

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
ВІННИЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. М.І. ПИРОГОВА

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

для практичних занять з навчальної дисципліни

**СУЧАСНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ В БІОЛОГІЇ
ТА ТЕЛЕМЕДИЦИНА**

**з підготовки доктора філософії всіх форм навчання
на третьому (освітньо-науковому) рівні вищої освіти**

**галузі знань 09 – Біологія
спеціальності: 091 – Біологія**

Мова навчання: українська

2020 рік

Вінниця

РОЗРОБЛЕНО ТА ВНЕСЕНО: Вінницький національний медичний університет ім. М.І. Пирогова, відділ аспірантури, докторантури

РОЗРОБНИК:

д.т.н, проф. А.Я. Кулик



Обговорено на засіданні кафедри біологічної фізики, інформатики та медичної апаратури Вінницького національного медичного університету ім. М.І. Пирогова та рекомендовано до затвердження на центральній методичній раді / науковій комісії

“18” вересня 2020 року, протокол № 2

Затверджено на центральній методичній раді / науковій комісії

“05” жовтня 2020 року, протокол № 2

Практичне заняття № 1.

Інтерполяція, апроксимація та екстраполяція даних (4 год).

Мета роботи: Отримати навички в оброблюванні отриманих експериментальних даних і визначенні аналітичних виразів для моделювання.

Знати: Принципи оброблювання отриманих експериментальних даних і алгоритми, призначені для цього.

Вміти: Вибрати ефективний метод оброблювання отриманих експериментальних даних і програмні продукти, необхідні для цього.

Короткі теоретичні відомості

Мета інтерполяції – побудова функції $F(x)$, яка в окремих точках X_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$), які називають вузлами інтерполяції, приймає значення $F(X_0) = Y_0, F(X_1) = Y_1, F(X_2) = Y_2, \dots, F(X_n) = Y_n$. Це означає, що в цих точках значення знайденої функції $F(x)$ збігаються з результатом експерименту. Завжди існує лише один інтерполяційний поліном, але знайти його можна різними способами.

Кінцево-різничний метод (Ньютона-Грегорі) є найбільш поширеним. Інтерполяційний поліном в цьому випадку має вигляд

$$F_N(X) = C_0 + C_1(X - X_0) + C_2(X - X_0)(X - X_1) + \dots + C_n(X - X_0)(X - X_1) \dots (X - X_{n-1}) \quad (1.1)$$

Коефіцієнти C_i знаходять з рівнянь $F_N(X_i) = Y_i, i = 0, 1, 2, \dots, n$, які дозволяють записати систему

$$\begin{aligned} C_0 &= Y_0; \\ C_0 + C_1(X_1 - X_0) &= Y_1; \\ C_0 + C_1(X_2 - X_0) + C_2(X_2 - X_0)(X_2 - X_1) &= Y_2; \\ &\vdots \\ C_0 + C_1(X_n - X_0) + C_2(X_n - X_0)(X_n - X_1) + \dots + \\ + C_n(X_n - X_0)(X_n - X_1) \dots (X_n - X_{n-1}) &= Y_n; \end{aligned} \quad (1.2)$$

Якщо крок $X_{i+1} - X_i = h$, то можна отримати різничні вирази

$$\begin{aligned}
C_0 &= Y_0; \\
C_1 &= \frac{Y_1 - Y_0}{h} = \frac{\Delta Y_0}{h}; \\
C_2 &= \frac{Y_2 - 2Y_1 + Y_0}{2h^2} = \frac{\Delta^2 Y_0}{2h^2}; \\
&\vdots \\
C_j &= \frac{\Delta^j Y_0}{(j!)h^j};
\end{aligned} \tag{1.3}$$

де $\Delta^j Y_0$ – права різниця порядку j в точці Y_0 .
Тоді поліном набуває вигляду

$$\begin{aligned}
F_n(X) &= Y_0 + \frac{\Delta Y_0}{1!h}(X - X_0) + \frac{\Delta^2 Y_0}{2!h^2}(X - X_0)(X - X_1) + \dots + \\
&+ \frac{\Delta^n Y_0}{n!h^n}(X - X_0)(X - X_1)\dots(X - X_{n-1}).
\end{aligned} \tag{1.4}$$

Нехай функція задана у вигляді таблиці (табл. 3.1). Тоді, виходячи з наведеної формули (3.4), коефіцієнти полінома будуть складати:

Таблиця 1.1 – Приклад завдання функції

j	x_j	y_j
0	4	1
1	6	3
2	8	8

$$\begin{aligned}
C_0 &= 1; \\
C_1 &= \frac{1}{2} \cdot 2 = 1; \\
C_2 &= \frac{(8 - 2 \cdot 3 + 1)}{2 \cdot 2^2} = \frac{3}{8}; \\
C_3 &= \frac{1}{6} \cdot \frac{4}{8} = \frac{1}{12}.
\end{aligned}$$

Таким чином, поліном Ньютона-Грегорі набуває вигляду

$$\begin{aligned}
F_3(x) &= 1 + 1 \cdot (x - 4) + \frac{3}{8} \cdot (x - 4) \cdot (x - 6) + \frac{1}{12} \cdot (x - 4) \cdot (x - 6) \cdot (x - 8) = \\
&= \frac{1}{24} (2x^3 - 27x^2 + 142x - 240).
\end{aligned}$$

Поліном Лагранжа описується виразом

$$F_n(x) = \sum_{j=0}^n y_j L_j(x), \tag{1.5}$$

$$L_j(x) = \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\dots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\dots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\dots(x_j-x_n)}. \quad (1.6)$$

Тут поліноми $L_j(x)$ степені n є добутками n лінійних співмножників, тобто $F_n(x)$ може мати максимальну степінь n . При цьому $L_j(x_j) = 1$, а $L_j(x_i) = 0$ при $j \neq i$.

Тоді поліном Лагранжа для прикладу табл. 1.1 буде мати вигляд

$$\begin{aligned} F_3(x) &= 1 \cdot \frac{(x-6)(x-8)(x-10)}{(4-6)(4-8)(4-10)} + 3 \cdot \frac{(x-4)(x-8)(x-10)}{(6-4)(6-8)(6-10)} + \\ &+ 8 \cdot \frac{(x-4)(x-6)(x-10)}{(8-4)(8-6)(8-10)} + 20 \cdot \frac{(x-4)(x-6)(x-8)}{(10-4)(10-6)(10-8)} = \\ &= \frac{1}{24} (2x^3 - 27x^2 + 142x - 240) \end{aligned}$$

Поліноміальна інтерполяція не забезпечують неперервність похідних функції $y(x)$ і може давати значні похибки в проміжках між вузлами. Крім цього, вона погано пристосована для екстраполяції і, зазвичай, не забезпечує асимптотичну поведінку функції $y(x)$ при зміні аргументу x за межами інтервалу інтерполяції. Часто зі збільшенням кількості вузлів похибка такої інтерполяції не лише не зменшується, а й починає зростати.

Від цих недоліків вільна **інтерполяція з використанням сплайн-функцій**. Сплайн (splain) в перекладі з англійської означає «гнучка лінійка». Цей клас функцій можна інтерпретувати як лінію, яку утворює гнучка лінійка, закріплена в ряді точок (вузлах інтерполяції). Математично сплайн – спеціальний поліном, який приймає у вузлах значення $y(x) = y_i = y(x_i)$ і забезпечує неперервність в них похідних. Зазвичай необхідно забезпечити першої і другої похідних, для чого достатньо використати сплайн-поліноми третього порядку (кубічні сплайни).

Виходячи з викладеного, умови потребують, щоб:

- сплайни стикалися в заданих точках (вузлах) $S_i(x_i) = y_i$ та $S_{i+1}(x_i) = y_i$;
- в місцях дотику сплайнів були рівні перші і другі похідні $S'_{i+1}(x_i) = S'_i(x_i)$ та $S''_{i+1}(x_i) = S''_i(x_i)$;
- виконувались додаткові умови $S'_1(x_0) = 0$ та $S''_n(x_n) = 0$.

Кубічний сплайн обчислюється за формулою

$$S(x) = \frac{(x_{i+1} - x)^2(2(x - x_i) + h)}{h^3} y_i + \frac{(x - x_i)^2(2(x_{i+1} - x) + h)}{h^3} + \\ + \frac{(x_{i+1} - x)^2(x - x_i)}{h^2} S'(x_i) - \frac{(x - x_i)^2(x - x_{i+1})}{h^2} S'(x_{i+1}), \quad (1.7)$$

де h – крок інтерполяції.

Перші похідні розраховуються при допомозі формул чисельного диференціювання за трьома точками:

$$S'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad \text{для } i = 1, 2, \dots, n-1; \\ S'(x_0) = \frac{4y_1 - y_2 - 3y_0}{2h} \quad \text{для } i = 0; \\ S'(x_n) = \frac{3y_n + y_{n-2} - 4y_{n-1}}{2h} \quad \text{для } i = n. \quad (1.8)$$

У розглянутого локально завданого сплайна неперервні лише нульова та перша похідна. Для глобально завданих кубічних сплайнів неперервною повинна бути також друга похідна.

Хоча сплайн-інтерполяція може реалізовуватись і за умови змінного кроку h_i , але його значна зміна $\left(\frac{h_{\max}}{h_{\min}} > 4 \right)$ призводить до втрати переваг сплайнів і похибка суттєво зростає.

Розглянуті раніше види кусково-лінійної інтерполяції можна розглядати як спотворені сплайни, у яких неперервна лише нульова похідна.

Прогнозування асимптотичної поведінки $y(x)$ за межами границь $[a, b]$ здійснюється за допомогою *лінійної екстраполяції* за формулами чисельного диференціювання:

$$y(x) = y(x_0) + \frac{(x - a)(4y_1 - y_2 - 3y_0)}{2h} \quad \text{для } x \leq a; \\ y(x) = y_n + \frac{(x - b)(3y_n + y_{n-2} - 4y_{n-1})}{2h} \quad \text{для } x \geq b. \quad (1.9)$$

В загальному випадку *апроксимація* – наближений опис однією функцією заданого вигляду іншої функції, яка задається масивом даних. Якщо крива повинна проходити через всі точки, що задані таблицею, то це можна

зробити методами інтерполяції. При іншому підході дані апроксимують з використанням таблиці, але не обов'язково, щоб функція чітко проходила через всі точки. Такий підхід називається припасуванням кривої, яку прагнуть провести так, щоб відхилення від табличних даних було мінімальним. Зазвичай користуються методом найменших квадратів різниць між табличними значеннями і формованою кривою, суть якого описується формулою

$$E = \sum_{i=0}^n (g(x_i) - y_i)^2, \quad (1.10)$$

де y_i – таблично завдана апроксимована функція;
 $g(x_i)$ – апроксимуюча функція.

Частіше за все апроксимуючу функцію $g(x)$ вибирають у вигляді лінійної комбінації складових

$$g(x) = C_1 g_1(x) + C_2 g_2(x) + \dots + C_k g_k(x). \quad (1.11)$$

Якщо у вигляді утворювальної функції $g(x)$ використовують ортогональні поліноми, для яких $\sum g_i(x_i) g_j(x_j) = 0$ при $i \neq j$, то алгоритм суттєво спрощується.

Прикладом можуть бути **функції Чебишева** $T_n(x)$ визначаються диференціальним рівнянням:

$$T_n(x) = \frac{2^n \cdot n!}{(2n)!} \sqrt{x^2 - 1} \frac{d^n}{dx^n} \left((x^2 - 1)^{n-\frac{1}{2}} \right). \quad (1.12)$$

На практиці користуються більш простими формулами для отримання ортогональних поліномів Чебишева:

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos x) \quad (1.13)$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad (1.14)$$

що являють собою поліноми степені n .

Розв'язок рівнянь (1.12) – (1.14) дозволяє отримати ряд ортогональних функцій, обмежених інтервалом $x \in [-1, 1]$ і описуваних виразами (1.15).

$$\begin{aligned}
T_0(x) &= 1, \\
T_1(x) &= x, \\
T_2(x) &= 3x^2 - 1, \\
T_3(x) &= 4x^3 - 3x, \\
T_4(x) &= 8x^4 - 8x^2 + 1, \\
T_5(x) &= 16x^5 - 20x^3 + 5x, \\
T_6(x) &= 32x^6 - 48x^4 + 18x^2 - 1, \\
T_7(x) &= 64x^7 - 112x^5 + 56x^3 - 7x, \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{1.15}$$

Для реалізації алгоритму необхідно визначити степінь поліному n поліному $T(x)$, а також межі a і b зміни аргументу x . Для $i = 0, 1, \dots, n$ на відрізку $[-1, 1]$ потрібно сформувати сітку оптимальних значень аргументу у вузлах чебишевської інтерполяції

$$x'_i = \cos\left(\frac{2i+1}{n+1} \cdot \frac{\pi}{2}\right). \tag{1.16}$$

Після цього значення x'_i приводиться до відрізка $[a, b]$

$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} x'_i. \tag{1.17}$$

Для $k = 0, 1, \dots, n$ та $i = 0, 1, \dots, n$ розраховуються коефіцієнти C_k

$$C_k = \frac{2}{n+1} \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot \cos\left(\frac{k\pi(2i+1)}{2(n+1)}\right). \tag{1.18}$$

В результаті розрахунків отримуються коефіцієнти C_0, C_1, \dots, C_n поліному $T(x')$, який припасовує функцію $f(x)$, тобто здійснюється апроксимація $f(x)$ поліномом $T(x')$.

Завдання.

За отриманим індивідуальним завданням отримати необхідну, виходячи з експериментальних даних.

Література:

Кулик А.Я. Експеримент в медицині. Комп'ютерні системи та інформаційні технології / А.Я. Кулик, Т.Є. Вуж, Б.Ф. Коваль. – Вінниця: ВНМУ ім. М.І. Пирогова, 2018. – 145 с.

Практичне заняття № 2.

Згладжування даних експерименту (4 год).

Мета роботи: Отримати навички у первинному оброблюванні отриманих експериментальних даних і усуненні можливих викидів, зумовлених нечіткістю експерименту.

Знати: Принципи первинного оброблювання отриманих експериментальних даних і алгоритми, призначені для цього.

Вміти: Вибрати ефективний метод оброблювання отриманих експериментальних даних і програмні продукти, необхідні для цього.

Короткі теоретичні відомості

Згладжування даних експерименту є спеціальною процедурою осереднення за допомогою інтерполяційних поліномів, яка дозволяє отримати уточнене значення \bar{y}_i за заданим значенням y_i та ряду найближчих значень $\dots, y_{i-1}, y_i, y_{i+2}, \dots$, відомих із випадковою похибкою.

Лінійне згладжування за трьома точками реалізується за допомогою формул:

$$\begin{aligned}\bar{y}_0 &= \frac{5y_0 + 2y_1 - y_2}{6}; \\ \bar{y}_i &= \frac{y_{i-1} + y_i + y_{i+1}}{3}, 1 \leq i \leq n-1; \\ \bar{y}_n &= \frac{5y_n + 2y_{n-1} - y_{n-2}}{6}.\end{aligned}\tag{2.1}$$

Лінійне згладжування за п'ятьма точками передбачає використання формул:

$$\begin{aligned}
\bar{y}_0 &= \frac{3y_0 + 2y_1 + y_2 - y_4}{5}; \\
\bar{y}_1 &= \frac{4y_0 + 3y_1 + 2y_2 + y_3}{10}; \\
\bar{y}_i &= \frac{y_{i-2} + y_{i-1} + y_i + y_{i+1} + y_{i+2}}{5}, 2 \leq i \leq n-2; \\
\bar{y}_{n-1} &= \frac{y_{n-3} + 2y_{n-2} + 3y_{n-1} + 4y_n}{10}; \\
\bar{y}_n &= \frac{3y_n + 2y_{n-1} + y_{n-2} - y_{n-4}}{5}.
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Нелінійне згладжування за сімома точками забезпечує осереднення на засадах полінома третьої степені і реалізується за допомогою формул:

$$\begin{aligned}
\bar{y}_0 &= \frac{39y_0 + 8y_1 - 4(y_2 + y_3 - y_4) + y_5 - 2y_6}{42}; \\
\bar{y}_1 &= \frac{8y_0 + 19y_1 + 16y_2 + 6y_3 - 4y_4 - 7y_5 + 4y_7}{42}; \\
\bar{y}_2 &= \frac{-4y_0 + 16y_1 + 19y_2 + 12y_3 + 2y_4 - 4y_5 + y_6}{42};
\end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned}
\bar{y}_i &= \frac{7y_i + 6(y_{i+1} + y_{i-1}) + 3(y_{i+2} + y_{i-2}) - 2(y_{i+3} + y_{i-3})}{21}, 3 \leq i \leq n-3; \\
\bar{y}_{n-2} &= \frac{y_{n-6} - 4y_{n-5} + 2y_{n-4} + 12y_{n-3} + 19y_{n-2} + 16y_{n-1} - 4y_n}{42}; \\
\bar{y}_{n-1} &= \frac{4y_{n-6} - 7y_{n-5} - 4y_{n-4} + 6y_{n-3} + 16y_{n-2} + 19y_{n-1} + 8y_n}{42}; \\
\bar{y}_n &= \frac{-2y_{n-6} + 4y_{n-5} + y_{n-4} - 4y_{n-3} - 4y_{n-2} + 8y_{n-1} + 39y_n}{42}.
\end{aligned}$$

Приклади лінійного згладжування за трьома і п'ятьма точками наведені у табл. 2.1, а нелінійного за сімома – у табл. 2.2.

Таблиця 2.1 – Приклад лінійного згладжування за трьома і п'ятьма точками ($n = 9$)

i	y_i	\bar{y}_i за 3 точками	\bar{y}_i за 5 точками	Точне значення y	i	y_i	\bar{y}_i за 3 точками	\bar{y}_i за 5 точками	Точне значення y
0	0,9	0,97	0,992	1	5	6,1	5,97(3)	6,044	6
1	2,12	1,98	1,995	2	6	6,92	7,05(6)	7,024	7
2	2,92	3,06(3)	2,998	3	7	8,15	8,04	8,004	8
3	4,15	3,99	4,038	4	8	9,05	9	8,957	9

4	4,9	5,05	4,998	5	9	9,8	9,825	9,91	10
---	-----	------	-------	---	---	-----	-------	------	----

Таблиця 2.2 – Приклад лінійного згладжування за сімома точками ($n = 9$)

i	y_i	\bar{y}_i за 7 точками	Точне значення y	i	y_i	\bar{y}_i за 7 точками	Точне значення y
0	0,7	0,7011429	0,69314718	5	1,99	1,950952381	1,945910149
1	1,08	1,0871429	1,09861228	6	2,04	2,07(3)	2,079441542
2	1,39	1,385	1,38629436	7	2,22	2,191428571	2,197224577
3	1,64	1,6242857	1,60932791	8	2,28	2,302857143	2,302585093
4	1,76	1,7995238	1,79175946	9	2,42	2,412619048	2,397895273

Завдання.

За отриманим індивідуальним завданням отримати необхідну, виходячи з експериментальних даних.

Література:

Кулик А.Я. Експеримент в медицині. Комп'ютерні системи та інформаційні технології / А.Я. Кулик, Т.Є. Вуж, Б.Ф. Коваль. – Вінниця: ВНМУ ім. М.І. Пирогова, 2018. – 145 с.

Технічні засоби

1. Персональні комп'ютери, підключені до мережі.
2. Мультимедійний проектор.
3. Програмні продукти вільного або частково вільного розповсюдження.

Контрольні заходи та питання до заліку: основне запитання, додаткові, допоміжні.