

1 APROKSYMACJA FUNKCJI

Na niniejszych zajęciach przedstawiony zostanie problem aproksymacji funkcji. Rozpatrywane będzie zagadnienie dla funkcji jednej zmiennej. W literaturze tematyka ta jest szeroko dyskutowana i rozwijana. Niniejszy rozdział zostanie ograniczony do jednej metody aproksymacyjnej dotyczącej funkcji podanej w postaci dyskretnej. Aproksymacja będzie dokonana w sensie najmniejszych kwadratów.

Niech rozważana funkcja będzie podana w postaci dyskretnej, w N punktach o współrzędnych (x_i, y_i) , dla $i = 1, 2, \dots, N$. Punkty te mogą być wynikiem doświadczenia opisującego pewną zależność pomiędzy wartościami x_i oraz y_i . Dokładna funkcja opisująca tę zależność na ogół nie jest znana. Jednak w wielu przypadkach można zaobserwować charakter tej zależności i na tej podstawie wyznaczyć funkcję aproksymującą zależność między wartościami x_i oraz y_i .

1.1 Metoda najmniejszych kwadratów

Aproksymacja w sensie najmniejszych kwadratów oparta jest na poszukiwaniu takiej krzywej, dla której suma kwadratów różnicy między wartościami danymi oraz wartościami funkcji aproksymującej jest najmniejsza.

Metodę aproksymacji funkcją liniową przedstawiono poniżej.

Dane są punkty (x_i, y_i) , dla $i = 1, 2, \dots, N$. Zależność między wartościami x_i oraz y_i opisuje się prostą $y = ax + b$.

Funkcja określająca błąd przybliżenia to

$$E(a, b) = \sum_{i=1}^N (y_i - (ax_i + b))^2$$

Aby błąd aproksymacji był najmniejszy należy wyznaczyć minimum powyższej funkcji, czyli należy wyznaczyć pochodne cząstkowe względem parametrów określających aproksymującą prostą oraz przyrównać je do zera:

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 \quad \frac{\partial E}{\partial b} = 0$$

Otrzymuje się układ dwóch równań linowych z dwiema niewiadomymi a i b :

$$\begin{cases} a \sum_{i=1}^N x_i^2 + b \sum_{i=1}^N x_i &= \sum_{i=1}^N x_i y_i \\ a \sum_{i=1}^N x_i + b n &= \sum_{i=1}^N y_i \end{cases}$$

Rozwiązanie powyższego układu daje prostą aproksymującą funkcję daną w postaci dyskretnej w sensie najmniejszych kwadratów.

Błąd metody określony jest wzorem

$$e = \sum_{i=1}^N (y_i - (ax_i - b))^2$$

Przykład. 1.1. Wyznaczyć prostą aproksymującą funkcję daną w postaci dyskretnej w Tabeli 8.1.

Tabela 1.1. Dane do Przykładu 1.1.

i	x_i	y_i
1	1.05	-0.15
2	1.95	1.0
3	2.1	2.0
4	3.5	3.2
5	4.05	4.4

Dane: $N = 5$, (x_i, y_i) , dla $i = 1, 2, \dots, 5$, w Tabeli 1.1

Rozwiązanie:

Należy wyznaczyć pomocnicze wielkości

$$\sum_{i=1}^5 x_i = 12.65$$

$$\sum_{i=1}^5 x_i^2 = 37.9675$$

$$\sum_{i=1}^5 x_i y_i = 35.0125$$

$$\sum_{i=1}^5 y_i = 10.45$$

Korzystając z powyżej wyznaczonych wielkości konstruuje się układ równań

$$\begin{cases} 37.9675a + 12.65b &= 35.0125 \\ 12.65a + 5b &= 10.45 \end{cases}$$

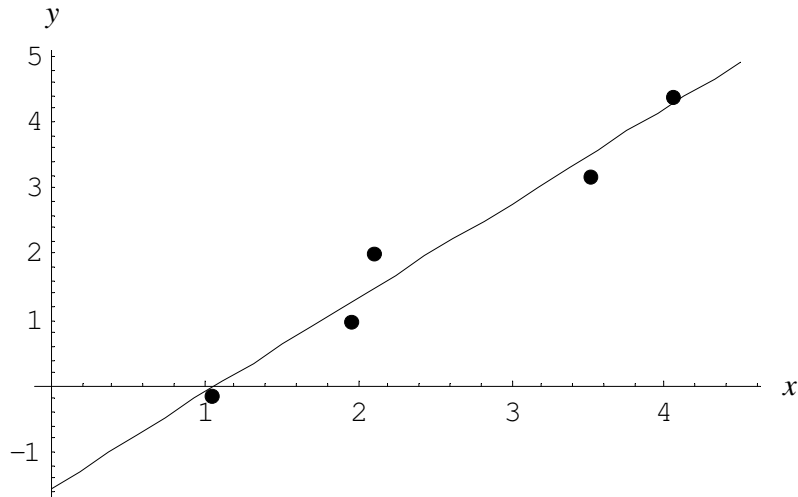
Rozwiązaniem układu równań jest

$a=1.43787$, $b=-1.5478$.

W powyższy sposób otrzymano prostą aproksymującą o wzorze $y=1.43787x-1.5478$.

Błąd metody dla rozważanego zadania wynosi 0.0907459.

Dane punkty oraz prostą aproksymującą przedstawiono na Wykresie 1.1.



Wykres 1.1. Dane w przykładzie 1.1 oraz prosta aproksymująca.

Metodę powyższą można uogólnić na aproksymację wielomianem stopnia m . Wielomian ten zapisany jest w postaci $P_m(x) = \sum_{i=0}^m a_i x^i$. Jeżeli dane jest N punktów, to stopień wielomianu musi być niższy od liczby punktów, czyli $m < N$.

Funkcja opisująca sumę kwadratów różnicy między wartościami funkcji aproksymującej i wartościami danymi jest następująca:

$$E(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^N (y_i - P_m(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m))^2.$$

Aby uzyskać najmniejszy błąd aproksymacji wyznacza się

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = 0 \text{ dla } i = 0, 1, \dots, m.$$

Daje to układ $m+1$ równań liniowych z niewiadomymi a_i dla $i = 0, 1, \dots, m$. Układ ten przedstawiony jest poniżej:

$$\begin{cases} a_0 \sum_{i=1}^N x_i^0 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^1 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^2 + \cdots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^m = \sum_{i=1}^N y_i x_i^0 \\ a_0 \sum_{i=1}^N x_i^1 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^3 + \cdots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} = \sum_{i=1}^N y_i x_i^1 \\ \vdots \\ a_0 \sum_{i=1}^N x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} + \cdots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{2m} = \sum_{i=1}^N y_i x_i^m \end{cases}$$

Rozwiązanie powyższego układu równań daje krzywą aproksymującą w sensie najmniejszych kwadratów.

Przykład 1.2. Wyznaczyć krzywą stopnia trzeciego, aproksymującą funkcję daną w postaci dyskretnej, przedstawioną w Tabeli 1.2

Tabela 1.2. Dane do Przykładu 1.2.

i	x_i	y_i
1	0.3	0.43
2	0.4	0.36
3	0.5	0.35
4	0.6	0.38
5	0.7	0.37
6	0.8	0.373
7	0.9	0.39
8	1.0	0.51
9	1.1	0.6
10	1.2	0.65

Dane: $N = 10$, (x_i, y_i) , dla $i = 1, 2, \dots, 10$, w Tabeli 1.2

$m = 3$.

Rozwiązanie:

Poszukiwany wielomian aproksymacyjny jest postaci: $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$

Należy utworzyć układ równań liniowych:

$$\begin{cases} a_0 \sum_{i=1}^{10} x_i^0 + a_1 \sum_{i=1}^{10} x_i^1 + a_2 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 + a_3 \sum_{i=1}^{10} x_i^3 = \sum_{i=1}^{10} y_i x_i^0 \\ a_0 \sum_{i=1}^{10} x_i^1 + a_1 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{10} x_i^3 + a_3 \sum_{i=1}^{10} x_i^4 = \sum_{i=1}^{10} y_i x_i^1 \\ a_0 \sum_{i=1}^{10} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{10} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{10} x_i^4 + a_3 \sum_{i=1}^{10} x_i^5 = \sum_{i=1}^{10} y_i x_i^2 \\ a_0 \sum_{i=1}^{10} x_i^3 + a_1 \sum_{i=1}^{10} x_i^4 + a_2 \sum_{i=1}^{10} x_i^5 + a_3 \sum_{i=1}^{10} x_i^6 = \sum_{i=1}^{10} y_i x_i^3 \end{cases}$$

Dla rozważanego przykładu układ ten ma postać:

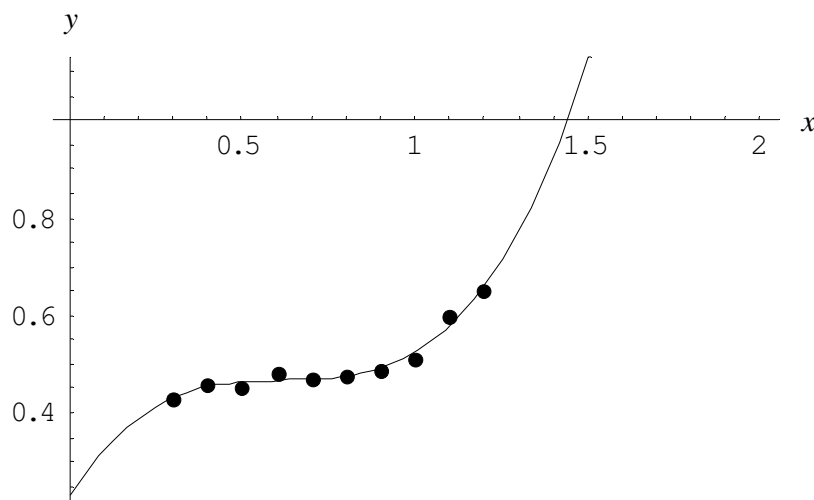
$$\begin{cases} 10a_0 + 7.5a_1 + 6.45a_2 + 6.075a_3 = 5.014 \\ 7.5a_0 + 6.45a_1 + 6.075a_2 + 6.0693a_3 = 3.9252 \\ 6.45a_0 + 6.075a_1 + 6.0693a_2 + 6.30675 = 3.50016 \\ 6.075a_0 + 6.0693a_1 + 6.30675a_2 + 6.73589a_3 = 3.39389 \end{cases}$$

Rozwiązanie powyższego układu daje wielomian aproksymujący:

$$P(x) = 0.232885 + 1.10101x - 1.74615x^2 + 0.936674x^3$$

Wielomian ten oraz dane punkty zostały przedstawione na Wykresie 8.2.

Rozwiązanie to wyznaczono z błędem 0.000117149.



Wykres 1.2. Krzywa aproksymująca stopnia 3 oraz dane punkty.

Często w zjawiskach fizycznych opisywanych w literaturze, zależności poszukiwane są w postaci funkcji wykładniczej lub potęgowej, np:

$$y = be^{ax}$$

$$y = bx^a$$

gdzie a , b są parametrami, które powinny być wyznaczone metodą aproksymacyjną w sensie najmniejszych kwadratów. Wtedy funkcje błędów są, odpowiednio:

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^N (y_i - be^{ax_i})^2$$

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^N (y_i - bx_i^a)^2$$

Przyrównanie pochodnych cząstkowych do zera prowadzi do układu równań nieliniowych. Aby uniknąć trudniejszego rozwiązywania układu równań nieliniowych od rozwiązywania układu równań liniowych, funkcje aproksymujące przekształca się do postaci, która daje w rezultacie różniczkowania układ równań liniowych. Osiąga się taki efekt logarytmując obustronnie rozważane funkcje aproksymujące:

$$\ln y = \ln b + ax \tag{1.1}$$

$$\ln y = \ln b + a \ln x \tag{1.2}$$

Przyjmuje się pomocnicze zmienne $Y = \ln y$, $B = \ln b$, $X = \ln x$ i rozwiązuje zadanie dla liniowej funkcji aproksymującej dla przypadku (1.1)

$$Y = B + ax.$$

Dodatkowo, dla funkcji (1.2) oznacza się $X = \ln x$ i rozwiązuje zadanie dla funkcji

$$Y = B + aX.$$

W obu przypadkach po skonstruowaniu funkcji błędu otrzymuje się układ równań liniowych, którego rozwiązaniem jest para liczb: a oraz B . Ostatecznym rozwiązaniem, parametrami funkcji aproksymujących są: a oraz $b = e^B$.

Przykład 1.3. Wyznaczyć krzywą umocnienia materiału $\sigma = C\varepsilon^n$. Oznaczenia w krzywej umocnienia: σ - naprężenie [Pa], ε - odkształcenie logarytmiczne [1], C - parametr zależny od materiału [Pa], n - parametr zależny od materiału [1]. Charakterystyka umocnienia podana jest w postaci Tabeli 1.3.

Tabela 1.3. Dane do Przykładu 1.3.

i	$\varepsilon_i = x_i$	$\sigma_i = y_i$ [MPa]
1	0.11	403
2	0.13	416
3	0.15	428
4	0.17	440
5	0.18	445
6	0.20	455

7	0.22	465
8	0.23	471
9	0.25	479
10	0.26	483

Dane: $N = 10$, (x_i, y_i) , dla $i = 1, 2, \dots, 10$, w Tabeli 1.3

Należy znaleźć funkcję aproksymującą w postaci funkcji potęgowej $\sigma = C\varepsilon^n$, analogicznej do funkcji $y = bx^a$. Parametrami funkcji aproksymującej są C i n (czyli analogicznie do wprowadzenia teoretycznego b, a)

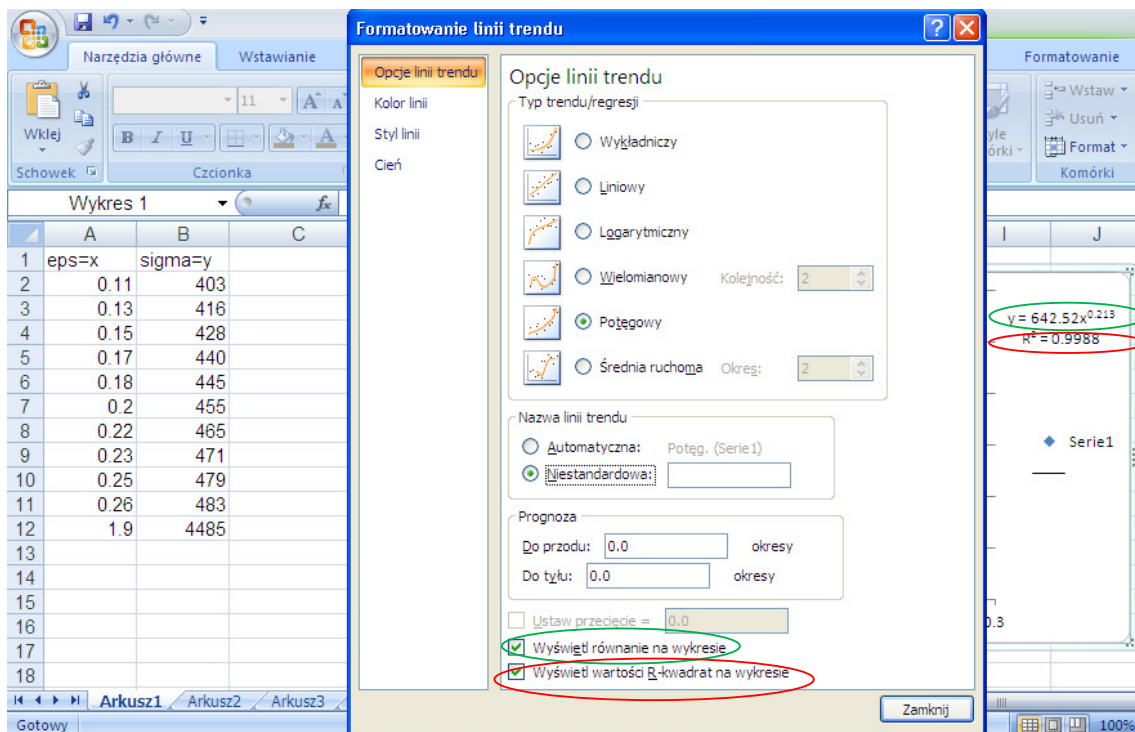
i	$\varepsilon_i = x_i$	$\sigma_i = y_i$ [MPa]	$X_i = \ln(x_i)$	$Y_i = \ln(y_i)$	X_i^2	$X_i Y_i$
1	0.11	403	-2.20727	5.998937	4.872063	-13.2413
2	0.13	416	-2.04022	6.030685	4.162501	-12.3039
3	0.15	428	-1.89712	6.059123	3.599064	-11.4949
4	0.17	440	-1.77196	6.086775	3.139831	-10.7855
5	0.18	445	-1.7148	6.098074	2.940534	-10.457
6	0.20	455	-1.60944	6.120297	2.59029	-9.85024
7	0.22	465	-1.51413	6.142037	2.292583	-9.29983
8	0.23	471	-1.46968	6.154858	2.159947	-9.04565
9	0.25	479	-1.38629	6.171701	1.921812	-8.55579
10	0.26	483	-1.34707	6.180017	1.814607	-8.32494
Σ			-16.95798	61.04250	29.49323	-103.3590

Korzystając z powyżej wyznaczonych wielkości konstruuje się układ równań

$$\begin{cases} 29.49323a - 16.95798B = -103.359 \\ -16.95798a + 10B = 61.0425 \end{cases}$$

Rozwiązaniem układu równań jest: $a = 0.213183$ oraz $B = 6.46577$. Aby uzyskać parametr b krzywej umocnienia należy wyznaczyć $b = e^B = 642.756386353$. Ostatecznie można napisać postać funkcji opisującej krzywą umocnienia materiału: $\sigma = 642.756386353\varepsilon^{0.213183}$ MPa.

Uwaga. Wiele programów posiada funkcje wyznaczania funkcji aproksymującej. W programie Excel jest to opcja „Dodaj linię trendu”. Funkcje aproksymujące, dostępne w Excelu, pokazano na Rys. 1.3. Zwrócić uwagę należy na Typ trendu – wielomianowy. Tłumaczenie na język polski parametru „Kolejność” jest nieodpowiednia, w tym polu wpisywany jest stopień wielomianu aproksymującego.



Rys. 1.3. Opcja „Dodaj linię trendu” w Excelu.

Ponadto warto zwrócić uwagę na opcję wypisywania na ekran równanie krzywej aproksymacji (zielone elipsy). oraz opcję wypisywania wartości parametru R^2 (czerwone elipsy). Wartość tego parametru powinna być jak najbliższa wartości 1.

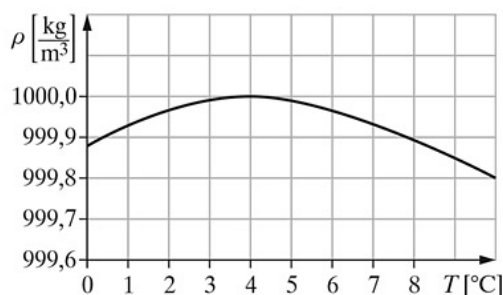
Zadania obliczone wcześniej można wykonać także wykorzystując funkcję aproksymacji w Excelu. Na Rys. 1.3 jest przedstawiona implementacja Przykładu 1.3.

Zadania do samodzielnego rozwiązania (zadania są analogiczne do tych rozwiązanych powyżej). W poniższych zadaniach pojawiają się parametry c_1 , c_2 , c_3 . Są to cyfry za numeru albumu studentki/studenta. c_1 jest ostatnią cyfrą w numerze albumu, c_2 przedostatnią, c_3 – trzecią od końca cyfrą.

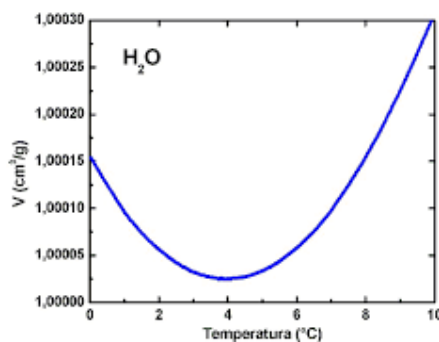
Zadanie 1. Wyznaczyć gęstość wody w temperaturze $t = (-2.5 + c_1/10)^\circ\text{C}$ w oparciu o tabelę, w której przedstawiono gęstość wody w wybranych temperaturach:

i	t_i	$\rho_i [\text{kg/m}^3]$
1	-7	998,92
2	-5	999,30
3	-3	999,58 + $c_2/1000$
4	-1	999,79
5	0	999,87
6	2	999,97
7	4	1000,00
8	6	999,97
9	8	999,89
10	10	999,73

Wykres zależności gęstości i objętości właściwej wody od temperatury przedstawiają rysunki 1.4, 1.5.



Rys. 1.4. Gęstość wody w zależności właściwej od temperatury



Rys. 1.5. Zależność objętości wody od temperatury

Zauważyć należy, że woda ma największą gęstość w temperaturze 4°C.

Zadanie 2. Wyznaczyć wartość logarytmicznej funkcji aproksymującej w punkcie $x=(1.8+c_2/100)$ w oparciu o tabelę z danymi:

i	x_i	y_i
1	1.3	0.21
2	1.4	0.28
3	1.5	0.33
4	1.6	0.39
5	1.7	$0.43+c_3/1000$
6	$1.85+c_2/1000$	0.48
7	2.0	0.52
8	2.2	0.64
9	2.4	0.72

zadanie 3. Sprawdzić, która z podanych aproksymacji:

- funkcją wielomianową (stopnia 1 i 2)
- funkcją potęgową
- funkcją wykładniczą

wprowadza najmniejszy błąd w przypadku aproksymacji wykonanej dla danych zawartych w tabeli:

i	x_i	y_i
1	3	$1.2+c_1/100$
3	5	$1.6-c_2/100$
4	7	1.86
5	9	$2.11+c_3/1000$
6	11	2.33

zadanie 4. Pierwszy matematyczny model rozprzestrzeniania się epidemii i wpływu szczepień rozważał już Daniel Bernoulli w XVIII wieku. Dzisiaj epidemiolodzy bazują na modelach, które po raz pierwszy zostały sformułowane w 1927 roku przez dwóch szkockich naukowców – Andersona i McKendricka oraz Williama Kermacka. Oboje interesowali się matematyką, chociaż nie była ona ich specjalnością. Pierwszy był lekarzem, drugi biochemikiem, który wszystkie obliczenia matematyczne prowadził w pamięci, bo po wypadku w laboratorium w roku 1924 całkowicie oślepnął. W oparciu o ich rozumowanie, można pokazać w jaki sposób rozprzestrzenia się choroba zakaźna.

Załóżmy dla uproszczenia, że każdy chory, zanim nie wyzdorzeje (albo umrze, bo i tak się może zdarzyć), zakaża średnio dwie zdrowe osoby. Liczba zakażonych podwaja się w każdym kroku – z dwóch chorych robi się czterech, z czterech – ośmiu itd. – i rośnie lawinowo. Matematycy mówią, że rośnie w sposób wykładniczy, bo tym wzrostem rządzi funkcja wykładnicza – w tym przypadku 2 do potęgi n , gdzie n jest liczbą oznaczającą numer pokolenia zakażonych. Funkcja nazywa się wykładniczą, bo zmienna jest w wykładniku potęgi.

Oczywiście w praktyce wzrost nie jest nieskończony, bo z czasem w otoczeniu ogniska choroby będą prawie sami inni chorzy (albo ci, którzy już przeszli chorobę i uodpornili się na nią), a więc nie będzie kogo zakażać. Epidemia wytraci impet.

Dokładny rozwój epidemii w czasie można zapisać w postaci nieliniowych równań różniczkowych, których nie daje się rozwiązać dokładnie, analitycznie. Trzeba użyć metod numerycznych (w ramach przedmiotu Matematyka – zastosowania inżynierskie temat będzie poruszany na następnych zajęciach).

Oczywistym jest, że aby zdusić epidemię, trzeba zmniejszyć liczbę nowych zakażeń. Można to osiągnąć przez:

- ograniczenie kontaktu chorych ze zdrowymi;
- szybko lecząc większość chorych (jeśli do dyspozycji jest lekarstwo), aby nie zdążyli zakażyć innych;
- przeprowadzenie szczepień ochronnych.

Szczepienia są najtańszą i najbardziej efektywną metodą walki z chorobami zakaźnymi. Dzięki nim w społeczeństwie jest duży odsetek ludzi, którzy są od początku odporni na chorobę. I nawet jeśli pojawi się osoba zakażona, to będzie miała wokół siebie ograniczony krąg tych, których może zakażyć. Tym samym szczepienia nie tylko uodparniają pojedyncze osoby, lecz także chronią całą populację, utrudniając zainicjowanie epidemii. Nazywa się to odpornością grupową, populacyjną lub stadną.

Parametrem, którym posługują się epidemiolodzy w celu predykcji rozwoju epidemii, jest **bazowy współczynnik reprodukcji**. Dla każdej choroby, a nawet regionu, może on być inny. Ma on jednak prosty sens: oznacza średnią liczbę osób, które zakażony jest w stanie sam wtórnie zakażyć (w przykładzie choroby i epidemii z początku zadania bazowy współczynnik reprodukcji wynosił 2).

Za każdym razem, kiedy ten współczynnik jest większy od 1 , pojawia się zagrożenie epidemią. Żeby nie nastąpił wykładniczy wzrost zachorowań, średnia liczba osób, którą chory zakaża, powinna być mniejsza od 1 . Kolejne potęgi liczb mniejszych od 1 nie rosną, tak jak np. potęgi 2 , lecz maleją do zera, co oznacza, że choroba w naturalny sposób wygasa.

Jeśli mamy do czynienia z chorobą, dla której bazowy współczynnik reprodukcji wynosi 2 , to oznacza, że powinniśmy zaszczepić więcej niż co drugą osobę, tj. ponad 50% populacji. Bo wtedy średnia liczba nowych zakażeń przypadająca na jedną osobę zmaleje poniżej 1 . Statystyczny chory, który normalnie zakażyłby dwie osoby, średnio zakaży mniej niż jedną, gdyż ponad połowa ludzi, z którymi się zetknie, dzięki szczepieniom będzie odporna. I epidemia nie wybuchnie. Oczywiście taki wniosek można wysnuć, zakładając, że 100% szczepień daje stu procentową odporność.

Bazowy współczynnik reprodukcji:

odra – 95%

krztusiec – 92-94 %

błonica i różyczka – 83-86 %

świnka – 75-86 %.

(Cytowane z wyborcza.pl „Ilu z nas trzeba zaszczepić, aby uniknąć epidemii? Matematyka masowych szczepień”, z pewnymi korektami i uzupełnieniami. Cytowane w celu wprowadzenia do zadania obliczeniowego, a nie dyskusji światopoglądowych)

Wyznaczyć bazowy współczynnik reprodukcji dla rozwoju populacji chorych (epidemii) w oparciu na danych zawartych w tabeli:

i	nr pokolenia epidemicznego = x_i	liczba zakażonych = y_i
1	1	$(10+c_2)105$
2	2	$(10+c_2)110$
3	3	$(10+c_2)116$
4	4	$(10+c_2)121$
5	5	$(10+c_2)128$
6	6	$(10+c_2)134$
7	7	$(10+c_2)(136+c_1)$
8	8	$(10+c_2)148$
9	9	$(10+c_2)155$
10	10	$(10+c_2)(158+c_3)$

Wyjaśnić znaczenie wyznaczonych parametrów (w sensie rozwoju epidemii) funkcji aproksymującej (w tym bazowy współczynnik reprodukcji). Czy epidemia wygasa czy rozwija się?