4.2.5. Метод Мюллера (D. E. Muller)

Метод Мюллера (или парабол) состоит в приближенной замене заданной функции $f(x)$ интерполяционным полиномом второй степени (параболой, на рис. 41 и 42 она нанесена пунктирной линией), построенным по значениям функции в трех точках x_0, x_1, x_2 и последующим нахождением координаты точки пересечения этой параболы с осью абсцисс, т.е. решения квадратного уравнения. Иными словами, в методе Мюллера используется не линейная аппроксимация, как в методах Ньютона и секущих, а квадратичная.

Как следует из определения метода Мюллера для начала итерационного процесса необходимо задать три начальных приближения: нулевое x_0, первое x_1 и второе x_2. На практике поступают следующим образом: за нулевое приближение выбирают одну из границ интервала локализации (левую рис. 41а или правую рис. 41б), а в качестве первого и второго приближения выбирают величины $x_1 = x_0 \pm \varepsilon$ и $x_2 = x_0 \pm 2\varepsilon$, где ε – заданная погрешность.

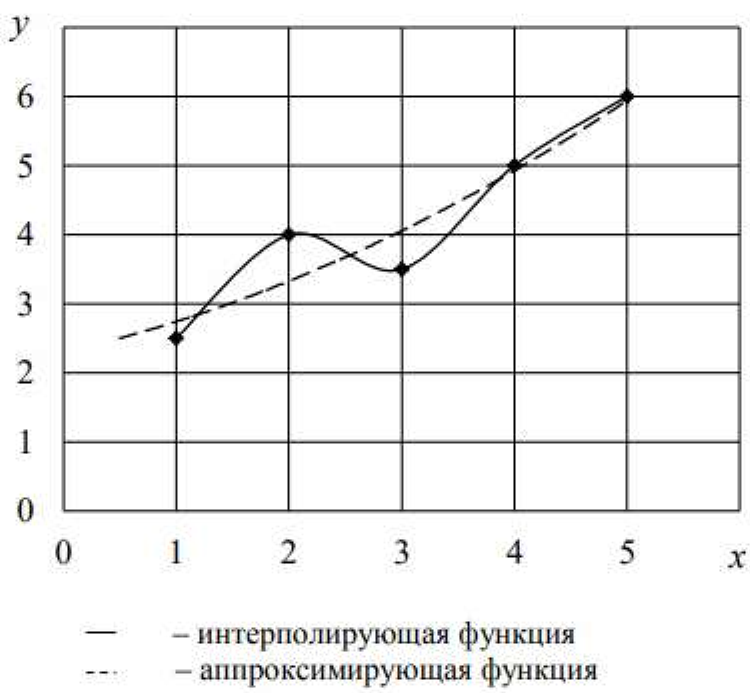

Рис. 4. Вид интерполирующей и аппроксимирующей функций

Если аналитическое выражение функции, описывающей закон изменение y_i (i=1, 2, …, n) неизвестно или весьма сложно, то возникает задача найти такую эмпирическую формулу

$$f = y(x),$$

значения которой при $x=x_i$ мало отличались бы от опытных данных.

Геометрически задача построения функции $f(x)$ по эмпирической формуле состоит в проведении усредненной кривой – кривой, проходящей через середину области значений (табл. 8) (рис. 5).

Таблица 8

Экспериментальные данные

x	1	2	3	4	5
y	2,5	4	3,5	5	5,5

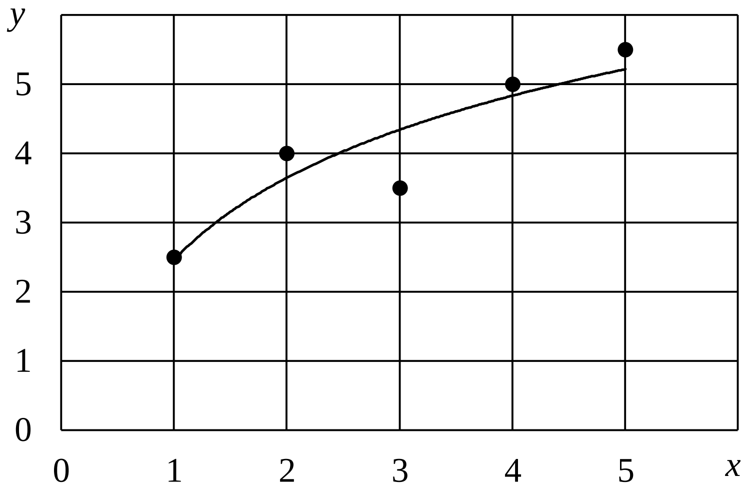

Рис. 5. Пример аппроксимирующей функции

Интерполяцией данные описываются более точно, чем при аппроксимации, но в ряде случаев обосновано применение аппроксимации:

- при значительном количестве табличных данных (интерполирующая функция становится громоздкой);
- интерполирующей функцией невозможно описать данные при повторении эксперимента в одних тех же начальных условиях (требуется статистическая обработка;
- для сглаживания погрешностей эксперимента. Данные x_i и y_i обычно содержат ошибки, поэтому интерполяционная формула повторяет эти ошибки. Из рисунка (рис. 6) видно, что значения y постоянно и равномерно увеличивается при росте x, а разброс данных относительно аппроксимирующей функции можно объяснить погрешностью эксперимента.

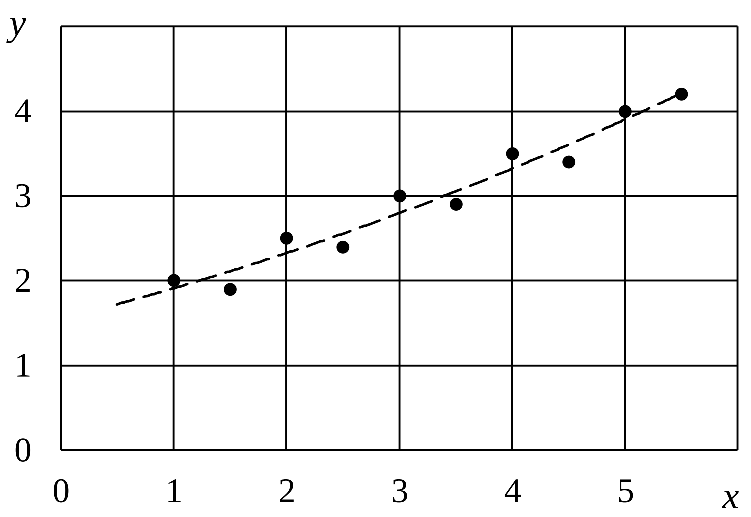

Рис. 6. Пример построения аппроксимирующей функции

При построении аппроксимирующей зависимости определяют:

- аналитический характер эмпирической формулы. Предпочтение отдается простым формулам, обладающим хорошей точностью;

- наилучшие параметры эмпирической зависимости.

Существует несколько методов аппроксимации, рассмотрим некоторые из них.

2.1. Метод наименьших квадратов

Суть метода наименьших квадратов заключается в нахождении таких значений x_i, при которых сумма квадратов отклонений (ошибок) $e_i = y_i - f_i(x)$ будет стремиться к минимуму

$$\sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 \to \min_x . \qquad (9)$$

Т.к. каждое значение x_i в общем случае «сопровождается» соответствующим коэффициентом a_i (i = 0, 1, 2, …, n), то задача сводится к нахождению данных коэффициентов. Введем обозначение функции

$$F(a_0,\ a_1,\ ...,a_n) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2. \qquad (10)$$

Тогда, на основе обращения в точке минимума функции F в нуль ее производных, для определения вышеупомянутых коэффициентов составляется нормальная система:

$$\begin{cases} \dfrac{dF}{da_0} = 0; \\ \dfrac{dF}{da_1} = 0; \\ ... \\ \dfrac{dF}{da_n} = 0. \end{cases}$$

Существенным недостатком метода является громоздкость вычислений, вследствие чего к нему прибегают при достаточно точных экспериментальных данных при необходимости получения очень точных значений функции.

2.2. Линейная аппроксимация

В ряде экспериментов данные распределяются таким образом, что оказывается возможным описать их изменение линейной зависимостью (линейным уравнением) (рис. 7)

$$P(x) = a \cdot x + b. \qquad (11)$$

Формулы для расчета коэффициентов a и b определяются по методу наименьших квадратов (9), подставив (11) в (10)

$$F = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b)^2 \to \min . \qquad (12)$$

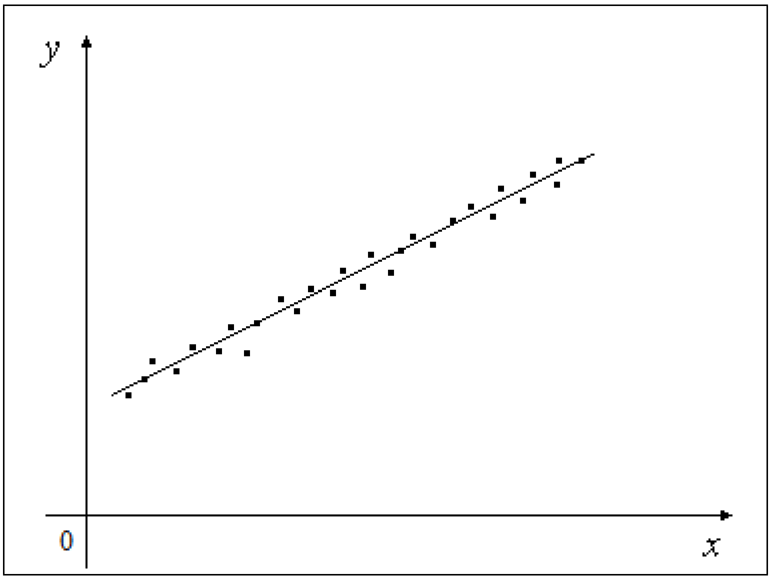

Рис. 7. Линейная аппроксимация

Для решения (12) составляется система из двух уравнений с двумя неизвестными

$$\begin{cases} \dfrac{dF}{da} = 0; \\ \dfrac{dF}{db} = 0. \end{cases} \tag{13}$$

Подставляя в (13) формулу (12), получаем

$$\begin{cases} \dfrac{dF}{db} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b) \cdot 1 = 0, \\ \dfrac{dF}{da} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b) \cdot x_i = 0. \end{cases} \tag{14}$$

и

$$\begin{cases} a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum\limits_{i=1}^{n} x_i = \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i) \\ a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i + nb = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i \end{cases}, \tag{15}$$

Решая полученную систему (15) методом подстановки, получаем формулы для нахождения коэффициентов a и b:

$$a = \frac{n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i) - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i}{n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right)^2}, \tag{16}$$

$$b=\frac{\sum\limits_{i=1}^{n} y_i - a\sum\limits_{i=1}^{n} x_i}{n}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{n} y_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i)}{n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i\right)^2}. \qquad (17)$$

Пример

Дана табличная зависимость мощности N токарно-винторезных станков от максимального диаметра обрабатываемой заготовки d, устанавливаемой над станиной, для десяти моделей (табл. 9).

Таблица 9

Значения максимального диаметра заготовки, устанавливаемой над станиной, и мощности токарно-винторезных станков

Модель станка	250ИТВМ.03	КА280	1В62Г	16К250	1М63	16К40	1Н65	СА650	1А660	1А670
d, мм	240	400	445	500	630	800	1000	1080	1250	2000
N, кВТ	3	7,5	8,37	11	15	18,5	22	22	30	55

Требуется найти мощность проектируемого токарно-винторезного станка для обработки заготовки максимального диаметра 700 мм.

Построим область значений распределения данных (рис. 8).

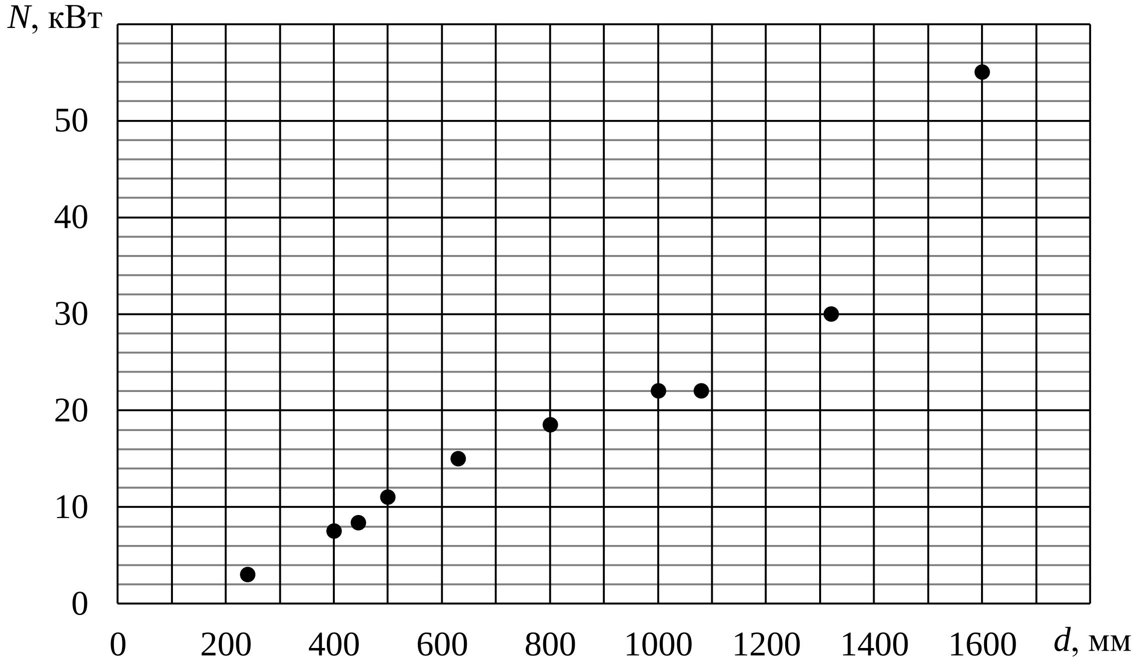

Рис. 8. Область распределения табличных данных (табл. 9)

Анализ диаграммы (рис. 8) позволяет сделать вывод, что изменение табличных данных можно с достаточной степенью точности описать уравнением прямой (11). В связи с этим, для нахождения эмпирической зависимости, описывающей изменение данных, можно воспользоваться методом линейной аппроксимации.

Для удобства перепишем вышеприведенные формулы (16, 17):

$$a = \frac{10 \cdot \sum_{i=1}^{10}(d_i \cdot N_i) - \sum_{i=1}^{10} d_i \cdot \sum_{i=1}^{10} N_i}{10 \cdot \sum_{i=1}^{10} d_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{10} d_i\right)^2}, \; b = \frac{\sum_{i=1}^{10} N_i - a\sum_{i=1}^{10} d_i}{10}.$$

Проведем расчеты и решим задачу, проиллюстрировав решение графически.

Значения коэффициентов:

$$a=0{,}032, \; b= -6{,}62.$$

Уравнение прямой для данного примера примет вид

$$N(d)=0{,}032 \cdot d - 6{,}62.$$

Подставив в последнее выражение значение диаметра 700 мм, получим значение мощности проектируемого станка – N=15,78 кВт.

Проведя аппроксимирующую функцию (прямую), можно убедиться в правильности решения (рис. 9).

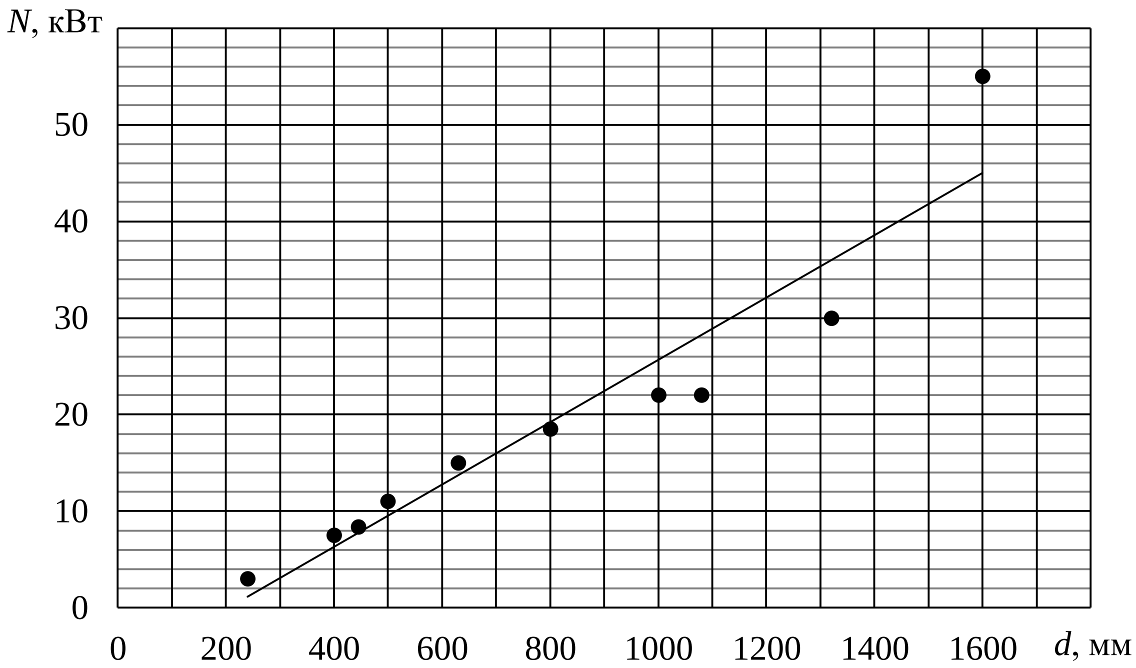

Рис. 9. Диаграмма, построенная средствами Microsoft Office Excel

Из диаграммы видно, что при значении диаметра заготовки 700 мм, мощность станка ориентировочно составит 16 к Вт.

2.3. Параболическая аппроксимация

Если линейным полиномом не удается точно точности аппроксимировать экспериментальные данные, применяют нелинейную аппроксимацию – аппроксимацию второго и большего порядков. Аппроксимация второго порядка (параболическая) опишется многочленом

$$P_2(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2. \qquad (18)$$

Коэффициенты a_i определятся по методу наименьших квадратов

$$F = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2)^2 \to \min_x . \qquad (19)$$

Составляем систему уравнений, приравняв частные производные нулю:

$$\begin{cases} \dfrac{dF}{da_0} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2) \cdot 1 = 0; \\ \dfrac{dF}{da_1} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2) \cdot x_i = 0; \\ \dfrac{dF}{da_2} = -2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i - a_2 \cdot x_i^2) \cdot x_i^2 = 0. \end{cases}$$

После преобразований получим систему линейных уравнений с тремя неизвестными (a_0, a_1, a_2):

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i + a_2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum\limits_{i=1}^{n} y_i, \\ a_0 \cdot \sum\limits_{i-1}^{n} x_i + a_1 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 = \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i), \\ a_0 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 + a_1 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^3 + a_2 \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^4 = \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i^2 \cdot y_i). \end{cases} \qquad (20)$$

Введем обозначения:

$$S_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i ;\ S_2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 ;\ S_3 = \sum_{i=1}^{n} x_i^3 ;\ S_4 = \sum_{i=1}^{n} x_i^4 ,$$

$$S_5 = \sum_{i=1}^{n} y_i ; S_6 = \sum_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i);\ S_7 = \sum_{i=1}^{n} (x_i^2 \cdot y_i).$$

С учетом принятых обозначений система (20) примет вид:

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \cdot S_1 + a_2 \cdot S_2 = S_5, \\ a_0 \cdot S_1 + a_1 \cdot S_2 + a_2 \cdot S_3 = S_6, \\ a_0 \cdot S_2 + a_1 \cdot S_3 + a_2 \cdot S_4 = S_7. \end{cases}$$

Коэффициенты a_0, a_1, a_2 найдутся методом Крамера, согласно которому:

$$a_0 = \frac{\Delta_0}{\Delta},\ a_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta},\ a_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta},$$

где

$$\Delta = \begin{vmatrix} n & S_1 & S_2 \\ S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_3 & S_4 \end{vmatrix};\ \Delta_0 = \begin{vmatrix} S_5 & S_1 & S_2 \\ S_6 & S_2 & S_3 \\ S_7 & S_3 & S_4 \end{vmatrix},\ \Delta_1 = \begin{vmatrix} n & S_5 & S_2 \\ S_1 & S_6 & S_3 \\ S_2 & S_7 & S_4 \end{vmatrix},\ \Delta_2 = \begin{vmatrix} n & S_1 & S_5 \\ S_1 & S_2 & S_6 \\ S_2 & S_3 & S_7 \end{vmatrix}.$$

4.2.4. Аппроксимация в виде показательной функции

При обработке данных эксперимента в некоторых случаях возникает необходимость воспользоваться зависимостью вида

$$y = b \cdot e^{a \cdot x}, \tag{21}$$

где a, b – неизвестные коэффициенты.

Прологарифмировав уравнение (15), получим

$$\ln(y) = \ln(b) + a \cdot x.$$

Введя обозначения:

$$Y=\ln(y),\ B=\ln(b),\ A=a,$$

получим линейный многочлен первой степени

$$Y=B+A \cdot x.$$

Далее уравнение решается по методу наименьших квадратов

$$F = \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \left(B + A \cdot x_i\right)\right)^2 \to \min_x.$$

Формулы для вычисления коэффициентов A и B аналогичны как для случая линейной аппроксимации (16, 17):

$$A = \frac{n \cdot \sum_{i=1}^{n}(x_i \cdot Y_i) - \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum_{i=1}^{n} Y_i}{n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2},\ B = \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i - A \sum_{i=1}^{n} x_i}{n}.$$

После определения коэффициентов вернемся к принятым ранее обозначениям:

$$a = e^A,\ b=B,\ y_i = e^{Y_i}.$$

2.5. Аппроксимация в виде степенной функции

Степенная функция имеет вид

$$y = b \cdot x^a. \tag{22}$$

Логарифмируя последнее уравнение, получим

$$\lg(y) = \lg(b) + a \cdot \lg(x).$$

Введем обозначения:

$$Y=\lg(y),\ B=\lg(b);\ A=a;\ X=\lg(x).$$

Используя метод наименьших квадратов, найдем неизвестные коэффициенты B и A:

$$F=\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i-\left(B+A\cdot X_i\right)\right)^2 \to \min_x .$$

Формулы для вычисления коэффициентов A и B аналогичны как для случая линейной аппроксимации (12, 13):

$$A=\frac{n\cdot\sum_{i=1}^{n}(X_i\cdot Y_i)-\sum_{i=1}^{n}X_i\cdot\sum_{i=1}^{n}Y_i}{n\cdot\sum_{i=1}^{n}X_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}X_i\right)^2},\ B=\frac{\sum_{i=1}^{n}Y_i-A\sum_{i=1}^{n}X_i}{n}.$$

После определения коэффициентов вернемся к принятым ранее обозначениям:

$b=10^B,\ a=A,\ y_i=10^{Y_i},\ x_i=10^{X_i}$.