МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Невинномысский технологический институт (филиал

МЕТОДЫ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИЙ

Методические указания к выполнению лабораторной работы

15.03.04 Автоматизация технологических процессов и производств

Невинномысск 2021

В методических указаниях изложены основные сведения о приближении набора экспериментальных данных эмпирической функцией одной переменной методом наименьших квадратов, даны решения линейной и нелинейной задач метода наименьших квадратов в традиционной и матричной формах, приведены основные показатели качества аппроксимации, рассмотрены меры повышения качества эмпирических уравнений. Даны примеры построения эмпирических уравнений с помощью современных программных средств решения математических задач.

Составитель: *к. т. н., доцент Болдырев Д.В.*

Ответственный редактор: *к. т. н., доцент В.М. Рейдер*

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Целью работы является усвоение основных понятий, связанных с аппроксимацией функций одной переменной эмпирическими зависимостями, сущности метода наименьших квадратов, приобретение навыков построения математических моделей линейных и нелинейных объектов с помощью современных программных средств решения математических задач.

1 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

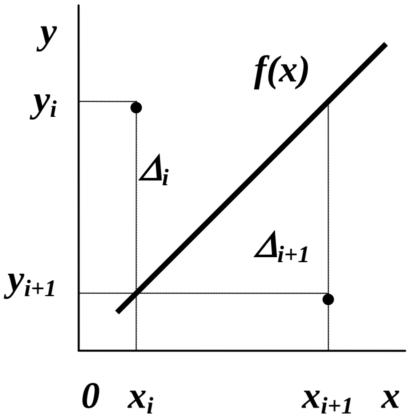
1.1 Основные сведения об аппроксимации

Эмпирические (т. е. полученные «из опыта») уравнения применяются для приближённой замены (*аппроксимации*) неизвестной зависимости между переменными x и y. На практике их значения получают в ходе экспериментального исследования реального объекта, поэтому они всегда содержат в себе ошибки определения. Не требуется, чтобы аппроксимирующая функция $y=f(x)$ проходила через все точки $\{x_i, y_i,\ i=1,\dots n\}$, тем самым повторяя допущенную погрешность. Достаточно, чтобы она располагалась в их окрестности.

Меру соответствия измеренных значений y_i и величин $f(x_i)$, рассчитанных с помощью эмпирического уравнения, можно оценить различными способами. В методе наименьших квадратов (МНК) критерием «близости» считают сумму квадратов их отклонений

$$S = \sum_{i=1}^{n}\left[f(x_i) - y_i\right]^2 = \sum_{i=1}^{n}\Delta_i^2 ,$$

которую называют также функцией невязки.



Каждое отклонение возводится в квадрат, чтобы при суммировании исключить влияние его знака и избежать эффекта взаимной компенсации:

$$\Delta_i = -\Delta_{i+1} = \Delta$$

$$\Delta_i + \Delta_{i+1} = \Delta + (-\Delta) = 0$$

$$\Delta_i^2 + \Delta_{i+1}^2 = \Delta^2 + (-\Delta)^2 = 2\cdot\Delta^2$$

Нахождение коэффициентов эмпирического уравнения методом наименьших квадратов проводится в следующем порядке:

1. Выбирается форма уравнения $f(x, \beta_1, \beta_2, \ldots \beta_m)$, исходя из физической природы задачи или из интуиции исследователя ($\beta_1, \beta_2, \ldots \beta_m$ – эмпирические коэффициенты уравнения). Если характер зависимости неизвестен, то предпочтение отдаётся более простым формулам.

2. Определяются параметры (коэффициенты) выбранного уравнения из условия минимума функции невязки:

$$S = \sum_{i=1}^{n}\left[f(x_i, \beta_1, \beta_2, \ldots \beta_m) - y_i\right]^2 \to min.$$

Для функции невязки переменными считаются величины $\beta_1, \beta_2, \ldots \beta_m$. Её минимум находится путём приравнивания нулю частных производных по параметрам $\beta_1, \beta_2, \ldots \beta_m$.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial \beta_1} = 2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m)}{\partial \beta_1} = 0 \\ \dfrac{\partial S}{\partial \beta_2} = 2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m)}{\partial \beta_2} = 0 \\ \quad ... \\ \dfrac{\partial S}{\partial \beta_m} = 2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m)}{\partial \beta_m} = 0 \end{cases}$$

Полученные уравнения составляют систему, решая которую можно определить неизвестные коэффициенты. Если эмпирическое уравнение линейно относительно своих параметров, то эта система также будет линейной и решаться аналитически. Если эмпирическое уравнение является нелинейным, то решение такой системы может быть получено путём итерационной вычислительной процедуры.

1.2 Линейная задача метода наименьших квадратов

Линейная задача МНК сводится к определению коэффициентов эмпирического уравнения вида:

$$y = \beta_0 + \beta_1 \cdot x_1 + ... + \beta_m \cdot x_m + \varepsilon = \beta_0 + \sum_{j=1}^{m} \beta_j \cdot x_j + \varepsilon = \hat{y} + \varepsilon,$$

где $x_1, ... x_m$ – независимые переменные, входящие в уравнение; y – наблюдаемая зависимая переменная; $\hat{y}$ – оценка значения y по уравнению; $\beta_0, ... \beta_m$ – параметры, подлежащие определению; ε – ненаблюдаемая ошибка, определяемая разностью между измеренным значением y и величиной, полученной по эмпирическому уравнению.

Для получения оценок параметров $\beta_0, ... \beta_m$ по схеме МНК необходимо определить минимум следующей функции:

$$S = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot \left[\hat{y}_i - y_i \right]^2 \rightarrow min,$$

где w_i имеет смысл весового коэффициента i–го наблюдения величины y. Он может выбираться по одному из следующих принципов:

- Если наблюдения каждого значения y_i неоднократные, то $w_i=n_i$, где n_i – число повторных измерений зависимой переменной y_i при фиксированном значении x_i.
- Если наблюдения каждого значения y_i неравноточные, то $w_i=1/\sigma_i^2$, где σ_i – среднеквадратичная погрешность i–го измерения зависимой переменной y_i.
- Если наблюдения каждого значения y_i однократные и равноточные, то $w_i=1$.

Учитывая выражение для $\hat{y}$, можно составить схему МНК.:

$$S = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot \left[\beta_0 + \sum_{j=1}^{m} \beta_j \cdot x_{ij} - y_i \right]^2 \to min,$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_0} = 2 \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot \left[\beta_0 + \sum_{j=1}^{m} \beta_j \cdot x_{ij} - y_i \right] = 0,$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_k} = 2 \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot \left[\beta_0 + \sum_{j=1}^{m} \beta_j \cdot x_{ij} - y_i \right] \cdot x_{ik} = 0, k = 1,...m.$$

Отсюда можно получить эквивалентную систему линейных уравнений, решением которой будут параметры уравнения $\beta_0, ... \beta_m$.

$$\begin{cases} \beta_0 \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i + \sum_{j=1}^{m} \left[\beta_j \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_{ij} \right] = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot y_1 \\ \beta_0 \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_{ik} + \sum_{j=1}^{m} \left[\beta_j \cdot \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_{ij} \cdot x_{ik} \right] = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot y_1 \cdot x_{ik}, k = 1,...m \end{cases}$$

Получим решение этой системы в матричной форме. Введём обозначения:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \dots \\ \beta_m \end{bmatrix}.$$

Весовые коэффициенты w_i образуют диагональную матрицу:

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & w_n \end{bmatrix}.$$

Тогда схема МНК запишется в матричной форме:

$$Y = X \cdot B + E,$$
$$S = (X \cdot B - Y)^T \cdot W \cdot (X \cdot B - Y),$$
$$\frac{\partial S}{\partial B} = 2 \cdot X^T \cdot W \cdot (X \cdot B - Y) = 0.$$

Система для нахождения элементов вектора B имеет вид:

$$X^T \cdot W \cdot X \cdot B = X^T \cdot W \cdot Y.$$

Если $det(X^T \cdot W \cdot X) \neq 0$, то она имеет единственное решение:

$$B = (X^T \cdot W \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot W \cdot Y.$$

Эта схема определения коэффициентов применима для линейной комбинации произвольных функций вида:

$$y = \beta_0 \cdot f_0(x) + \beta_1 \cdot f_1(x) + \dots + \beta_m \cdot f_m(x) = \sum_{j=0}^{m} \beta_j \cdot f_j(x),$$

и для полиномиальных уравнений:

$$y = \beta_0 + \beta_1 \cdot x + \beta_2 \cdot x^2 + \dots + \beta_m \cdot x^m = \sum_{j=0}^{m} \beta_j \cdot x^j.$$

Матрицы X' для линейной комбинации функций и X'' для полного полинома (содержащего все степени x от 0 до m) будут иметь вид:

$$X' = \begin{bmatrix} f_0(x_1) & \dots & f_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_0(x_n) & \dots & f_m(x_n) \end{bmatrix}, \quad X'' = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^m \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^m \end{bmatrix}.$$

1.3 Качество линейного уравнения

Основным критерием качества является оценка среднеквадратичной (стандартной) погрешности расчёта параметра y с помощью полученного уравнения:

$$S_y^2 = \frac{1}{n-m-1} \cdot \sum_{i=1}^{n} \left[\hat{y}_i - y_i\right]^2 .$$

С учётом введённых матричных обозначений:

$$S_y^2 = \frac{(X \cdot B - Y)^T \cdot (X \cdot B - Y)}{n-m-1}.$$

Если эта величина превышает допустимый предел, уравнение отвергается или модифицируется.

Важным показателем качества уравнения является чувствительность оценок коэффициентов $\beta_0,\dots\ \beta_m$ к относительным изменениям величин y_i, вызванными влиянием погрешности их определения. Она находится по формуле:

$$\gamma = \frac{\partial\beta_k / \beta_k}{\partial y_i / y_i} = \frac{\partial \ln \beta_k}{\partial \ln y_i} = \frac{\partial\beta_k}{\partial y_i} \cdot \frac{y_i}{\beta_k}.$$

Так как $B=(X^T \cdot W \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot W \cdot Y$, то окончательное выражение для расчёта чувствительности коэффициента β_k к изменению величины y_i примет вид:

$$\gamma = \left[(X^T \cdot W \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot W \right]_{ki} \cdot \frac{y_i}{\beta_k}.$$

Коэффициенты уравнения всегда определяются с погрешностью, величина которой тем больше, чем ближе значение $det(X^T \cdot W \cdot X)$ к нулю. Среднеквадратичная ошибка оценки коэффициента β_k определяется по формуле:

$$S^2_{\beta k} = S^2_y \cdot (X^T \cdot W \cdot X)^{-1}_{kk}.$$

Проверяется соотношение:

$$|\beta_k| < S_{\beta k} \cdot t_{\alpha/2}(n - m'),$$

где $t_{\alpha/2}(n-m')$ – значение коэффициента Стьюдента для уровня доверительной вероятности $\alpha/2$ и числа степеней свободы $n-m'$ ($m'=m+1$ – число коэффициентов эмпирического уравнения). Рекомендуемое значение $\alpha=0.05$). Если это условие выполняется, то подтверждается гипотеза о равенстве β_k нулю. **Коэффициент считается незначимым и исключается из уравнения.**

В ряде случаев для повышения качества аппроксимации исходное уравнение рационально представить в виде:

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{m} \beta_j \cdot (x_j - \bar{x}_j) + \varepsilon,$$

где $\bar{x}_j$ – средние значения соответствующих переменных.

Тогда система уравнений для определения коэффициентов $\beta_0, \ldots \beta_m$ представится в форме:

$$\begin{cases} \beta_0 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} w_i + \sum\limits_{j=1}^{m}\left[\beta_j \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot (x_{ij} - \overline{x}_j)\right] = \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot y_i \\ \beta_0 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot (x_{ik} - \overline{x}_k) + \sum\limits_{j=1}^{m}\left[\beta_j \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot (x_{ij} - \overline{x}_j)\cdot(x_{ik} - \overline{x}_k)\right] = \\ = \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot y_i \cdot (x_{ik} - \overline{x}_k), k = 1,\dots m \end{cases}$$

Так как $\sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot (x_{ij} - \overline{x}_j) = 0,\ j = 1,\dots m$, то система упрощается:

$$\begin{cases} \beta_0 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} w_i = \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot y_i \\ \sum\limits_{j=1}^{m}\left[\beta_j \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot (x_{ij} - \overline{x}_j)\cdot(x_{ik} - \overline{x}_k)\right] = \sum\limits_{i=1}^{n} w_i \cdot y_i \cdot (x_{ik} - \overline{x}_k), \\ k = 1,\dots m \end{cases}$$

Отсюда можно получить выражение для определения β_0. При равных весах наблюдений $\beta_0 = \overline{y}$.

При записи системы в матричной форме изменяются компоненты X и B.

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} - \overline{x}_1 & \dots & x_{1m} - \overline{x}_m \\ \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} - \overline{x}_1 & \dots & x_{nm} - \overline{x}_m \end{bmatrix},\ B = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \dots \\ \beta_m \end{bmatrix}.$$

Остальные матричные уравнения сохраняют свою справедливость. Решая систему $B = (X^T \cdot W \cdot X)^{-1} \cdot X^T \cdot W \cdot Y$, можно определить неизвестные параметры эмпирического уравнения.

Погрешности определения всех коэффициентов, кроме β_0, находятся по общим формулам. Величина погрешности для β_0 составляет

$$S_{\beta 0} = \frac{S_y}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} w_i}}.$$

Для равноточных измерений считают $S_{\beta 0} = S_y / \sqrt{n}$.

1.4 Нелинейная задача метода наименьших квадратов

Если уравнение $f(x, \beta_1, \ldots \beta_m)$ не зависит от своих параметров линейно, то нелинейной будет система уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\partial S}{\partial \beta_1} = 2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m)}{\partial \beta_1} = 0 \\ \quad \ldots \\ \dfrac{\partial S}{\partial \beta_m} = 2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m)}{\partial \beta_m} = 0 \end{cases}$$

В общем случае она не имеет аналитического решения и решается численно. Популярным методом решения систем нелинейных уравнений является метод Ньютона. Он заключается в следующем.

Введём обозначения:

$$\begin{cases} \varphi_1(\beta_1, \ldots \beta_m) = \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m)}{\partial \beta_1} \\ \quad \ldots \\ \varphi_1(\beta_1, \ldots \beta_m) = \sum\limits_{i=1}^{n} \left[f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m) - y_i \right] \cdot \dfrac{\partial f(x_i, \beta_1, \ldots \beta_m)}{\partial \beta_m} \end{cases}$$

Зададимся начальными приближениями значений коэффициентов $\beta_{10}, \ldots \beta_{m0}$ и разложим функции $\varphi_1(\beta_1, \ldots \beta_m), \ldots \varphi_m(\beta_1, \ldots \beta_m)$ в ряд Тейлора в окрестности точки $(\beta_{10}, \ldots \beta_{m0})$. Из разложения исключаются все составляющие со степенями производных выше первой. Тогда:

$$\begin{cases} \varphi_1 \approx \varphi_{10} + \left[\dfrac{\partial \varphi_1}{\partial \beta_1}\right]_0 \cdot (\beta_1 - \beta_{10}) + \ldots + \left[\dfrac{\partial \varphi_1}{\partial \beta_m}\right]_0 \cdot (\beta_m - \beta_{m0}) \\ \ldots \\ \varphi_m \approx \varphi_{m0} + \left[\dfrac{\partial \varphi_m}{\partial \beta_1}\right]_0 \cdot (\beta_1 - \beta_{10}) + \ldots + \left[\dfrac{\partial \varphi_m}{\partial \beta_m}\right]_0 \cdot (\beta_m - \beta_{m0}) \end{cases}$$

Так как в точке минимума функции невязки S должно выполняться условие $\varphi_1=\ldots=\varphi_m=0$, то эту систему можно приближённо представить следующим образом:

$$\begin{cases} \left[\dfrac{\partial \varphi_1}{\partial \beta_1}\right]_0 \cdot \Delta\beta_1 + \ldots + \left[\dfrac{\partial \varphi_1}{\partial \beta_m}\right]_0 \cdot \Delta\beta_m = -\varphi_{10} \\ \ldots \\ \left[\dfrac{\partial \varphi_m}{\partial \beta_1}\right]_0 \cdot \Delta\beta_1 + \ldots + \left[\dfrac{\partial \varphi_m}{\partial \beta_m}\right]_0 \cdot \Delta\beta_m = -\varphi_{m0} \end{cases},$$

где величины $\Delta\beta_1=\beta_1-\beta_{10},\ldots\ \Delta\beta_m=\beta_m-\beta_{m0}$ – поправки к соответствующим коэффициентам.

Полученная система будет линейна относительно поправок. Решая её, можно найти значения $\Delta\beta_1,\ldots\ \Delta\beta_m$ и определить скорректированные значения коэффициентов $\beta_1=\beta_{10}+\Delta\beta_1,\ldots\ \beta_m=\beta_{m0}+\Delta\beta_m$.

Если величины всех поправок по абсолютной величине меньше заданной точности ε, т. е. $|\Delta\beta_1|\le\varepsilon,\ldots\ |\Delta\beta_m|\le\varepsilon$, то итерационный процесс прекращается. В противном случае выполняется переназначение переменных $\beta_{10}=\beta_1,\ldots\ \beta_{m0}=\beta_m$, пересоставляется система уравнений и определяются новые значения поправок.

Найдём решение нелинейной задачи МНК в матричной форме. Введём обозначения векторов и матриц:

$$X=\begin{bmatrix}x_1\\ \ldots\\ x_n\end{bmatrix},\quad Y=\begin{bmatrix}y_1\\ \ldots\\ y_n\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}\beta_1\\ \ldots\\ \beta_m\end{bmatrix},\quad F(X,B)=\begin{bmatrix}f(x_1,\beta_1,\ldots\beta_m)\\ \ldots\\ f(x_n,\beta_1,\ldots\beta_m)\end{bmatrix},$$

$$\Phi=\begin{bmatrix}f(x_1,\beta_1,\ldots\beta_m)-y_1\\ \ldots\\ f(x_n,\beta_1,\ldots\beta_m)-y_n\end{bmatrix}=F(X,B)-Y,\quad W=\begin{bmatrix}w_1 & \ldots & 0\\ \ldots & \ldots & \ldots\\ 0 & \ldots & w_n\end{bmatrix}.$$

Тогда функция невязки и её производные в матричной форме будут иметь следующий вид:

$$S=\left[F(X,B)-Y\right]^T\cdot W\cdot\left[F(X,B)-Y\right]=\Phi^T\cdot W\cdot\Phi\to min,$$

$$\frac{\partial S}{\partial B}=2\cdot J^T\cdot W\cdot\Phi,$$

$$J=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial\Phi_1}{\partial\beta_1} & \ldots & \dfrac{\partial\Phi_1}{\partial\beta_m}\\ \ldots & \ldots & \ldots\\ \dfrac{\partial\Phi_m}{\partial\beta_1} & \ldots & \dfrac{\partial\Phi_m}{\partial\beta_m}\end{bmatrix}.$$

Матрицу J называют матрицей Якоби (якобианом). Если задан вектор начальных приближений коэффициентов $B_0=(\beta_{10},\ldots\ \beta_{m0})^T$, то можно получить приближённое выражение для оценки производной $\partial S/\partial B$ в точке, где функция невязки имеет минимум:

$$\frac{\partial S}{\partial B}\approx 2\cdot J^T\cdot W\cdot\Phi.$$

Разложим функцию Φ в ряд Тейлора в окрестности точки B_0. Исключим из этого разложения компоненты со степенями производных выше первой:

$$\Phi=\Phi_0+J_0\cdot(B-B_0).$$

Тогда можно записать:

$$\boldsymbol{J_0^T \cdot W \cdot \left[\Phi_0 + J_0 \cdot (B - B_0)\right] = 0,}$$

$$\boldsymbol{J_0^T \cdot W \cdot J_0 \cdot (B - B_0) = -J_0^T \cdot W \cdot \Phi_0,}$$

$$\boldsymbol{B = B_0 - (J_0^T \cdot W \cdot J_0)^{-1} \cdot J_0^T \cdot W \cdot \Phi_0.}$$

Последнее выражение является рекуррентной формулой для уточнения значений вектора коэффициентов. Её применяют до тех пор, пока каждый элемент вектора поправок $\boldsymbol{B - B_0}$ не станет по абсолютной величине меньше соответствующего элемента вектора критериев точности $\boldsymbol{E = (\varepsilon_1, \ldots \varepsilon_m)^T}$, или пока евклидова норма (длина) вектора поправок $\|\boldsymbol{B - B_0}\|$ не станет меньше заданной точности $\boldsymbol{\varepsilon}$.

В ряде случаев решение нелинейной задачи МНК можно упростить, преобразовав исходное уравнение $\boldsymbol{f(x, \beta_1, \ldots \beta_m)}$ к линейному виду путём соответствующей замены переменных. Найденные параметры преобразованных линейных характеристик используются для расчёта коэффициентов исходных зависимостей. Некоторые наиболее типичные примеры преобразования переменных и пересчёта коэффициентов показаны ниже.

$$y = \beta_1 + \frac{\beta_2}{x} \rightarrow \begin{bmatrix} y' = y \\ x' = \frac{1}{x} \end{bmatrix} \rightarrow y' = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x' \rightarrow \begin{bmatrix} \beta_1 = \alpha_1 \\ \beta_2 = \alpha_2 \end{bmatrix}.$$

$$y = \frac{\beta_1}{x + \beta_2} \rightarrow \begin{bmatrix} y' = \frac{1}{y} \\ x' = x \end{bmatrix} \rightarrow y' = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x' \rightarrow \begin{bmatrix} \beta_1 = \frac{1}{\alpha_2} \\ \beta_2 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \end{bmatrix}.$$

$$y = \frac{\beta_1 \cdot x + \beta_2}{x + \beta_3} \rightarrow \begin{bmatrix} x_1 = x \\ x_2 = -x \cdot y \\ y' = y \end{bmatrix} \rightarrow$$

$$\rightarrow y' = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot x_1 + \alpha_2 \cdot x_2 \rightarrow \begin{bmatrix} \beta_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \\ \beta_2 = \frac{\alpha_0}{\alpha_2} \\ \beta_3 = \frac{1}{\alpha_2} \end{bmatrix}.$$

$$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 \cdot x) \rightarrow \begin{bmatrix} x' = x \\ y' = \ln y \end{bmatrix} \rightarrow$$

$$\rightarrow y' = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x' \rightarrow \begin{bmatrix} \beta_1 = exp(\alpha_1) \\ \beta_2 = \alpha_2 \end{bmatrix}.$$

$$y = \beta_1 \cdot x^{\beta_2} \rightarrow \begin{bmatrix} x' = \ln x \\ y' = \ln y \end{bmatrix} \rightarrow y' = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x' \rightarrow \begin{bmatrix} \beta_1 = exp(\alpha_1) \\ \beta_2 = \alpha_2 \end{bmatrix}.$$

2 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ АППРОКСИМАЦИИ В СИСИТЕМЕ MathCAD

Создание матриц и векторов, необходимых для решения задачи МНК, производится по общим правилам. В свободном месте рабочего поля документа размещаются имена объектов со знаком присваивания. Через пункты меню ***Математика|Матрицы... (Math|Matrices...)*** вызывается диалог, в котором определяются количество ***Строк (Rows)***, ***Столбцов (Columns)*** и выбирается действие ***Создать (Create)***. Здесь же можно ***Удалить (Delete)*** или ***Вставить (Insert)*** нужное число строк и столбцов. (Доступ к диалогу производится также нажатием клавиш **[*Ctrl*]** ***M***.)

Для формирования диагональной и единичной матриц удобно использовать следующие функции.

Имя функции	Возвращается...
diag(V)	Диагональная матрица, содержащая по диагонали элементы вектора ***V***.
identity(n)	Единичная матрица размерностью $n \times n$.

На этапе задания значений над векторами и матрицами можно выполнять следующие операции:

Операция	Обозначение	Клавиши	Описание
Присваивание	:=	`:`	Присваивание значений элементам вектора или матрицы.
Нижний индекс вектора	V_n	`[`	Элемент вектора с номером n.
Нижний индекс матрицы	$M_{n,m}$	`[…,…`	Элемент матрицы из строки n и столбца m.
Верхний индекс	$M^{\langle n\rangle}$	`[Ctrl]6`	Извлечение столбца n из M (возвращается вектор).
Векторизация	$\vec{M}$	`[Ctrl]-`	Выполнение всех операций над M поэлементно.

По умолчанию массивы нумеруются с нулевого элемента. Чтобы изменить этот порядок, необходимо определить начальное значение встроенной переменной ***ORIGIN*** через пункт меню ***Математика|Встроенные переменные... (Math|Built–In Variables...)***. Можно также задать глобальное значение ***ORIGIN*** в любом месте документа. Например, чтобы установить этот параметр равным ***1***, необходимо напечатать в рабочем поле ***ORIGIN~1*** (при этом в документе отобразится ***ORIGIN≡1***).

Над векторами и матрицами выполняются стандартные операции.

Операция	Обозначение	Клавиши	Описание
Сложение и вычитание с константой	$V+C$, $V-C$ $C+V$, $C-V$ $M+C$, $M-C$ $C+M$, $C-M$	`+` `-`	Сложение (вычитание) элементов массивов с константой ***C***.
Умножение и деление на константу	$V \cdot C$, $C \cdot V$ $M \cdot C$, $C \cdot M$ $\frac{V}{C}, \frac{M}{C}$	`*` `-`	Умножение (деление) элементов массивов на константу ***C***.
Сложение и вычитание	V_1+V_2 , V_1-V_2 , M_1+M_2 , M_1-M_2	`+` `-`	Сложение (вычитание) соответствующих элементов массивов, имеющих одинаковую размерность.
Умножение векторов	$V \cdot V$	`*`	Скалярное произведение векторов.
Умножение матрицы на вектор	$M \cdot V$	`*`	Произведение матрицы ***M*** на вектор ***V***. Число столбцов ***M*** должно соответствовать числу строк ***V***.
Умножение матриц	$M_1 \cdot M_2$	`*`	Произведение матриц M_1 и M_2. Число столбцов M_1 должно соответствовать числу строк M_2.
Транспониро–вание	V^T, M^T	`[Ctrl]1`	Транспонирование массива.
Степень	M^n	`^`	Целая степень ***n*** квадратной матрицы ***M*** (M^{-1} – обратная матрица).

Пример решения общей линейной задачи МНК в матричной форме приведён в приложении Б.

Для вычисления коэффициентов уравнения, представляющего линейную комбинацию произвольных функций, используется стандартная функция ***linfit***.

Имя функции	Возвращается...
linfit(x, y, F)	Вектор коэффициентов для линейной комбинации функций из вектора ***F***, дающей наилучшую аппроксимацию данных из векторов ***x*** и ***y***.

Элементами вектора ***F(x)*** являются функции, линейно комбинирующие в искомом уравнении. Их скалярное произведение на элементы вектора коэффициентов ***F(x)·B*** даст значение аппроксимирующей функции ***y(x)***. Пример использования функции ***linfit*** при определении коэффициентов полиномов различного порядка показан в приложении Б.

Для определения коэффициентов нелинейного уравнения методом наименьших квадратов используется стандартная функция ***genfit***, реализующая итерационную процедуру поиска решения.

Имя функции	Возвращается...
genfit(x, y, B_0, F)	Вектор m коэффициентов $\beta_0,\ldots\ \beta_{m-1}$ функции, дающей наилучшую аппроксимацию данных из векторов x и y. $F(x,B)$ – функциональный вектор. B_0 – вектор начальных приближений коэффициентов.

Элементами вектора $F(x,\ B)$ размерностью $m+1$ являются функция $f(x,\ \beta_0,\ldots\ \beta_0)$ и её m частных производных по $\beta_0,\ldots\ \beta_{m-1}$. Пример использования функции ***genfit*** для определения параметров нелинейных функций приведён в приложении В.

Нелинейную задачу МНК можно решить также путём минимизации сформированной функции невязки с помощью стандартной функции ***minerr***.

Имя функции	Возвращается...
minerr(β_1, ... β_m)	Значения коэффициентов β_1,... β_m искомой функции.

До использования этой функции необходимо задать начальные приближения коэффициентов и сформировать систему уравнений в блоке ***Given*** (см. приложение В). Число уравнений должно быть равно числу неизвестных (для удовлетворения этому требованию в блок допустимо включать фиктивные уравнения). Здесь же можно задать ограничения на значения коэффициентов.

Для записи операций соотношения при формировании системы уравнений используются следующие комбинации клавиш:

Условие	Клавиши	Условие	Клавиши
x = y	**[Ctrl]=**	**x ≠ y**	**[Ctrl]3**
x < y	**>**	**x ≤ y**	**[Ctrl]9**
x > y	**<**	**x ≥ y**	**[Ctrl]0**

Пример использования функции ***minerr*** для определения коэффициентов нелинейного уравнения приведён в приложении В. Здесь же приводится пример оценки коэффициентов нелинейного уравнения методом Ньютона.

3 ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

Работа заключается в построении эмпирических уравнений функции ***y(x)***. Она выполняется студентом индивидуально по заданию, выданному преподавателем. Варианты заданий приведены в приложении А. Работа выполняется в следующем порядке.

1. Задаётся число наблюдений ***n***. Формируются вектора независимой и зависимой переменных ***x*** и ***y*** и диагональная весовая матрица ***W*** размерностью ***n***×***n***. (По усмотрению преподавателя подбор коэффициентов эмпирических уравнений может производиться для разных весовых матриц.)

2. Набор значений x и y аппроксимируется полиномом степени m. Для этого формируются матрица наблюдений X размерность $n \times (m+1)$ (с учётом единичного столбца). Коэффициенты полинома определяются путём решения общей линейной задачи МНК с помощью матричных преобразований. Определяются показатели качества аппроксимации S_y и S_{bj}. Строится график, на который наносятся исходные данные x и y и величины, полученные по аппроксимирующему уравнению.

3. Набор значений x и y аппроксимируется полиномом степени m, который представляется в виде линейной комбинации степенных функций. Коэффициенты полинома определяются с помощью функции ***linfit***. Определяется показатель качества аппроксимации S_y. Строится график, на который наносятся исходные данные x и y и величины, полученные по аппроксимирующему уравнению.

4. Набор значений x и y аппроксимируется заданной нелинейной зависимостью, коэффициенты которой находятся с помощью функции ***genfit***. Определяется показатель качества аппроксимации S_y.

5. Набор значений x и y аппроксимируется заданной нелинейной зависимостью, коэффициенты которой находятся путём минимизации функции невязки с помощью функции ***minerr***. Определяется показатель качества аппроксимации S_y.

6. Набор значений x и y аппроксимируется заданной нелинейной зависимостью, коэффициенты которой находятся методом Ньютона. Определяется показатель качества аппроксимации S_y.

7. Строится график, на который наносятся исходные данные и величины, полученные по аппроксимирующим уравнениям.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. В чём заключается сущность метода наименьших квадратов?
2. Как определяются коэффициенты эмпирического уравнения

методом наименьших квадратов?

3. Как формулируется и решается линейная задача метода наименьших квадратов в традиционной и матричной форме записи?

4. Какие существуют показатели качества линейного уравнения, полученного методом наименьших квадратов?

5. Как повысить качество линейного уравнения, полученного методом наименьших квадратов?

6. Как формулируется и решается нелинейная задача метода наименьших квадратов в традиционной и матричной форме записи?

7. Как решаются задачи метода наименьших квадратов средствами системы MathCAD?

ЛИТЕРАТУРА

1. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989.
2. Турчак Л.И. Основы численных методов. – М.: Наука, 2003.
3. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копчёнова Н.В. Вычислительные методы для инженеров. – М.: Высшая школа, 1994.
4. Канахен Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. – М.: Мир, 1998.
5. Лоусон Ч., Хенсон Р. Численное решение задач метода наименьших квадратов. – М.: Наука, 1986.
6. Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. – М.: Статистика, 1979.
7. Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ: В 2–х кн. – М.: Финансы и статистика, 1986. – 1987.
8. Плис А.И., Сливина Н.А. MathCAD 2000. Математический практикум. – М.: Финансы и статистика, 2003.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЙ ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

№ варианта																			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Начальное значение независимой переменной *x*																			
1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0	1.9	1.8	1.7	1.6	1.5	1.4	1.3	1.2	1.1
Шаг изменения независимой переменной *x*																			
0.1	0.2	0.3	0.2	0.3	0.1	0.3	0.2	0.1	0.2	0.1	0.3	0.2	0.1	0.2	0.3	0.2	0.3	0.1	0.2
Значения зависимой переменной *y*																			
9.0	6.0	3.5	4.0	297	7.0	40.0	2.0	12.8	8.8	2.8	29.0	2.3	92.0	2.0	32.0	2.0	5.0	26.8	0.1
5.4	7.0	3.0	12.0	24.5	11.5	16.5	3.2	6.0	4.0	3.6	11.0	2.6	52.0	2.5	18.5	2.5	4.4	23.6	1.4
4.2	9.0	2.8	20.0	10.5	15.0	11.5	3.8	4.8	2.3	5.0	8.0	2.9	36.0	2.5	12.5	2.5	3.4	20.2	3.4
3.6	11.0	2.6	32.0	7.0	18.5	9.0	4.4	4.2	1.4	7.0	7.0	3.3	26.0	3.0	9.0	2.5	2.6	16.2	6.2
3.2	14.0	2.5	44.0	5.5	21.5	7.5	4.6	4.0	0.8	10.6	6.0	3.7	18.0	4.0	6.0	3.0	1.6	11.4	10.7
3.0	17.0	2.4	58.0	4.5	24.5	7.0	4.8	3.8	0.5	14.8	6.0	4.0	12.0	6.0	4.5	3.0	1.2	7.4	15.1
3.0	20.0	2.4	74.0	4.0	27.5	6.0	4.8	3.6	0.3	20.2	5.2	4.3	8.0	12.5	3.0	3.5	0.6	3.6	19.6
2.8	25.0	2.3	90.0	3.5	30.0	6.0	5.0	3.6	0.2	24.4	5.1	4.5	6.0	31.5	2.5	4.0	0.4	1.6	22.5
2.6	30.0	2.3	108	3.5	32.5	5.5	5.0	3.4	0.1	30.6	4.9	4.7	4.0	48.9	1.5	5.0	0.2	0.2	25.9
2.6	37.0	2.3	126	3.5	35.0	5.0	5.0	3.4	0.1	30.6	4.7	4.7	4.0	68.3	1.5	5.0	0.2	0.2	25.9
Степень аппроксимирующего полинома																			
3	4	3	4	3	4	3	4	3	4	3	4	3	4	3	4	3	4	3	4

ПРОДОЛЖЕНИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ А

ФУНКЦИИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОЙ АППРОКСИМАЦИИ

№ варианта	Форма зависимости
1, 11	$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 / x)$
2, 12	$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 \cdot x^{\beta_3})$
3, 13	$y = (\beta_1 \cdot x + \beta_2) / (x + \beta_3)$
4, 14	$y = \beta_1 \cdot x^{\beta_2}$
5, 15	$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 / x) + \beta_3 \cdot exp(\beta_4 / x)$
6, 16	$y = \beta_1 \cdot (x + \beta_2)^{0.5}$
7, 17	$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 \cdot x^{0.5})$
8, 18	$y = \beta_1 - \beta_2 \cdot exp(\beta_3 \cdot x)$
9, 19	$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 / (x + \beta_3))$
10, 20	$y = \beta_1 \cdot exp(\beta_2 \cdot x) + \beta_3 \cdot exp(\beta_4 \cdot x)$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ (документ MathCAD)

Исходные данные:

$data :=$

	0	1	2
0	0.50	1.20	0.20
1	1.00	2.20	0.10
2	1.50	2.30	0.20
3	2.00	3.70	0.10
4	2.50	2.80	0.10
5	3.00	1.50	0.10
6	3.50	2.10	0.20

$x := data^{\langle 0 \rangle}$

$y := data^{\langle 1 \rangle}$

$\sigma := data^{\langle 2 \rangle}$

$n := length(x)$

$i := 0 .. n - 1$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИНОМИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Порядок аппроксимирующего полинома:

$m := 2$

$j := 0 .. m$

Матрицы наблюдений и весов:

$X^{\langle j \rangle} := \overrightarrow{x^{j}}$

$W := diag\left(\overrightarrow{\frac{1}{\sigma^2}}\right)$

Коэффициенты для равных весов наблюдений:

$b := \left(X^T \cdot X\right)^{-1} \cdot X^T \cdot y$

$b^T = (\ 0.0571 \quad 2.7190 \quad -0.6476\ )$

Среднеквадратичная погрешность расчёта наблюдаемой переменной:

$$s_y := \frac{|X \cdot b - y|}{\sqrt{n - m - 1}}$$

$$s_y = 0.6670$$

Погрешность расчёта коэффициентов уравнения:

$$s_{b_j} := s_y \cdot \sqrt{\left[\left(X^T \cdot X\right)^{-1}\right]_{j,j}}$$

$$s_b^T = \begin{pmatrix} 1.0394 & 1.1914 & 0.2911 \end{pmatrix}$$

Чувствительность коэффициентов к относительным изменениям величины y:

$$\gamma_{b_{j,i}} := \left[\left(X^T \cdot X\right)^{-1} \cdot X^T\right]_{j,i} \cdot \frac{y_i}{b_j}$$

$$\gamma_b = \begin{pmatrix} 27.0000 & 16.5000 & -5.7500 & -27.7500 & -21.0000 & -3.7500 & 15.7500 \\ -0.5149 & -0.1156 & 0.4229 & 1.0368 & 0.6620 & 0.0788 & -0.5701 \\ -0.4412 & 0.0000 & 0.5074 & 1.0882 & 0.6176 & 0.0000 & -0.7721 \end{pmatrix}$$

Коэффициенты для неравноточных наблюдений:

$$\beta := \left(X^T \cdot W \cdot X\right)^{-1} \cdot \left(X^T \cdot W \cdot y\right)$$

$$\beta^T = \begin{pmatrix} -0.4611 & 3.6954 & -0.9484 \end{pmatrix}$$

Среднеквадратичная погрешность расчёта наблюдаемой переменной:

$$s_y := \frac{|X \cdot \beta - y|}{\sqrt{n - m - 1}}$$

$$s_y = 0.8136$$

Погрешность расчёта коэффициентов уравнения:

$$s_{\beta_j} := s_y \cdot \sqrt{\left[\left(X^T \cdot W \cdot X\right)^{-1}\right]_{j,j}}$$

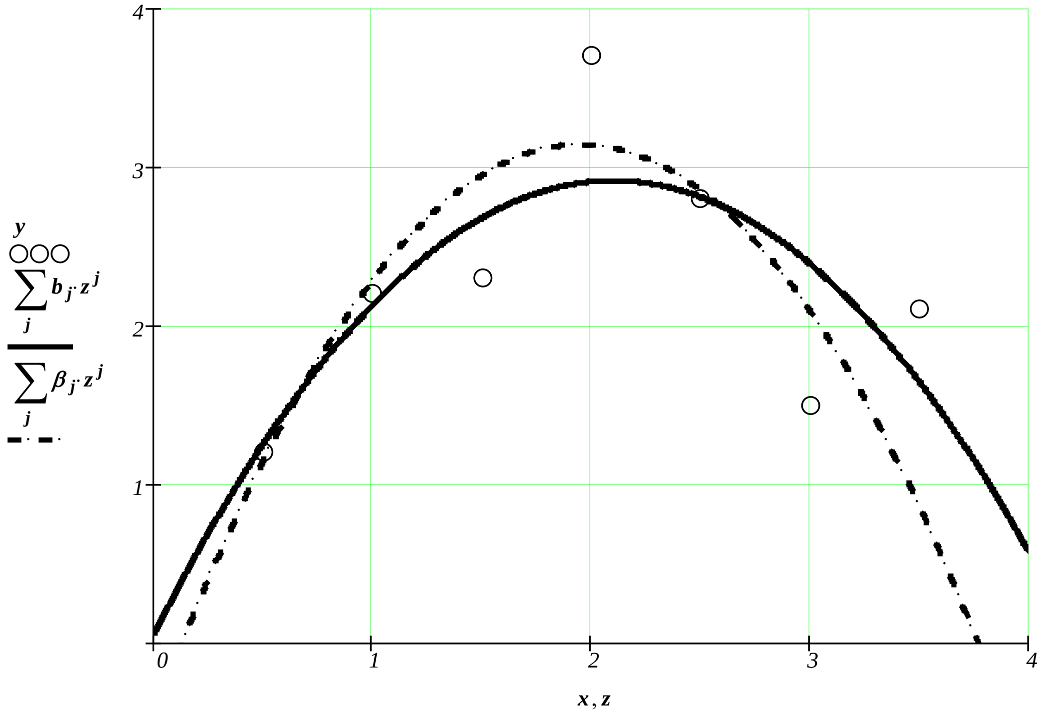
$$s_\beta^T = \begin{pmatrix} 0.2031 & 0.2253 & 0.0560 \end{pmatrix}$$

Чувствительность коэффициентов к относительным изменениям величины y:

$$\gamma_{\beta_{j,i}} := \left[\left(X^T \cdot W \cdot X\right)^{-1} \cdot X^T \cdot W\right]_{j,i} \cdot \frac{y_i}{\beta_j}$$

$$\gamma_\beta = \begin{pmatrix} -2.1724 & -5.7191 & 0.2393 & 6.6818 & 4.3948 & -0.4392 & -1.9851 \\ -0.2567 & -0.4333 & 0.1201 & 1.3387 & 0.7333 & -0.1363 & -0.3657 \\ -0.2162 & -0.2417 & 0.1446 & 1.3442 & 0.6314 & -0.2428 & -0.4194 \end{pmatrix}$$

График зависимостей расчётных и экспериментальных значений наблюдаемой величины:



ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОЛИНОМИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ СРЕДСТВАМИ MathCAD

Векторы, содержащие линейную комбинацию функций для полиномов первой, второй, третьей и четвёртой степени:

$$F_1(x) := \begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix} \quad F_2(x) := \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix} \quad F_3(x) := \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad F_4(x) := \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \\ x^3 \\ x^4 \end{pmatrix}$$

Коэффициенты полиномов:

$$b_1 := linfit(x, y, F_1)$$

$$b_2 := linfit(x, y, F_2)$$

$$b_3 := linfit(x, y, F_3)$$

$$b_4 := linfit(x, y, F_4)$$

$$b_1^T = (\ 2.0000 \quad 0.1286\ )$$

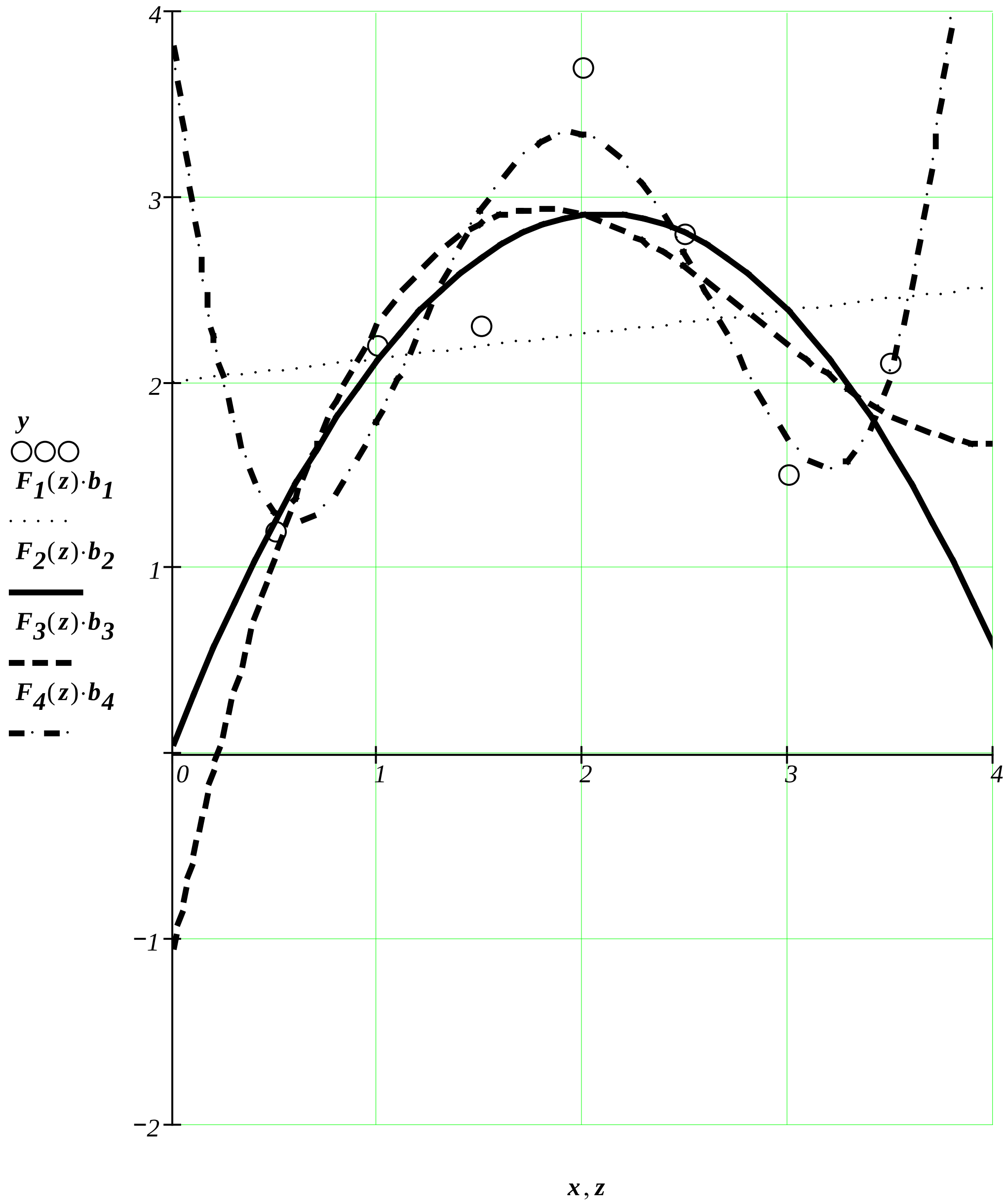
$$b_2^T = (\ 0.0571 \quad 2.7190 \quad -0.6476\ )$$

$$b_3^T = (\ -1.0429 \quad 5.2246 \quad -2.1143 \quad 0.2444\ )$$

$$b_4^T = (\ 3.8000 \quad -10.1356 \quad 12.6833 \quad -5.2343 \quad 0.6848\ )$$

Графики зависимостей расчётных и экспериментальных значений наблюдаемой величины:

$z := 0, 0.1 .. 4$



ПРИЛОЖЕНИЕ Б

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ (документ MathCAD)

Исходные данные:

$\boldsymbol{data} :=$

	0	1
0	1.00	9.10
1	2.00	6.30
2	3.00	4.20
3	4.00	3.70
4	5.00	3.50
5	6.00	2.80

$$\boldsymbol{x} := \boldsymbol{data}^{\langle 0\rangle}$$

$$\boldsymbol{y} := \boldsymbol{data}^{\langle 1\rangle}$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Веса наблюдений:

$$\boldsymbol{w} := \overrightarrow{\frac{1}{|\boldsymbol{y}|}}$$

Аппроксимирующая функция:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}) := \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{exp}\left(\frac{\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\gamma}}\right)$$

Функция невязки:

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}) := \left(\left|\overrightarrow{\left[\boldsymbol{w}\cdot\left(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}) - \boldsymbol{y}\right)\right]}\right|\right)^2$$

Начальные значения параметров.

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\gamma} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Блок подбора оптимальных параметров, включающий два фиктивных уравнея (число уравнений должно совпадать с числом неизвестных):

Given

$$S(\alpha,\beta,\gamma) = 0 \quad 0 = 0 \quad 0 = 0$$

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} := Minerr(\alpha,\beta,\gamma)$$

Коэффициенты уравнения:

$$(\alpha \;\; \beta \;\; \gamma) = (\, 2.1469 \;\; 2.5271 \;\; 0.7091 \,)$$

Среднеквадратичная погрешность расчёта наблюдаемой переменной:

$$S_y := \frac{|f(x,\alpha,\beta,\gamma) - y|}{\sqrt{n-m}}$$

$$S_y = 0.4355$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ СРЕДСТВАМИ MathCAD

Вектор, содержащий аппроксимирующую функцию и её частные производные по искомым параметрам:

$$F(x,\beta) := \begin{bmatrix} \beta_0 \cdot exp\left(\dfrac{\beta_1}{x+\beta_2}\right) \\ exp\left(\dfrac{\beta_1}{x+\beta_2}\right) \\ \dfrac{\beta_0}{x+\beta_2} \cdot exp\left(\dfrac{\beta_1}{x+\beta_2}\right) \\ \dfrac{-\beta_0 \cdot \beta_1}{(x+\beta_2)^2} \cdot exp\left(\dfrac{\beta_1}{x+\beta_2}\right) \end{bmatrix}$$

Начальные значения параметров.

$$b_0 := \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Подбор оптимальных параметров уравнения.

$$b := genfit(x, y, b_0, F)$$

$$b^T = (\, 1.1183 \;\; 8.5476 \;\; 3.0684 \,)$$

Среднеквадратичная погрешность расчёта наблюдаемой переменной:

$$S_y := \frac{|F(x,b)_0 - y|}{\sqrt{n-m}}$$

$$S_y = 0.2416$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ МЕТОДОМ НЬЮТОНА

Предельное число итераций:

$$countLimit := 50$$

Точность поиска решения:

$$\varepsilon := 10^{-16}$$

Начальные значения параметров:

$$b_0 := \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Матрица весов наблюдений:

$$W := diag\left(\overrightarrow{\frac{1}{|y|}}\right)$$

Процедура подбора параметров:

$$Approx(b_0, \varepsilon) := \left| \begin{array}{l} \text{for } k \in 0 .. countLimit \\ \quad \left| \begin{array}{l} \text{for } i \in 0 .. last(x) \\ \quad \text{for } j \in 0 .. last(b_0) \\ \quad\quad J_{i,j} \leftarrow F(x_i, b_0)_{j+1} \\ b \leftarrow b_0 - \left(J^T \cdot W \cdot J\right)^{-1} \cdot \left[J^T \cdot W \cdot \left(F(x, b_0)_0 - y\right)\right] \\ \text{break if } |b - b_0| < \varepsilon \\ b_0 \leftarrow b \end{array} \right. \\ b \end{array} \right.$$

$$B := Approx(b_0, \varepsilon)$$

Коэффициенты уравнения:

$$B^T = (\ 1.2201 \quad 7.5252 \quad 2.7321\ )$$

Среднеквадратичная погрешность расчёта наблюдаемой переменной:

$$S_y := \frac{|F(x, B)_0 - y|}{\sqrt{n - m}}$$

$$S_y = 0.2441$$

График зависимостей расчётных и экспериментальных значений наблюдаемой величины (результаты, полученные средствами MathCAD и методом Ньютона, совпадают).

$z := 0, 0.1 .. 7$