Тема: МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, МОДЕЛЬ І ЕКСПЕРИМЕНТ

Мета: вивчити інтерполяцію у математичному моделюванні, виконати планування експерименту, здійснити інтерполяцію функції однієї змінної.

Теоретичні відомості

Математичне моделювання – це теоретично-експериментальний метод пізнавально-складової діяльності, це метод визначення і пояснення явищ, процесів і систем (об’єктів-оригіналів) на основі створення нових об’єктів математичних моделей. Під математичною моделлю прийнято розуміти су- купність відношень (рівнянь, нерівностей, логічних умов, операторів тощо), які визначають характеристики перебування об’єкта моделювання, а через них і вихідні реакції $\bar{Y} = \{y_i; i = \overline{1,m}\}$ в залежності від параметрів об’єкта-оригінала *W*, вхідних впливів $X\{x_j; j = \overline{1,n}\}$, початкових і граничних умов, а також часу.

Математична модель, як правило, враховує лише ті властивості (атрибути) об’єкта-оригінала *W*, які відображають, визначають і є цікавими з точки зору цілей і задач конкретного дослідництва.

Відповідно, в залежності від цілей моделювання, при розгляді одного і того ж об’єкта-оригінала *W* з різних точок зору і в різних аспектах останній може мати різні математичні описи і, як наслідок, бути представленим різними математичними моделями.

Визначення математичної моделі найбільш загально і конструктивно сформулював П.Дж. Косн. Суть його така.

Математична модель – це формальна система, що є кінцевою сукупніс- тю символів і досить суворих правил, визначених цими символами для пев- ного об’єкта із деякими власними відношеннями, символами або константами.

Отже, кінцева сукупність символів (алфавіт) і досить сурові правила оперування цими символами (–граматика і –синтаксис математичних виразів) приводять до формування абстрактних математичних об’єктів. Тільки інтерпретація робить абстрактний об’єкт математичною моделлю.

Будь-який експеримент, яким би він не був складним, закінчується поданням результатів, формулюванням висновків і, можливо, дачею рекомен- дацій іншим особам. Ця інформація може надаватися у вигляді графіків або кривих, математичних формул або номограм, таблиць, статичних даних або словесних описів. Із графіків отримується залежність результату R від змінної x або залежність R від x і y у випадку параметричних кривих. Для отримання залежності R від x, y і z необхідно побудувати ізометричні координати. Графічне зображення більш складних функцій неможливе, оскільки людина не в змозі наочно уявити більш складні співвідношення. Записуючи результати у вигляді формул, можна виразити залежність R від більшої кількості змінних, але лише в небагатьох експериментах одночасно досліджується більше трьох незалежних змінних.

Статичний показник може давати інформацію про всю сукупність даних і про змінність окремих елементів сукупності. Він може давати інформацію про значимість причинного співвідношення або вказувати ймовірність появи конкретної події в майбутньому на основі попереднього досліду.

Подання результатів експериментів в словесній формі завжди було проблемою при проведенні наукових дослідів. Це найнеефективніший спосіб подання результатів, але його не можна ігнорувати повністю. Безумовно, результати деяких експериментів, які проводяться в сучасних фізичних лабораторіях, просто неможливо подати в словесній формі. В техніці такі екс- перименти зустрічаються порівняно рідко, і значна частина технічного звіту звичайно містить словесні описи і пояснення.

Більшість інженерних експериментів веде до конкретної дії – прийняття рішення, продовження дослідів або визнання невдач.

Найбільш складною проблемою є правильне формулювання питань, пов'язаних з побудовою плану експерименту.

План експерименту – це загальний термін. Він визначає набір інструкцій до проведення експерименту, в яких вказується послідовність робіт, характер і величина змін змінних і даються вказівки щодо проведення повторних експериментів.

Неможливо уявити собі експеримент, в якому основним продуктом не були б дані, які записані в тій або іншій формі. В простих експериментах кінцеві дані можуть бути досить елементарними і не містити взагалі будь-якої помилки. З іншого боку, у виключно складних експериментах може бути низька точність, а кінцевий результат буде містити великі помилки.

При дослідженні теоретичних питань, пов'язаних з проведенням експериментів, важливу роль грає вивчення помилок і невизначеностей. Ні один експеримент неможливо правильно спланувати без детального вивчення цього важливого фактора.

Експериментатор, в якій би області він не працював, майже завжди притримується такої послідовності: на початку відбувається планування, потім додають обладнання, після цього відбуваються досліди і накінець виконується аналіз та складається звіт. При плануванні і придбанні обладнання аналіз помилок повинен бути на першому плані.

Якщо технічні обмеження приводять до досить великої невизначеності або фінансові можливості не дозволяють придбати прилади високої точності, то проведення експерименту неможливе.

План експерименту є компактним і ефективним, якщо завчасно встано- влюються інтервали між значеннями змінних. Якщо нас цікавить функціональне співвідношення між незалежною змінною x і залежною змінною y, то цю функцію можна зобразити у вигляді деякої кривої (або прямої) в системі координат (x, y). Така крива складається з нескінченної кількості окремих точок, з яких вибирається деяка кінцева необхідна кількість точок, що характеризують дану функцію. Якщо розглядається функція двох незалежних змінних, то повній сукупності даних відповідає деяка площина.

Таким чином, вибір кінцевої сукупності експериментальних точок є необхідним і важливим етапом планування.

Наступним етапом після проведення експерименту є обробка результатів.

Підбір емпіричних формул та згладжування

При експериментальному (емпіричному) вивченні функціональної залежності однієї величини y від другої величини x проводять ряд вимірювань величини y при різних значеннях величини x. Задача полягає в аналітичному поданні шуканої функціональної залежності, тобто в підборі формули, що описує результати експерименту. Особливість задачі полягає в тому, що наявність випадкових помилок вимірювань роблять нерозумним підбір такої формули, яка точно описувала б всі експериментальні значення. Іншими словами, графік шуканої функції не повинен проходити через всі точки, а повинен, по можливості, згладжувати –шум (випадкові помилки вимірювань). Зрозуміло, що згладжування –шуму буде тим більш точним і надійним, чим більша кількість проведених експериментів, тобто чим більше ми маємо надлишкової інформації.

Наприклад, для проведення прямої $y = ax + b$ досить двох точок – (x_1, y_1) і (x_2, y_2), якщо ці точки відомі точно. Але при наявності більш або менш значного шуму, як на рис.1, для тієї ж мети може знадобитися декілька десятків точок.

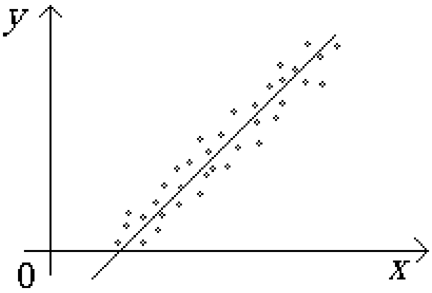


Рис. 1.

Емпіричну формулу звичайно вибирають з формул конкретного типу, наприклад:

$$y = ax + b, \quad y = a \cdot e^{bx} + c, \qquad y = a + h\sin(\omega x + \varphi)$$

Іншими словами, задача зводиться до визначення параметрів a, b, c формул, в той же час як вигляд формули відомий наперед з яких- небудь теоретичних міркувань або з міркувань простоти аналітичного по- дання емпіричного матеріалу.

Позначимо вибрану функціональну залежність через

$$y = f(x; a_o, a_1, ..., a_n)$$

з явним показом всіх параметрів, які необхідно визначити. Ці параметри x; a_o , $a_1,...,a_n$ не можна визначити точно за емпіричними значеннями функції y_1, y_2 $,...,y_n$, тому що останні містять випадкові помилки. Мова йде тільки про отримання достатньо добрих оцінок шуканих параметрів. Метод найменших квадратів дозволяє отримати задовільні оцінки всіх параметрів a_o , $a_1,...,a_n$.

Але не завжди, наприклад, з фізичного аналізу задачі відомий вигляд формули, щоб потім визначити невідомі параметри. Іноді доводиться мати діло з задачами, для яких попередній фізичний аналіз не дає точного вигляду формули або дозволяє вибрати формули з досить широкого кола. Крім того, для простоти подальших розрахунків часто віддають перевагу залежності у вигляді многочлена, але при цьому степінь многочлена не задається наперед.

Якщо кількість експериментальних точок велика, то підбір емпіричної формули може виявитися досить важким: формули з малим числом параметрів можуть давати більші спотворення, а велике число параметрів не зручне для аналізу. Для аналізу важливо ліквідувати ―шум експерименту, зберігаючи інформацію про істинність функції. Для цієї мети використовується згладжування емпіричних даних, тобто заміна даної таблиці експериментальних точок іншою таблицею близьких до них точок, які лежать на достатньо гладкій кривій.

Згладжування відбувається за допомогою многочленів (бажано оптимального степеня), які наближають за методом найменших квадратів вибрані групи експериментальних точок. Оскільки найкраще згладжування отримується для середніх точок (коли враховується інформація про поведінку функції по обидва боки від згладжуваної точки), то кількість точок для згладжування вибирають непарну, а групи точок – ковзними вздовж всієї таблиці: беруть, наприклад, перші п’ять точок y_1, y_2, y_3, y_4, y_5 і згладжують за їх допомогою середню точку y_3, потім беруть наступну групу y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 і згладжують точку y_4, і так далі до кінця таблиці. При цьому залишаються декілька кратних точок (наприклад, дві на початку і дві в кінці таблиці), які згладжуються з меншою точністю.

Нижче наводяться найбільш вживані з простих формул згладжування для таблиць з постійним кроком. В цих формулах прийняті такі позначення. Середній точці групи приписується індекс 0, симетричні точки отримують при цьому індекси ±1, ±2,...

Згладжувані значення позначаються хвилькою зверху. Основною формулою слугує формула згладжування середньої точки, тобто формула для $\tilde{y}_0$, інші формули використовуються тільки на краях таблиці.

Лінійне згладжування

Лінійним згладжуванням називається згладжування многочленом першого степеня.

Формули лінійного згладжування за трьома точками:

$$\tilde{y}_0 = \frac{1}{3}(y_{-1} + y_0 + y_1),$$

$$\tilde{y}_{-1} = \frac{1}{6}(5y_{-1} + 2y_0 - y_1),$$

$$\tilde{y}_1 = \frac{1}{6}(-y_{-1} + 2y_0 + 5y_1).$$

Формули лінійного згладжування за п’ятьма точками:

$$\tilde{y}_0 = \frac{1}{5}(y_{-2} + y_{-1} + y_0 + y_1 + y_2),$$

$$\tilde{y}_{-1} = \frac{1}{10}(4y_{-2} + 3y_{-1} + 2y_0 + y_1),$$

$$\tilde{y}_1 = \frac{1}{10}(y_{-1} + 2y_0 + 3y_1 + 4y_2),$$

$$\tilde{y}_{-2} = \frac{1}{5}(3y_{-2} + 2y_{-1} + y_0 - y_2),$$

$$\tilde{y}_2 = \frac{1}{5}(-y_{-2} + y_0 + 2y_1 + 3y_2).$$

Нелінійне згладжування

З множини формул нелінійного згладжування наведемо тільки формули згладжування многочленів третього степеня за сімома точками:

$$\tilde{y}_0 = \frac{1}{21}(-2y_{-3} + 3y_{-2} + 6y_{-1} + 7y_0 + 6y_1 + 3y_2 - 2y_3),$$

$$\tilde{y}_{-1} = \frac{1}{42}(-4y_{-3} + 16y_{-2} + 19y_{-1} + 12y_0 + 2y_1 - 4y_2 + y_3),$$

$$\tilde{y}_1 = \frac{1}{42}(y_{-3} - 4y_{-2} + 2y_{-1} + 12y_0 + 19y_1 + 16y_2 - 4y_3),$$

$$\tilde{y}_{-2} = \frac{1}{42}(8y_{-3} + 19y_{-2} + 16y_{-1} + 6y_0 - 4y_1 - 7y_2 + 4y_3),$$

$$\tilde{y}_2 = \frac{1}{42}(4y_{-3} - 7y_{-2} - 4y_{-1} + 6y_0 + 16y_1 + 19y_2 + 8y_3),$$

$$\tilde{y}_{-3} = \frac{1}{42}(39y_{-3} + 8y_{-2} - 4y_{-1} - 4y_0 + y_1 + 4y_2 - 2y_3),$$

$$\tilde{y}_3 = \frac{1}{42}(-2y_{-3} + 4y_{-2} + y_{-1} - 4y_0 - 4y_1 + 8y_2 + 39y_3).$$

Формули згладжування многочленами більш високих степенів майже не використовуються, а формули згладжування за більшим числом точок використовуються досить рідко, тому що вони залишають погано згладженими досить велику кількість точок по краях таблиці.

Зауважимо, що результат згладжування сильно залежить від використаних формул, вибір яких підказується швидше інтуїцією, ніж якими-небудь правилами.

Лінійна кореляція і регресія

При вивченні залежності між двома величинами, кожна з яких піддається випадковому розсіюванню (безконтрольному розподілу), використовуються методи кореляційного аналізу. Кореляційний аналіз вивчає усереднений закон поведінки кожної з величин в залежності від значень іншої величини, а також міру залежності між розглянутими величинами. Підставляючи кожному значенню однієї величини, наприклад, x, середнє з відповідних значень другої величини, наприклад, y, ми отримуємо функцію регресії або просто регресію y на x. Аналогічно визначається регресія величини x на величину y. Функція регресії зображається графічно лінією регресії. Міра залежності між величинами характеризується коефіцієнтом кореляції або кореляційними відношеннями.

Кореляція між величинами x та y називається лінійною, якщо обидві функції регресії лінійні. В цьому випадку лінії регресії перетворюються в прямі регресії. Кутові коефіцієнти цих прямих виражаються через коефіцієнт кореляції, який служить також мірою лінійної залежності між величинами.

Коефіцієнтом кореляції ρ між випадковими величинами x та y називається математичне сподівання добутку їх нормованих відхилень:

$$\rho = M\left(\frac{x-a}{\sigma_x}\cdot\frac{y-b}{\sigma_y}\right),$$

де $a = Mx$ і $b = My$ – центри розподілення величин x і y, σ_x^2 і σ_y^2 – їх дисперсії.

Коефіцієнт кореляції ρ може бути також записаний в одній з таких форм:

$$\rho = \frac{1}{\sigma_x\sigma_y}M(x-a)(y-b) = \frac{M(xy)-M_xM_y}{\sigma_x\sigma_y}.$$

Величина $M(x-a)(y-b)$ називається кореляційним моментом.

Коефіцієнт кореляції – це безрозмірна величина, його абсолютна величина не перевищує одиницю: $|\rho| \le 1$.

Для незалежних величин x і y коефіцієнт кореляції дорівнює нулеві. Якщо для залежних величин коефіцієнт кореляції дорівнює нулю, то в цьому випадку величини x і y називаються некорельованими.

Коефіцієнт кореляції характеризує міру лінійної залежності між величинами x і y. Пояснимо це. Нехай $Ax+B$ – лінійна функція середньоквадратичного наближення до величини y, тобто така лінійна функція, для якої математичне сподівання $M[y-(Ax+B)]^2$ досягає найменшого значення.

Для експериментального вивчення залежності між двома величинами x і y проводять деяку кількість n незалежних випробувань (дослідів, спостережень). Результат i-го дослідження дає пару значень x_i, y_i $(i=\overline{1,n})$. За цими значеннями визначаються точкові оцінки як середніх значень, так і коефіцієнта кореляції.

Незмінними і самостійними оцінками теоретичних середніх значень a і b служать емпіричні середні значення:

$$\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i, \quad \bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i.$$

Незміщеними і самостійними оцінками дисперсії σ_x^2 і σ_y^2 служать емпіричні дисперсії:

$$S_x^2=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2=\frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n}x_i^2-(\bar{x})^2n\right],$$

$$S_y^2=\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y})^2=\frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n}y_i^2-(\bar{y})^2n\right].$$

Для оцінки кореляційного моменту служить емпіричний кореляційний момент:

$$\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})=\frac{1}{n-1}\left[\sum_{i=1}^{n}x_iy_i-\bar{x}\bar{y}n\right].$$

За цими оцінками будують емпіричний коефіцієнт кореляції:

$$r=\frac{1}{S_xS_y}\cdot\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y}).$$

Зауважимо, що емпіричний коефіцієнт кореляції, як і теоретичний, за абсолютною величиною не перевищує одиниці.

Коефіцієнт r не змінюється при зміні початку відліку і масштабу вимірювання величин x і y. Ця властивість дозволяє суттєво спростити обчислення за допомогою вибору зручного початку відліку (x_o, y_o) і одиниць масштабу.

Після заміни:

$$x=x_0+h_1u, \quad y=y_0+h_2\upsilon \qquad (h_1,h_2>0),$$

тобто $u=\frac{x-x_0}{h_1}$, $\upsilon=\frac{y-y_0}{h_2}$, емпіричний коефіцієнт кореляції обчислюється за формулою:

$$r = \frac{\sum u_i \upsilon_i - n\overline{u}\,\overline{\upsilon}}{\sqrt{\sum u_i^2 - n(\overline{u})^2} \cdot \sqrt{\sum \upsilon_i^2 - n(\overline{\upsilon})^2}},$$

де $\overline{u} = \frac{1}{n}\sum u_i, \quad \overline{\upsilon} = \frac{1}{n}\sum \upsilon_i, \quad \sum = \sum_{i=1}^{n}$.

Приклад розрахунку коефіцієнта кореляції

Проведено $n = 26$ вимірювань значень x і y. В перших трьох стовпцях таблиці знаходяться різні значення вимірювань (x_i, y_i) з кількістю вимірювань m_i, в яких зустрічалась кожна точка (x_i, y_i). Для величини x вибрано початок відліку $x_0 = 26$, масштабний коефіцієнт $h_1 = 0{,}5$. Для величини y, відповідно, $y_0 = 0{,}5$ і $h_2 = 0{,}01$. Таким чином, величини $u_i = \frac{x_i - 26}{0{,}5}, \quad \upsilon_i = \frac{y_i - 0{,}5}{0{,}01}$ наближають тільки цілі значення. При підрахунку сум, які входять в формулу (2.3.4), кожний доданок враховується стільки раз, скільки він зустрічається в таблиці, тому для розрахунку введені стовпці um, u^2m і $\upsilon m, \upsilon^2 m, u\upsilon m$. В другому рядку умовно вказаний порядок дій. В останньому рядку підраховані суми, які необхідні для розрахунків:

$$\sum m_i = n = 26, \quad \sum u_i \upsilon_i = -26, \quad \sum u_i^2 m_i = 248,$$

$$\sum \upsilon_i m_i = 22, \qquad \sum \upsilon_i^2 m_i = 104, \quad \sum u_i \upsilon_i m_i = 87.$$

Зауважимо, що тут суми Σ результатів беруться не по всіх n = 26 вимірюваннях, як в формулі (2.3.7), а лише по різних точках (x_i, y_i), що і викликає необхідність врахування множників m_i. Наприклад, повна сума $\sum_{i=1}^{n} u_i \upsilon_i$ тут записується у вигляді $\sum u_i \upsilon_i m_i$, а середнє значення – $\overline{u} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} u_i = \frac{1}{n}\sum u_i m_i$.

Для контролю розрахунків рекомендується повторити розрахунок з іншим початком відліку.

За отриманими даними знаходимо середнє значення $\overline{u} = -1, \ \overline{\upsilon} = \frac{22}{26} = 0{,}846$ і емпіричний коефіцієнт кореляції:

$$r = \frac{87 - 26 \cdot (-1) \cdot 0{,}846}{\sqrt{248 - 26 \cdot (-1)^2} \cdot \sqrt{104 - 26 \cdot (0{,}846)^2}} = 0{,}793.$$

x	y	m	u	um	U^2m	υ	υm	$\upsilon^2 m$	$U\upsilon m$
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)=(3)(4)	(6)=(4)(5)	(7)	(8)=(3)(7)	(9)=(7)(8)	(10)=(5)(7)
23,0	0,48	2	-6	-12	72	-2	-4	8	24
24,0	0,50	4	-4	-16	64	0	0	0	0
24,5	0,49	3	-3	-9	27	-1	-3	3	9
24,5	0,50	2	-3	-6	18	0	0	0	0
25,0	0,51	1	-2	-2	4	1	1	1	-2
25,5	0,52	1	-1	-1	1	2	2	4	-2
26,0	0,49	2	0	0	0	-1	-2	2	0
26,0	0,51	1	0	0	0	1	1	1	0
26,0	0,53	2	0	0	0	3	6	18	0
26,5	0,50	1	1	1	1	0	0	0	0
26,5	0,52	1	1	1	1	2	2	4	2
27,0	0,54	2	2	4	8	4	8	32	16
27,0	0,52	1	2	2	4	2	2	4	4
28,0	0,53	3	4	12	48	3	9	27	36
Суми	26	-	-26	248	-	22		104	87

Рівняння прямих регресії

Пряма регресії y на x має рівняння:

$$y-b=\rho\frac{\sigma_y}{\sigma_x}(x-a),$$

де $a, b, \sigma_x, \sigma_y, \rho$ – параметри.

Пряма регресії x на y має рівняння:

$$x-a=\rho\frac{\sigma_x}{\sigma_y}(y-b).$$

Коефіцієнти

$$\beta_{y/x}=\rho\frac{\sigma_y}{\sigma_x},\quad \beta_{x/y}=\rho\frac{\sigma_x}{\sigma_y}$$

називаються коефіцієнтами регресії y на x та x на y, відповідно. Обидва коефіцієнти регресії $\beta_{y/x}$ і $\beta_{x/y}$ мають той же знак, що і коефіцієнт кореляції ρ. Обидві прямі регресії проходять через точку (a, b) – центр розподілення. Прямі регресії y на x та x на y збігаються тільки тоді, коли $|\rho|=1$, тобто у випадку лінійної функціональної залежності між величинами x та y.

Ці оцінки визначають емпіричні прямі регресії. Емпірична пряма регресії у на х має рівняння:

$$y-\overline{y}=r\frac{S_y}{S_x}(x-\overline{x}),$$

причому

$$b_{y/x}=r\frac{S_y}{S_x}=\frac{\sum_{i=1}^{n}x_iy_i-n\overline{x}\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n}x_i^2-n(\overline{x})^2}=\frac{\sum_{i=1}^{n}u_i\upsilon_i-n\overline{u}\,\overline{\upsilon}}{\sum_{i=1}^{n}u_i^2-n(\overline{u})^2}\cdot\frac{h_2}{h_1}$$

є емпіричним коефіцієнтом регресії y на x.

Параметри даної лінійної функції задовольняють принцип найменших квадратів за y: сума квадратів відхилень спостережуваних значень y_i від розрахункових за рівнянням прямої регресії менше, ніж сума квадратів відхилень їх від будь-якої іншої прямої. Таким чином, має місце нерівність:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-\overline{y}-r\frac{S_y}{S_x}(x_i-\overline{x})\right]^2\leq\sum_{i=1}^{n}[y_i-(Ax_i+B)]^2,$$

або, з врахуванням (2.3.7), маємо:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[y_i-\overline{y}-r\frac{S_y}{S_x}(x_i-\overline{x})\right]^2=(n-1)S_y^2(1-r^2)$$

Емпірична пряма регресії x на y має рівняння:

$$x-\overline{x}=r\frac{S_x}{S_y}(y-\overline{y}),$$

де $b_{x/y}=r\frac{S_x}{S_y}=\frac{\sum_{i=1}^{n}x_iy_i-n\overline{x}\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n}y_i^2-n(\overline{y})^2}=\frac{\sum_{i=1}^{n}u_i\upsilon_i-n\overline{u}\,\overline{\upsilon}}{\sum_{i=1}^{n}\upsilon_i^2-n(\overline{\upsilon})^2}\cdot\frac{h_1}{h_2}$

є емпіричним коефіцієнтом регресії x на y. Для цієї прямої принцип найменших квадратів виконується відносно величини x: сума квадратів відхилень спостережуваних значень x_i від розрахункових за рівнянням прямої регресії менше, ніж сума квадратів відхилень їх від будь-якої іншої прямої. Таким чином, має місце нерівність:

$$\sum_{i=1}^{n}\left[x_i-\overline{x}-r\frac{S_x}{S_y}(y_i-\overline{y})\right]^2\leq\sum_{i=1}^{n}[x_i-(Ay_i+B)]^2.$$

При цьому $\sum_{i=1}^{n}\left[x_i-\overline{x}-r\frac{S_x}{S_y}(y_i-\overline{y})\right]^2=(n-1)S_x^2(1-r^2).$

На рис. 2 і рис. 3 показано, які відхилення маються на увазі при розгляді прямих регресії y на x і x на y.

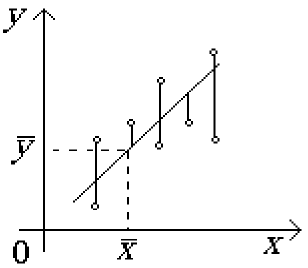


Рисунок 2

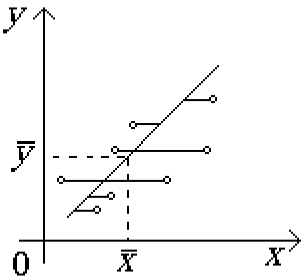


Рисунок 3

Обидві емпіричні прямі регресії проходять через центр емпіричного розподілення – точку $(x,\ y)$. Пряма регресії x на y завжди проходить крутіше (з більшим нахилом до осі x), ніж пряма регресії y на x.

Обидві емпіричні прямі регресії проходять через центр емпіричного розподілення – точку $(\overline{x}, \overline{y})$. Пряма регресії x на y завжди проходить крутіше (з більшим нахилом до осі x), ніж пряма регресії y на x.

Емпіричні коефіцієнти регресії $b_{y/x}$ і $b_{x/y}$ мають той же знак, що і емпіричний коефіцієнт кореляції r, і пов’язані співвідношенням $b_{y/x} \cdot b_{x/y} = r^2$.

Приклад Визначимо рівняння емпіричних прямих регресії попереднього прикладу. Маємо:

$$\overline{x} = 26 + 0{,}5 \cdot (-1) = 25{,}5,$$

$$\overline{y} = 0{,}5 + 0{,}01 \cdot 0{,}846 = 0{,}50846.$$

Емпіричний коефіцієнт регресії y на x:

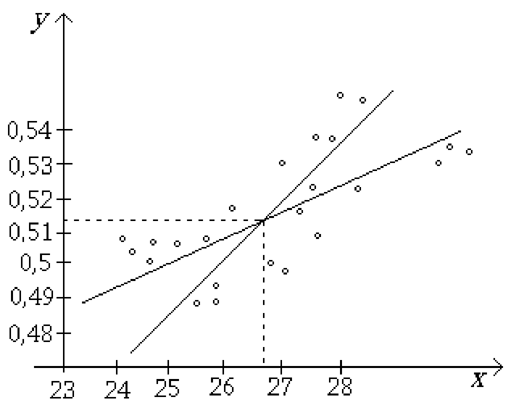
$$b_{y/x} = \frac{87 - 26 \cdot (-1) \cdot 0{,}846}{248 - 26 \cdot (-1)^2} \cdot \frac{0{,}01}{0{,}5} = 0{,}00978.$$

Емпіричний коефіцієнт регресії x на y:

$$b_{y/x} = \frac{87 - 26 \cdot (-1) \cdot 0{,}846}{101 - 26 \cdot (0{,}846)^2} \cdot \frac{0{,}5}{0{,}01} = 63{,}8;$$

$$y - 0{,}508 = 0{,}00978 \cdot (x - 25{,}5),$$

$$x - 25{,}5 = 63{,}8 \cdot (y - 0{,}508).$$



Інтерполяція функцій однієї і декількох змінних

Повним описом функціональної залежності відповідних результатів випробувань (вимірів) вважають задання формули або нескінченний набір чисел. Розв'язання задач на ЕОМ відбувається тільки з кінцевою сукупністю чисел. Виникає необхідність охарактеризувати функцію кінцевим набором чисел.

За методом сіток функції описують їх значеннями в кінцевому числі *k–х* точок. Це означає, що на деякому інтервалі $[a, b]$ у вузлах сітки маємо відповідні значення функції $f(x_1, x_2 .. x_k)$ $(\overline{k=1,n})$.

Одновимірна інтерполяція

На практиці найбільш часто необхідно відновити функцію за її сітковим поданням. Це роблять за допомогою інтерполяції.

Задача одновимірної інтерполяції полягає в побудові такої функції, що $f(x_k)=y_k$ для всіх k і при цьому $f(x)$ повинна приймати розумні значення для X, які містяться між заданими точками. Критерій розумності для кожної за- дачі свій і, напевне, ніколи точного визначення не буде мати.

Найбільш важливим класом інтерполяційних функцій є множина алгеб- раїчних поліномів. Задача поліноміальної інтерполяції полягає в побудові полінома

$$P_{n-1}(x; f) = P_{n-1}(x; x_1;...; f_1;...; f_n)$$

степені n-1, який приймає у вузлах $x_1, x_2,...,x_n$ значення $f_1, f_2,..., f_n$. З курсу математичного аналізу відомо, що будь-яка неперервна функція може бути представлена на кінцевому інтервалі $[a,b]$ поліном P_n степені n, а через n точок можна провести єдиний поліном степені n-1.

Відновлення коефіцієнтів полінома $P_{n-1}(x;f)$ можна провести, розв'язуючи систему n рівнянь відносно невідомих лінійних коефіцієнтів a_k $(k=0, n-1)$. Але в багатьох випадках рівняння недостатньо обумовлені. Найбільш задовільний спосіб визначення полінома, який інтерполює точки (x_k, f_k), полягає у використанні базису лагранжевих поліномів на множині (x_k). Це такі поліноми $l_j(x)$ $(j=0, n-1)$ степені n-1, що

$$l_j(x) = \begin{cases} 1, & \text{якщо} \quad j = k; \\ 0, & \text{якщо} \quad j \neq k. \end{cases}$$

Ці умови задовольняє поліном

$$l_j(x) = \frac{(x - x_1)\cdots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\cdots(x - x_n)}{(x_j - x_1)\cdots(x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1})\cdots(x_j - x_n)}.$$

Кожний множник чисельника обертається в нуль при $k \neq j$. Відповідні множники знаменника нормують поліномом так, що $l_j(x_j) = 1$. Поліном $l_j(x) f_j$ приймає значення f_j в точці x_j і дорівнює нулеві у всіх точках x_k ($k \neq j$). Таким чином, інтерполяційний поліном степені $n-1$, який проходить через n точок (x_k, f_k), виражається формулою

$$P_{n-1}(x, f) = \sum_{j=1}^{n} l_j(x) f(x_j)$$

і називається інтерполяційним поліномом Лагранжа.

Похибка поліноміальної інтерполяції на інтервалі *[а, в]* оцінюється за формулою:

$$f(x) - P_{n-1}(x, f) = \max_{[a,в]} \left| f^{(n)}(x) \right| \left| (x - x_1) \cdots (x - x_n) \right| / n!,$$

де $f^{(n)}$ - похідна порядку n.

Якщо похідні високих порядків великі за абсолютним значенням, то точність апроксимації буде малою, тому немає потреби вибирати велику кількість вузлів. Крім того, при підвищенні степені полінома результат через погану обумовленість стає досить чутливим до помилок округлення. При недостатній функції відрізок *[а, в]* розбивають начасткові інтервали і на кожному з них використовують інтерполяцію невисокого порядку. Наприклад, якщо відомо, що $f(x)$ має обмежену тільки другу похідну $f''(x) \leq M_2$, то бажано обмежитись лінійною інтерполяцією.

Тоді похибка на рівномірній сітці з кроком h буде не перевищувати $M_2 h^2/8$.

Таким чином, процес кусково-лінійної інтерполяції збігається при $h \to 0$ зі швидкістю h^2, тоді як процес інтерполяції в цілому може розбігатись.

Для наближеного відновлення функції за її значеннями на сітці використовують, крім поліномів, інші функції. Наприклад, для подання періоди- чних функцій використовують тригонометричну інтерполяцію.

Приклад. За дослідними даними залежність водопоглинання w від температури опалення Т становить

Т, ºС	1000	1200	1300
w, %	15	7	2

визначити водопоглинання для проміжного значення Т=1250ºС.

Розв'язання: Інтерполяційний поліном Лагранжа для триточкової інтерполяції такий:

$$P_2 = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f_3. \quad (2.4.4)$$

Якщо підставити значення $x = T = 1250$, $x_1 = 1000$, $x_2 = 1200$, $x_3 = 1300$, $f_1 = w_1 = 15$, $f_2 = w_2 = 7$ і $f_3 = w_3 = 2$, отримаємо:

$$P_2(1250) = \frac{(1250-1200)(1250-1300)}{(1000-1200)(1000-1300)}\cdot 15 + \frac{(1250-1000)(1250-1300)}{(1200-1000)(1200-1300)}\cdot 7 +$$
$$+\frac{(1250-1000)(1250-1200)}{(1300-1000)(1300-1200)}\cdot 2 = 4{,}6.$$

Отже, при Т=1250°С водопоглинання w=4,6%.

Інтерполяція сплайнами

Розглянемо випадок кусково-поліноміальної інтерполяції, коли між сусідніми вузлами сітки функції інтерполюються кубічним поліномом (кубічним сплайном) [7]. Його коефіцієнти на кожному інтервалі визначаються з умови спряження у вузлах:

$$f_i = y_i,$$
$$f'(x_i - 0) = f'(x_i + 0),$$
$$f''(x_i - 0) = f''(x_i + 0), i = \overline{1, n-1}.$$

Крім цього, при $x = x_0$ і $x = x_n$ висувається гранична умова:

$$f''(x_0) = 0, f''(x_n) = 0. \quad (2.4.5)$$

Будемо шукати кубічний поліном у вигляді:

$$f(x) = a_i + в_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3,$$
$$x_{i-1} \le x \le x_i.$$

З умови $f_i = y_i$ маємо:

$$f(x_{i-1}) = a_1 = y_{i-1},$$
$$f(x_i) = a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 = y_i,$$
$$h_i = x_i - x_{i-1}, \quad i = \overline{1, n-1}.$$

Визначимо похідні:

$$f'(x) = в_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2,$$
$$f''(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1})$$

і запишемо умову їх неперервності при $x = x_i$:

$$в_{i+1} = в_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2,$$
$$c_{i+1} = c_i + 3d_i h_i, \quad i = \overline{1, n-1}.$$

Загальна кількість невідомих коефіцієнтів дорівнює $4n$, але кількість рівнянь (2.4.7) і (2.4.8) дорівнює $4n$-2. Інші два рівняння отримаємо з умови (2.4.5) при $x = x_0$ і $x = x_n$: $c_1 = 0, c_n + 3d_n h_n = 0$.

Виразивши з (2.4.8) $d_i = (c_{i+1} - c_i)/3h_i$ та підставляючи його в (2.4.7) з врахуванням $a_i = y_{i-1}$, отримаємо:

$$в_i = \frac{(y_i - y_{i-1})}{h_i} - \frac{1}{3} h_i (c_{i+1} + 2c_i),\ i = \overline{1, n-1}, \qquad (2.4.9)$$

$$в_n = (y_n - y_{n-1}) h_n - \frac{2}{3} h_n c_n.$$

З першого рівняння (2.4.8) і (2.4.9) та виразу d_i отримуємо для визначення c_i різницеве рівняння другого порядку:

$$h_i c_i + 2(h_i + h_{i+1}) c_{i+1} + h_{i+1} c_{i+2} = 3\left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}\right), \qquad (2.4.10)$$

$$i = \overline{1, n-1}$$

з граничними умовами:

$$c_1 = 0, c_{n+1} = 0. \qquad (2.4.11)$$

Різницеве рівняння (2.4.10) з умовами (2.4.11) розв'язується методом прогонки.

Використаємо кубічну сплайн-інтерполяцію для розв'язання попереднього прикладу.

Оскільки необхідно визначити значення $f(1250)$, то кубічний поліном будемо шукати у вигляді

$$f(x) = a_2 + в_2 (x - x_1) + c_2 (x - x_1)^2 + d_2 (x - x_1)^3 \qquad (2.4.12)$$

на рівномірній сітці з кроком $h = 100$ на інтервалі $1200 = x_1 \le x \le x_2 = 1300$.

Коефіцієнт $a_2 = y_1 = 7$.

Різницеве рівняння (2.4.10) запишеться у вигляді:

$$(c_1 + 4c_2 + c_3) h^2 = 3(y_2 - 2y_1 + y_0).$$

З врахуванням (2.4.11) $c_1 = 0, c_3 = 0$, тоді $4c_2 = \frac{3}{100^2}(2 - 14 + 15)$. Звідки $c_2 = {}^{9}\!/_{40000}$. Тоді $d_2 = -{}^{9}\!/_{12000000}$.

Визначимо за формулою (2.4.9) значення $в_2$:

$$в_2 = \frac{y_2 - y_1}{100} - \frac{2}{3} h c_2 = \frac{2 - 7}{100} - \frac{200}{3} \cdot \frac{9}{40000} = -\frac{5}{100} - \frac{3}{200} = -\frac{13}{200}.$$

В результаті кубічний поліном набуде вигляду:

$$f(x) = 7 - \frac{13}{200}(x - 1200) + \frac{9}{40000}(x - 1200)^2 - \frac{9}{12000000}(x - 1200)^3.$$

Звідки $f(1250) = 4{,}22$.

Інтерполяція використовується також в задачі оберненого інтерполювання: задана таблиця $y_i = y(x_i)$; знайти xi як функцію від y_i.

Прикладом оберненого інтерполювання може служити задача про знаходження коренів рівняння.

Інтерполяційні формули використовуються також при обчисленні інтегралів, при написанні різницевих апроксимацій для диференціальних рів- нянь на основі інтегральних тотожностей.

Багатовимірна інтерполяція

В різних додатках широко використовують двовимірні, тривимірні таб- лиці. Наприклад, теплофізичні властивості різноманітних речовин залежать від температури і тиску, а оптичні характеристики – ще і від довжини хвилі випромінювання.

При багатовимірній інтерполяції через громіздкість таблиць необхідно брати достатньо великі кроки по аргументах, тобто сітка вузлів, на якій бу- дують таблицю, отримується достатньо грубою. Тому необхідно вводити перетворення змінних $\eta = \eta(y)$, $\xi = \xi(x)$, $\varphi = \varphi(z)$, підбираючи відповідні формули. При вдалому виборі таких формул можна використовувати в нових змінних інтерполяційний поліном невисокого степеня.

Здійснюючи багатовимірну інтерполяцією, необхідно пам'ятати, що розміщення вузлів не може бути довільним. Наприклад, при інтерполяції полінома першого степеня $P_1(x, y)$ вузли не повинні лежати на одній прямій в площині. Дійсно, визначник системи трьох рівнянь

$$z_i = a + вx_i + cy_i,\ i = \overline{1,3}$$

записується у вигляді:

$$\Delta = x_1(y_2 - y_3) + x_2(y_3 - y_1) + x_3(y_1 - y_2).$$

Умови розміщення трьох точок на одній прямій виглядають таким чином:

$$x_1(y_2 - y_3) + x_2(y_3 - y_1) + x_3(y_1 - y_2) = 0,$$

тобто, якщо вузли лежать на одній прямій, то визначник дорівнює нулю і побудувати поліном $P_1(x, y)$ вигляду неможливо. Перевіряти умови потрібного типу достатньо складно, тому на практиці намагаються будувати регулярні сітки, як правило, прямокутні і рівномірні, коли вузли є точками перетину двох взаємно перпендикулярних систем паралельних прямих. На цій сітці проводять просту послідовну інтерполяцію спочатку за рядками, а потім за стовпцями.

При послідовній інтерполяції завищується степінь інтерполяційного полінома. При трикутній конфігурації розміщення вузлів степінь многочлена буде мінімальною. Многочлен *n*-ої степеня у формі Ньютона в даному випадку можна уявити як узагальнення одновимірного варіанта запису:

$$P_n(x,y)=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n-1} Z(x_0,\ldots,x_i,y_0,\ldots,y_j)\prod_{P=0}^{i-1}(x-x_P)\prod_{q=0}^{j-1}(y-y_q).$$

Приклад

Записати многочлен Ньютона першого і другого степеня для двовимірної інтерполяції функції $z=z(x,y)$.

З (2.4.16) отримаємо:

$$P_1(x,y)=z(x_0,y_0)+z(x_0,y_0,y_1)(y-y_0)+z(x_0,x_1,y_0)(x-x_0),$$

$$z(x_0,y_0,y_1)=\frac{z(x_0,y_0)-z(x_0,y_1)}{y_0-y_1},\ z(x_0,x_1,y_0)=\frac{z(x_0,y_0)-z(x_1,y_0)}{x_0-x_1}.$$

$$P_2(x,y)=z(x_0,y_0)+z(x_0,y_0,y_1)\cdot(y-y_0)+z(x_0,y_0,y_1,y_2)\cdot(y-y_0)\cdot(y-y_1)+$$
$$+z(x_0,x_1,y_0)\cdot(x-x_0)+z(x_0,x_1,y_0,y_1)\cdot(x-x_0)\cdot(y-y_0)+z(x_0,x_1,x_2,y_0)\cdot$$
$$\cdot(x-x_0)\cdot(x-x_1).$$

В деяких випадках використовують нерегулярні сітки. Тоді обмежуються інтерполяційним поліномом першого степеня $z=a+вx+cy$ і його коефіцієнти знаходять за трьома вузлами:

$$z_i=a+вx_i+cy_i,\ i=\overline{1,3}.$$

Коефіцієнти a, $в$, c не обов'язково визначати, оскільки перший стовпець є лінійною комбінацією трьох інших стовпців. В результаті з цих стовпців можна скласти визначник, який буде дорівнювати нулю. Розглядаючи цей визначник за першим стовпцем, отримаємо залежність $z=z(x,y)$.

Порядок виконання роботи

1. На підставі виданого завдання вивчити методи математичного моделювання.
2. Розв'язати задані приклади.
3. Скласти звіт по лабораторній роботі.

Зміст звіту

1. Назва роботи.
2. Мета роботи.
3. Розрахунки значень заданих прикладів.
4. Висновки.
5. Література.

Література

1. Эндрюс Дж., Мак-Лоун Р. Математическое моделирование – М.: Мир, 1979. - 217 с.
2. Вознесенский В.А., Лященко Т.В., Огарков Б.Л. Численные методы решения строительно-технологических задач на ЭВМ. – К.: Вища школа, 1989. - 328 с.
3. Борщ И.М., Вознесенский В.А., Мукин В.З. и др. Процессы и аппара- ты в технологии строительных материалов. – К.: Вища школа, 1981. - 296 с.
4. Подвальный А.М., Проценко А.М. Исследование проницаемости на математических моделях // Защита строительных конструкций зданий от коррозии. – М.: Стройиздат, 1973. – С. 149-156.
5. Вознесенский В.А., Лященко Т.В., Иванов Я.П., Николов И.И. ЭВМ и оптимизация композиционных материалов. – К.: Будівельник, 1989. - 240 с.
6. Моисеев Н.Н., Иванилов Ю.П., Столярова Е.М. Методы оптимизации.
   – М.: Наука, 1978. - 272 с.
7. Самарский А.А. Введение в численные методы. – М.: Наука, 1983. - 272 с.
8. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975.- 266 с.