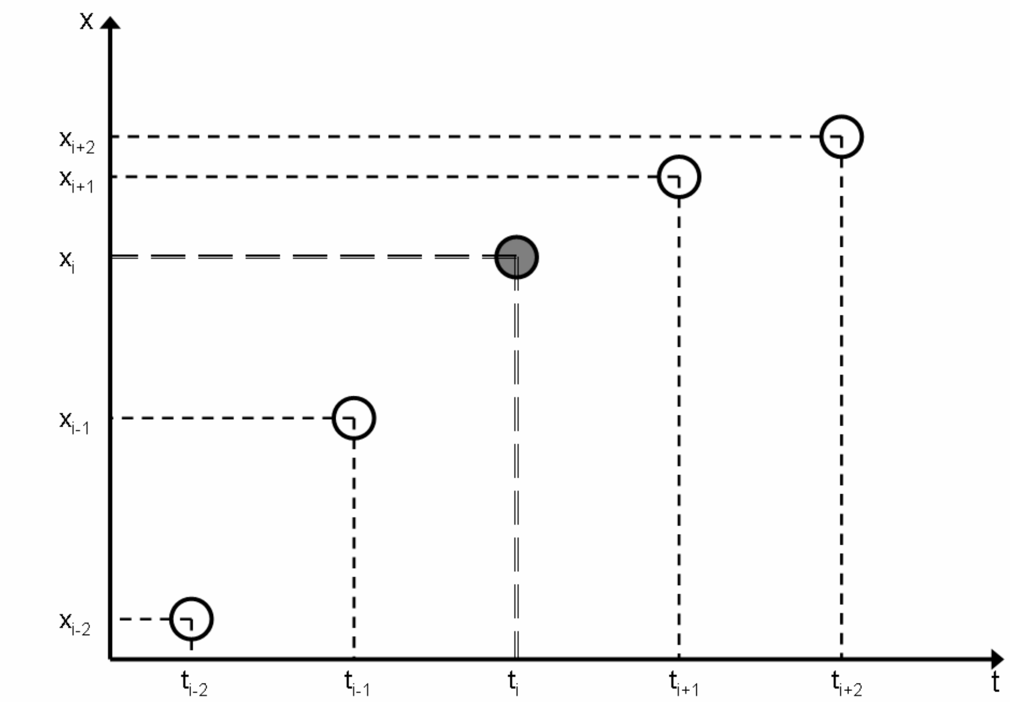
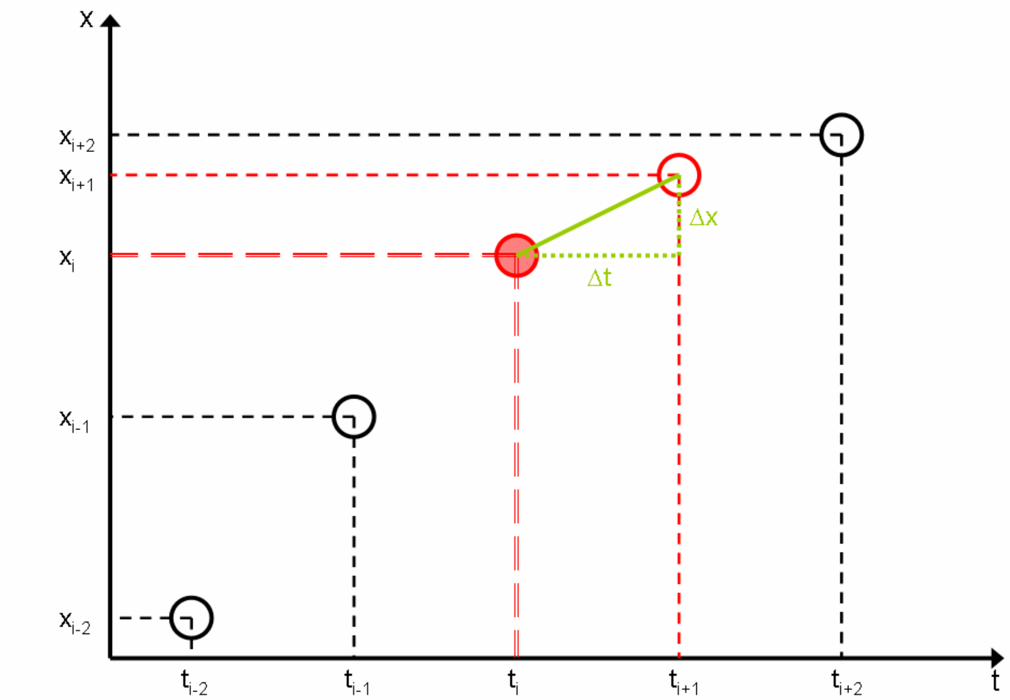
О численном взятии производной

Рассмотрим вот такую задачу. Даны некоторые экспериментальные точки, представляющие собой зависимость координаты от времени, т.е. $x(t)$:

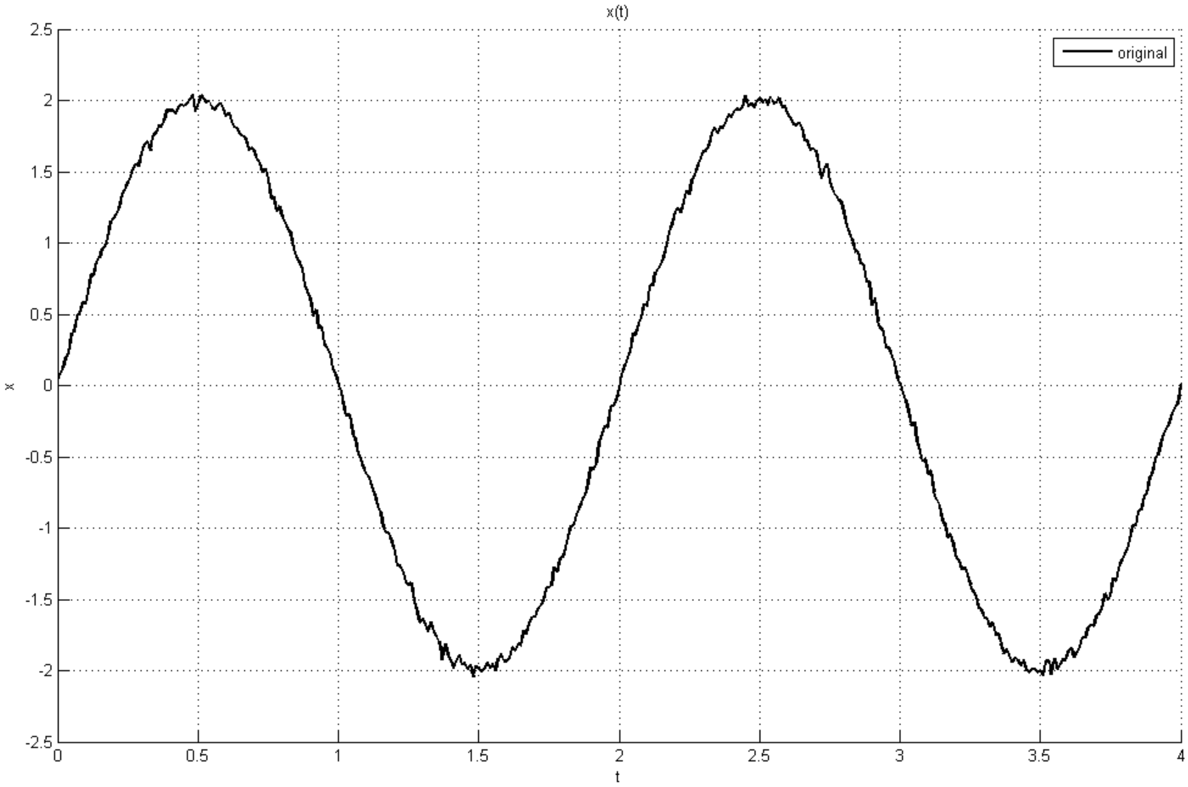


Требуется вычислить скорость, т.е. значение производной в каждый момент времени t_i.

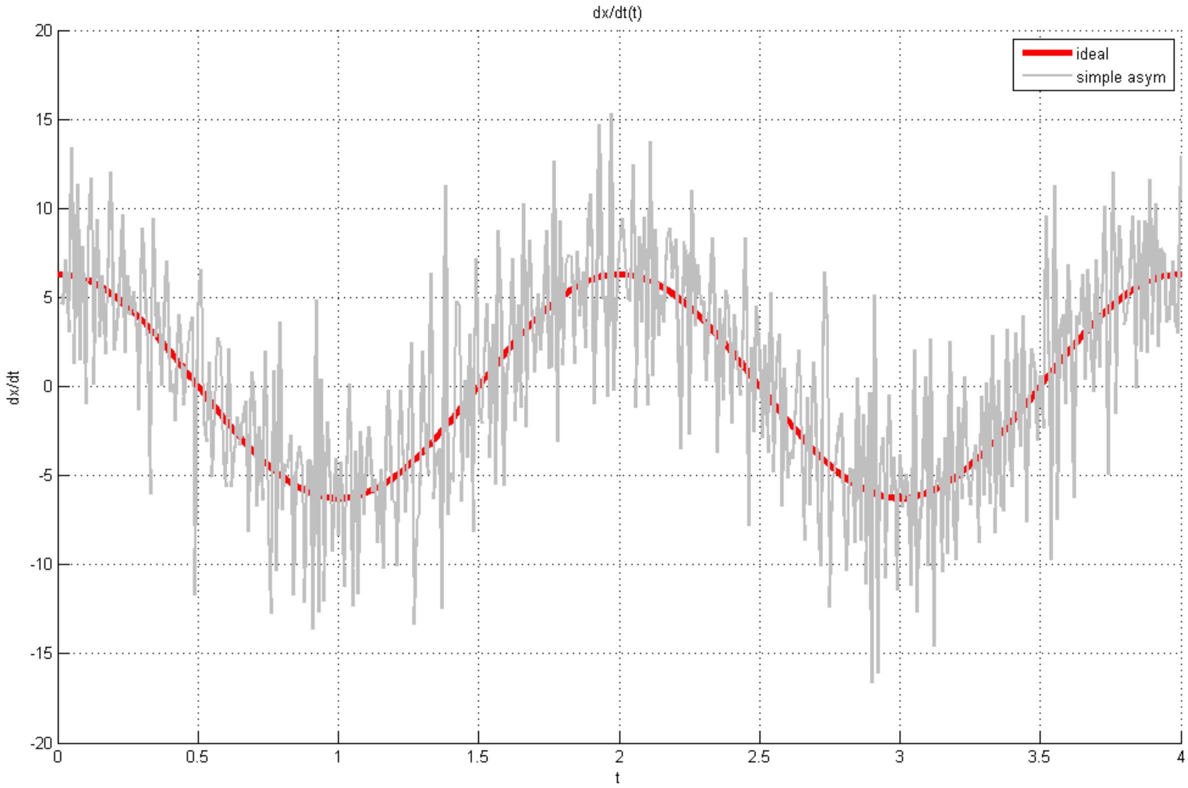
Решение, которое напрашивается самым первым – а давайте считать по определению! Т.е. $dx/dt = (x_{i+1} - x_i)/(t_{i+1} - t_i)$:



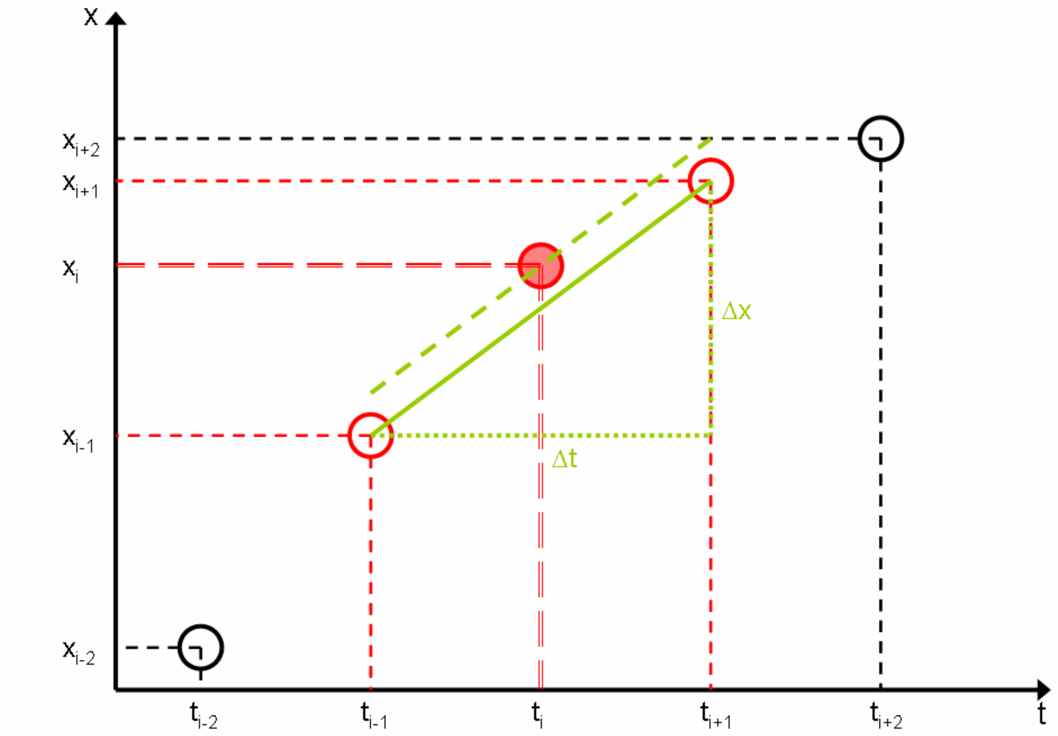
Выглядит в теории неплохо. Хотя смущает некоторая асимметрия такой производной. Но что же будет на практике?
Посмотрим вот на этого красавца-синуса, которого несколько потрепала жизнь:



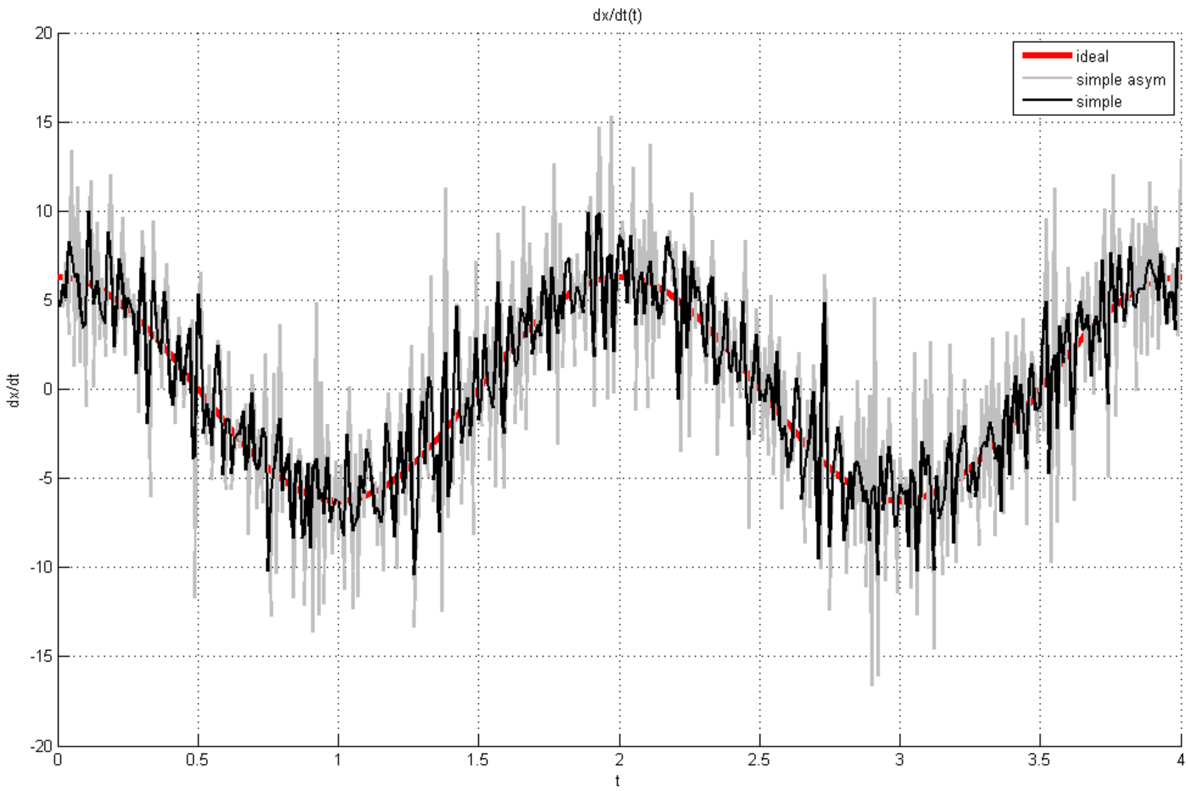
Внимательный читатель уже может заподозрить неладное. Смотрим на производную, назовём её simple asym:



О ужас! С трудом угадывается то, что мы действительно должны были получить (красная кривая). Хмм… Наверное дело в несимметричности, ок, попробуем исправить дело – $dx/dt = \left(x_{i+1} - x_{i-1}\right)/\left(t_{i+1} - t_{i-1}\right)$, назовем её simple:



То, что «треугольник» производной не проходит через нужную точку нестрашно – нам ведь нужен только угол. Проверяем на данных:



О_о, сильно лучше не стало. Почему же производной так поплохело? Давайте разберёмся внимательнее.

Мы оценивали производную вот так:

$$\frac{\widetilde{dx}}{dt}=\frac{\tilde{x}(t+\Delta t)-\tilde{x}(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$

Но реальные данные $\tilde{x}(t)$ содержат также шум, т.е. $\tilde{x}(t)=x(t)+n(t)$, подставляем:

$$\frac{\widetilde{dx}}{dt}=\frac{\tilde{x}(t+\Delta t)+n(t+\Delta t)-\tilde{x}(t-\Delta t)-n(t-\Delta t)}{2\Delta t}=\left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=[t-\Delta t;t+\Delta t]}+\frac{1}{2\Delta t}\left(n_{t+\Delta t}-n_{t-\Delta t}\right)$$

Т.е. наша оценка производной есть реальное значение производной где-то на промежутке $\left[t-\Delta t;t+\Delta t\right]$ + маленькая добавочка.

Посмотрим на свойства оценки. Её матожидание (ну или среднее значение):

$$\left\langle\frac{\widetilde{dx}}{dt}\right\rangle=\left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=[t-\Delta t;t+\Delta t]}+\frac{1}{2\Delta t}\left(\left\langle n_{t+\Delta t}\right\rangle-\left\langle n_{t-\Delta t}\right\rangle\right)$$

Если свойства шума не меняются со временем и ни о чего не зависят, то $\left\langle n_{t-\Delta t}\right\rangle=\left\langle n_{t+\Delta t}\right\rangle$ и:

$$\left\langle\frac{\widetilde{dx}}{dt}\right\rangle=\left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=[t-\Delta t;t+\Delta t]}$$

Таким образом, чем меньше Δt, тем точнее мы приближаемся оценкой к действительному значению производной. Но это в среднем! А теперь посмотрим на разброс:

$$D\left[\frac{\widetilde{dx}}{dt}\right]=D\left[\left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=[t-\Delta t;t+\Delta t]}\right]+D\left[\frac{1}{2\Delta t}\left(\left\langle n_{t+\Delta t}\right\rangle-\left\langle n_{t-\Delta t}\right\rangle\right)\right]$$

Т.к. дисперсия константы есть ноль, то первое слагаемое пропадает, а второе для случая независимых слагаемых (мы предполагаем, что шум в точках независим – это важно!) тогда превратится в:

$$D\left[\frac{\widetilde{dx}}{dt}\right]=\frac{1}{2\Delta t^2}D\left[n\right]$$

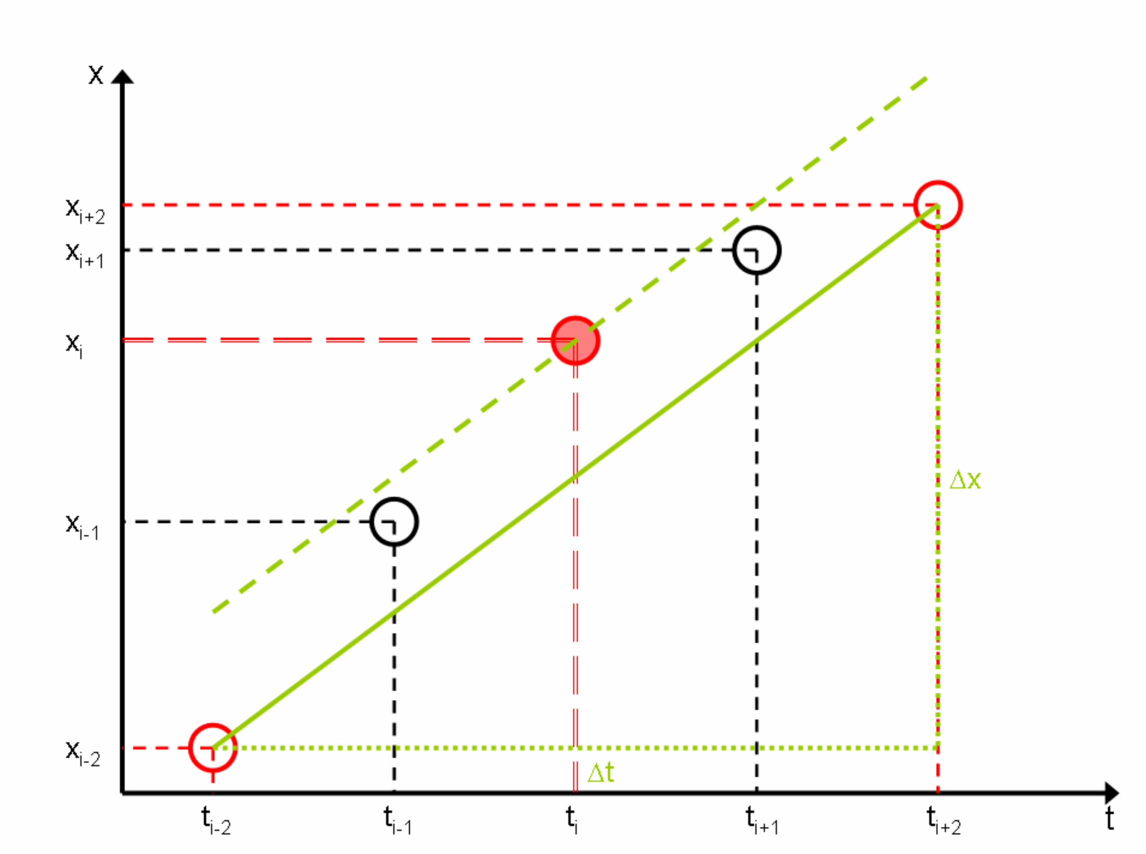
Или для среднеквадратичного отклонения:

$$\sigma\left[\frac{\widetilde{dx}}{dt}\right]=\frac{1}{\sqrt{2}\Delta t}\sigma\left[n\right]$$

Т.е. получается, что с уменьшением шага Δt среднее значение оценки приближается к реальной производной, но вот разброс оценки стремительно растёт!

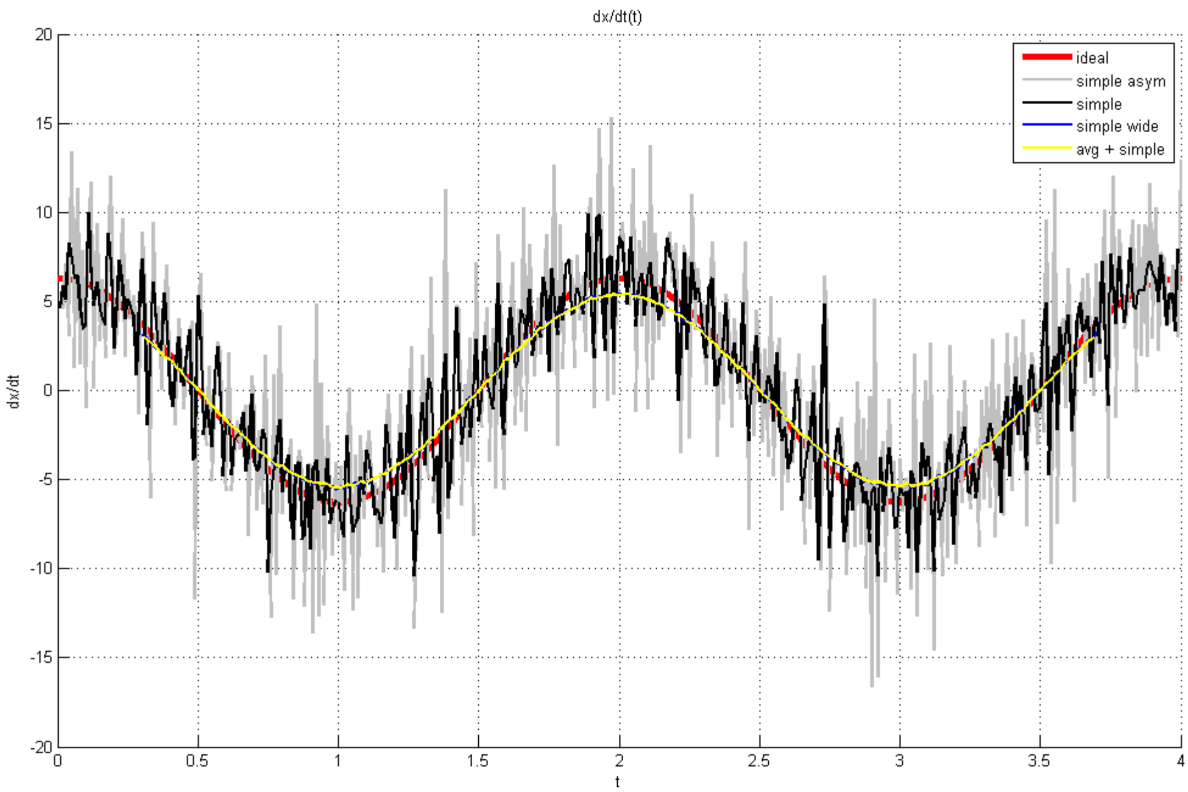
Т.е. существует некоторый баланс между уменьшением и увеличением шага. Нет смысла брать слишком маленький шаг!

Хорошо, давайте возьмём шаг больше, т.е. вот так (назовём такую оценку simple wide):

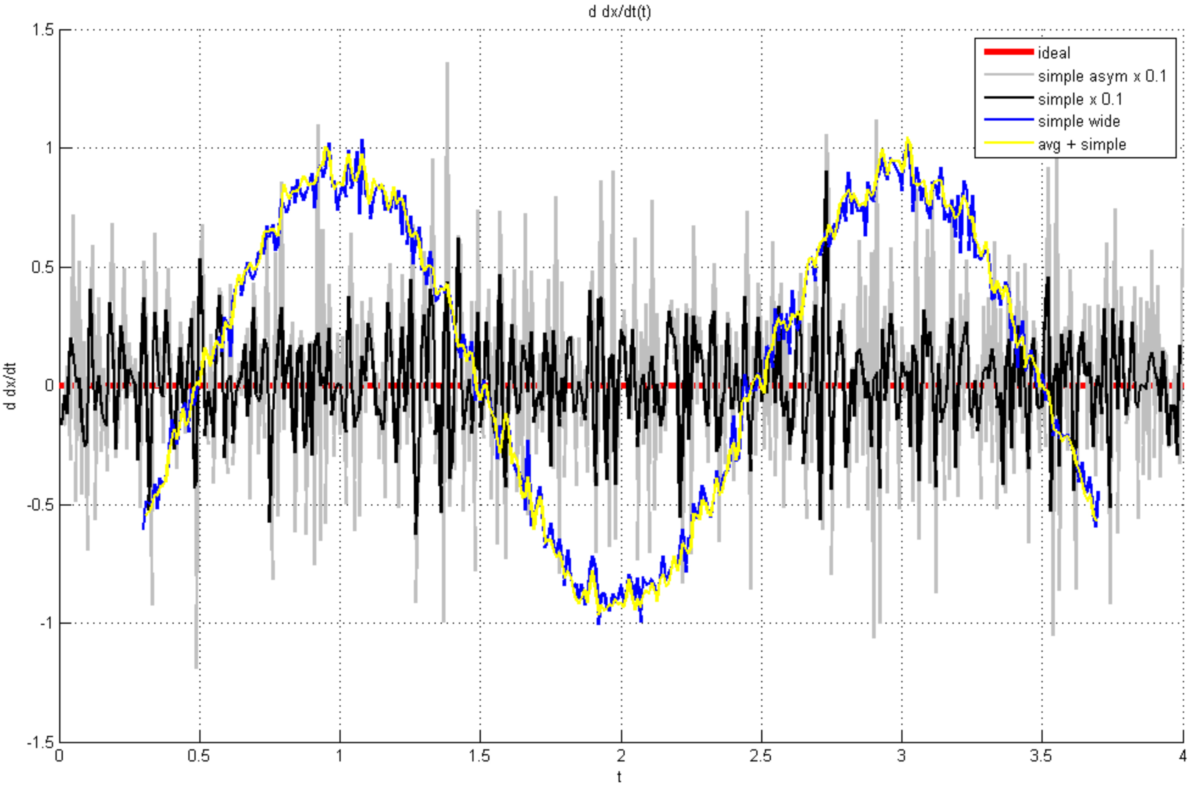


Кто-то может возразить «Стоп, ну глазом же видно, что синус мятый – давайте его выровняем!». Т.е. сначала погладим функцию так, что значение в каждый момент времени есть среднее значение в некоторой окрестности. Назовём этот случай avg + simple.

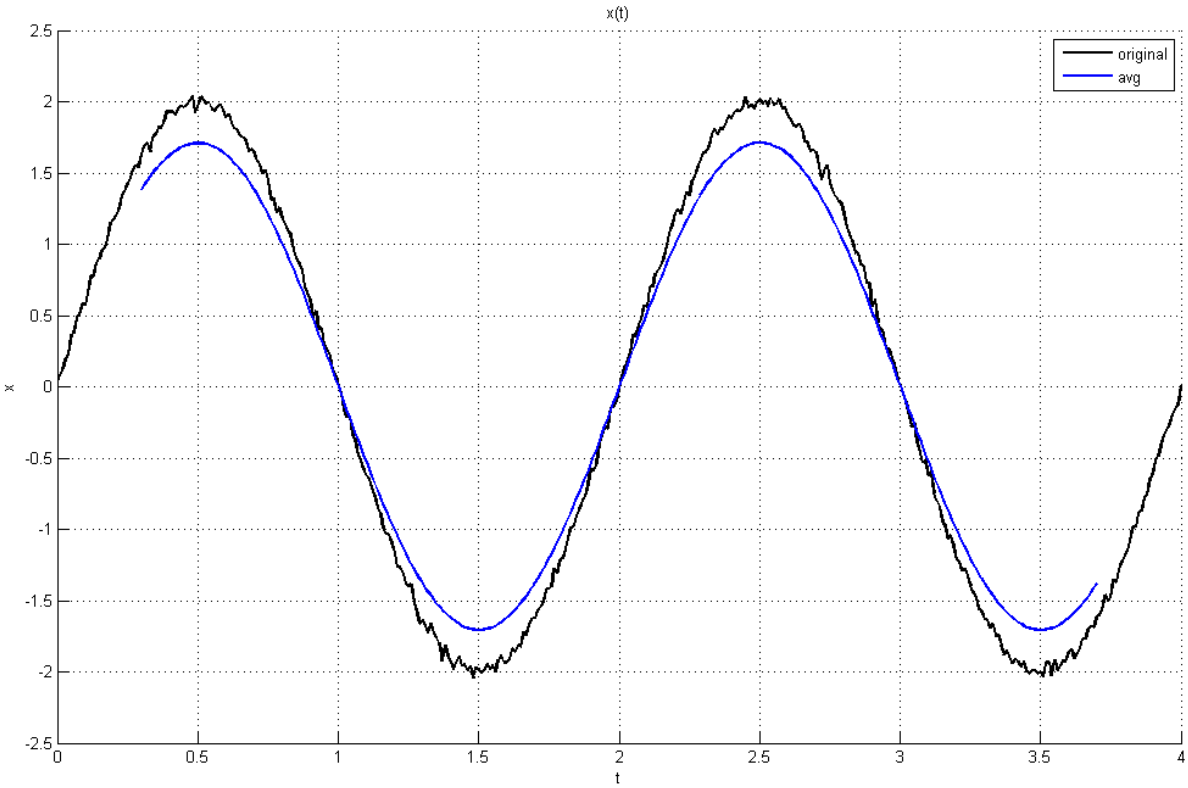
Смотрим на результат:



О, стало значительно лучше! Шум в производной сильно уменьшился. Разницы между вариантами simple wide и avg + simple практически никакой нет.
Взглянем на разницу между оценкой и идеалом:



(для наглядности разница для simple asym и simple уменьшена в 10 раз)
Действительно, simple wide и avg + simple почти не отличаются, однако avg + simple даёт при той же ошибке чуть меньший разброс точек, объясняемый сглаживанием.
Кто-то может спросить, а почему мы не попробовали сначала посчитать производную, а потом её сгладить (т.е. simple + avg)? Можно показать, что с точки зрения математики оба способа полностью эквивалентны и приводят к одинаковым финальным формулам. Но это если нет промежуточных округлений. В любом случае, вариант «сначала погладить, потом брать» выглядит визуально приятнее, т.к. не нужно наблюдать мусор.
Тем не менее, наши оценки вся равно не дотягивают до идеальной производной.
В чём дело? Посмотрим на функцию, которую мы погладили:



Опаньки! А вершины то тоже сгладились! Соответственно и скорость прохода через 0 уменьшилась. Вспоминая формулу для оценки видим, что при большом «окне взятия производной» мы будем получать производную где-то на этом промежутке.

Так как же «правильно» брать численно производную? Есть два способа.

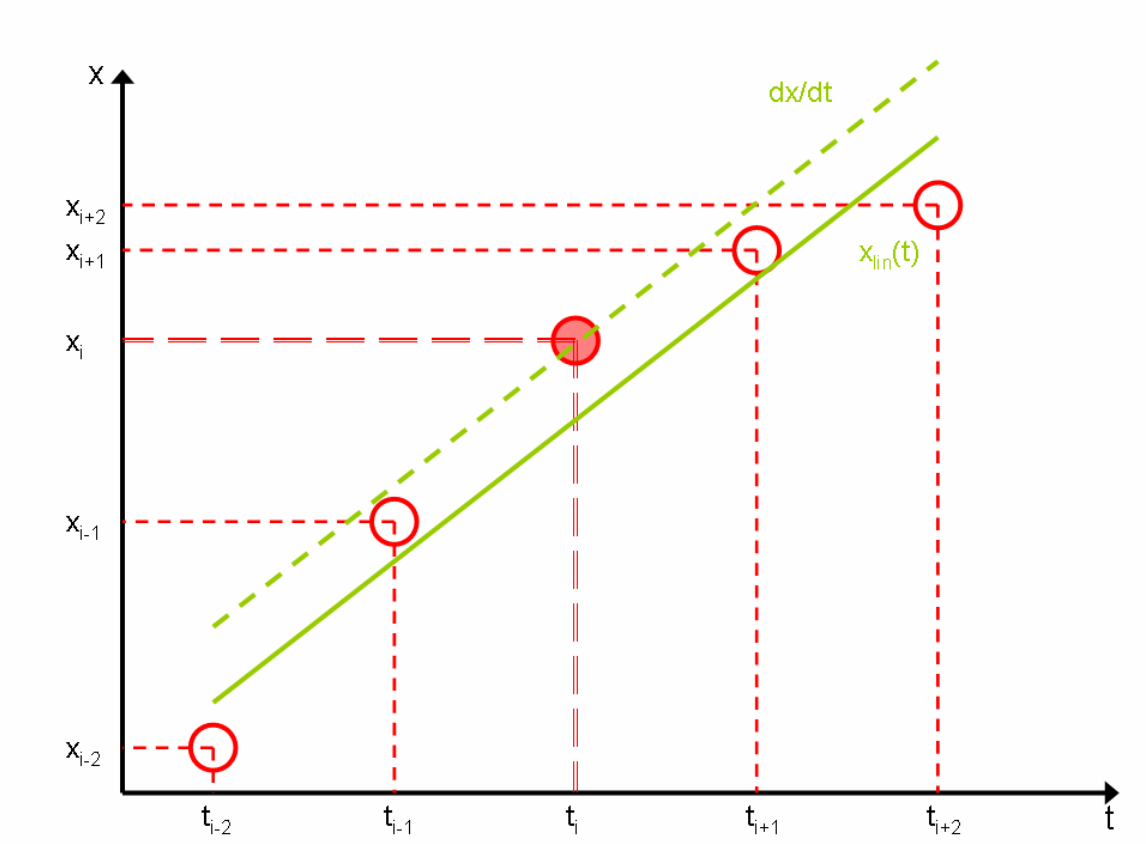
Способ 1. Если вам очень повезло, то есть некоторая модель физического явления, которая её описывает. Оттуда вы можете взять решение в общем виде, подобрать коэффициенты экспериментально, а затем аналитически взять производную.

Например. В этой задаче мы знаем (или чувствуем), что зависимость $x(t)$ есть синус. Давайте с помощью МНК найдём его коэффициенты из эксперимента!

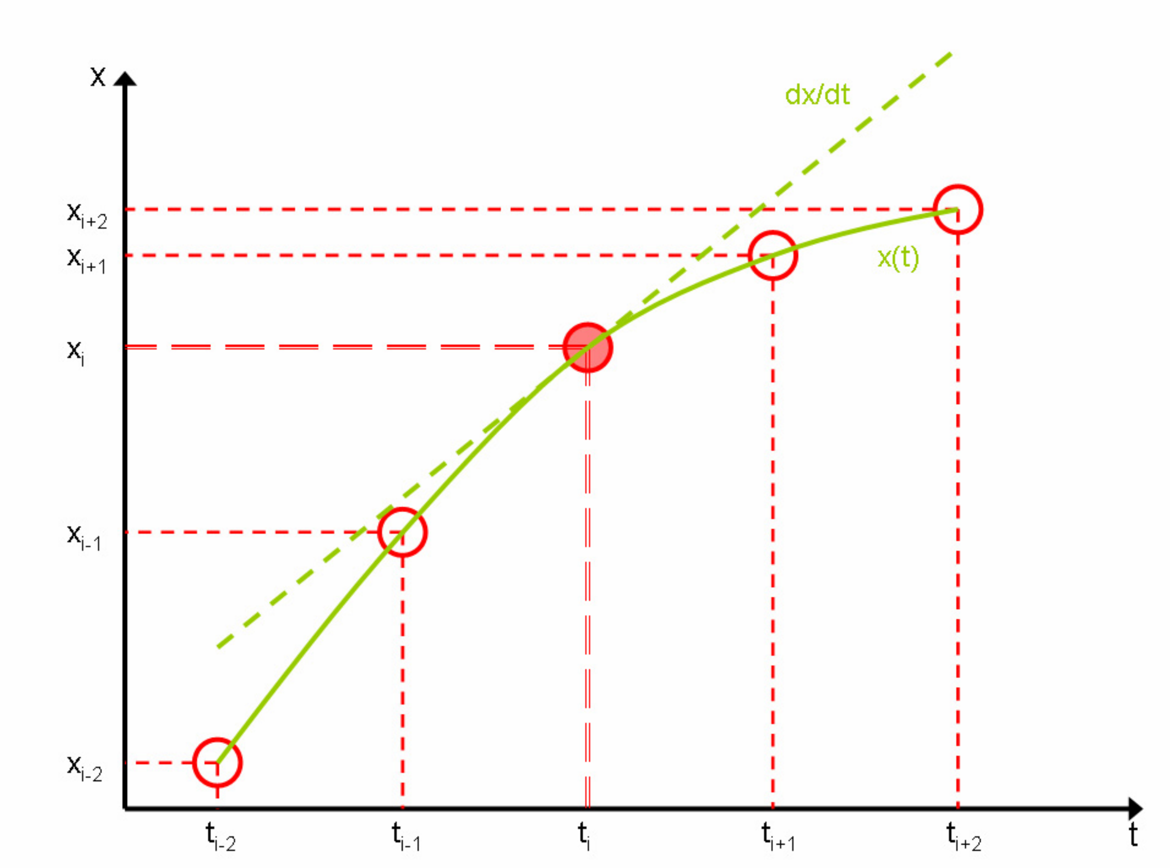
Т.е. ищем A и ω в $x(t) = A\sin\omega t$, а затем считаем производную как $dx(t)/dt = A\omega\cos\omega t$.

Но это если модель есть. А если нет?

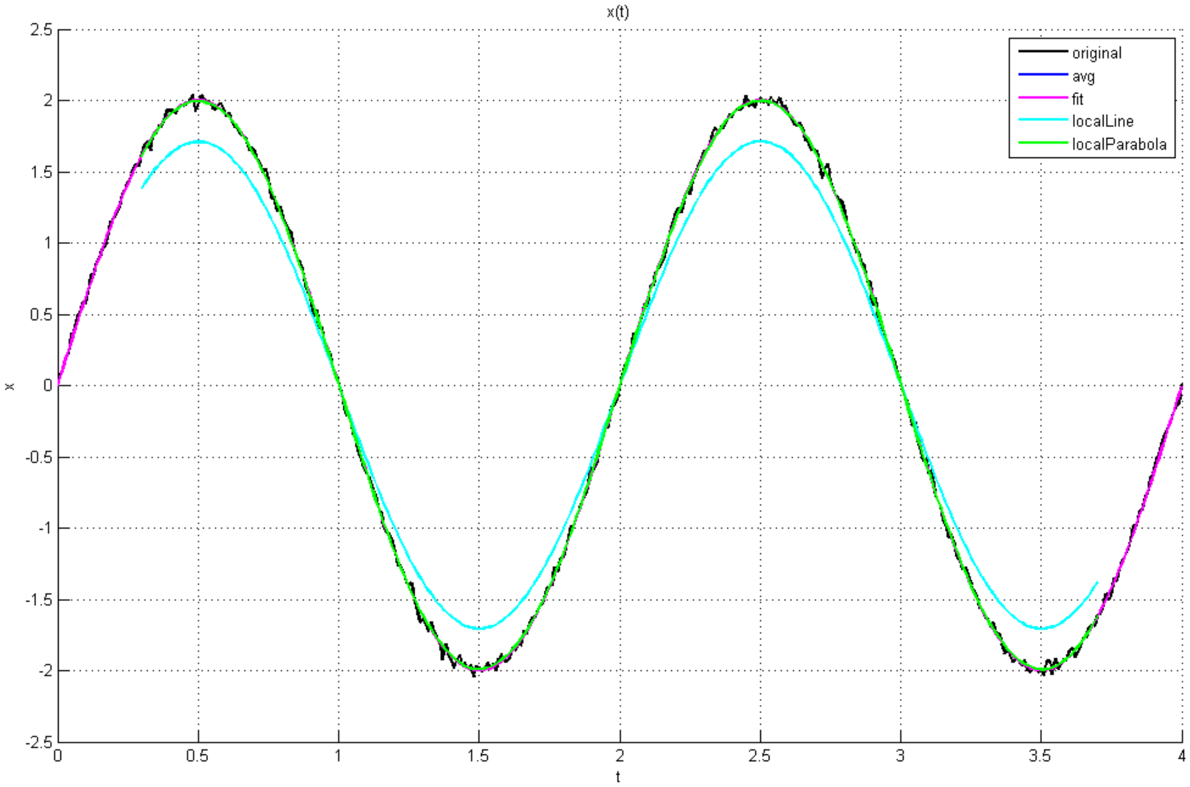
Тогда способ 2. Если у нас функция достаточно пологая, т.е. характер её меняется неспешно, то её локально можно представить линией! Таким образом, берём несколько точек в той окрестности, где хотим посчитать производную, по МНК определяем линию, и далее из неё берём производную как просто тангенс угол наклона:



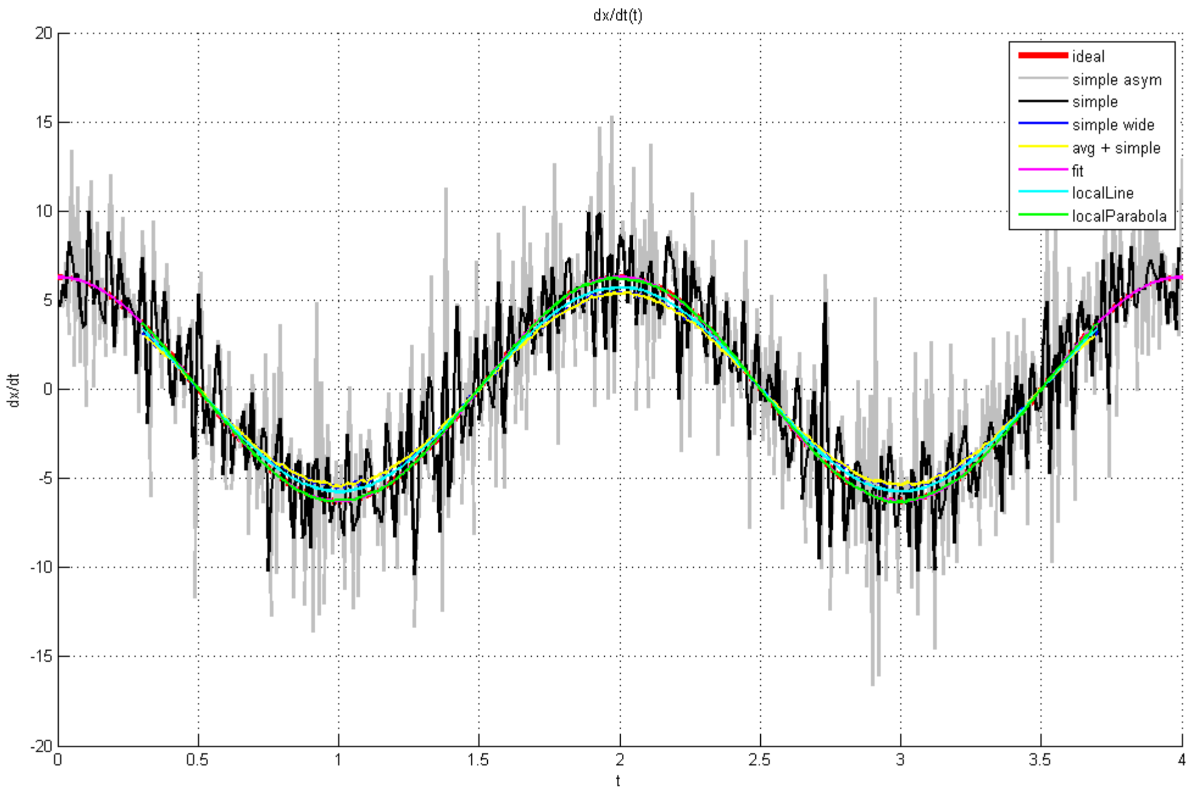
Можно пойти дальше. Видно же, что функция изгибается, а давайте тем же МНК приблизим её параболой! А далее уже из неё достанем производную. Т.е. как-то так:



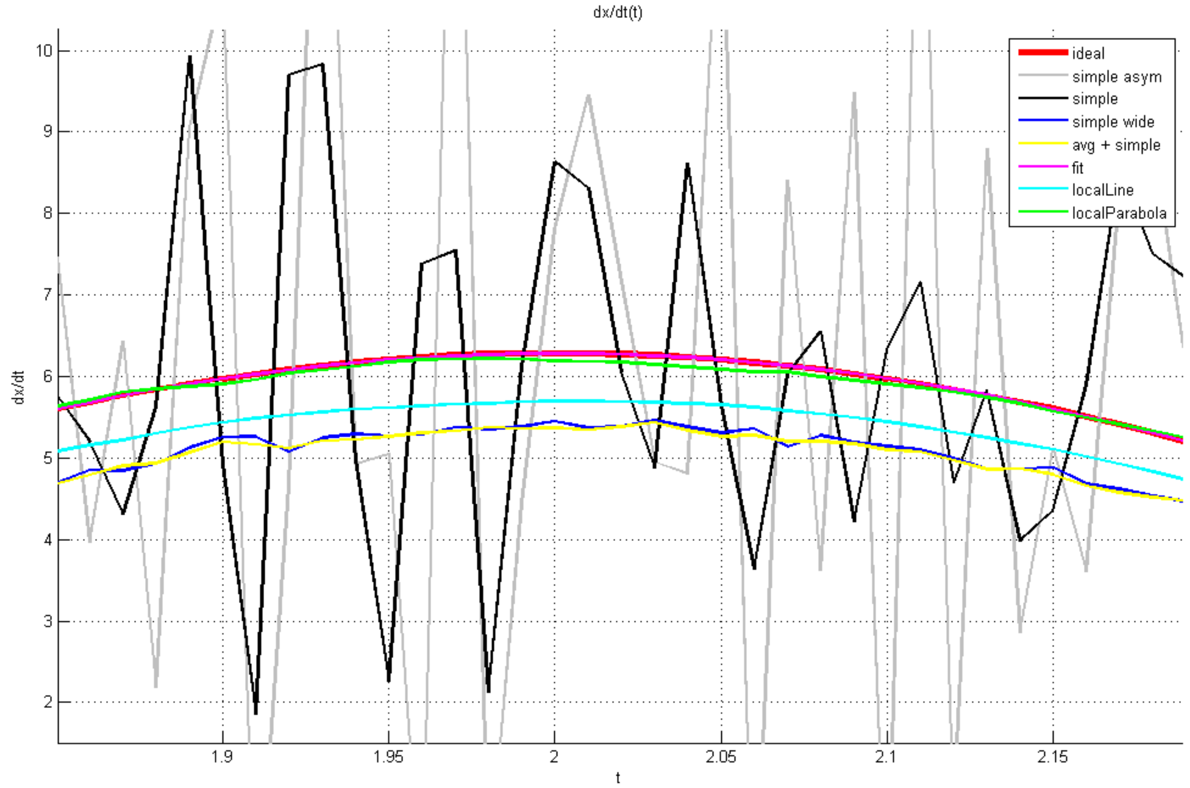
А теперь применим эти два способа к синусу. Назовём их соответственно fit, localLine и localParabola. И вуаля!



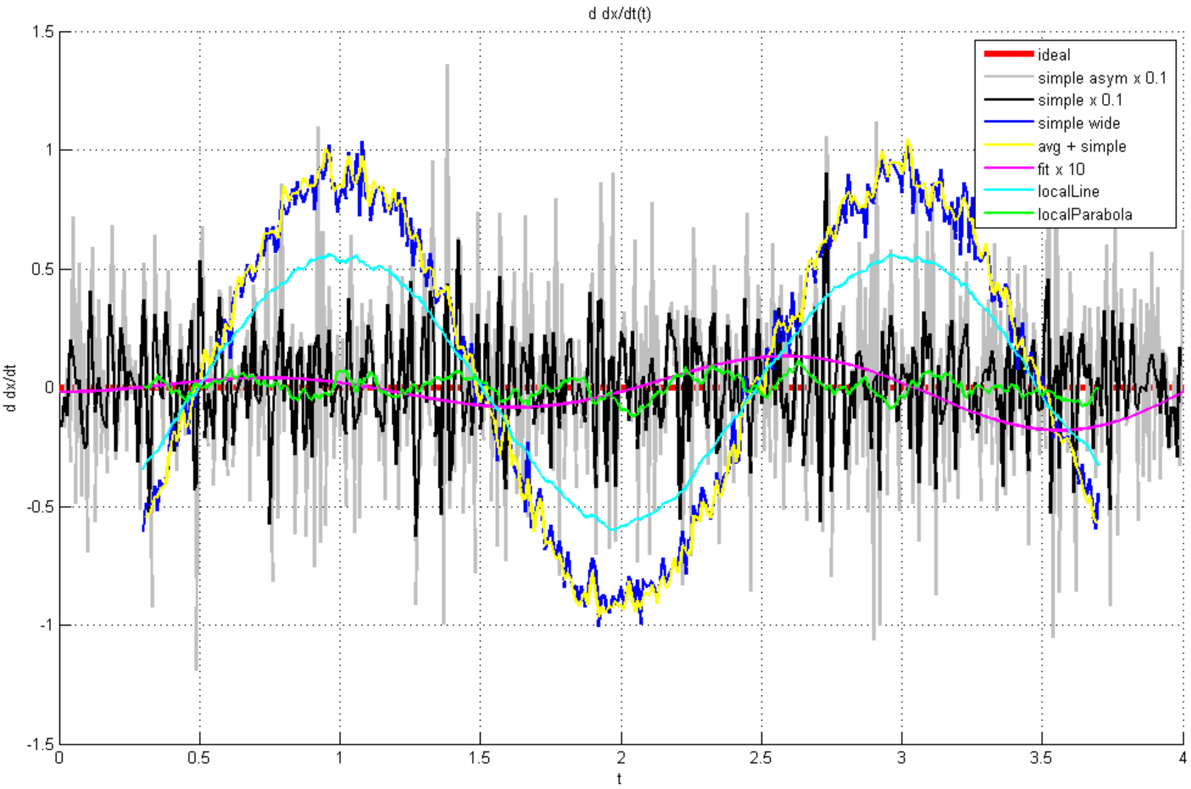
Как можно видеть (точнее не видеть), localLine полностью совпал с avg (тут может возникнуть вопрос, как же так – мы ведь фитили линией, да, действительно, однако для наглядности для всех «уширенных» производных бралось очень много точек – примерно четверть периода), fit лёг практически идеально на синус, как и localParabola. Что же с производной?



Огого. Присмотримся ближе:



Видно, что localLine и localParabola обладают куда меньшим шумом и ближе приближены к идеалу. fit же практически с ним совпадает. Посмотрим на разницу:

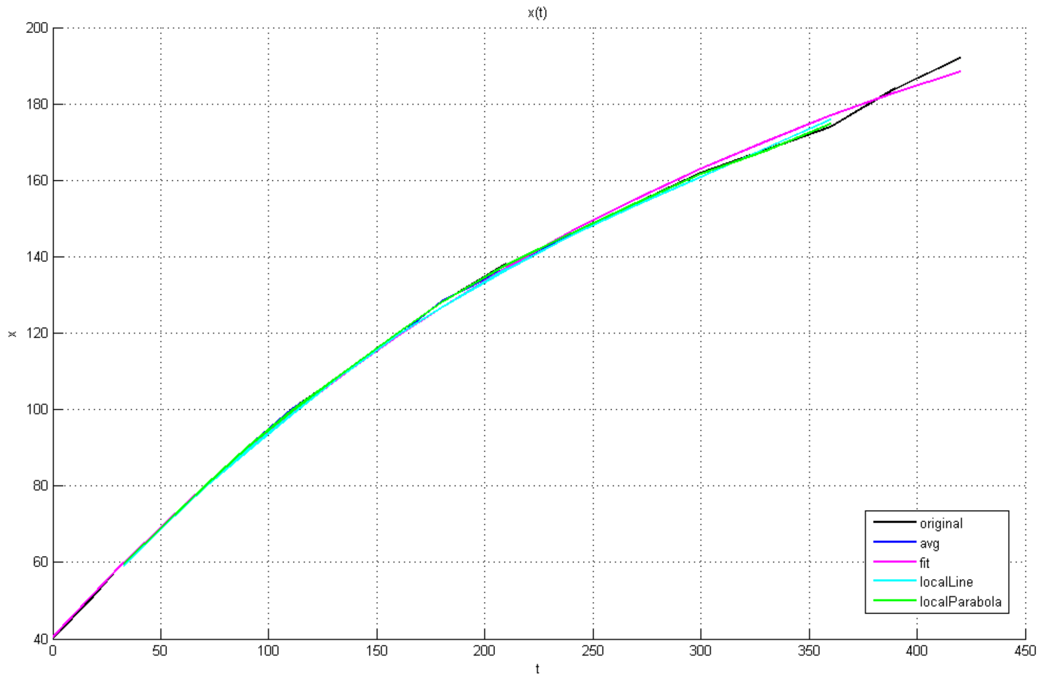


(для наглядности разница для fit увеличена (!) в 10 раз)
Всё говорит само за себя. Парабола однозначно в этом случае лучше остальных (если недоступна модель, конечно).

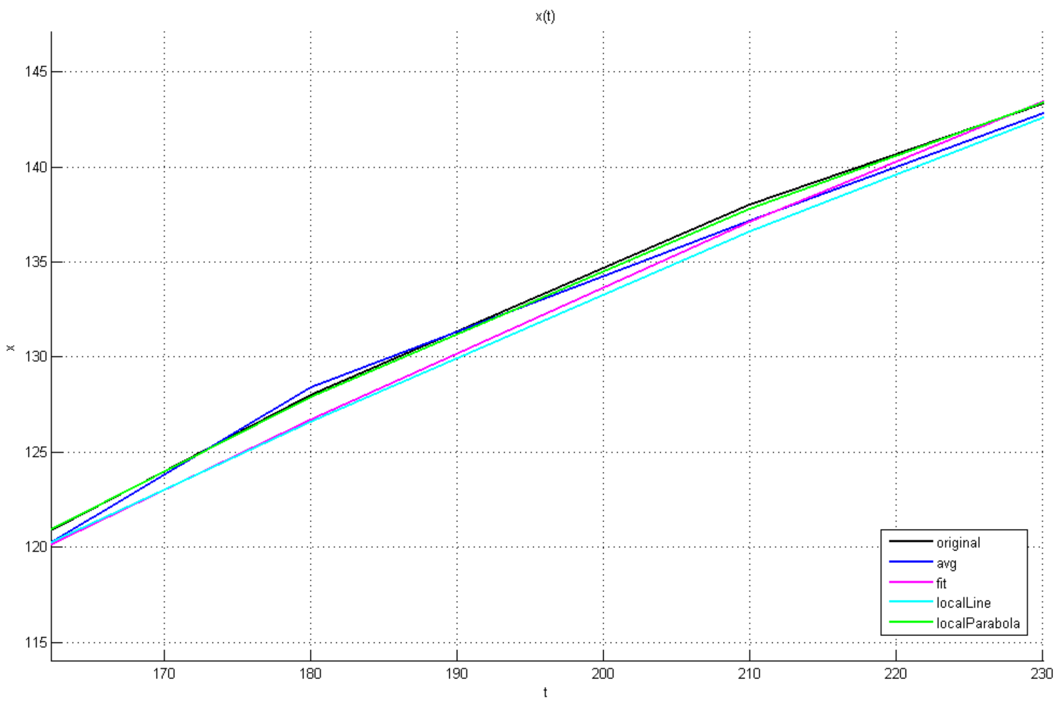
(справедливости ради отмечу, что использовалась кубическая парабола, т.к. обычная не даёт НИЧЕГО по сравнению с линией из-за особенности синуса – в точке максимальной скорости $\sin x = x - x^3/3!$ синус просто не содержит квадратичного слагаемого, т.е. именно там парабола совпадает с линией)

А теперь смертельный номер. То всё были модельные данные. Возьмём реальный эксперимент, а именно, рост давления в бутылке с минералкой при её встряхивании. В этом случае давление растёт экспоненциально, приближаясь к предельному, чем мы и воспользуемся. Использовалась ширина «окна» в 5 точек, т.к. их всего 18.

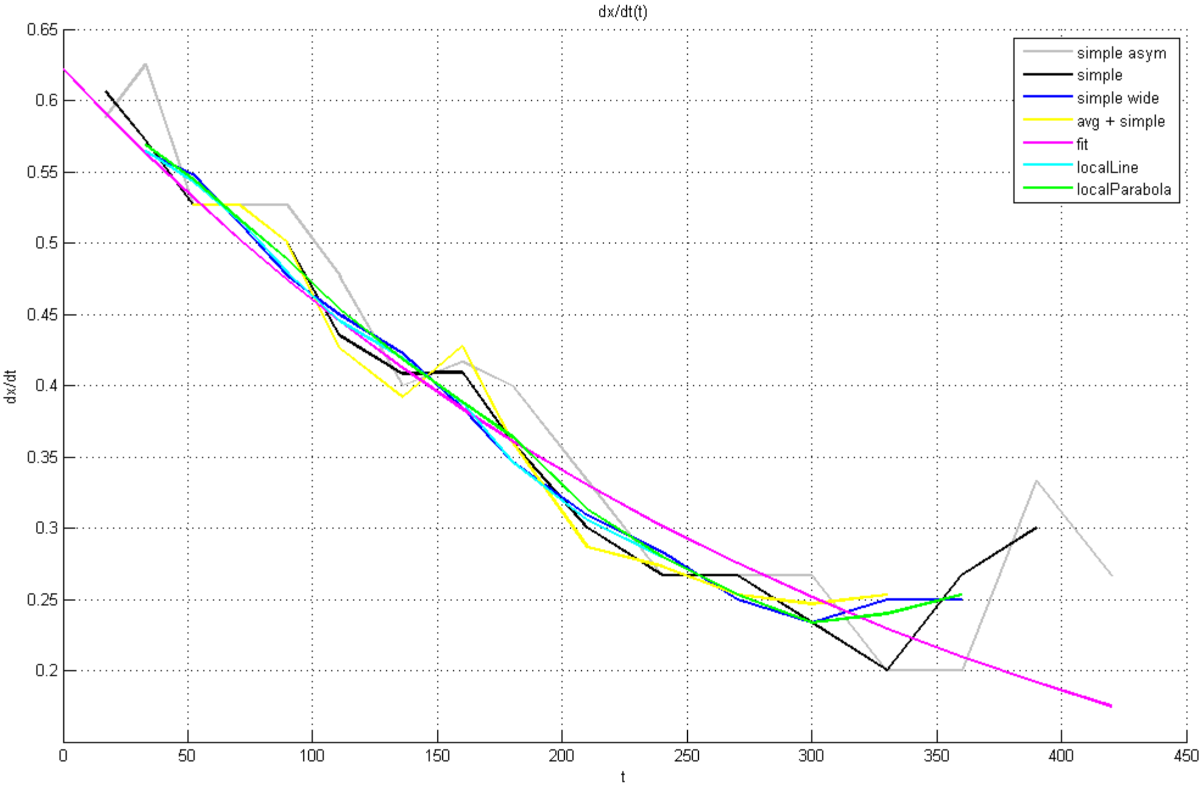
Рост давления от времени:



Ближе:

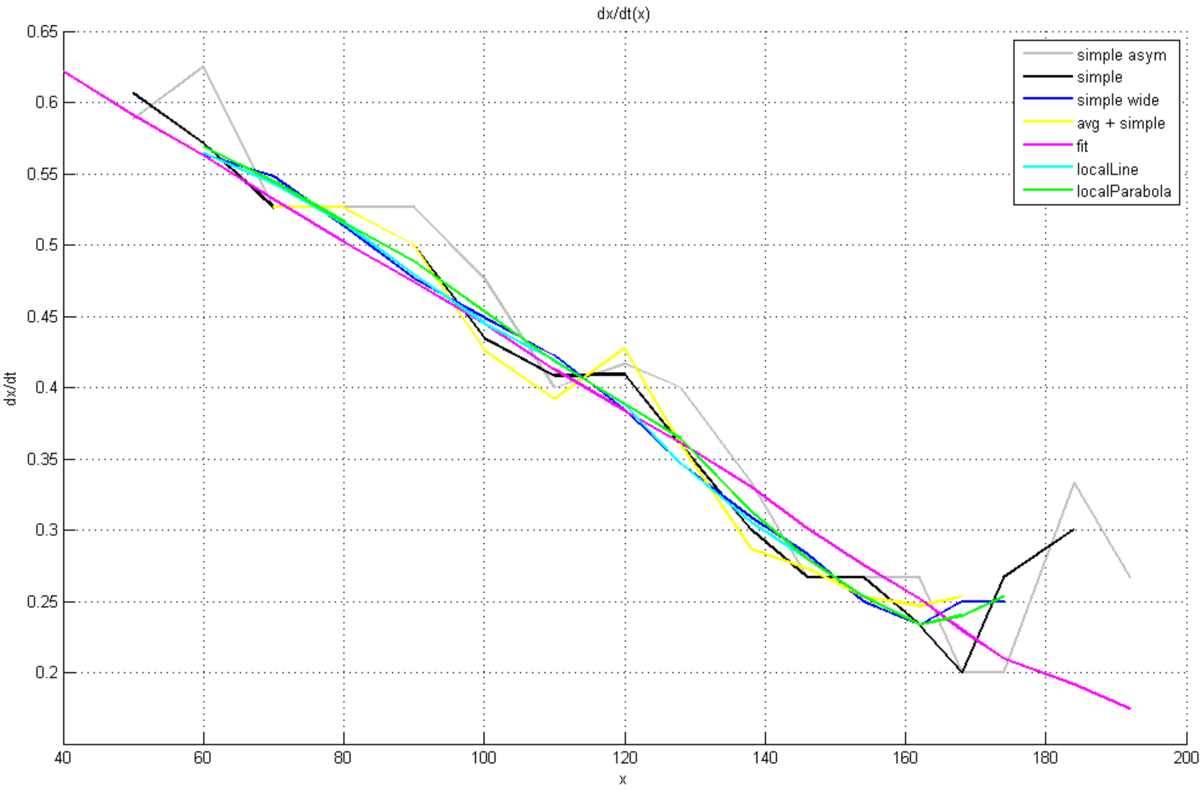


Все методы дают приблизительно одинаковый результат, но это не самое интересное. Считаем скорость роста давления!



Приближение экспонентой (fit) даёт наилучший результат, его мы и возьмём за основу. simple asym и simple довольно сильно шумят, остальные методы лучше, avg + simple в одной из точек выбивается.

Более интересен график в осях $dx(t)/dt$ и $x(t)$ – теория говорит о том, что в этом случае $dp/dt = \gamma p_k - \gamma p$, т.е. зависимость линейна. Проверим:



Что же даст результат фитинга по параметрам γ и p_k?

А вот и результат:

метод	γ	$\gamma - \gamma_{fit}$	p_k	$p_k - p_{kfit}$
simple asym	0.00286	-0.00016	261	15
simple	0.00293	-0.00009	253	6
simple wide	0.00313	0.00011	242	-5
avg + simple	0.00325	0.00023	238	-9
fit	0.00302	0	247	0
localLine	0.00314	0.00012	241	-5
localParabola	0.00318	0.00016	241	-5

Какой вывод можно сделать?

1) Фит лучше всегда, если есть адекватная модель (с неадекватной всё будет ещё хуже);

2) Все методы дают приблизительно одинаковую оценку параметра γ;

3) Все методы дают и приблизительно одинаковую оценку давления p_k за исключением simple asym, т.к. по своей природе он ассиметричен и эквивалентен тому, что значение производной вычисляется не в нужной точке, а правее её;

4) Методы localLine и localParabola дают более симпатичные графики ^-^

По возникшим вопросам и замечаниям можно писать сюда:
https://vk.com/id17810468