3. Tomotika S. On the stability of a cylindrical thread of a viscous liquid surrounded by another viscous fluid - Proc. Roy. Soc. : (London), 1935, Vol.A150- P.322-337.

РЕЗАНОВА В.Г., ПОДУНАЙ Д.В.

ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ МЕТОДУ НАЙМЕНШИХ КВАДРАТІВ У МАТРИЧНОМУ ВИГЛЯДІ

REZANOVA V. G., PODUNAY D.V.

SOFTWARE FOR IMPLEMENTATION THE METHOD OF LEAST SQUARES IN MATRIX FORM

The article deals with theoretical approaches and the creation of software for implementing the method of least squares in matrix form. Further software can be used by students and researchers in conducting applied calculations. Because the information presented in accessible language, and the results are displayed progressively and in a visual form, the article may be useful in the learning process.

Keywords: regression analysis, linear regression, regression model, linear form, the method of least squares matrix form.

Вступ

Теоретичні дослідження грають велику роль в процесі пізнання об'єктивної дійсності, оскільки дозволяють глибоко зануритись в сутність природних явищ, створити наукову картину світу. Розв'язання задач математичними методами здійснюється шляхом математичного формулювання задачі, вибору методу дослідження математичної моделі, аналізу отриманого результату. Математична модель являє собою систему математичних співвідношень – формул, функцій, рівнянь, які описують об'єкт, що вивчається. В залежності від постановки задачі, можуть використовуватись різні моделі.

Постановка завдання

Часто в якості математичних моделей використовують явні функціональні залежності вигляду:

$$y = f(x_1, x_2, ...x_p, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m, \varepsilon), \quad (1)$$

де f - функція регресії; $x_1, x_2, ...x_p$ - незалежні змінні (фактори); $\beta_1, \beta_2, ...\beta_m$ - параметри залежності; ε - випадкова складова. Остання вводиться в модель, коли дані проявляють помітну варіативність випадкового характеру. Дуже часто вважають, що ε входить у модель адитивно, тобто (1) приймає вигляд:

$$y = f(x_1, x_2, ...x_p, \beta_1, \beta_2, ...\beta_m) + \varepsilon \quad (2)$$

Співвідношення (1), (2) являють собою моделі регресії або регресійні моделі.

Незалежним змінним (факторам) $x_1, x_2, ...x_p$ надаються ті чи інші значення, при цьому експериментальним шляхом одержуються відповідні значення y. Тоді (2) переходить у систему співвідношень, з якої визначають параметри $\beta_1, \beta_2, ...\beta_m$. Завдяки наявності випадкової складової параметри $\beta_1, \beta_2, ...\beta_m$ можна лише оцінити, а не точно визначити. При цьому одержуються оцінки $b_1, b_2, ...b_m$ відповідних параметрів, і замість моделі (2) в реальності будемо оперувати наближенням $\hat{y}$ до неї:

$$\hat{y} = f(x_1, x_2, ...x_p, b_1, b_2, ...b_m).$$

Якщо функція f є поліном, то $b_1, b_2, ...b_m$ - це коефіцієнти регресії, а функція $\hat{y}$ приймає вигляд:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_i b_i x_i + \sum_{i,j} b_{ij} x_i x_j + ... \tag{3}$$

Оцінювання коефіцієнтів будемо здійснювати методом найменших квадратів.

Основна частина

За результатами експерименту над об’єктом дослідження можна отримати математичну модель певного вигляду. Зокрема, це може бути регресійна модель з функцією регресії у вигляді полінома певного степеня – так звана модель поліноміальної регресії (3).

Якість наближення регресійної моделі до реального об’єкта залежить не тільки від експериментальних даних, але і від методу побудови моделі. В якості такого методу часто обирають метод найменших квадратів (МНК).

Нехай виконується n експериментів, в кожному з яких вектору незалежних змінних (факторів) $x = (x_1, \ldots x_p)$ надається певних значень, і при цьому одержуються деякі значення залежної змінної y. Позначимо $x_i = (x_{i1}, \ldots, x_{ip})$ набір значень назалежних змінних, що було надано їм в i-му експерименті, y_i – відповідні значення залежної змінної ($i = 1,2, \ldots, n$). Згідно з МНК в якості оцінки вектора параметрів $\beta = (\beta_1, \ldots, \beta_m)$ береться такий вектор $b = (b_1, \ldots, b_m)$ (інше позначення – $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, ..., \hat{\beta}_m)$) при якому сума

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - f(x_i; \beta) \right]^2 \tag{4}$$

приймає мінімальне значення по $\beta \in R^m$, де R^m – m-вимірний евклідів простір.

Якщо функція регресії f є диференційованою за параметрами $(\beta_1, \ldots, \beta_m)$, то необхідною умовою мінімуму $S(\beta)$ є виконання рівностей

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta_j} = 0, \ j = 1,2, ..., m. \tag{5}$$

Система (5) складається з рівнянь, кількість яких дорівнює числу невідомих системи – коефіцієнтів $b_1, b_2, \ldots, b_m$. Невідомі коефіцієнти, які необхідно обчислити за результатами експерименту, будемо шукати за методом найменших квадратів (МНК) в матричному вигляді.

Нехай

$X = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & \dots & x_{0p} \\ x_{10} & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n0} & x_{n1} & & x_{np} \end{pmatrix}$ – матриця плану, де n - кількість точок плану, p – кількість факторів;

$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{pmatrix}$ – вектор-стовпчик значень залежної змінної (параметра оптимізації), що спостерігаються у певних точках плана;

$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$ – вектор-стовпчик невідомих коефіцієнтів.

$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$ – вектор-стовпчик відхилень експериментальних значень y_i залежної змінної від значень $\hat{y}_i$, отриманих з рівняння регресії $\hat{y} = \sum_i b_i x_i$ (Зауважимо, що загальну модель $\hat{y} = b_0 + \sum_i b_i x_i + \sum_{i,j} b_{ij} x_i x_j + \dots$ можна легко звести до вигляду $\hat{y} = \sum_i b_i z_i$ шляхом заміни змінних).

Згідно методу найменших квадратів маємо:

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \varepsilon' \varepsilon = (Y - Xb)'(Y - Xb) \to \min$$

Звідси: $b = (X'X)^{-1} X'Y$, де «штрих» означає операцію транспонування.

Програмне забезпечення для автоматизації описаного процесу дозволяє значно спростити процес побудови моделей, звільнивши дослідника від довготривалих кропітких розрахунків.

Висновки

Якщо обрано математичну модель, тобто обрано тип залежності y від x і записано відповідне рівняння, то спланувавши і провівши експеримент у відведеній для досліджень ділянці факторного простору, можна оцінити чисельні значення коефіцієнтів цього рівняння. Оцінювання коефіцієнтів зручно здійснювати методом найменших квадратів у матричній формі.

Розроблене програмне забезпечення може стати у нагоді вченим-дослідникам, а також студентам у навчальному процесі.

Література

1. Бондарь А. Г., Статюха Г. А., Потяженко И. А. Планирование эксперимента при оптимизации процессов химической технологии. – Киев, Высшая школа, 1980, 264 с.

2. Сидняев Н. Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных. – М.: Юрайт, 2012, 400 с.

3. Мейерс С. Эффективный и современный C++. М.: Вильямс, 2016. – 304 с.

РЕЗАНОВА В.Г., ХАЙЛОВСЬКА А.Д.

ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ПЕРЕВІРКИ АДЕКВАТНОСТІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

REZANOVA V. G., KHAILOVSKA A.D.

SOFTWARE FOR VERIFICATION MATHEMATICAL MODEL ADEQUACY

The article discusses the theoretical approaches and creating software to verify the adequacy of the mathematical model. Adequacy - the degree of compliance with the results obtained when testing the developed mathematical model, experimental data or test problem. Testing is needed to validate the simulation results. Therefore, when checking the adequacy, our goal is to ensure the validity of hypotheses together and got to match exactly with the precision set out in setting our problem. The developed software can be used by scientists for calculations.

Keywords: mathematical model, adequacy, regression analysis, software.

Вступ

Розв’язання задач математичними методами здійснюється шляхом математичного формулювання задачі, вибору методу дослідження математичної моделі, аналізу отриманого результату. Математичне формулювання задачі уявляється у вигляді чисел, геометричних образів, функцій, систем рівнянь і т.п. Математична модель являє собою систему математичних співвідношень – формул, функцій, рівнянь, які описують об’єкт, що вивчається.

Математичне моделювання дозволяє виключити необхідність виготовлення громіздких фізичних моделей, пов'язаних з матеріальними витратами; скорочувати час визначення характеристик (особливо при розрахунку математичних моделей за допомогою програмного забезпечення); вивчати поведінку об'єкту моделювання при різних значеннях параметрів; аналізувати можливість застосування різних елементів; отримувати характеристики і показники, які складно отримувати експериментально.

Постановка завдання

Математична модель являє собою опис об’єкту, що вивчається, поданий за допомогою математичної символіки. Після побудови кожної моделі постає питання про її придатність. Іншими словами, модель потребує перевірки на адекватність. Адекватність – ступінь відповідності результатів, отриманих при перевірці розробленої математичної моделі, даних експерименту чи тестової задачі. Перевірка потрібна для підтвердження правильності результатів моделювання. Таким чином, при перевірці на адекватність