Acta Agrophysica, 2004, 3(1), 99-105

NIEBEZPIECZEŃSTWA STOSOWANIA TRANSFORMACJI FUNKCJI W APROKSYMACJI METODĄ NAJMNIEJSZYCH KWADRATÓW PRZY MODELOWANIU ZAGADNIEŃ ROLNICZYCH

Leszek Kuchar

Katedra Matematyki, Akademia Rolnicza, ul. Grunwaldzka 53, 50-357 Wrocław
e-mail: Kuchar@ozi.ar.wroc.pl

Streszczenie. Standardowym narzędziem dopasowania funkcji do danych empirycznych jest metoda najmniejszych kwadratów (MNK), zgodnie z którą minimalizowana jest suma kwadratów odchyleń obserwacji od wartości dobieranej funkcji. Zagadnienie sprowadza się do rozwiązywania układu równań, w którym postać dopasowywanej funkcji determinuje jego typ. Autorzy wielu prac, mając na celu pominięcie trudnego, nieliniowego układu równań, wykonują transformację funkcji uzyskując prostsze zagadnienie liniowe. Postępowanie takie niesie za sobą jednak niebezpieczeństwa, które mogą prowadzić do rozwiązywania zupełnie innego zagadnienia od zamierzonego. W szczególności należy do nich zmiana kryterium dopasowania funkcji oraz analiza dobranej funkcji bez uwzględniania transformacji błędów. W pracy podano niebezpieczeństwa dla typowych przekształceń funkcji oraz przedstawiono przykład liczbowy.

Słowa kluczowe: metoda najmniejszych kwadratów, aproksymacja funkcji, miary dopasowania

WSTĘP

W naukach rolniczych bardzo często istnieje potrzeba opisania zjawiska przy pomocy funkcji matematycznych. Standardowym narzędziem dopasowania funkcji do danych empirycznych jest metoda najmniejszych kwadratów (MNK), w której wybór postaci funkcji wpływa na skalę trudności zagadnienia [1,3,5]. W szcze-gólności, przy aproksymacji funkcją nieliniową istnieje dość powszechne postępo-wanie transfermowania zmiennych mające na celu ominięcie problemów technicznych poprzez linearyzacje zagadnienia [1,2,5]. Przedstawione jednak postępowanie niesie za sobą niebezpieczeństwa, które mogą prowadzić do rozwiązywania zupełnie innego zagadnienia od zamierzonego i otrzymania nieoczekiwanego wyniku [3,5].

METODA MNK I TRANSFORMACJA ZMIENNYCH

Zgodnie z metodą MNK dla danych obserwacji (y_i, x_i) i = 1,2,...n, gdzie y_i obserwacje zmiennej zależnej a x_i obserwacje zmiennej niezależnej (ogólnie – x_i może być wektorem zmiennych niezależnych) dopasowanie funkcji y = f(x) wykonane jest poprzez znalezienie minimum:

$$\min_{\underline{a}} F(\underline{a}) = \min_{\underline{a}} \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(\underline{a}, x_i)]^2 \tag{1}$$

względem wektora parametrów $\underline{a}$ funkcji f(x) /funkcję f(x) wraz z parametrami $\underline{a}$ oznaczono jako f($\underline{a}$,x)/. Wiadomo, że powyższe zagadnienie sprowadza się do rozwiązania układu równań:

$$\frac{\partial F(\underline{a})}{\partial \underline{a}} = 0 \tag{2}$$

o stopniu równym ilości parametrów wektora $\underline{a}$ [3,4]. Postać funkcji y = f(x) determinuje typ układu równań (2) /liniowy, nieliniowy/, który jest bardzo ważny ze względów numerycznych. Niekiedy, jeśli jest to możliwe, mając na celu ominięcie rozwiązywania trudnego, nieliniowego układu równań (2) – wykonywana jest transformacja funkcji f(x) postaci: g(y) = g[f(x)] sprowadzająca problem do zagadnienia liniowego względem parametrów $\underline{a}$.

Przedstawione postępowanie niesie za sobą niebezpieczeństwa i w konsekwen-cji prowadzi do:

- zmiany kryterium (1) dopasowania funkcji i minimalizowania sumy kwadratów różnic $[g(y_i) – g(f(\underline{a},x_i))]^2$ funkcji g(x);
- oceny aproksymacji funkcji y = f(x) uzyskanej na drodze transformacji odwrotnej do funkcji g(y) = g[f(x)] poprzez nieuwzględnienie transformacji błędów;
- potencjalnie źle numerycznie uwarunkowanego układu równań względem parametrów $\underline{a}$.

W przypadku drugiego z wymienionych niebezpieczeństw postępowanie byłoby poprawne gdyby nie wykonywano transformacji odwrotnej – jednak z punktu widzenia badanego zjawiska nie jest to interesujące, bowiem opisywaną zmienną jest cecha y a nie g(y).

Wybór funkcji f(x), g(y) w każdym przypadku determinuje postać kryterium (1) z tych też powodów linearyzacja zagadnień powinna być przeprowadzana bardzo ostrożnie z pełną kontrolą błędów aproksymacji [3,4,5].

DOPASOWANIA FUNKCJI W PRZYPADKU TRANSFORMACJI LOGARYTMICZNEJ I WYKŁADNICZEJ

Szczególnie częstym przypadkiem spotykanym w modelowaniu procesów rolniczych jest transformacja danych przy użyciu funkcji logarytmicznej lub wykładniczej [1,3,5]. W tej sytuacji dysponujemy logarytmami lub wartościami funkcji wykładniczej zmiennej zależnej - co modyfikuje kryterium dopasowania funkcji (1) do następujących postaci:

$$\min_{\underline{a}} F(\underline{a}) = \min_{\underline{a}} \sum_{i=1}^{n} [\ln \frac{y_i}{f(\underline{a}, x_i)}]^2 \tag{3}$$

$$\min_{\underline{a}} F(\underline{a}) = \min_{\underline{a}} \sum_{i=1}^{n} [e^{y_i} - e^{f(\underline{a}, x_i)}]^2 \tag{4}$$

W przypadku wzoru (3) prowadzi to do zmiany kryterium sum bezwzględnych różnic do równie ważnej, lecz innej normy, sum relatywnych. Różnica posługiwania się kryteriami 1, 3-4 jest zauważalna i szczególnie widoczna na przykładzie wybranych wartości umieszczonych w tabeli 1. Dla rozważanych danych sumy kwadratów różnic wartości obserwowanych i estymowanych wahają się od 3 do 4,60·10^43 i w istotny sposób zależą od rzędu wartości obserwacji. Dobór parametrów $\underline{a}$ w metodzie MNK wykonywany jest tak, aby największą wagę nadać największym różnicom; dla transformacji logarytmicznej obserwacji $y_2 = 0,01$, transformacji wykładniczej $y_3 = 100$, podczas gdy w przypadku braku transformacji wagi wszystkich trzech obserwacji y_i są jednakowe. Jak widać w konsekwencji dla różnych kryteriów otrzymywane będą różne wartości wektora $\underline{a}$, a niebezpieczeństwo w estymacji tkwi w sytuacji gdy rozwiązania znacznie się różnią i mogą nie być akceptowane.

Ocena dopasowania funkcji rutynowo wykonywana jest w oparciu o kwadrat współczynnika korelacji RR określanego jako stopień wyczerpywania zmienności całkowitej przez model [2,5]:

$$RR = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2} \tag{5}$$

gdzie: dodatkowo $\hat{y}_i$ oznacza oszacowanie obserwacji y_i przy pomocy danej funkcji czy modelu, natomiast $\overline{y}$ średnią arytmetyczną dla zmiennej y.

W przypadku transformacji logarytmicznej i wykładniczej oceny dopasowania przyjmują odpowiednio postacie:

$$RR = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(\ln y_i - \widehat{\ln y_i})^2}{\sum_{i=1}^{n}(\ln y_i - \overline{\ln y})^2} \tag{6}$$

$$RR = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(\exp(y_i) - \widehat{\exp(y_i)})^2}{\sum_{i=1}^{n}(\exp(y_i) - \overline{\exp(y)})^2} \tag{7}$$

Tabela 1. Przykładowe wartości obserwacji i ich oszacowań dla różnych transformacji
Table 1. Example of data and data fitting using different transformation

Wartości obserwacji Observed value	Wartości oszacowań Estimated value	Transformacja – Transformation		
y_i	$\hat{y}_i$	brak non	logarytmiczna logarithmic	wykładnicza exponential
0,10	1,10	1,00	5,74	3,61
0,01	1,01	1,00	21,30	3,01
100,00	101,00	1,00	0,000099	4,60·10^43
Suma kwadratów różnic Sum squares 7 errors		3,00	27,040099	≈ 4,60·10^43

W każdym przypadku transformacja wpływa na postać miary dopasowania funkcji i w każdym przypadku jest ona inna. W różny też sposób określa zmienność całkowitą badanego zjawiska [3,5].

Niebezpieczeństwa błędnej aproksymacji przy transformacji zmiennych (w każdym przypadku) związane są również z rozkładem obserwacji. W tym przypadku linearyzacja niekiedy prowadzi do rozwiązania, które nie jest optymalne, ale może być zaakceptowane chociaż z góry o tym nie wiadomo. Generalnie, należy unikać transformacji funkcji chyba, że odpowiednie zagadnienie nieliniowe jest trudne lub niemożliwe do rozwiązania. Zawsze należy jednak wykonać predykcję obserwacji i oszacowanie miar dopasowania funkcji.

PRZYKŁAD

Kalibracja automatycznego sterownika wykazała bezwładność jego działania mierzoną w sekundach (y) dla temperatur bliskich 0°C (x) zgodną z poniższymi danymi (20 obserwacji):

x:	-9	-8	-7	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0	k (k=1,...10)
y:	.1	.00001	.2	.00001	.3	.00001	.1	.1	.0001	.0005	$e^{-(k-1)^2}$

Opis zależności pomiędzy temperaturą a bezwładnością zaproponowano zgodnie z następującą funkcją:

$$y(x) = e^{a_0x^2 + a_1x + a_2} \tag{8}$$

Nieznane współczynniki a_0, a_1, a_2 wyznaczono metodą MNK korzystając wcześniej z transformacji logarytmicznej: lny = ln (f(x)) = $a_0x^2+a_1x+a_2$ – szacując je w oparciu o liniowy model regresji wielokrotnej postaci:

$$\ln y = a_0z + a_1x + a_2 \qquad (z = x^2) \tag{9}$$

Kwadrat współczynnika korelacji wielokrotnej w tym przypadku wyniósł RR = 0,88 (istotny na poziomie $\alpha = 0{,}001$), a współczynniki odpowiednio:
$a_0= –0{,}462$, $a_1= –2{,}357$, $a_2= –0{,}320$. Aproksymację logarytmu bezwładności czasowej sterownika przedstawiono na rysunku 1 po stronie lewej.
Zgodnie jednak z założeniem o kształcie procesu (8) za opis zjawiska przyjęto funkcję:

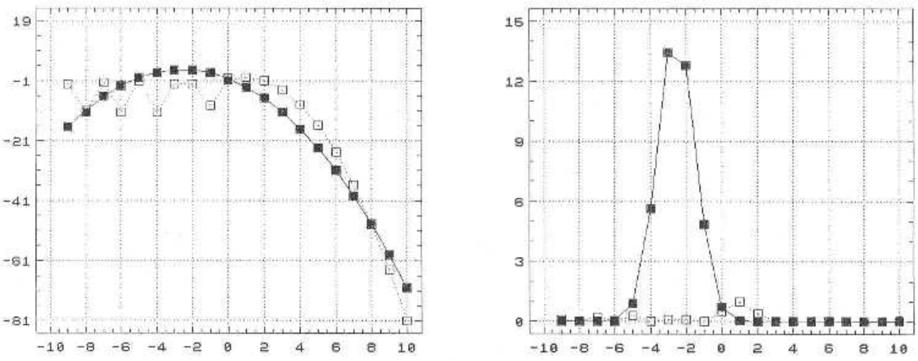
$$y(x) = e^{-0{,}462x^2 - 2{,}357x - 0{,}320} \tag{10}$$

Wartość współczynnika RR obliczona na podstawie predykcji z równania (10) wskazała wartość RR = 0 (dopasowanie funkcji umieszczono na rysunku 1 po stronie prawej). Uzyskana wartość współczynnika RR = 0 wskazuje na bezużyteczność równania (10) do opisu badanego zjawiska, chociaż dopasowanie wartości zlogarytmowanych jest bardzo dobre. Dobierając jednak funkcje do opisu zależności jesteśmy zainteresowani dopasowaniem funkcji postaci (8) a nie (9). W omawianym przypadku funkcja (8) dopasowana została zgodnie z kryterium (3) nie zaś zgodnie z kryterium (1) a ocenę wykonano w oparciu o wzór (6) dla logarytmów obserwacji z inaczej wyznaczoną zmiennością całkowitą.

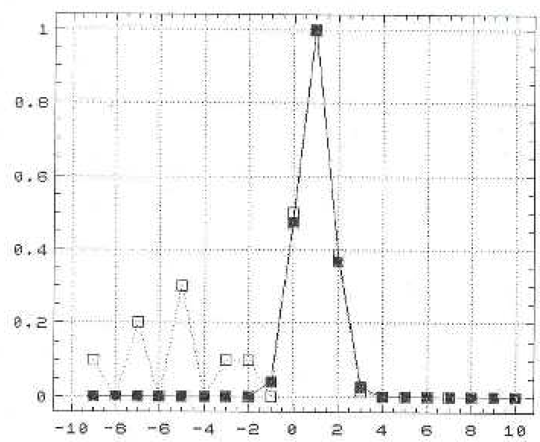
Aproksymacja funkcji (8) wykonana zgodnie z klasycznym postępowaniem (kryterium (1), układ równań (2)) poprzez rozwiązanie – w tym przypadku – układu równań nieliniowych pozwala na uzyskanie dużej zgodności dopasowania z danymi obserwacyjnymi (RR = 0,85). Otrzymaną funkcję postaci:

$$y(x) = e^{-0{,}869x^2 - 1{,}828x - 0{,}449} \tag{11}$$

przedstawiono na rysunku 2.



Rys. 1. Aproksymacja logarytmu bezwładności czasowej sterownika – ln(y) funkcją kwadratową (wykres z lewej strony, RR=0,88) oraz bezwładności czasowej sterownika – y funkcją wykładniczą uzyskaną przy pomocy zagadnienia linearyzowanego (wykres z prawej strony, RR = 0)
Fig. 1. Stearing module data transformed by logarithm – ln(y) fitted by quadratic function (left, RR = 0.88), and stearing module simple data (y) fitted by exponential function using linearization (right, RR = 0)



Rys. 2. Aproksymacja bezwładności czasowej sterownika - y funkcją wykładniczą uzyskaną jako rozwiązanie zagadnienia nieliniowego (RR = 0,85)
Fig. 2. Stearing module data (y) fitted by exponential function; coefficients obtained as a solution of non-linear system (RR=0.85)

WNIOSKI

Z przeprowadzonych w niniejszej pracy rozważań można wysnuć następujące wnioski:

1. Transformacja zmiennych w aproksymacji funkcji metodą najmniejszych kwadratów może prowadzić do rozpatrywania innego zagadnienia od zamierzonego poprzez zmianę normy dopasowania funkcji.
2. Powrót do oryginalnych zmiennych przez przekształcenie odwrotne może nieść za sobą duże błędy dopasowania funkcji a aproksymacja nie mieć sensu.
3. Należy unikać transformacji funkcji chyba, że odpowiednie zagadnienie nieliniowe jest trudne lub niemożliwe do rozwiązania. Zawsze należy wykonać predykcję obserwacji i oszacowanie miar dopasowania funkcji, które dają realną wartość opisu zjawiska.

PIŚMIENNICTWO

1. **Chow G.C.:** Econometrics. Mc Graw Hill Inc., NY, 1983.
2. **Dąbrowski A., Gnot S., Michalski A., Srzednicka J.:** Statystyka 15 godzin z pakietem Statgraphics. Wyd. AR we Wrocławiu, Wrocław, 1994.
3. **Ratkowsky D.A.:** Handbook of Nonlinear Regression Models. Marcel Dekker Inc., 1989.
4. **SAS Institute Inc.:** SAS/STAT User's Guide Release 6.03. Cary, NC, 1988.
5. **Walpole R.E., Myers R.H.:** Probability and Statistics for Engineers and Scientists, Mac Millan Publ. Comp., New York, NY, 1993.

UNCERTAINTIES OF LSM APPROXIMATION USING TRANSFORMED FUNCTION IN MODELLING AGRICULTURAL PROCESSES

Leszek Kuchar

Department of Mathematics, University of Agriculture
ul. Grunwaldzka 53, 50-357 Wrocław
e-mail: Kuchar@ozi.ar.wroc.pl

Abstract. Least Square Method (LSM) as the most often used procedure in approximation fits function to the data by minimizing squared residuals. The above problem is equivalent to solving the system of equations represented by the model. It often happens, when non-linear model is selected, non-linear equation system is replaced by linear system as a consequence of function linearization and problem simplification. In this case function transformation determine different criterion of fitting, and the method estimates a different model. In the paper, uncertainties of Least Square Method (LSM) approximation and example of data fitting using linearization of exponential function are shown.

Keywords: least square method, data approximation, linear and non-linear fitting