione assume che il fluido sia di Bingham e restituisce:

- In **`MSE`** il Mean Squared Error
- Una funzione **`f`** che calcoli $\tau = f(\dot{\gamma}) = a\dot{\gamma} + b$

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Prima parte: verifica se il fluido sia di Bingham

Nel file **`es_fluidbehavior.m`** nello start-kit, definite la funzione:

```
function [MSE, f] = check_Bingham(DGAMMA, TAU)
```

- Si esegua la funzione per i dati dei due fluidi
- Si utilizzi il parametro di uscita **`f`** per disegnare:
  - La funzione approssimante, tra **`min(DGAMMA)`** e **`max(DGAMMA)`**
  - I punti noti originali

È possibile farlo utilizzando la funzione:

```
function plot_results(DGAMMA, TAU, f, t)
```

- Già definita nello start-kit

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Seconda parte: verifica se il fluido sia Newtoniano

Nel file `es_fluidbehavior.m` nello start-kit, definite la funzione:

```
function [MSE, f] = check_Newton(DGAMMA, TAU)
```

Che prenda come parametri:

- Un vettore riga `DGAMMA` con i valori noti di $\dot{\gamma}$
- Un vettore riga `TAU` con i valori noti di τ

La funzione assume che il fluido sia Newtoniano e restituisce:

- In `MSE` il Mean Squared Error
- Una funzione `f` che calcoli $\tau = f(\dot{\gamma}) = a\dot{\gamma}$

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Seconda parte: verifica se il fluido sia Newtoniano

Nel file **`es_fluidbehavior.m`** nello start-kit, definite la funzione:

```
function [MSE, f] = check_Newton(DGAMMA, TAU)
```

- Si esegua la funzione per i dati dei due fluidi
- Si utilizzi il parametro di uscita **`f`** per disegnare:
  - La funzione approssimante, tra **`min(DGAMMA)`** e **`max(DGAMMA)`**
  - I punti noti originali

È possibile farlo utilizzando la funzione:

```
function plot_results(DGAMMA, TAU, f, t)
```

- Già definita nello start-kit

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Terza parte: verifica se il fluido sia pseudoplastico o dilatante

Nel file `es_fluidbehavior.m` nello start-kit, definite la funzione:

```
function [MSE, f] = check_PowerLaw(DGAMMA, TAU)
```

Che prenda come parametri:

- Un vettore riga `DGAMMA` con i valori noti di $\dot{\gamma}$
- Un vettore riga `TAU` con i valori noti di τ

La funzione assume che il fluido segua la legge $\tau = b\dot{\gamma}^a$ e restituisce:

- In `MSE` il Mean Squared Error
- Una funzione `f` che calcoli $\tau = f(\dot{\gamma}) = b\dot{\gamma}^a$

Esercizio: Comp. Reologico di un Fluido

Terza parte: verifica se il fluido sia pseudoplastico o dilatante

Nel file **`es_fluidbehavior.m`** nello start-kit, definite la funzione:

```
function [MSE, f] = check_PowerLaw(DGAMMA, TAU)
```

- Si esegua la funzione per i dati dei due fluidi
- Si utilizzi il parametro di uscita **`f`** per disegnare:
  - La funzione approssimante, tra **`min(DGAMMA)`** e **`max(DGAMMA)`**
  - I punti noti originali

È possibile farlo utilizzando la funzione:

```
function plot_results(DGAMMA, TAU, f, t)
```

- Già definita nello start-kit

Esercizio: Qualità del Vino

Esercizio: Qualità del Vino

I due file `winequality-red.xlsx` e `winequality-white.xlsx`...

...Contengono informazioni su una serie di vini portoghesi

- L'ultima colonna contiene una stima della qualità (range 1-10)
- Le altre colonne contengono il valore di alcune proprietà fisico/chimiche

Formalmente, ogni data point è una coppia (x_i, y_i) in cui:

- y_i è la qualità del vino
- x_i un vettore con le proprietà del vino (i.e. $x_{i,0}$, $x_{i,1}$, etc.)

Vogliamo ottenere una approssimazione $f(x)$ della qualità y

- A differenza del caso precedente, $f(x)$ in questo caso è multivariata...
- ...Semplicemente perché x è un vettore!

Esercizio: Qualità del Vino

Come gestire funzioni multivariate? Nel solito modo!

Il metodo lineare dei minimi quadrati si può applicare a funzioni nella forma:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j g_j(x)$$

- Ogni α_j è un peso (da determinare), ogni $g_j(x)$ è una funzione base

Una funzione basa può utilizzare solo alcune componenti del vettore

Una scelta molto frequente:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j x_j$$

- I.e. $f(x)$ è una combinazione lineare delle componenti di x

Esercizio: Qualità del Vino

A partire dal file `es_wine.m`:

Approssimare la qualità del vino (rosso e bianco) con una funzione $f(x)$ tale che:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j x_j$$

- Andranno determinati la matrice dei coefficienti e la colonna dei termini noti
- Poi si potranno determinare i pesi α_j con il metodo dei minimi quadrati

Una volta determinati i pesi:

- Disegnare (con `histogram`) l'istogramma dell'errore di stima, i.e.:

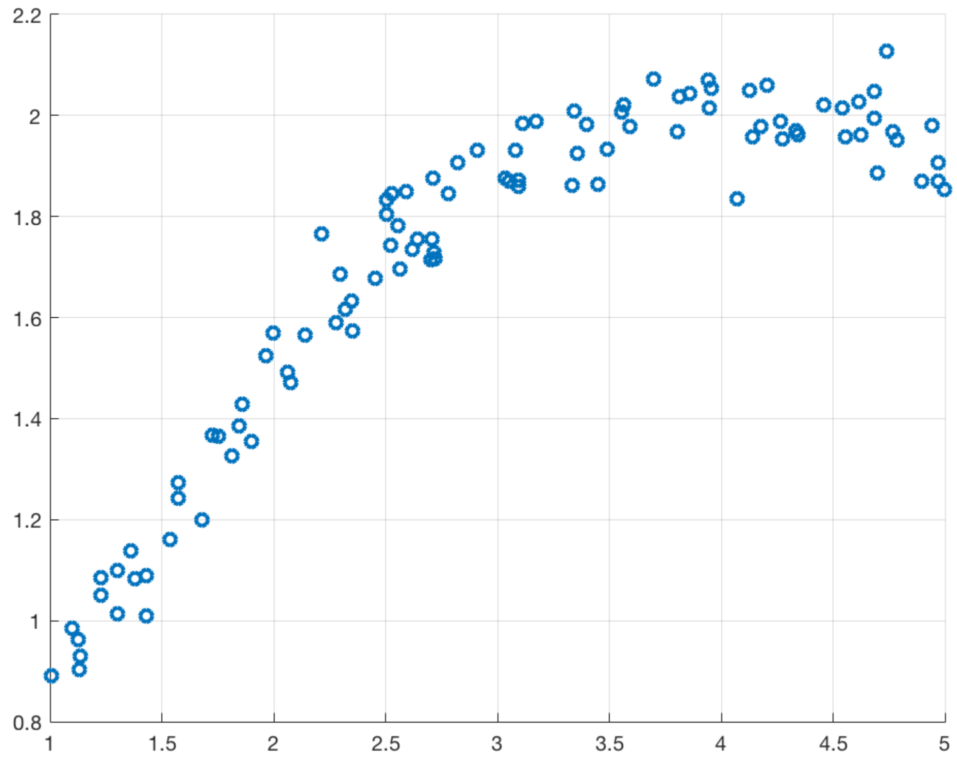
$$err(x_i) = y_i - f(x_i)$$

- Disegnare (con `bar`) un grafico a barre che mostri i valori dei pesi α
- ...Le barre più grandi corrisponderanno alle proprietà più importanti!

Esercizio: Deformazione Meccanica

Esercizio: Deformazione Meccanica

Sono date delle misure di deformazione di un pezzo meccanico



- Alle ascisse c'è la posizione originaria X di alcuni punti sul pezzo
- Alle ordinate c'è la posizione $X2$ dopo la deformazione

Esercizio: Deformazione Meccanica

Le misure non sono molto precise (sono “rumorose”)

A partire dal file `es_strain.m`:

- Approssimare relazione $X2 = F(X)$ con il metodo dei minimi quadrati
- Determinate (visivamente) il grado minimo necessario…
- …Per avere una approssimazione polinomiale adeguata

Una possibile definizione dello sforzo meccanico è data da:

$$S(X) = 1 - F'(X)$$

- Dove $F'(X)$ è la derivata di $F(X)$

Si calcoli lo sforzo meccanico per $X = 1.5$

Esercizio: Velocità di un Fluido in Condotta

Esercizio: Velocità di un Fluido in Condotta

La velocità di un fluido in una condotta varia lungo la sezione

- Tendenzialmente, la velocità è maggiore al centro
- Il profilo di velocità è simile ad una parabola

Supponiamo di avere delle misurazioni di velocità

Le misurazioni sono nella forma (x_i, y_i)

- x_i rappresenta la posizione sulla sezione della condotta
- y_i è il valore della velocità misurata
- Le posizioni degli estremi della condotta sono note

Vogliamo ricostruire l'intero profilo di velocità

Esercizio: Velocità di un Fluido in Condotta

Partite dal file `es_waterspeed.m` nello start-kit

Approssimate il profilo di velocità:

- Come funzione approssimante, utilizzate una parabola…
- …Quindi applicate il metodo dei minimi quadrati

Procedete poi a disegnare:

- Il valore del polinomio interpolante su tutta la condotta
- Utilizzando `scatter` disegnate anche le misurazioni

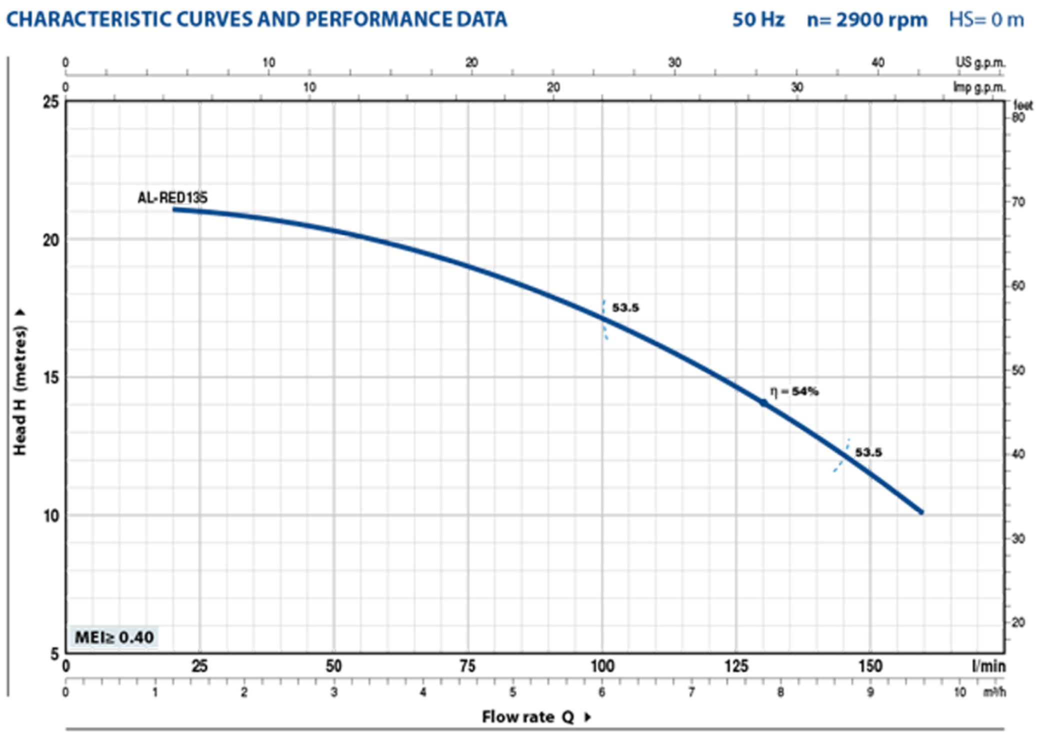
Provate quindi ad utilizzare una interpolazione polinomiale esatta

- Determinate il grado del polinomio necessario e disegnatelo
- Quale delle due curve vi sembra più realistica?

Esercizio: Prestazioni di una Pompa Centrifuga

Esercizio: Prestazione di una Pompa Centrifuga

Il diagramma di prestazione di una pompa centrifuga:



- Mostra la relazione tra la <u>portata Q</u> (alle ascisse)…
- …E la <u>prevalenza H</u> (una grandezza analoga alla pressione)

Esercizio: Prestazione di una Pompa Centrifuga

Spesso il diagramma viene definito a partire da valori noti, e.g.:

Portata (lt/s)	20	40	60	80	100	120	140	160
Prevalenza (m)	21	20.5	20	18.5	17	15	13	10

Nel file `es_pump.m` dello start-kit:

- Approssimare la curva utilizzando il metodo dei minimi quadrati
- Determinate (visivamente) il grado minimo necessario…
- …Per avere una approssimazione polinomiale adeguata
- Disegnate il polinomio approssimante ed i punti originari
- Determinate il valore di H per $Q = 90$
- Determinate lo stesso valore con una approssimazione lin. a tratti