ВОДНОЕ ХОЗЯЙСТВО БЕЛОРУССИИ. Вып. 3
МИНСК 1973

И. В. Минаев

ОДИН СПОСОБ ПОДБОРА ЭМПИРИЧЕСКИХ ФОРМУЛ К ДАННЫМ ЭКСПЕРИМЕНТА

Представление данных эксперимента в виде формул наряду с табличным и графическим часто позволяет выявить многие особенности изучаемой зависимости двух величин. Иногда, однако, формульное представление дает наибольшую информацию об изучаемом явлении, поскольку используется математический аппарат, например дифференцирование и интегрирование.

Подбор эмпирических формул включает в основном две операции: предположение вида формулы (прямолинейная, квадратичная, кубическая, гиперболическая и т. д.) и подбор коэффициентов при неизвестных. Нами предлагается способ подбора коэффициентов к параболической зависимости, которые вычисляются последовательно один за другим (метод последовательных вычислений) без решения системы линейных уравнений, например в методе наименьших квадратов [1] или методе равных сумм [2]. Преимущество такого вычисления коэффициентов заключается не только в простоте, но и в большей точности.

Рассмотрим многочлен третьей степени

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 \tag{1}$$

с действительными коэффициентами и целыми положительными степенями неизвестной. Неизвестная величина x может принимать любые значения на числовой оси, но тогда график функции (1) будет пересекать ось абсцисс один (в случае одного действительного корня) или три раза (в случае трех действительных корней). Мы будем рассматривать только часть графика функции (1), причем возрастающую ветвь ($a_3>0$).

Изменение величины x приводится к безразмерной шкале, т. е. x принимает значения на отрезке [0,1—0,9] с шагом 0,1 (девять узлов интерполяции [3]).

Рассмотрим следующий многочлен третьей степени с числовыми коэффициентами на отрезке [0,1—0,9]:

$$y_1 = 0{,}085 + 1{,}07x + 2{,}3x^2 + x^3\,. \tag{2}$$

Построим график функции (2) и следующих многочленов:

$$y_{10} = 0{,}085 + 0x, \tag{3}$$

$$y_{11} = 0{,}085 + 1{,}07x, \tag{4}$$

$$y_{12} = 0{,}085 + 1{,}07x + 2{,}3x^2, \tag{5}$$

полученных последовательным присоединением членов многочлена (2) (рис. 1). Значения y_i ($i=0{,}1$—$0{,}9$) многочленов (2)—(5) приведены в табл. 1.

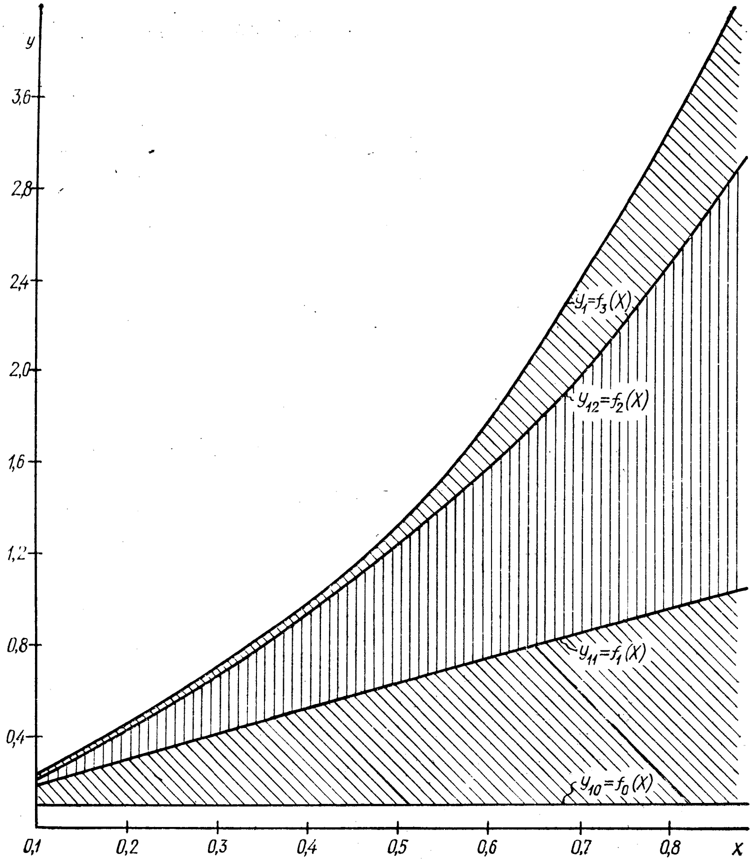

Рис. 1. График кубического многочлена.

Таблица 1

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
y_1	0,216	0,399	0,640	0,945	1,320	1,771	2,304	2,925	3,640
y_{11}	0,192	0,299	0,406	0,513	0,620	0,727	0,834	0,941	1,048
y_{12}	0,215	0,391	0,613	0,881	1,195	1,555	1,961	2,413	2,911

Рассмотрим часть графика многочлена (2) на узлах интерполяции [0,6—0,9]. Поскольку многочлен (2) третьей степени, то третья разделенная разность ординат графика $y_1=f_3(x)$ на указанных узлах интерполяции не равна нулю [3]:

$$\Delta y_{6,7,8,9} = y_6 - 3y_7 + 3y_8 - y_9 \neq 0, \qquad (6)$$

где индексы указывают номера узлов интерполяции.

Но для графика $y_{12}=F_2(x)$ третья разделенная разность уже равна нулю. Поэтому комбинация ординат (6) обратится в нуль, если от каждой ординаты в выражении (6) вычесть член $(a_3\, x_i^3)(x_i=0{,}6—0{,}9)$:

$$(y_6-a_3 0{,}6^3)-3(y_7-a_3 0{,}7^3)+3(y_8-a_3 0{,}8^3)-(y_9-a_3 0{,}9^3)=0. \tag{7}$$

Отсюда найдем значение a_3:

$$a_3=\frac{y_6-3y_7+3y_8-y_9}{(0{,}6^3-3\cdot 0{,}7^3+3\cdot 0{,}8^3-0{,}9^3)}=\frac{\Delta\, y_i^3}{-0{,}006}\,. \tag{8}$$

Действительно, подставив в формулу (8) ординаты $y_1=f_3(x)$ из табл. 1, получим

$$a_3=\frac{1{,}771-3\cdot 2{,}304+3\cdot 2{,}925-3{,}64}{-0{,}006}=+1.$$

Вычислим далее ординаты y_{12} многочлена (5):

$$y_{26}=y_6-a_3 0{,}6^3=1{,}771-1\cdot 0{,}216=1{,}555,$$
$$y_{27}=y_7-a_3 0{,}7^3=2{,}304-1\cdot 0{,}343=1{,}961,$$
$$y_{28}=y_8-a_3 0{,}8^3=2{,}925-1\cdot 0{,}512=2{,}413,$$
$$y_{29}=y_9-a_3 0{,}9^3=3{,}640-1\cdot 0{,}729=2{,}911.$$

Для полученных ординат (в полном соответствии с табл. 1) разделенная разность третьего порядка (6) равна нулю, но уже вторая нулю не равна:

$$\Delta\, y^{(2)}_{7,8,9}=y_{37}-2y_{38}+y_{39}=+0{,}046. \tag{9}$$

Для того чтобы обратить вторую разделенную разность (9) в нуль, вычтем из каждой ординаты y_{3i} $(i=7—9)$ величину $(a_2 x_i^2)$:

$$(y_{37}-a_2 0{,}7^2)-2(y_{38}-a_2 0{,}8^2)+(y_{39}-a_2 0{,}9^2)=0,$$

$$a_2=\frac{\Delta\, y^{(2)}_{7,8,9}}{0{,}02}\,. \tag{10}$$

Для ординат y_{12} коэффициент a_2 по формуле (10) равен

$$a_2=\frac{0{,}046}{0{,}02}=2{,}3.$$

Аналогично определим коэффициенты a_1 и a_0:

$$y_{28}=y_{38}-a_2 0{,}8^2=2{,}413-1{,}472=0{,}941,$$
$$y_{29}=y_{39}-a_2 0{,}9^2=2{,}911-1{,}863=1{,}048,$$
$$(y_{29}-a_1 0{,}9)-(y_{28}-a_1 0{,}8)=0,$$

$$a_1=\frac{y_{29}-y_{28}}{0{,}9-0{,}8}=\frac{\Delta\, y^{(1)}_{9,8}}{0{,}1}\cdots \tag{11}$$

$$a_0 = y_{29} - a_1 0{,}9 = 1{,}048 - \frac{1{,}048 - 0{,}941}{0{,}1} \cdot 0{,}9 = 0{,}085. \qquad (12)$$

Таким образом, все коэффициенты многочлена третьей степени вычислены без решения системы линейных уравнений четвертой степени. Из изложенного последовательность вычислений достаточно ясна: вначале вычисляется коэффициент при неизвестной высшей степени, затем находятся ординаты многочлена, не содержащего члена с неизвестной в наибольшей степени, и вычисления повторяются.

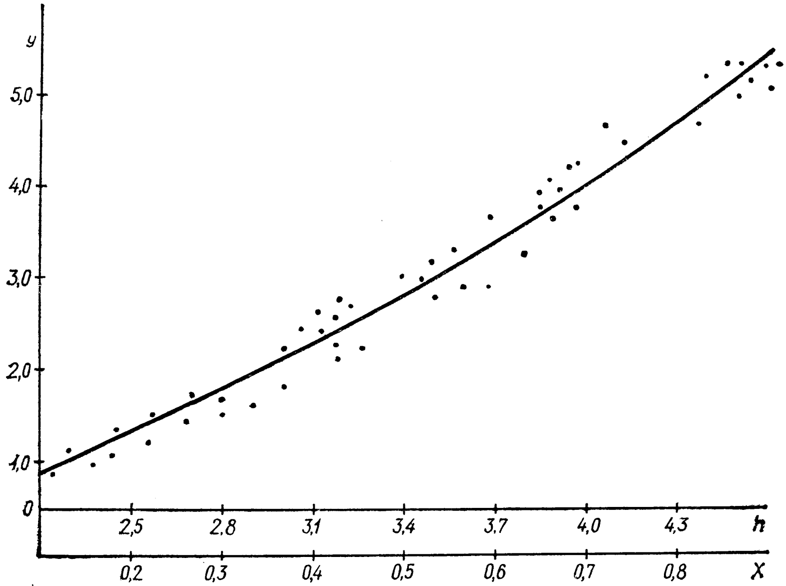

Рис. 2. Кривая экспериментальных данных.

Рассмотрим пример. Экспериментальные данные зависимости величины y от h нанесены на координатную сетку. Кривая, осредняющая экспериментальные точки, проведена по лекалу (рис. 2). Предполагается, что эта кривая — часть графика квадратичной параболы

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2, \qquad (13)$$

где x — безразмерная переменная, связанная с переменной h соотношением

$$x = \frac{h - (h_1 - h_{\text{ш}})}{10 \cdot h_{\text{ш}}}, \qquad (14)$$

где $h_1 = 2{,}2$ — начальная величина переменной на рассматриваемом отрезке; $h_{\text{ш}} = 0{,}3$ — шаг изменения переменной (той же размерности, что и h).

Следует отметить, что переход от размерной шкалы к безразмерной всегда возможен. Безразмерная шкала позволяет унифицировать подсчет коэффициентов эмпирической формулы.

В отличие от метода наименьших квадратов в рассматриваемом случае проверяется степень и подбираются коэффициенты формулы, график которой вычерчивается по эмпирическим данным приближенно.

В связи с этим проверим функцию (13) на различных участках. Вначале возьмем участок, включающий узлы интерполяции [0,6—0,9], а затем [0,1—0,4]. Ординаты (y) кривой, снятые с графика, приведены в табл. 2.

Таблица 2

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
y	0,79	1,19	1,64	2,13	2,75	3,35	4,0	4,69	5,43
$\overline{y}$	0,84	1,24	1,69	2,18	2,92	3,32	3,96	4,66	5,40

Получаем

$$\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9} = y_6 - 3y_7 + 3y_8 - y_9 = 3{,}35 - 3\cdot 4{,}0 + 3\cdot 4{,}69 - 5{,}43 = -0{,}01.$$

Абсолютная величина разделенной разности не является показателем правильного предположения степени эмпирической формулы. Однако если брать более высокие порядки разностей, то они должны стремиться к нулю. В частности, мы предполагаем, что третья разделенная разность близка к нулю. Тогда коэффициент a_2 из (12) найдем, обращая в нуль вторую разделенную разность:

$$(y_7 - a_2\cdot 0{,}7^2) - 2(y_8 - a_2\cdot 0{,}8^2) + (y_9 - a_2\cdot 0{,}9^2) = 0,$$

$$a_2 = \frac{\Delta y^{(2)}_{7,8,9}}{0{,}02} = \frac{0{,}05}{0{,}02} = 2{,}5,$$

$$y_{19} = y_9 - 2{,}5\cdot 0{,}9^2 = 5{,}43 - 2{,}025 = 3{,}405,$$

$$y_{17} = y_7 - 2{,}5\cdot 0{,}7^2 = 4{,}0 - 1{,}225 = 2{,}775,$$

$$\Delta y^{(1)}_{9,7} = (y_{19} - a_1\cdot 0{,}9) - (y_{17} - a_1\cdot 0{,}7) = 0,$$

$$a_1 = \frac{y_{19} - y_{17}}{0{,}2} = \frac{3{,}405 - 2{,}775}{0{,}2} = 3{,}15,$$

$$a_0 = y_{19} - a_1\cdot 0{,}9 = 0{,}57.$$

Таким образом, коэффициенты в уравнении (13) на узлах интерполяции [0,7—0,9] равны: $a_2=2{,}5$, $a_1=3{,}15$, $a_0=0{,}57$. Производя аналогичные вычисления для участка с узлами интерполяции [0,1—0,3], получаем следующие коэффициенты для уравнения (13): $a_2=2{,}5$, $a_1=3{,}25$, $a_0=0{,}44$.

Учитывая малую разность в значениях коэффициентов, осредняем их и принимаем для эмпирической формулы (13): $a_2=2{,}5$, $a_1=3{,}2$, $a_0=0{,}5$. В табл. 2 приведены значения $\overline{y}$, вычисленные по уравнению

$$\overline{y} = 0{,}5 + 3{,}2x + 2{,}5x^2. \qquad (15)$$

Если бы на различных участках кривой были подобраны две различные функции, например линейная и квадратичная, то приближенную эмпирическую формулу можно получить следующим образом. Пусть на первом участке [0,1—0,4] получена линейная зависимость

$$\overline{y_1} = b_0 + b_1 x,$$

а на втором [0,5—0,9] квадратичная

$$\overline{y_2} = a_0 + a_1 x + a_2 x^2.$$

Представим их в виде

$$\overline{y_1} = b_0 \left(1 + \frac{b_1}{b_0} x\right) = b_0 \overline{f_1}(x),$$

$$y_2 = a_0 \left(1 + \frac{a_1}{a_0} x + \frac{a_2}{a_0} x^2\right) = a_0 \overline{f}(x).$$

Эмпирическую формулу для такой функции (назовем ее состыкованной) можно получить, используя $\overline{f_1}(x)$ и $\overline{f_2}(x)$, для чего напишем сумму

$$\overline{y} = A_1 \overline{f_1}(x) + A_2 \overline{f}(x). \tag{16}$$

Коэффициенты A_1 и A_2 находятся с помощью метода равных сумм [2].

При подсчете a_0 по (12) коэффициент a_1 заменен его выражением через разделенную разность; подобную замену можно произвести и для других коэффициентов. Начнем с общего выражения для старшего коэффициента многочлена (1).

Из равенства (7) получим

$$(y_6 - 3y_7 + 3y_8 - y_9) - a_3(0{,}6^3 - 3 \cdot 0{,}7^3 + 3 \cdot 0{,}8^3 - 0{,}9^3) = 0. \tag{17}$$

Вводя обозначения, запишем для коэффициента a_3:

$$a_3 = \frac{\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9}}{\Delta^3 x^{(3)}_{6,7,8,9}}. \tag{18}$$

Показатель при Δ означает степень, в которую возводятся значения узлов интерполяции, указанные индексами при x.

Вторую разделенную разность (9) представим в виде

$$[(y_7 - a_3 0{,}7^3) - a_2 0{,}7^2 - 2[(y_8 - a_3 0{,}8^3) - a_2 0{,}8^2] + \\ + [(y_9 - a_3 0{,}9^3) - a_2 0{,}9^2] = 0, \tag{19}$$

$$\Delta y^{(2)}_{7,8,9} - a_3 \Delta^3 x^{(2)}_{7,8,9} - a_2 \Delta^2 x^{(2)}_{7,8,9} = 0. \tag{20}$$

Заменив в (18) a_3 его значением по (17), получим

$$a_2 = \frac{\Delta y^{(2)}_{7,8,9}}{\Delta^2 x^{(2)}_{7,8,9}} - \frac{\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9}}{\Delta^3 x^{(3)}_{6,7,8,9}} \cdot \frac{\Delta^3 x^{(2)}_{7,8,9}}{\Delta^2 x^{(2)}_{7,8,9}}. \tag{21}$$

Для коэффициента a_1 формула, аналогичная (21), будет получена из выражения для первой разделенной разности:

$$\{[(x_9 - a_3 0{,}9^3) - a_2 0{,}9^2] - a_1 0{,}9\} - \{[(y_8 - a_3 0{,}8^3) - \\ - a_2 0{,}8^2] - a_1 0{,}8\} = 0. \tag{22}$$

Общие выражения для коэффициентов a_2 и a_1 здесь не приводятся из-за их громоздкости. Поскольку разности различных порядков для узлов интерполяции легко вычислить, используя безразмерную шкалу (в этом сказывается преимущество перехода к безразмерной шкале), то коэффициенты кубического многочлена представляются через разделенные разности своих ординат:

$$\left.\begin{aligned} a_3 &= (-166{,}66)\,\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9},\\ a_2 &= 50\,\Delta y^{(2)}_{7,8,9} + 400\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9},\\ a_1 &= 10\Delta y^{(1)}_{9,8} - 85\Delta y^{(2)}_{7,8,9} - 318{,}33\,\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9},\\ a_0 &= \Delta y^{(0)}_{8} - 9\Delta y^{(1)}_{9,8} + 36\Delta y^{(2)}_{7,8,9} + 84\Delta y^{(3)}_{6,7,8,9}.\end{aligned}\right\} \tag{23}$$

В выражениях для коэффициентов по (23) входят разделенные разности различных порядков, что приводит к необходимости их вычисления. Однако эти выражения можно упростить, представив все коэффициенты многочлена в виде

$$a_i = k_1(y_6) + k_2(-3y_7) + k_3(3y_8) + k_4(-y_9), \tag{24}$$

где k_i — коэффициенты, зависящие от выбранных узлов интерполяции.

Для кубического многочлена коэффициенты можно определить по следующим формулам для узлов интерполяции [0,6—0,9]:

$$\left.\begin{aligned} a_3 &= (-166{,}66)(y_6 - 3y_7 + 3y_8 - y_9),\\ a_2 &= 400(+y_6) + 416{,}66(-3y_7) + 366{,}66(+3y_8) + 350(-y_9),\\ a_1 &= -[318{,}33(+y_6) + 290(-3y_7) + 265(+3y_8) + 243{,}33(-y_9)],\\ a_0 &= 84(+y_6) + 72(-3y_7) + 63(+3y_8) + 56(-y_9).\end{aligned}\right\} \tag{25}$$

Приведем также формулы для вычисления коэффициентов квадратного многочлена и многочлена четвертой степени.

Для квадратного многочлена (13) на узлах интерполяции [0,7—0,9] формулы для коэффициентов имеют вид

$$\left.\begin{aligned} a_2 &= 50(y_7 - 2y_8 + y_9),\\ a_1 &= -[85(+y_7) + 80(-2y_8) + 75(+y_9)],\\ a_0 &= 36(+y_7) + 31{,}5(-2y_8) + 28(+y_9).\end{aligned}\right\} \tag{26}$$

Для многочлена четвертой степени

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4$$

на узлах интерполяции [0,5—0,9] формулы для коэффициентов имеют вид

$$\left.\begin{aligned}
a_4 &= 416{,}66(y_5 - 4y_6 + 6y_7 - 4y_8 + y_9),\\
a_3 &= -[1250(+y_5) + 1208{,}33(-4y_6) + 1166{,}66(+6y_7) +\\
&\qquad + 1125(-4y_8) - 1083{,}33(+y_9)],\\
a_2 &= 1770{,}833(+y_5) + 1658{,}33(-4y_6) + 1554{,}166(+6y_7) +\\
&\qquad + 1458{,}33(-4y_8) + 1370{,}833(+y_9),\\
a_1 &= -[1325(+y_5) + 1224{,}166(-4y_6) + 1137{,}5(+6y_7) +\\
&\qquad + 1062{,}5(-4y_8) + 996{,}66(+y_9)],\\
a_0 &= 396(+y_5) + 366(-4y_6) + 342(+6y_7) + 321{,}75(-4y_8) +\\
&\qquad + 304(+y_9).
\end{aligned}\right\} \quad (27)$$

Для других узлов интерполяции коэффициенты в формулах (25), (26), (27) изменятся, однако, изменяя масштабы оси абсцисс, можно воспользоваться и приведенными формулами для достаточно большого диапазона изменения переменной.

Если подставить в формулу для коэффициента a_1 из (26) значения ординат из табл. 2, то получим $a = 3{,}15$, т. е. то же значение, которое было ранее получено с помощью разделенных разностей различных порядков.

Полученные формулы позволяют получить коэффициенты с большей точностью, что не всегда возможно при решении систем линейных уравнений. Точность подбора эмпирической формулы оценивается вычислением коэффициента корреляции или коррелятивного отношения.

Если степень эмпирической формулы предположена большей, чем необходимо, то старший коэффициент (a_3 в (25), a_2 в (26), a_4 в (27)) будет равен нулю. В этом случае необходимо предположить меньшую степень и вычислить все коэффициенты.

Литература

1. *Б. М. Шиголев.* Математическая обработка наблюдений. М., 1962. 2. *П. В. Мелентьев.* Приближенные вычисления. М., 1962. 3. *А. О. Гельфонд.* Исчисление конечных разностей. М., 1967.