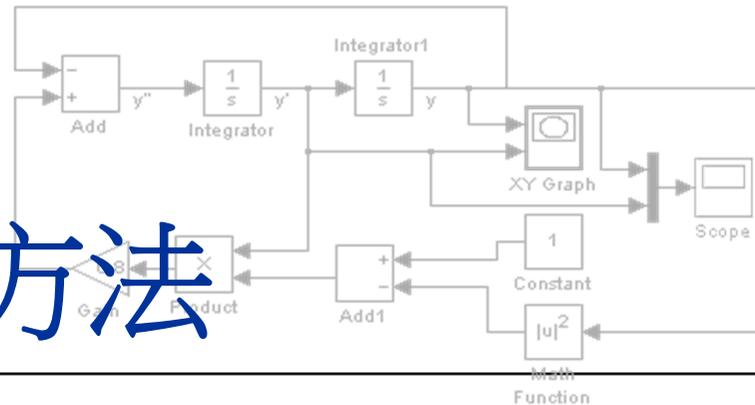


決策分析方法



求解線性聯立方程式

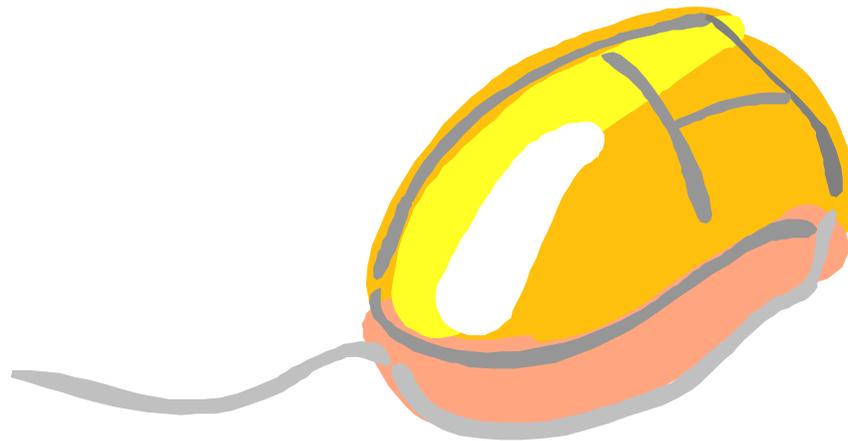
求解非線性方程式

最佳化設計的極值求解

曲線擬合與插值法

積分與微分方程式

常微分方程式





Linear Algebra Conception

- Matrix Equation
- Matrix Inverse
 - Cramers Rules
 - Determinant
- Gaussian Elimination
- LU Decomposition
- Square Root Method
 - Normal Equation

線性代數的相關運算

聯立方程式的求解

設要解聯立方程式

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 4 & 3 \\ 3 & 6 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

這是

$$AX=B$$

的基本型式。要解出向量 X ，只要計算 A 左除 B 即可：

```
>> A=[1 0 2;0 4 3;3 6 0]
```

```
A =
```

```
    1    0    2
    0    4    3
    3    6    0
```



```
>> B=[9;1;0]
```

```
B =
```

```
    9
```

```
    1
```

```
    0
```

```
>> X=A\B
```

```
X =
```

```
    3.5714
```

```
   -1.7857
```

```
    2.7143
```

```
>> inv(A)*B
```

```
ans =
```

```
    3.5714
```

```
   -1.7857
```

```
    2.7143
```



克拉瑪法則

- 克拉瑪法則： $AX = B$ 的唯一解為 $x_k = \frac{|A(k;B)|}{|A|}$; $k = 1, \dots, n$

```
>> A=[1 0 2;0 4 3;3 6 0];
```

```
>> B=[9;1;0];
```

```
>> det([B,A(:,[2 3])])/det(A)
```

```
ans =
```

```
3.5714
```

```
>> det([A(:,1),B,A(:,3)])/det(A)
```

```
ans =
```

```
-1.7857
```

```
>> det([A(:,[1 2]),B])/det(A)
```

```
ans =
```

```
2.7143
```

使用 `linsolve` 解現性系統

- 線性方程式： $AX = B$

```
>> A=[4 1 2;1 2 5;2 5 1];  
>> B=[4;3;1];  
>> X=linsolve(A,B)
```

X =

```
    0.7901  
   -0.2222  
    0.5309
```

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 5 \\ 2 & 5 & 1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{Bmatrix} 4 \\ 3 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

```
>>
```



當方程式數目不等於變數數目的情況

- over determinate：方程式的數目大於未知數的數目
- 「左除」法求解over determinate的問題，所求得的解是最小平方解。也就是找出的 X 是使得

$$\|AX - B\|^2$$

即 $AX - B$ 之範數（norm）的平方為最小。



$$2x - 4y = 6$$

$$3x - 8y = 3$$

$$6x + 7y = 14$$

```
>> A=[2 -4;3 -8;6 7]
```

```
A =
```

```
2 -4
```

```
3 -8
```

```
6 7
```

```
>> B=[6;3;14]
```

```
B =
```

```
6
```

```
3
```

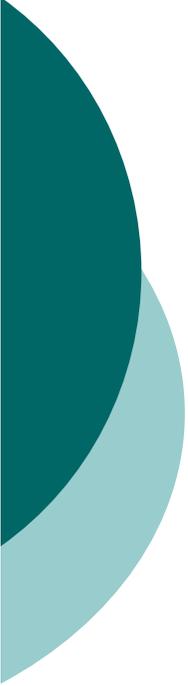
```
14
```

```
>> X=A\B
```

```
X =
```

```
2.0969
```

```
0.2250
```

- 
-
- **under determinate**：方程式的數目小於未知數的數目，此時有無窮多組解
 - ✓ 利用左除法，可以求得所有的解向量裡，擁有元素0最多的向量
 - ✓ 如果是用虛反矩陣法（**pseudo-inverse**），則求得的是最小範數解



舉例來說，要求解如下的方程式：

$$5x + 3y + 3z - 4u - 9v = 40$$

$$3x + 3y + 4z + 2u - 5v = 30$$

$$7x - 6y + 3z + 3u + 2v = 24$$

```
>> A=[5 3 3 -4 -9;3 3 4 2 -5;7 -6 3 3 2]
```

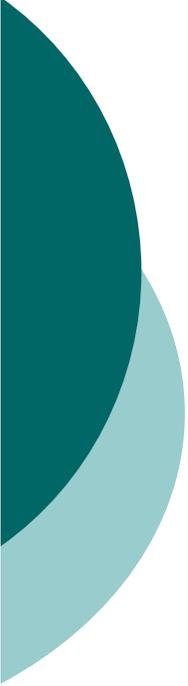
```
A =
```

```
     5     3     3    -4    -9
     3     3     4     2    -5
     7    -6     3     3     2
```

```
>> B=[40;30;24]
```

```
B =
```

```
    40
    30
    24
```



利用左除法：

```
>> s1=A\B
s1 =
    3.6250
         0
         0
    1.6513
   -3.1645
```

虛反矩陣法：

```
>> s2=pinv(A)*B
s2 =
    2.9836
    0.0273
    2.1179
    0.5061
   -2.2967
```



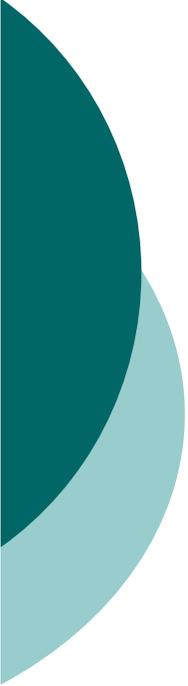
固有值與固有向量

- A 的固有值可求解 $\det(\lambda I_n - A) = 0$ 而得
- 由 $AX = \lambda X$ 可求得伴隨 λ 的固有向量

Matlab 的 `eig` 函數可計算固有值與固有向量

表 11.1.2 求解固有值與固有向量的函數

函 數	說 明
<code>ev=eig(mat)</code>	計算矩陣 mat 的固有值
<code>[vect, dv]=eig(mat)</code>	計算矩陣 mat 的固有值與固有向量



```
>> A=magic(3)
```

```
A =
```

```
     8     1     6
     3     5     7
     4     9     2
```

```
>> eig(A)
```

```
ans =
```

```
15.0000
 4.8990
-4.8990
```

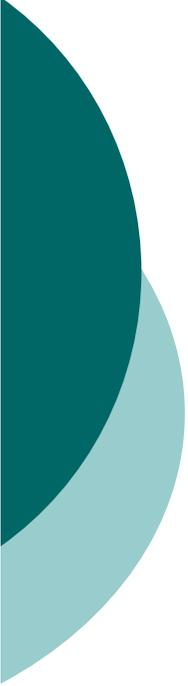
```
>> [vect,dv]=eig(A)
```

```
vect =
```

```
 -0.5774  -0.8131  -0.3416
 -0.5774   0.4714  -0.4714
 -0.5774   0.3416   0.8131
```

```
dv =
```

```
15.0000         0         0
         0   4.8990         0
         0         0  -4.8990
```



方程式的求解

多項式的處理

- n 次多項式可以表示成如下的型式：

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x^1 + a_0$$

多項式

$$p(x) = 6x^5 + 12x^4 + 8x^3 - x + 32$$

可用下面的列向量來表示：

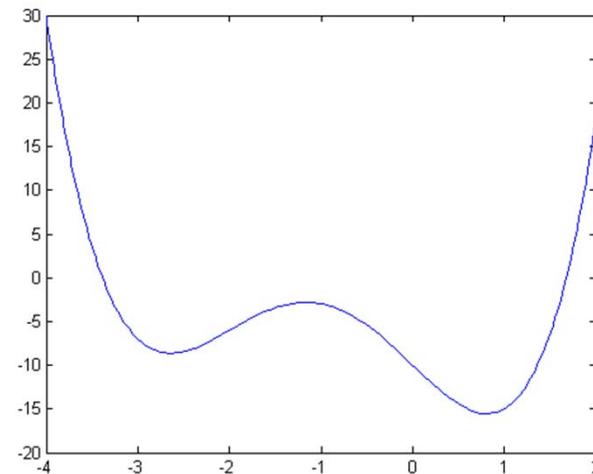
$$p = [6 \ 12 \ 8 \ 0 \ -1 \ 32]$$

表 11.2.1 與多項式運算相關的函數

函數	說明
<code>polyval(p,a)</code>	計算多項式 $p(x)$ 於 $x=a$ 的值。 a 可以為一個純量或向量
<code>roots(p)</code>	計算多項式 $p(x)$ 的根

```
>> p=[1 4 0 -10 -10];  
>> fplot('x^4+4*x^3-10*x-10',[-4,2])
```

```
>> roots(p)  
ans =  
-3.3851  
1.6769  
-1.1459 + 0.6698i  
-1.1459 - 0.6698i
```





求解非線性方程式

- 如果要求解非線性方程式，可利用 `fzero` 函數：

表 11.2.2 求解非線性方程式的函數

函 數	說 明
<code>fzero(fun, x₀)</code>	以 x_0 為初始值，求解方程式 $fun=0$ 的解
<code>fzero(fun, [x₀, x₁])</code>	在 $[x_0, x_1]$ 區間內求解方程式 $fun=0$ 的解

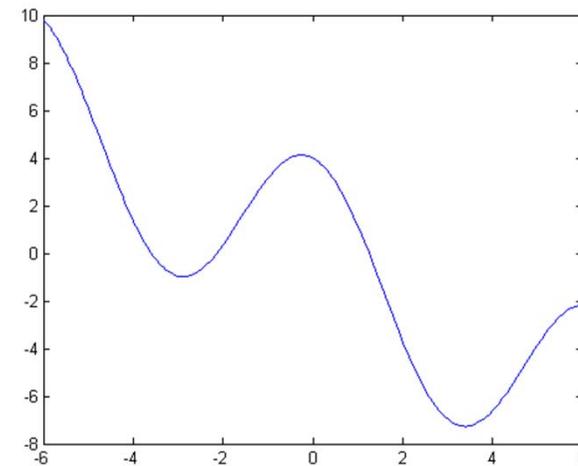


```
function y=func11_1(x)
y=4*cos(x)-x;
```

```
>> fzero('func11_1',3)
ans =
    1.2524
```

```
>> fzero('func11_1',-4)
ans =
   -3.5953
```

```
>> fzero('func11_1',[-4,-3])
ans =
   -3.5953
```

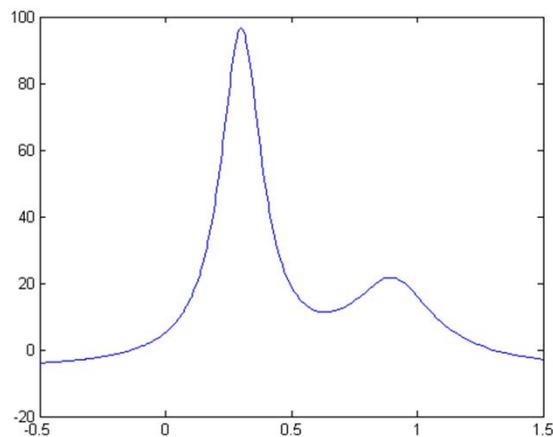


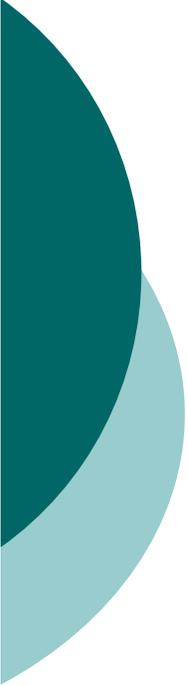
○ 關於humps函數

humps 函數的數學定義式為

$$y(x) = \frac{1}{(x-0.3)^2 + 0.01} + \frac{1}{(x-0.9)^2 + 0.04} - 6$$

```
>> fplot('humps',[-0.5,1.5]); hold on
```





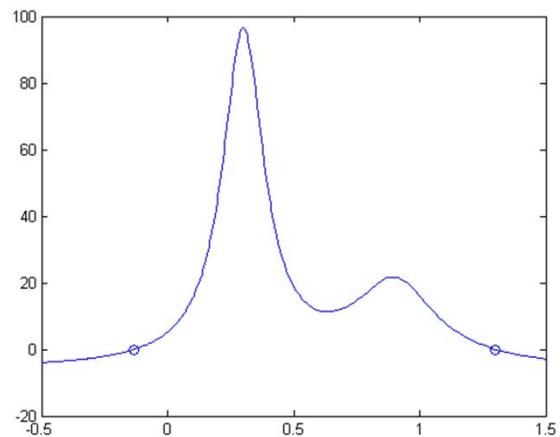
```
>> x1=fzero('humps',-0.5)
```

```
x1 =  
    -0.1316
```

```
>> x2=fzero('humps',1.5)
```

```
x2 =  
    1.2995
```

```
>> plot([x1 x2],[0 0],'o');hold off
```



顯示求解的過程

- `optimset` 函數可查看求解過程或改變求解精度：

表 11.2.3 `optimset` 函數的用法

函數	說明
<code>opts=optimset('par1','val1','par2','val2',...)</code>	依照參數 <code>par1</code> 的值為 <code>val1</code> ，參數 <code>par2</code> 的值為 <code>val2</code> ，建立一個選項結構，以供 Matlab 的 <code>fzero</code> 、 <code>fminbnd</code> 與 <code>fminsearch</code> 等函數使用
參數	說明
<code>Display</code>	設定 <code>off</code> 則不顯示輸出，設定 <code>iter</code> 則顯示每一個迭代的結果，設定 <code>final</code> 則只顯示計算的最終結果
<code>TolX</code>	設定所容許的誤差
<code>FunValCheck</code>	檢查計算過程中的函數值
<code>OutputFcn</code>	可用來指定一個自定的函數，只要求解過程中每迭代一次，自定的函數就會被執行一次



```
>> opts=optimset('Display','iter')
```

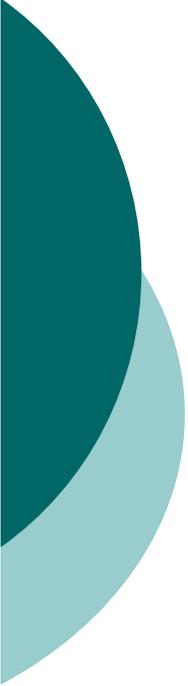
```
opts =  
      Display: 'iter'  
      MaxFunEvals: []  
      MaxIter: []  
      TolFun: []  
      TolX: []  
      FunValCheck: []  
      OutputFcn: []  
      :  
      TolPCG: []  
      TolRLPfun: []  
      TolXInteger: []  
      TypicalX: []
```



```
>> fzero('humps',3,opts)
```

Search for an interval around 3 containing a sign change:

Func-count	a	f(a)	b	f(b)	Procedure
1	3	-5.63829	3	-5.63829	initial interval
3	2.91515	-5.61014	3.08485	-5.66348	search
5	2.88	-5.59749	3.12	-5.67314	search
7	2.83029	-5.57852	3.16971	-5.6861	search
9	2.76	-5.54928	3.24	-5.70314	search
11	2.66059	-5.50236	3.33941	-5.72494	search
13	2.52	-5.42219	3.48	-5.75188	search
15	2.32118	-5.27031	3.67882	-5.78365	search
17	2.04	-4.9243	3.96	-5.81906	search
19	1.64235	-3.75631	4.35765	-5.85593	search
20	1.08	9.42923	4.35765	-5.85593	search



Search for a zero in the interval [1.08, 4.3576]:

Func-count	x	f(x)	Procedure
20	4.35765	-5.85593	initial
21	3.10194	-5.66823	interpolation
22	2.09097	-5.00353	bisection
23	1.58548	-3.43728	bisection
24	1.33274	-0.670982	bisection
25	1.28333	0.372862	interpolation
26	1.30098	-0.0313704	interpolation
27	1.29961	-0.00133688	interpolation
28	1.29955	2.54388e-007	interpolation
29	1.29955	-4.07603e-011	interpolation
30	1.29955	0	interpolation

Zero found in the interval [1.08, 4.35765]

ans =

1.2995



極小值的求解

- `fminbnd` 函數：可求解單一變數函數的極小值
- `fminsearch` 函數：可求解多變數函數的極小值

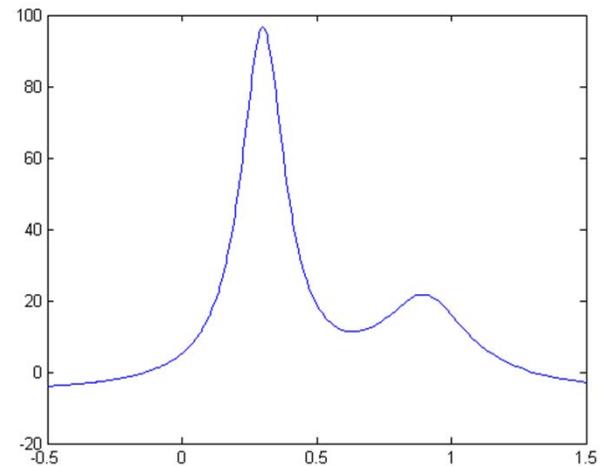
表 11.3.1 求解函數的最小值

函數	說明
<code>fminbnd(fun, x1, x2)</code>	搜尋單變數函數 <i>fun</i> 的最小值
<code>fminsearch(fun, [x, y, ...])</code>	指定初始點為 <i>x, y, ...</i> ，求解多變數函數 <i>fun</i> 的最小值

單一變數的極小值求解

```
>> fplot('humps',[-0.5,1.5])  
>> fminbnd('humps',0.5,0.8)  
ans =  
    0.6370
```

```
>> [x,val]=fminbnd('humps',0.5,0.8)  
x =  
    0.6370  
val =  
   11.2528
```

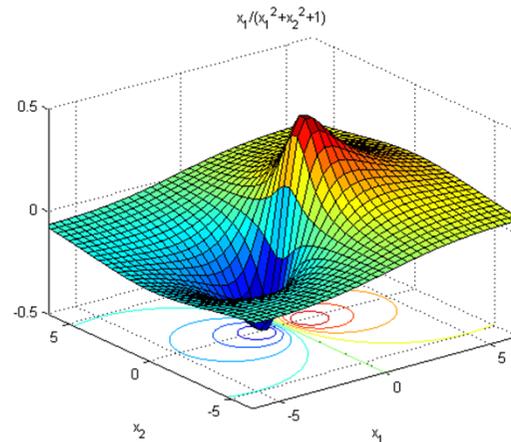


多變數函數的極小值求解

- 利用 `fminsearch` 求解函數極小值時：
第一個變數 x 必須定義成 $x(1)$ ，第二個變數 y 必須定義成 $x(2)$ ，多於兩個以上的變數則以此類推

```
function y=func11_3(x)  
y = x(1)/(x(1)^2+x(2)^2+1)
```

```
>> ezsurf('x1/(x1^2+x2^2+1)',36)
```





```
>> fminsearch('func11_3',[0,4])
```

```
ans =  
-1.0000 -0.0000
```

```
>> [x,val]=fminsearch('func11_3',[0,4])
```

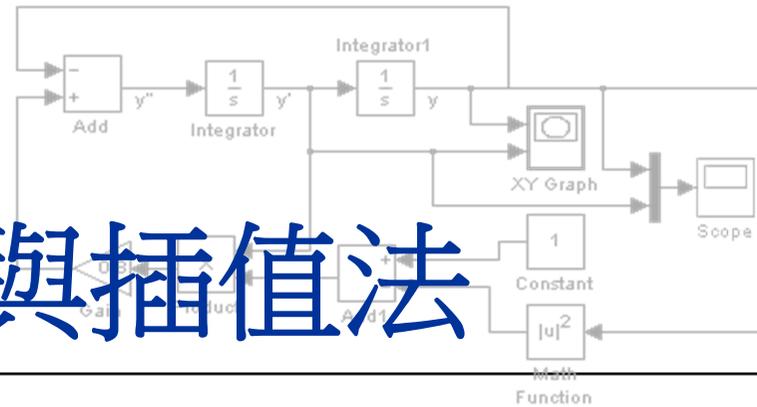
```
x =  
-1.0000 -0.0000
```

```
val =  
-0.5000
```

```
>> fminsearch('x(1)/(x(1)^2+x(2)^2+1)',[0,4])
```

```
ans =  
-1.0000 -0.0000
```

曲線擬合與插值法



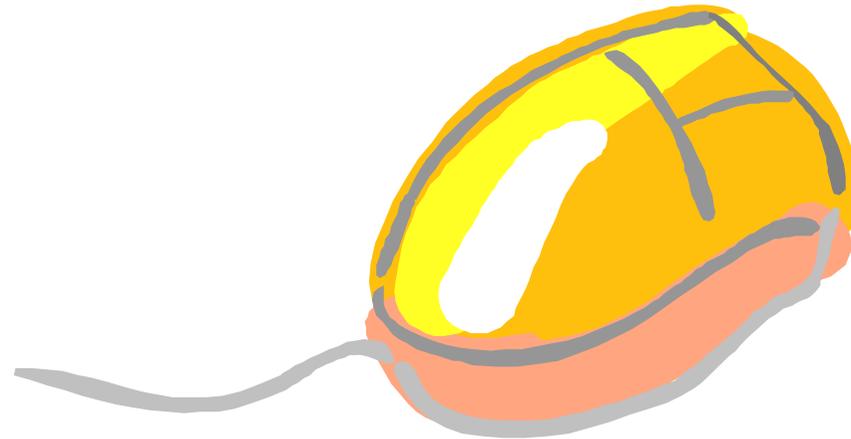
認識曲線擬合與插值法

n 階多項式的擬合方法

各種插值方法與其應用

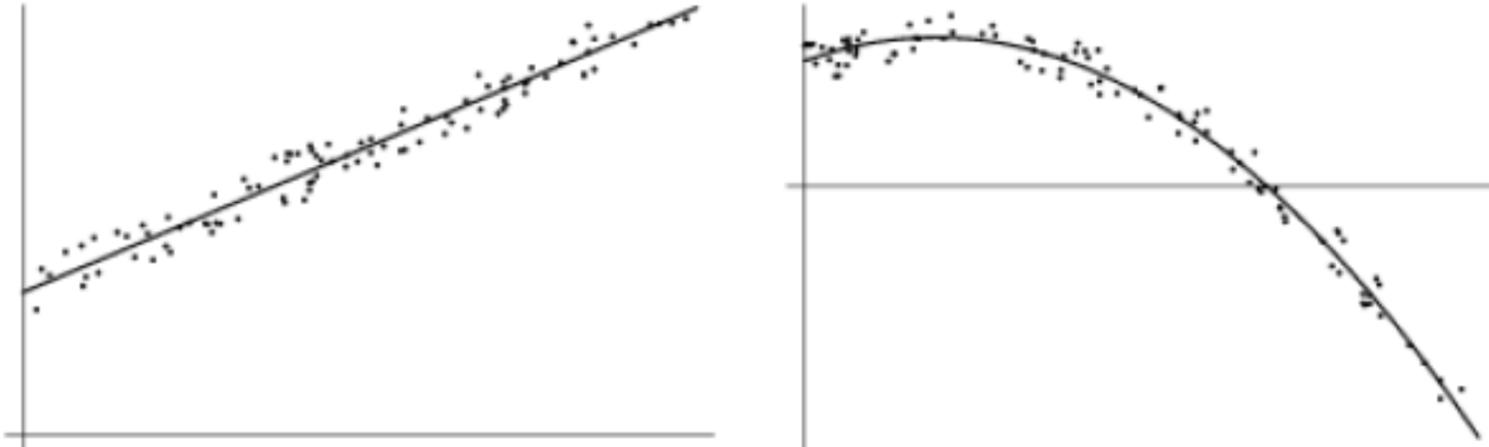
散佈式資料點的插值法

克利金(Kriging)法

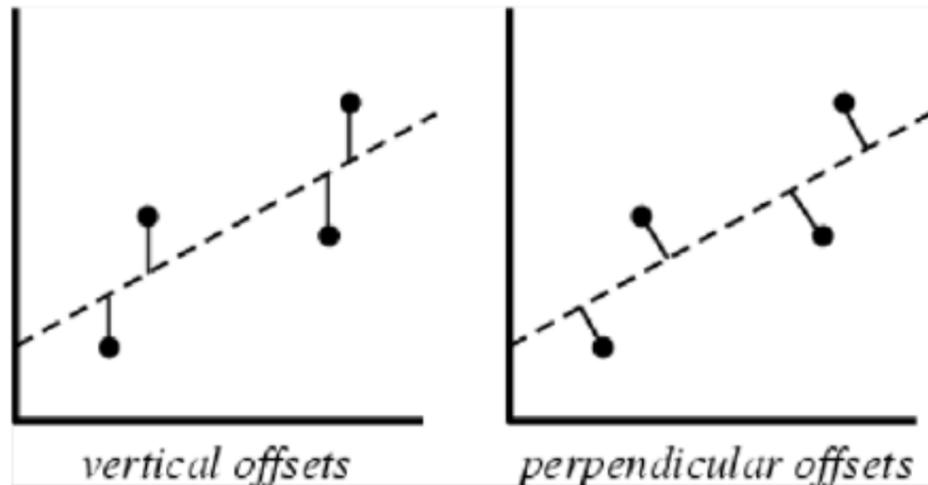


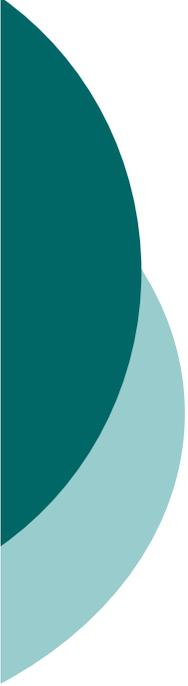
Least Squares Fitting

- Finding the best-fitting curve to a given set of points



- Minimizing the sum of the squares of the offsets ("the residuals") of the points from the curve





Mathematical References

- Linear regression: $\hat{y} = a + b\hat{x}$
 - Perpendicular offsets
 - Correlation coefficients
- Logarithmic regression: $\hat{y} = a + b \ln \hat{x}$
- Power-Law regression: $\hat{y} = A\hat{x}^B$
- Exponential regression: $\hat{y} = Ae^{B\hat{x}}$
- Polynomial regression: $\hat{y} = a_0 + a_1\hat{x} + \dots + a_n\hat{x}^n$
- Nonlinear regression:
 - Ex: Gaussian functions $Y = A \exp(Bx)$



曲線擬合

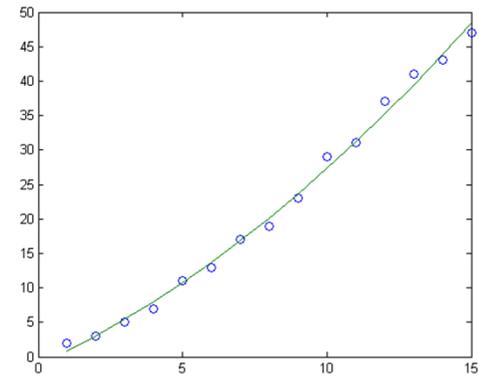
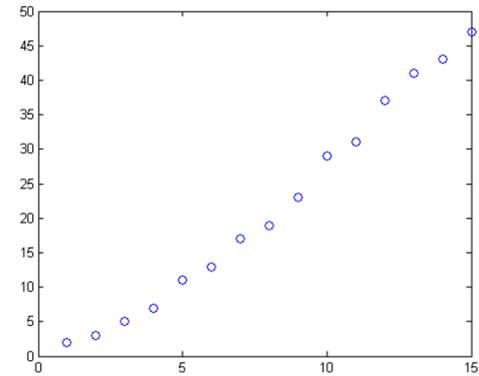
- 曲線擬合（**curve fitting**）：
利用最小平方法求出最能表示出資料趨勢的函數
- **Matlab**是以**polyfit**函數來進行多項式的曲線擬合：

表 12.1.1 多項式曲線擬合函數

函 數	說 明
<code>polyfit(x,y,n)</code>	分別以橫座標與縱座標所組成的向量 x 與 y ，進行 n 階多項式的擬合
<code>polyval(p,a)</code>	計算多項式 $p(x)$ 於 $x = a$ 的值



```
>> y=primes(50);  
>> x=1:length(y);  
>> plot(x,y,'o')  
>> p2=polyfit(x,y,2)  
p2 =  
    0.0907    1.9517   -1.2484  
  
>> f2=polyval(p2,x);  
>> plot(x,y,'o',x,f2,'-')
```





插值法

一維的插值法

- 如果要處理一維資料點的插值，可用`interp1`函數：

表 12.2.1 一維插值法

函 數	說 明
<code>interp1(x,y,x_i, 'method')</code>	計算插值，其中 <i>method</i> 可為 <code>nearest</code> : 鄰近點插值法 <code>linear</code> : 線性插值法（預設值） <code>spline</code> : <code>spline</code> （雲形線）插值法 <code>cubic</code> : 三次多項式插值法
<code>interp1(x,y,x_i, 'method', 'extrap')</code>	同上，但以外插來計算



```
>> interp1([1 5],[4 6],2,'nearest')
```

```
ans =  
     4
```

```
>> interp1([1 5],[4 6],2,'linear')
```

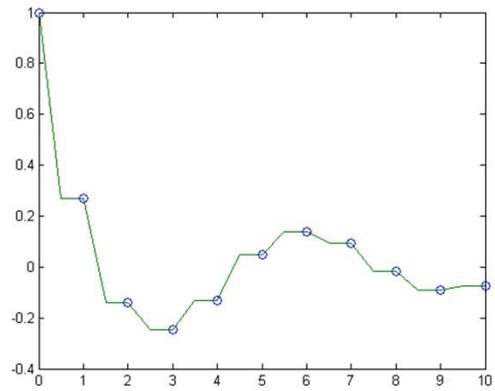
```
ans =  
 4.5000
```

```
>> interp1([1 5],[4 6],5.1,'linear','extrap')
```

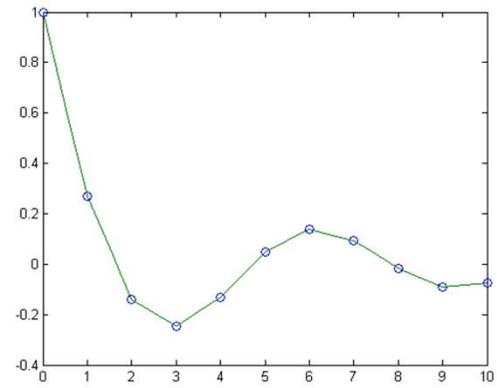
```
ans =  
 6.0500
```



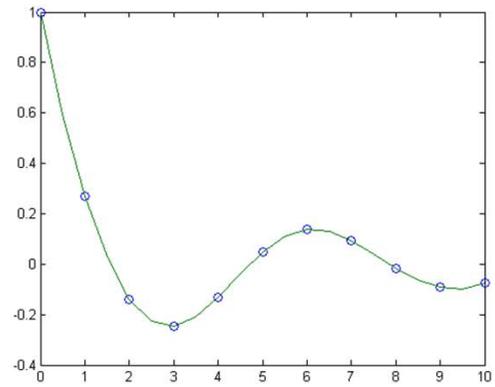
鄰近點插值法



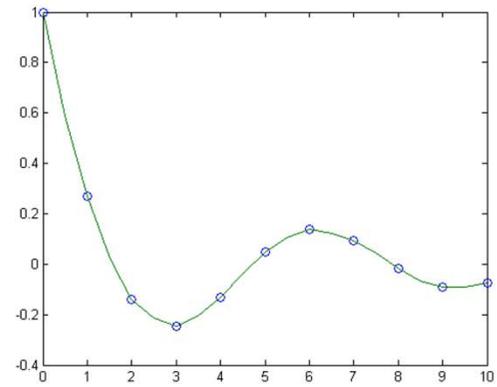
線性插值法



spline 內插



cubic 內插





二維平面的插值法

- `interp2` 函數可用來進行二維平面插值：

表 12.2.2 二維插值法

函 數	說 明
<code>interp2(x,y,z,x_i,y_i, 'method')</code>	計算二維插值，其中 <i>method</i> 可為 <ul style="list-style-type: none"><code>nearest</code>: 鄰近點插值法<code>linear</code>: 線性插值法（預設）<code>spline</code>: <code>spline</code> 插值法<code>cubic</code>: 三次多項式插值法
<code>interp2(x,y,z,x_i,y_i, 'method', val)</code>	當插點落在數據範圍之外時，則結果設定為 <i>val</i>

- 
-
- 下面的範例是以peaks函數來示範如何進行二維平面的插值法：

```
>> [x,y,z]=peaks(8);
```

```
>> zz=peaks(1,1)
```

```
zz =
```

```
    2.4338
```

```
>> interp2(x,y,z,1,1,'linear')
```

```
ans =
```

```
    2.7986
```

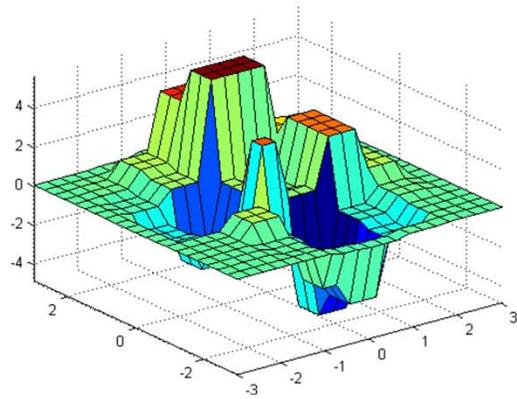
```
>> interp2(x,y,z,[-0.5,0.2],[-0.4,1],'spline')
```

```
ans =
```

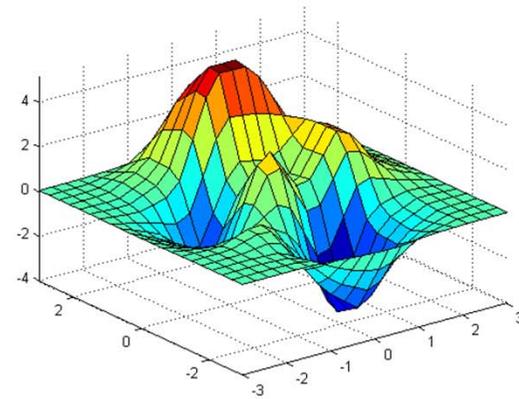
```
    3.3018    4.2221
```



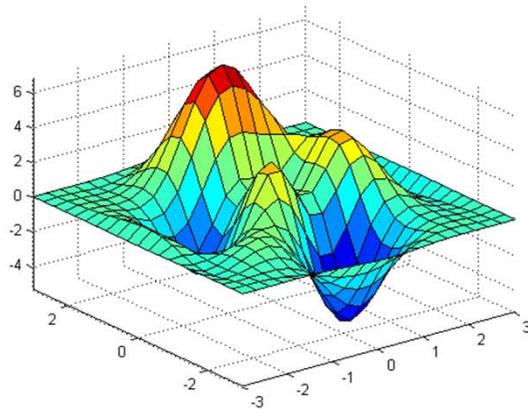
鄰近點插值法



線性插值法



spline 內插





多維插值法

- 多維插值法包含了三維與三維以上的多維插值，其語法如下表所列：

表 12.2.3 三維與三維以上的多維插值法

函 數	說 明
<code>interp3(x,y,z,w,x_i,y_i,z_i, 'method')</code>	求解 $x = x_i$ 、 $y = y_i$ 與 $z = z_i$ 時所相對應的 w_i
<code>interp3(x,y,z,w,x_i,y_i,z_i, 'method', val)</code>	插點的值超出範圍時，則以 <i>val</i> 的值當成插值
<code>interp_n(x₁,x₂,...,w, y₁,y₂,..., 'method')</code>	求解 $x_1 = y_1$, $x_2 = y_2$, ... 時所相對應的 w_i
<code>interp_n(x₁,x₂,...,w, y₁,y₂,..., 'method', val)</code>	插點的值超出範圍時，則以 <i>val</i> 的值當成插值

- 
-
- 三維插值法的結果可利用slice函數來觀看：

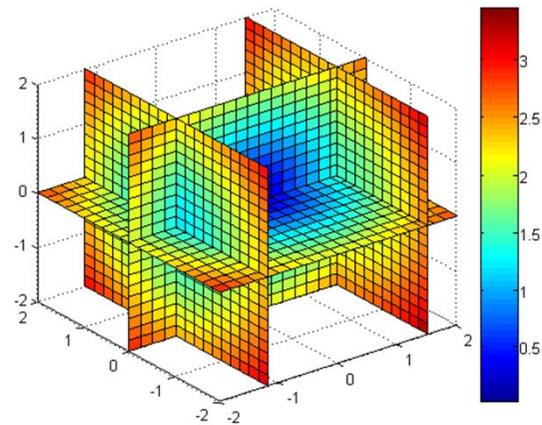
表 12.2.4 三維的 slice 繪圖指令

函 數	說 明
<code>slice(x,y,z,w,sx,sy,sz)</code>	繪出交 x 軸於 s_x ，交 y 軸於 s_y ，以及交 z 軸於 s_z 之平面

- 下面是以 $w(x,y,z) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ 為例，說明如何使用inperp3與slice函數。

```
>> w=sqrt(x1.^2+x2.^2+x3.^2);  
>> x=-2:0.2:2; y=-2:0.2:2; z=-2:0.2:2;  
>> [x1,x2,x3]=meshgrid(x,y,z);
```

```
>> slice(x1,x2,x3,w,[-1.2,1.5],0,0);colorbar
```



```
>> sqrt(0.35^2+0.17^2+0.64^2)
```

```
ans =  
    0.7490
```

```
>> interp3(x1,x2,x3,w,0.35,0.17,0.64,'spline')
```

```
ans =  
    0.7490
```



散佈式資料點插值法

二維的散佈點內插

- 當資料點散佈於平面或空間上時，可以採用散佈式插值法計算
- 散佈式插值法只能計算內插，不能計算外插
- Matlab以griddata函數進行二維的散佈點內插：

表 12.3.1 二維散佈式資料點插值法

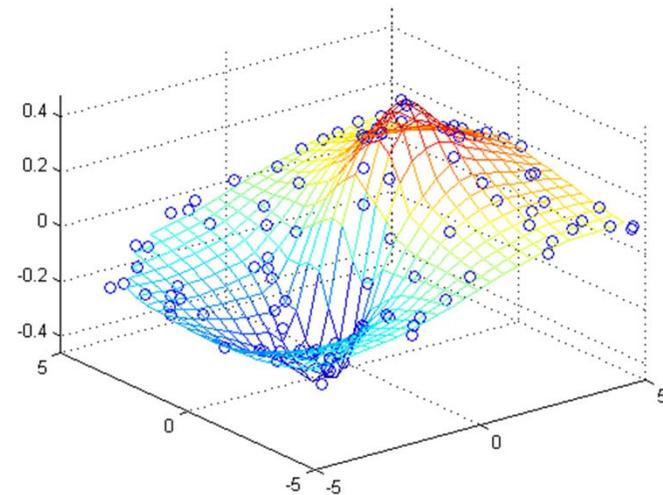
函 數	說 明
<code>griddata(x,y,z,x_i,y_i,'method')</code>	二維的散佈點內插，其中 <i>method</i> 可為
	<code>nearest</code> : 鄰近點插值法
	<code>linear</code> : 線性插值法（預設）
	<code>cubic</code> : 三次多項式插值法

- 下面是二維的散佈點內插的範例

```
>> x=10*rand(1,100)-5;  
>> y=10*rand(1,100)-5;  
>> z=x./(x.^2+y.^2+1);  
>> griddata(x,y,z,1,1)  
ans =  
    0.2759
```

$$z(x, y) = x / (x^2 + y^2 + 1)$$

資料點與擬合之後的圖形：





三維的散佈點內插

- 如果散佈的資料點是三維，則可以利用`griddata3`函數來進行內插：

表 12.3.2 三維散佈式資料點插值法

函 數	說 明
<code>griddata3(x,y,z,w,x_i,y_i,z_i, 'method')</code>	三維的散佈點內插，其中 <i>method</i> 可為
	<code>nearest</code> : 鄰近點插值法
	<code>linear</code> : 二維線性插值法（預設）

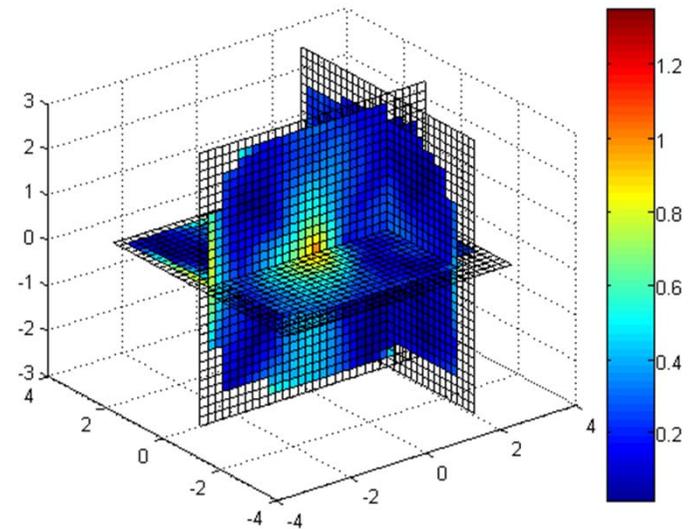
- 下面是三維散佈式資料點內插的作法：

```
>> x=6*rand(1,100)-3;  
>> y=6*rand(1,100)-3;  
>> z=6*rand(1,100)-3;  
>> w=sqrt(x.^2+y.^2+z.^2);
```

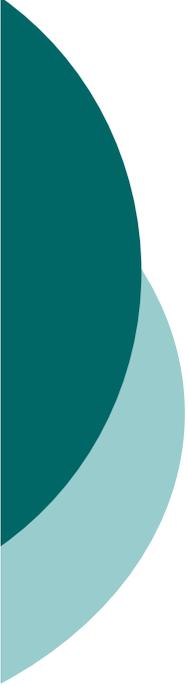
```
>> sqrt(2^2+2^2+2^2)  
ans =  
    3.4641
```

```
>> griddata3(x,y,z,w,2,2,2)  
ans =  
    3.6999
```

$$w(x, y, z) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$



上圖顯示了除了在原點附近之外，多半的
誤差均小於0.2



空間資料分析之插值法

克利金法(Kriging technique)

- 克利金法又名地質統計法(Geostatistics technique)
- 此技術是以南非採礦地質學家D. G. Krige來命名
- 根據資料在空間中分佈的統計特性，推測線性內插係數的一種技術，以簡化的最小自成演算法為基礎，使用變異圖(Variogram)或半變異圖(Semi-variogram)為權重函數
- 基本假設為期望值與變異數只和隨機變數的距離有關，而與其所在空間無關。
- 通常用於從已知點的高程取得表面高程的推測值，可應用於任一現象自點資料產生一個表面



數學上不同趨勢條件假設下的克利金法

- 簡單克利金法(**simple Kriging**)：
 - 不包含「不偏估條件」(**unbiased estimation**)
- 普通克利金法(**ordinary Kriging**)：
 - 包含「平均值為常數」(**constant mean**)假設的「不偏估條件」
- 通用克利金法(**universal Kriging**)：
 - 包含「平均值為某種空間趨勢函數」(**local trend**)假設的「不偏估條件」
- 其他，如：區域克利金法、聯合克利金法及分離克利金法



克利金法推估步驟

- 結構分析(structural analysis)
 - 由歷史資料迴歸統計協變異數(covariance)隨距離變化的情形
 - 決定變異圖或半變異圖函數
- 最佳線性不偏估估計(Best Linear Unbiased Estimation-BLUE)
 - 假設估計值為已知值的線性權重平均
 - 根據不偏估和最小估計誤差變異數兩項原則
 - 利用變異圖或半變異圖導出權重係數值。
- 函數工具: Matlab, Python, R等均有提供

變異圖或半變異圖函數

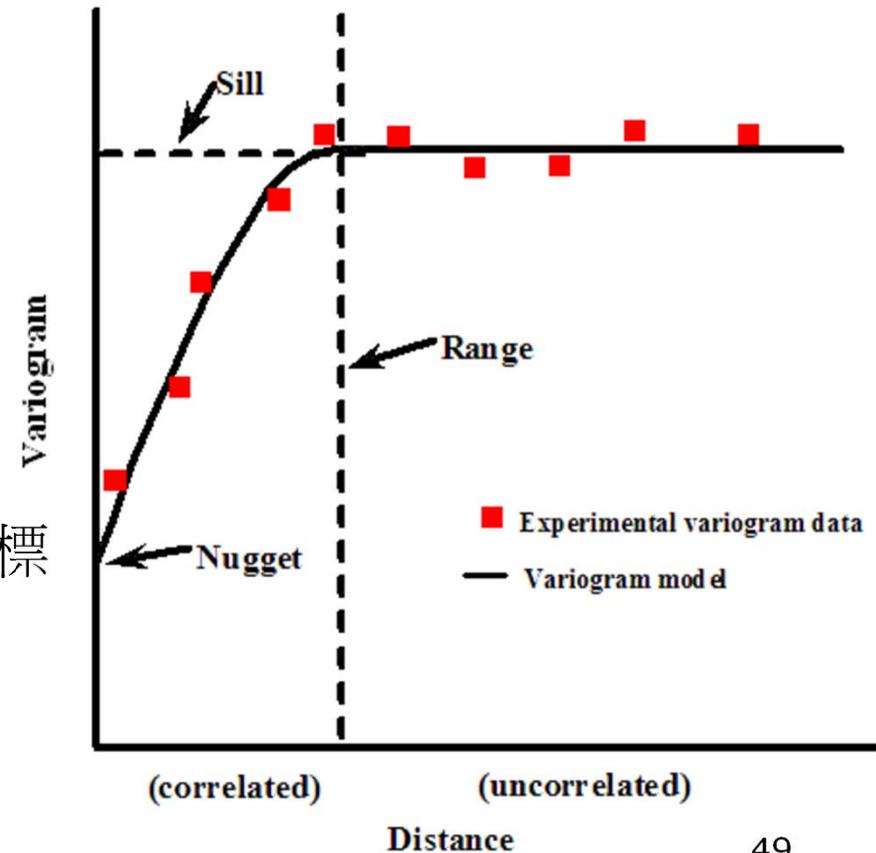
○ 變異圖(Variogram)函數

- 觀測樣本資料的協變異數隨距離變化情形

- Nugget: 碎塊效應
- Sill: 臨界變異值
- Range: 影響範圍

- 函數定義

- $2\gamma(d_{ij}) = E[(Z(u_i) - Z(u_j))^2]$
- $u(x, y)$ 為空間位置座標
- $Z(u)$ 為空間隨機變數
- d_{ij} 為 i 及 j 點距離
- $\gamma(d_{ij})$ 為半變異圖函



半變異圖模式

○ 模式說明

- 半變異圖模式須滿足半變異結構及維度條件，為決定 $\gamma(\mathbf{d}_{ij})$ 需選用已滿足正定條件的模式
- $\gamma(\mathbf{d}_{ij})$ 決定後，即可提供Kriging進行最佳推估

○ 配套模式

- Spherical
- Exponential
- Power
- Gaussian

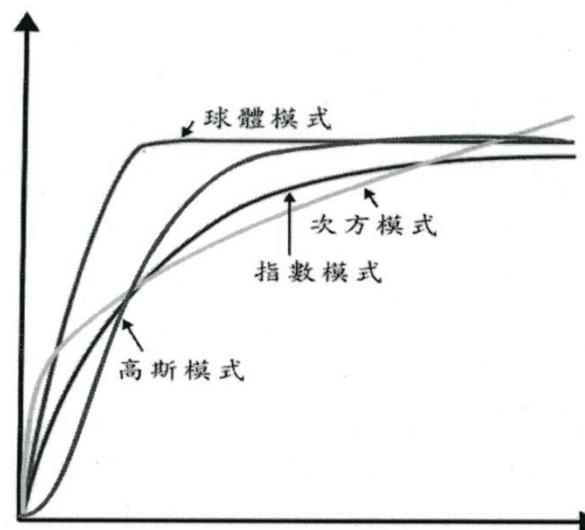


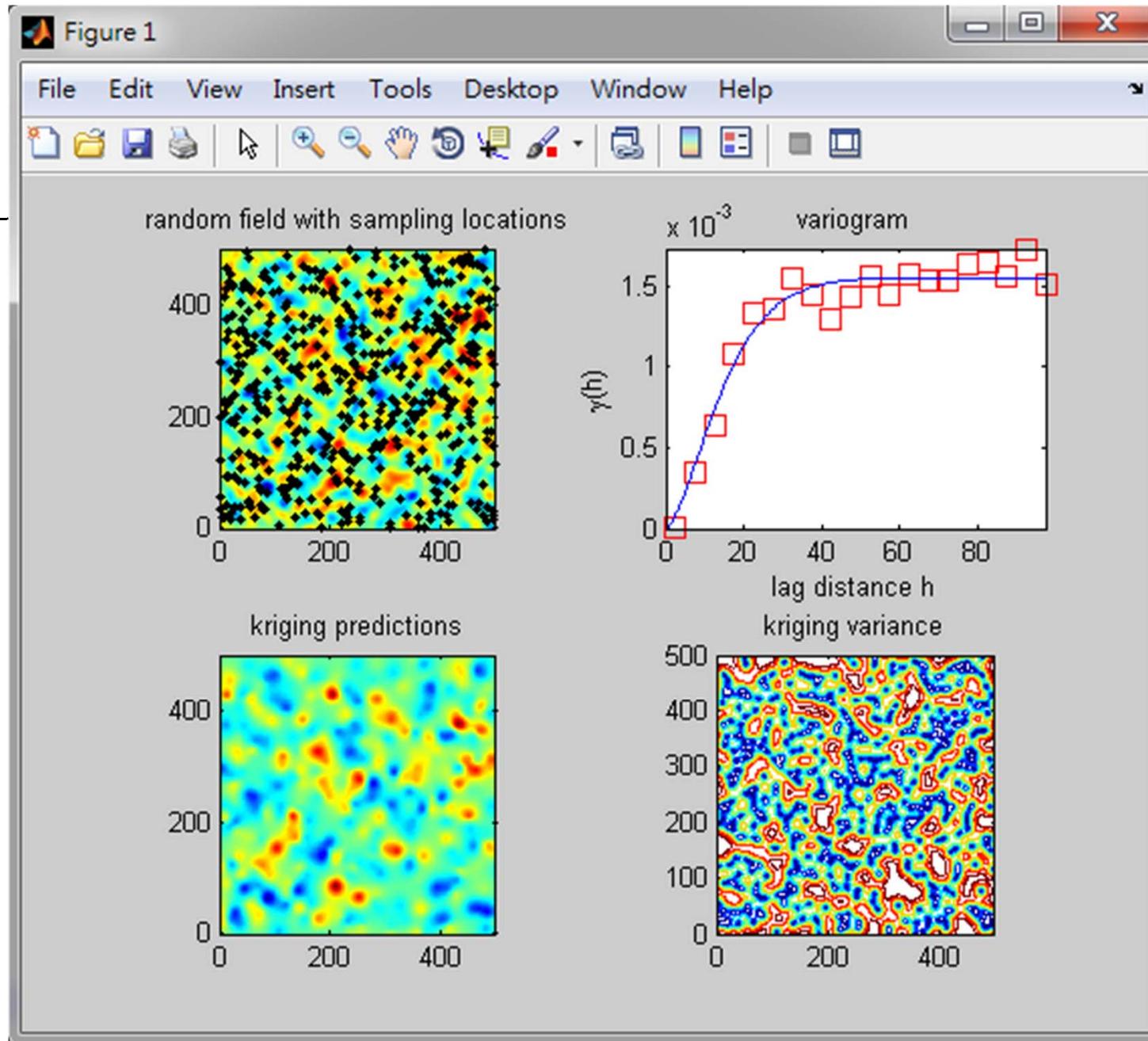
圖 3-3 常用理論半變異元套配模式

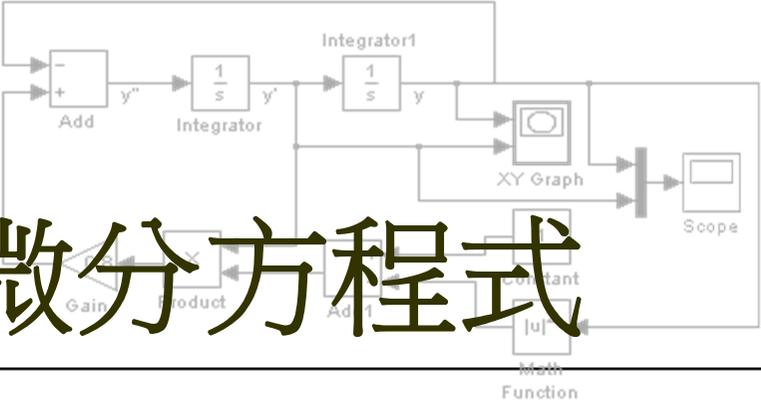
Kriging Example

```
% define the spatial geometry with random autocorrelation pts
[X,Y] = meshgrid(0:500);
Z = randn(size(X));    % Y, Y, Z all are a 500x500 matrix
Z = imfilter(Z,fspecial('gaussian',[40 40],8));
% sample the field: create 500 pts randomly in x, y axes and
% interpolated into z axis
n = 500;
% x, y are 500x1 vectors, 0<=x[i], y[i]<=500
x = rand(n,1)*500;
y = rand(n,1)*500;
% use linear interpolation ('linear', 'cubic','nearest','spline')
z = interp2(X,Y,Z,x,y);
% plot the random field by projecting 3D surf to 2D plan
% at the upper-left corner of the figure
subplot(2,2,1)
imagesc(X(1,:),Y(:,1),Z); axis image; axis xy
hold on
plot(x,y,'.k')
title('random field with sampling locations')
```



```
% calculate the sample variogram by variogram.m
v = variogram([x y],z,'plotit',false,'maxdist',100);
% and fit a spherical variogram by variogramfit.m
% plot at the upper-right corner of the figure
subplot(2,2,2)
[dum,dum,dum,vstruct] =
variogramfit(v.distance,v.val,[],[],[],'model','stable');
title('variogram')
% now use the sampled locations in a Kriging: (x,y,z) is
% observation, (X,Y) is prediction
% the processing bar will show as computing the Kriging
[Zhat,Zvar] = kriging(vstruct,x,y,z,X,Y);
% plot the prediction at the lower-left corner of the figure
subplot(2,2,3)
imagesc(X(1,:),Y(:,1),Zhat); axis image; axis xy
title('kriging predictions')
% plot the contour of prediction data, the contour is plotted at
% the lower-right corner
subplot(2,2,4)
contour(X,Y,Zvar); axis image
title('kriging variance')
```





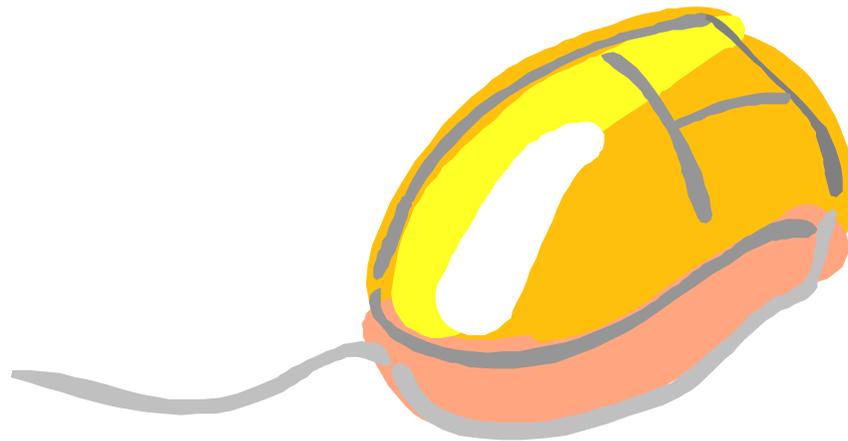
微積分與微分方程式

數值微分

數值積分及積分常見的問題

微分方程式的求解方法

剛性系統及解法



微分的運算

梯度與微分的運算

- 要計算數值微分，可利用gradient函數：

表 13.1.1 梯度運算函數

函 數	說 明
$dy = \text{gradient}(vect, dx)$	計算一維向量 $vect$ 每一個元素所在位置之梯度
$[dAx, dAy] = \text{gradient}(A, dx, dy)$	計算矩陣 A 裡每一個元素於所在位置之 x 與 y 方向的梯度
$[dAx, dAy, dAz] = \text{gradient}(V, dx, dy, dz)$	計算三維陣列 V 裡每一個元素於所在位置之 x 、 y 與 z 方向的梯度



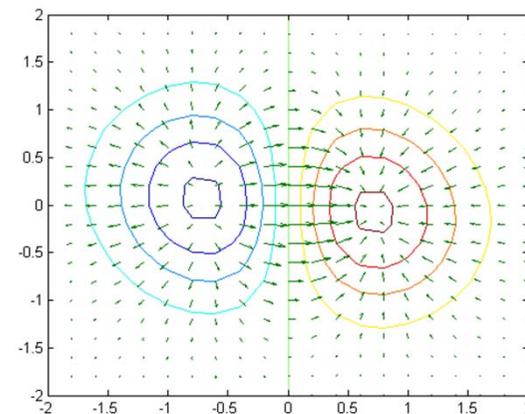
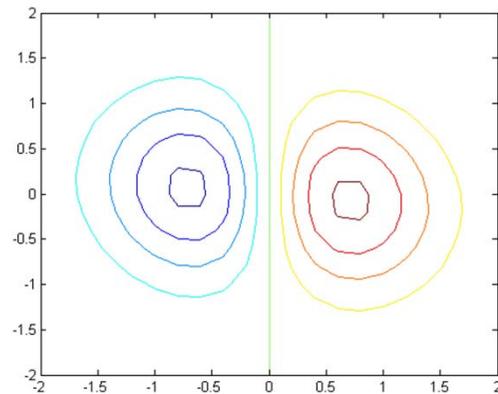
```
>> x=0:2:8
x =
    0     2     4     6     8

>> y=sqrt(x)
y =
    0  1.4142  2.0000  2.4495  2.8284

>> gradient(y,x)
ans =
    0.7071  0.5000  0.2588  0.2071  0.1895
```

- 若資料是二維，則gradient傳回兩個引數，分別代表 x 與 y 方向的梯度：

```
>> [xx,yy]=meshgrid(-2:0.2:2,-2:0.2:2);  
>> zz=xx.*exp(-xx.^2-(yy+0.1*xx).^2);  
>> contour(xx,yy,zz)  
>> [px,py]=gradient(zz,0.2,0.2);  
>> hold on;quiver(xx,yy,px,py);
```



差分的運算

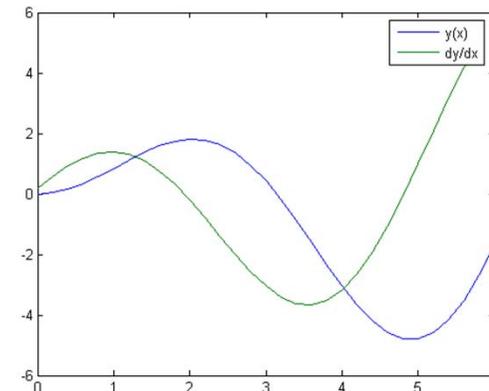
- 元素與元素之間的差值可利用**diff**指令進行差分運算：

表 13.1.2 差分運算函數

函 數	說 明
<code>diff(x)</code>	計算向量 x 的差分
<code>diff(mat, n)</code>	沿著矩陣 mat 的第 n 個維度進行差分的運算

- 差分運算也可以用來估算數據資料的梯度：

```
>> x=0:0.2:6;  
>> y=x.*sin(x);  
>> dy=diff(y)./diff(x);  
>> plot(x,y,x(1:end-1),dy);
```





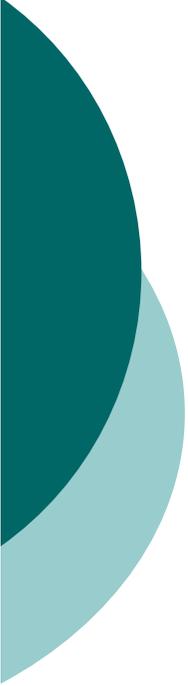
積分運算

單一變數之定積分運算

- Matlab提供了trapz與quad函數來計算數值積分：

表 13.2.1 單一變數的定積分運算函數

函 數	說 明
trapz(<i>y</i>)	間距為 1，以梯形法計算一維向量 <i>y</i> 的積分值。
trapz(<i>x</i> , <i>y</i>)	由 $y = f(x)$ 的關係式，以梯形法計算積分
quad('func', <i>a</i> , <i>b</i> , <i>tol</i>)	利用適應性辛普森法則對函數 <i>func</i> 做積分

- 
-
- 下面的範例是利用**trapz**來計算數值積分：

```
>> x=linspace(0,pi,50);
```

```
>> y=sin(x);
```

```
>> trapz(x,y)
```

```
ans =
```

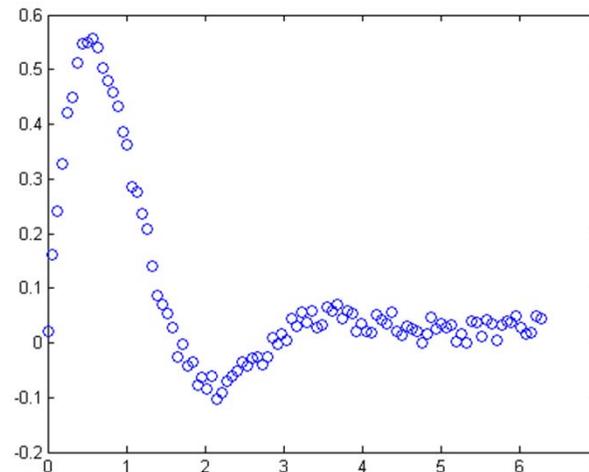
```
1.9993
```

$$\int_0^{\pi} \sin(x) dx$$

-
- 下面是利用梯形積分法對離散的資料點積分：

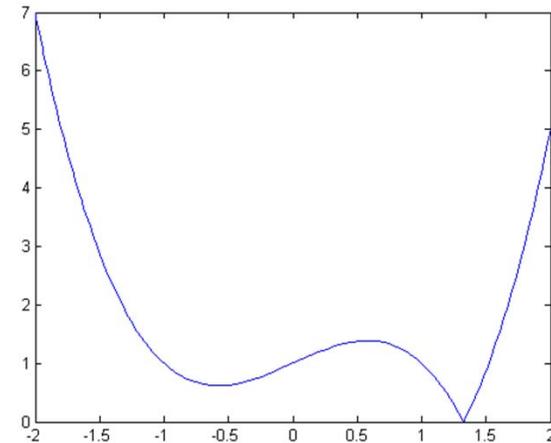
```
>> f=@(x) sin(2*x).*exp(-x);  
>> x=linspace(0,2*pi,100);  
>> y=f(x)+0.05*rand(1,100);  
>> plot(x,y,'o')
```

```
>> trapz(x,y)  
ans=  
    0.5763
```



-
- 如果被積分函數是一個數學函數，則可利用quad函數來積分：

```
>> f=@(x) abs(x.^3-x-1);  
>> fplot(f,[-2,2])  
>> quad(f,-2,2)  
ans =  
    6.8645
```

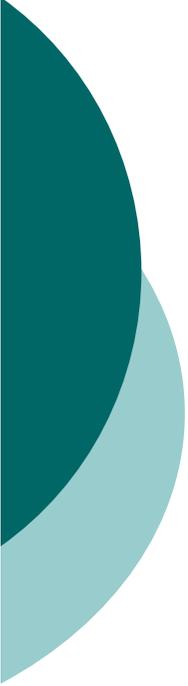


多重積分

- 如要進行多重積分，可利用`dblquad`與`triplequad`函數：

表 13.2.2 多變數的定積分運算函數

函 數	說 明
<code>dblquad('func', x1, x2, y1, y2, tol)</code>	計算 $\int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} func \, dy \, dx$
<code>triplequad('func', x1, x2, y1, y2, z1, z2, tol)</code>	計算 $\int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \int_{z_1}^{z_2} func \, dz \, dy \, dx$

- 
-
- 下面是積分區間是一個矩形（或立方體）的例子：

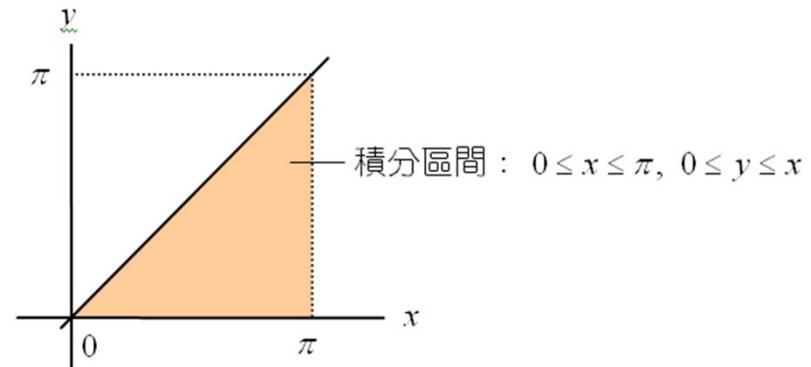
```
>> dblquad('x*y.^2',0,2,0,3)
```

```
ans =  
    18.0000
```

```
>> triplequad('x+y.*z',0,6,0,2,1,4)
```

```
ans =  
    198
```

- 如果區間不是矩形或立方體，可利用邏輯運算子&來定義積分的區間。



例如積分式

$$\int_0^{\pi} \int_0^x \cos(x + 2y) dy dx$$

的被積分函數可定義成

$$\cos(x+2*y) .* (x \geq 0 \ \& \ x \leq \pi \ \& \ y \geq 0 \ \& \ y \leq x)$$

- 
-
- 下面是一些多重積分的範例：

$$\int_0^2 \int_0^{4-2x} 8-x-y \, dy \, dx$$

```
>> dblquad(' (8-x-y) .* (y<=4-2*x) ', 0, 2, 0, 4)
ans =
    24.0000
```

$$\int_0^1 \int_x^1 x^2 \sqrt{1+y^4} \, dy \, dx$$

```
>> dblquad(' x.^2 .* sqrt(1+y.^4) .* (y-x>=0) ', 0, 1, 0, 1)
```

微分方程式的運算

微分方程式的解題器

- Matlab提供了7種解題器
- 所有解題器的語法都相同，只是解題的演算法不同

表 13.3.1 微分方程式求解函數

函數	說明
$[t,y]=\text{solver}(\text{odefun}, [t_0,t_f], \text{ini})$	區間從 t_0 到 t_f ，初值為 ini ，以 solver 方法解微分方程式 odefun
$[t,y]=\text{solver}(\text{odefun}, [t_0,t_1,t_2,\dots,t_f], \text{ini})$	同上，但是只解出特定時間 t_0,t_1,t_2,\dots,t_f 的值

上表中， solver 代表 ode45 、 ode23 、 ode113 、 ode15s 、 ode23s 、 ode23t 與 ode23tb 等7個函數的任意一個。

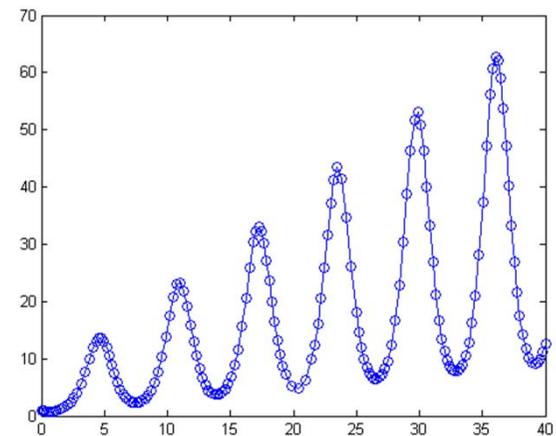
求解微分方程式

- 一階微分方程式可表示成 $y'(t) = f(y(t), t)$

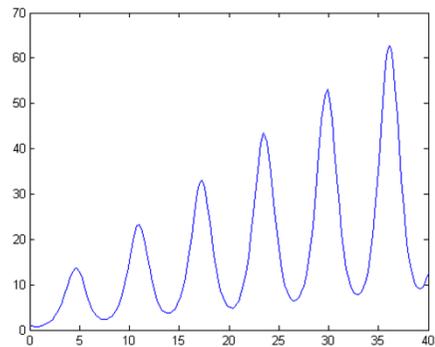
下面是求解一階微分方程式的範例：

```
function dy=func13_1(t,y)
dy=sin(t)-y*cos(t);

>> ode45('func13_1',[0,40],1)
```

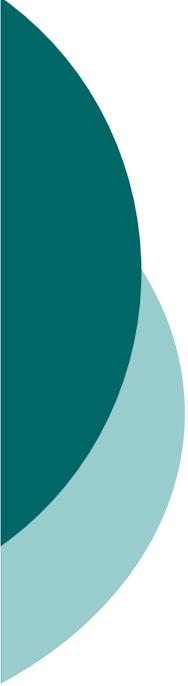


```
>> [t,y]=ode45('func13_1',[0,40],1);  
>> plot(t,y)
```



- 下面的範例是利用匿名函數來定義微分方程式：

```
>> dy=@(t,y) cos(t)+y*cos(t/3);  
>> [t,y]=ode45(dy,[0,40],0);
```

- 
-
- n 階微分方程式可表示成

$$y^{(n)}(t) = f(y^{(n-1)}(t), y^{(n-2)}(t), \dots, y'(t), t)$$

- 在定義 n 階微分方程式時，必須先把它改寫成 n 個一階的微分方程式
- 改寫之後，方程式便有 n 個狀態變數，此時必須以向量來定義它



例如

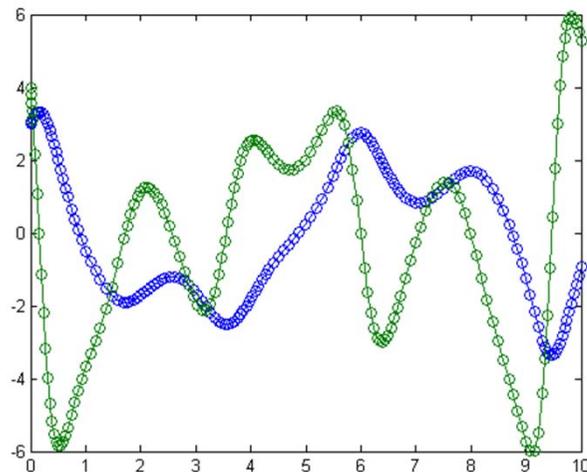
$$y'' = 7.5 \cos t - 0.05y' - y^3$$

可以改寫成下面的標準型式，即二個一階的微分方程式：

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = 7.5 \cos t - 0.05y_2 - y_1^3 \end{cases}$$

```
function dy=func13_2(t,y)
dy=[y(2);
    7.5*cos(t)-0.05*y(2)-y(1)^3];
```

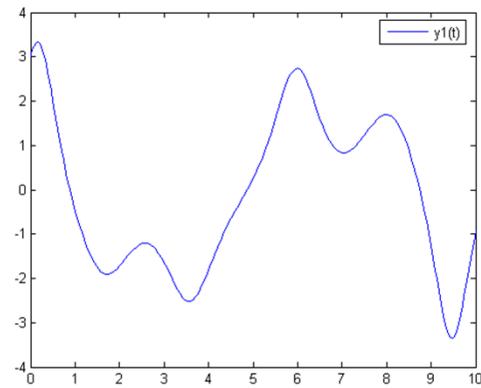
```
>> ode45('func13_2',[0,10],[3,4]) %y(0)=3, y'(0)=4
```



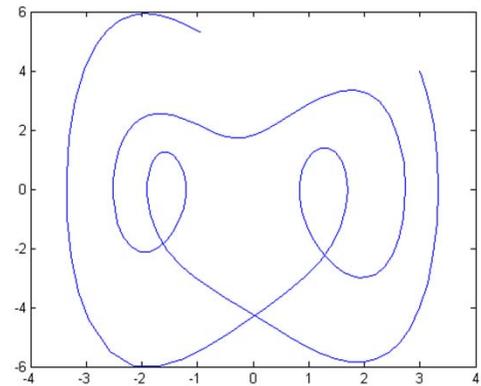
$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = 7.5 \cos t - 0.05 y_2 - y_1^3 \end{cases}$$

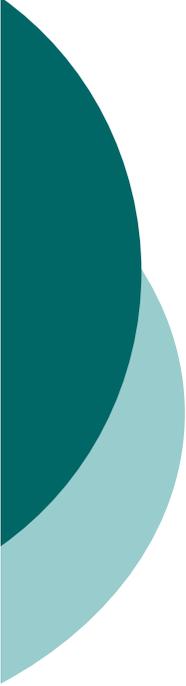


```
>> [t,y]=ode45('func13_2',[0,10],[3,4]);  
>> plot(t,y(:,1));legend('y1(t)')
```



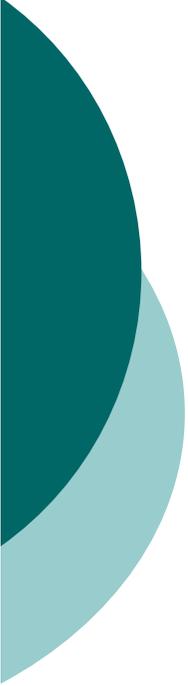
```
>> plot(y(:,1),y(:,2))
```





剛性系統的求解

- 剛性（**stiff**）方程式：方程式解的變化率差異過大
- 以 `ode45` 解剛性方程式時，會因為解題的步長無限的縮小，導致無法順利的解完整個方程式。
- 剛性方程式可以改用`ode15s`或`ode23s`等函數解之。

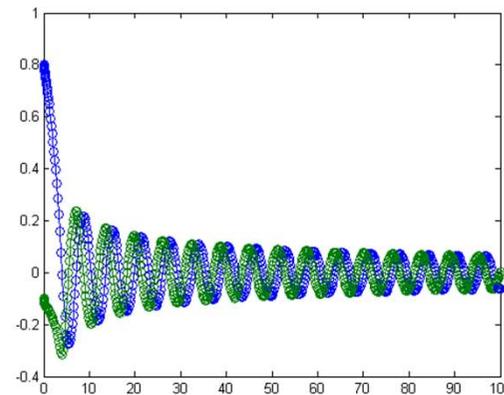
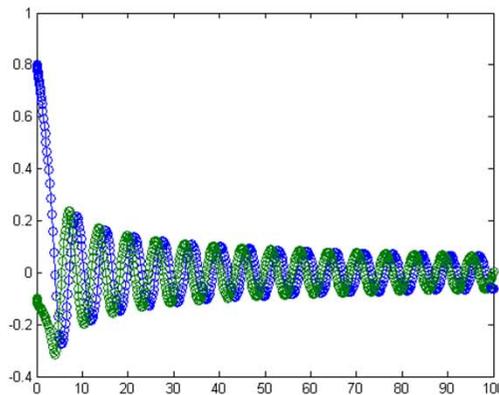
- 
-
- 例如微分方程組

$$\begin{cases} y_1' = y_2 \\ y_2' = -y_1 - \mu y_1^2 y_2 \end{cases}$$

當 μ 值變得很大的時候（例如 $\mu = 150$ ），則為 stiff 系統

$\mu = 10$ 時的方程式（非剛性系統）：

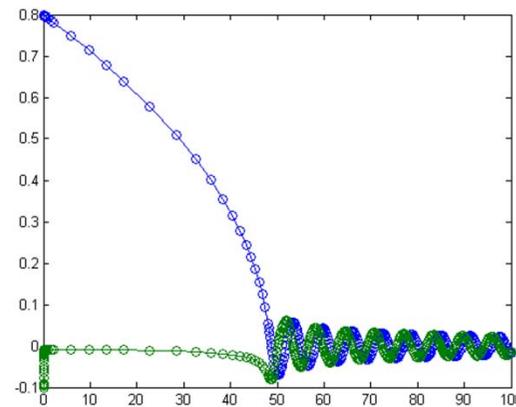
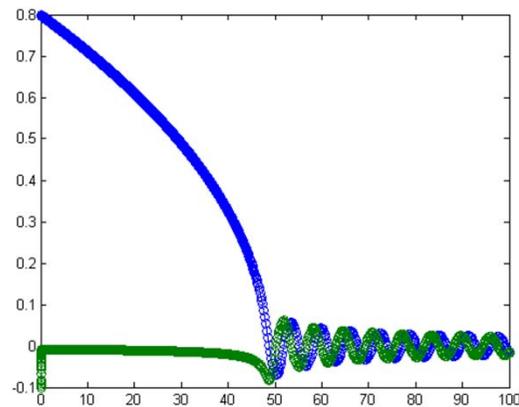
```
>> dy=@(t,y) [y(2);-y(1)-10*y(1)^2*y(2)];  
>> ode45(dy,[0,100],[1.3,-0.1]);  
>> ode15s(dy,[0,100],[1.3,-0.1]);
```



※ ode15s的解題速度較ode45來得慢上許多。因此對於非剛性的微分方程組而言，選擇ode45會有較好的執行效能。

$\mu = 150$ 時的方程式（剛性系統）：

```
>> dy=@(t,y) [y(2);-y(1)-150*y(1)^2*y(2)];  
>> ode45(dy,[0,100],[0.8,-0.1]);  
>> ode15s(dy,[0,100],[0.8,-0.1]);
```



※ 當 $\mu=150$ 時，ode15s比起ode45要快上許多。由此可知選對 ODE 的解題器將會大幅的影響到求解的效率。

解微分方程式的選項

- `odeset`可產生一個特殊的結構，讓ODE解題器可以依這個結構求值：

表 13.3.2 ODE 解題器的選項函數

函數	說明
<code>opts=odeset('par1','val1','par2','val2',...)</code>	依照參數 par_1 的值為 val_1 ，參數 par_2 的值為 val_2 ，建立一個選項結構

表 13.3.3 `odeset` 常用的參數

參數	說明
<code>RelTol</code>	相對誤差容許值，預設值為 10^{-3}
<code>AbsTol</code>	絕對誤差容許值，預設值為 10^{-6}
<code>Refine</code>	設定 <code>Refine</code> 為 n 可以用內插的方式產生 n 倍數目的輸出點
<code>OutputFcn</code>	如果沒有輸出引數，則在解題完畢後，Matlab 會自動呼叫此一函數

```
>> dy=@(t,y) [y(2); 7.5*cos(t)-0.05*y(2)-y(1)^3];  
>> opts=odeset('RelTol',10^-4);  
>> [t,y]=ode45(dy,[0,20],[3,4.2],opts);  
>> plot(y(:,1),y(:,2),'- ',y(:,1),y(:,2),'r.')
```

