

### 7.3. Метод наименьших квадратов для расчета коэффициентов

#### аппроксимирующей функции

Аппроксимация – это приближение. Приближение чего-то к чему-то с той или иной точностью.

Метод наименьших квадратов (МНК) – метод оценки параметров модели на основании экспериментальных данных, содержащих случайные погрешности; в частности, **построение модельной кривой, для которой сумма квадратов расстояний от экспериментальных точек до этой кривой минимальна.**

Этот метод был разработан Лежандром и Гауссом в 1795 – 1805 гг.

Рассмотрим на примере прямой линии  $y_m = a x + b$

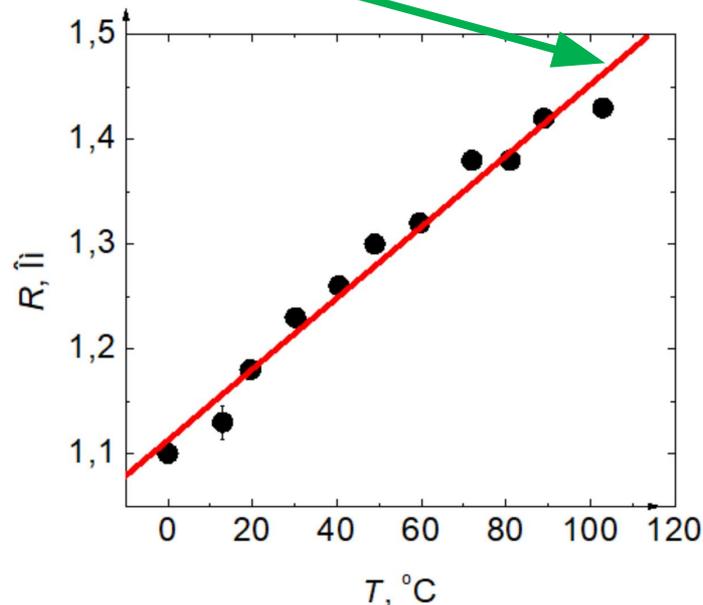
$$a = 0.0034 \\ b = 1.112$$

#### $y_m$ – теоретическая (по МНК)

Он заключается в нахождении таких значений  $a$  и  $b$ , при которых сумма квадратов расстояний от прямой  $y_T = a x + b$  до экспериментальных точек с координатами  $x_i$  и  $y_i$  (где  $i = 1, 2, \dots, n$ ) была бы наименьшей:

$$\sum_{i=1}^n (\Delta_i)^2 \rightarrow \min,$$

где  $\Delta_i = y_{эi} - y_{Ti}$  или  $\Delta_i = y_{эi} - a x_i - b$  (последнее выражение называют  $i$ -ым начальным уравнением).



**Замечание 1.** Задачу МНК можно графически интерпретировать как задачу минимизации вертикальных расстояний от точек, изображающих экспериментальные данные до искомой кривой регрессионной зависимости. Мы предполагаем, что между  $X$  и  $Y$  существует строгая функциональная зависимость, но из-за неизбежных ошибок измерения экспериментальные точки могут заметно отклоняться от предполагаемых теоретических зависимостей. Идея метода основывается на предположении, что все ошибки аппроксимации  $\epsilon_i$  соответствуют реальным ошибкам измерения  $\Delta y_i$  зависимой переменной  $Y$ , а ошибки в измерениях независимой переменной  $X$  пренебрежимо малы.

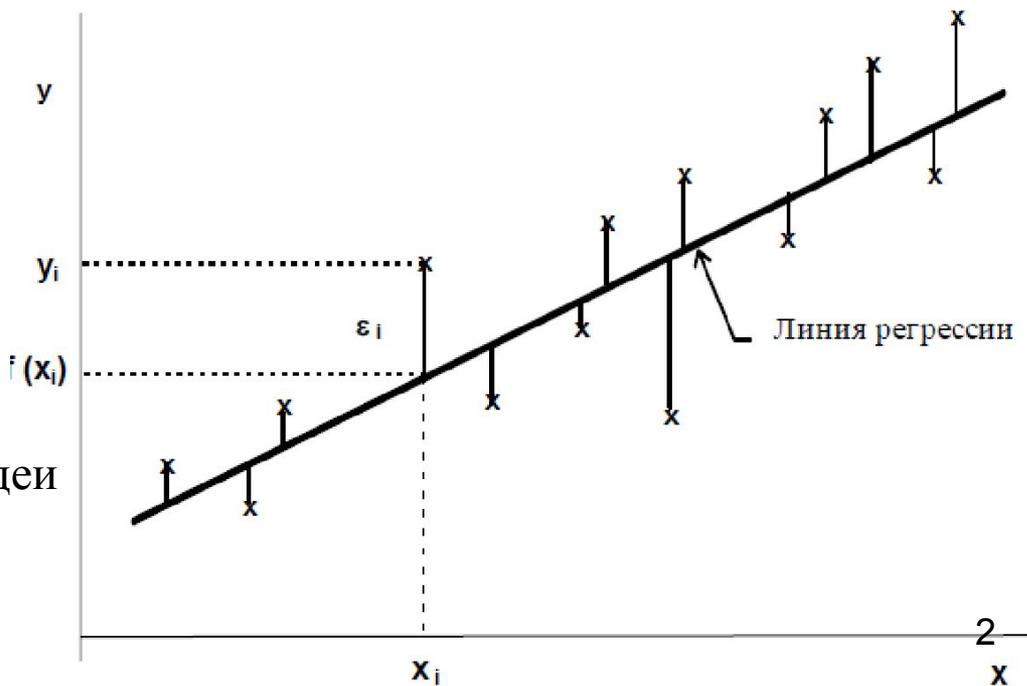


Рис. Геометрическая интерпретация идеи метода наименьших квадратов

Алгоритм МНК для нахождения теоретической прямой  $y = b + a x$  следующий:

1. Для нахождения минимума

$$\text{Min} \sum_i^n (\Delta_i)^2 = \text{Min} \sum_i^n (y_i - ax_i - b)^2$$

Находят частные производные по  $a$  и  $b$  (!неизвестные!)

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^n (\Delta_i)^2}{\partial a} = \sum_{i=1}^n (2ax_i^2 + 2bx_i - 2x_i y_{\text{э}i})$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^n (\Delta_i)^2}{\partial b} = \sum_{i=1}^n (2b + 2ax_i - 2y_{\text{э}i})$$

2. Приравнять к нулю частные производные, сократить на 2 и **решить полученные уравнения относительно  $a$  и  $b$** :

$$\sum_{i=1}^N (ax_i^2 + bx_i - x_i y_{\varepsilon i}) = 0$$

$$\sum_{i=1}^N (ax_i^2 + b - y_{\varepsilon i}) = 0$$

- два линейных уравнения для определения 2-х параметров  $a$  и  $b$ , система решается однозначно.

В результате можно определить коэффициенты  $a$  и  $b$ :

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i; \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad \text{--- обозначения средних значений}$$

$$a = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}; \quad b = \bar{y} - a\bar{x}$$

Если из физических соображений **свободный член**  $b = 0$  (например закон Ома), то находим минимум:

$$\text{Min} \sum_i^n (\Delta_i)^2 = \text{Min} \sum_i^n (y_i - ax_i)^2$$

Частная производная по  $\mathbf{a}$ , откуда получаем:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i y_i)}{\sum_{i=1}^N (x_i)^2}; \quad b = 0$$

Этот метод позволяет найти и погрешность определения  $a$  и  $b$ .

Однако способ определения погрешностей весьма сложен, поэтому приведем только результаты расчетов.

Средняя квадратическая погрешность определения углового коэффициента  $a$  равна

$$S_k = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - k \cdot x_i - b)^2}{(n-2) \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$$

Здесь уравнение прямой:  
 **$y = kx + b$**

Средняя квадратическая погрешность определения свободного члена  $b$  равна

$$S_b = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - k \cdot x_i - b)^2 \cdot \left[ \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 + \bar{x} \cdot \sum_{i=1}^n x_i \right]}{n \cdot (n-2) \cdot \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$$

или

$$S_b = S_k \cdot \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 + \bar{x} \cdot \sum_{i=1}^n x_i}{n}}$$

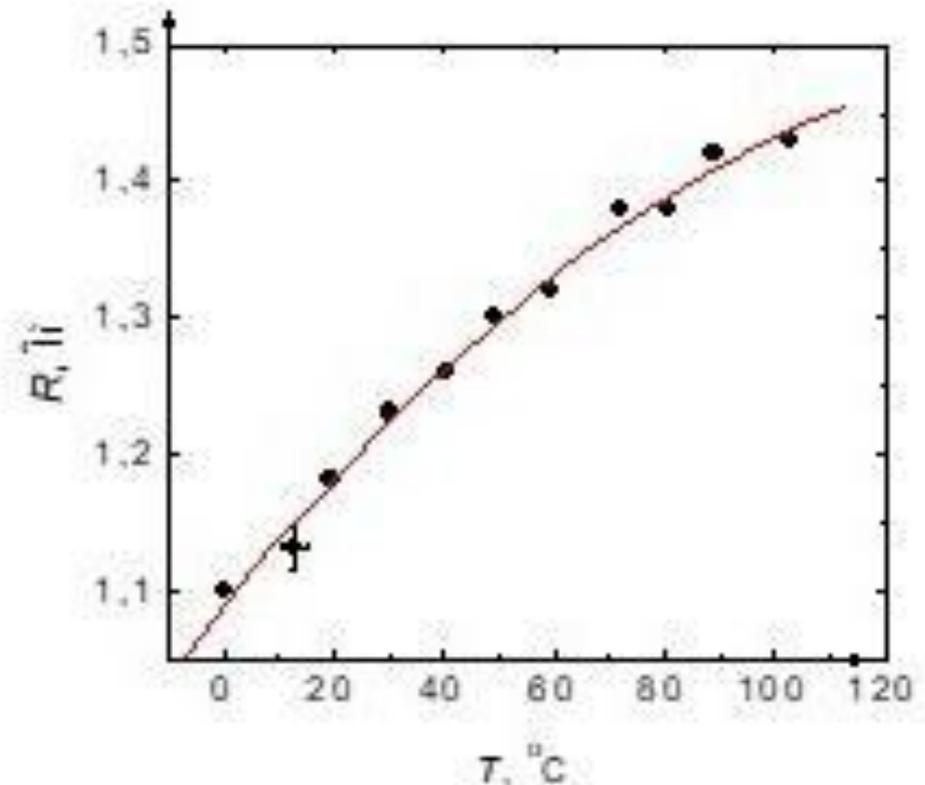
Аналогично можно определить коэффициенты полинома (а также экспоненты, логарифма и т.д.) любой степени. Получается система линейных уравнений равная количеству определяемых коэффициентов.

*Полином (многочлен)*

*n – ой степени*

$$y = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n$$

$$y = 1.088 + 0.005x - 1.53 \times 10^{-5}x^2$$



**Пример.** Рассмотрим вычисление температурного коэффициента сопротивления металла по методу наименьших квадратов. Сопротивление зависит от температуры  $t$  по линейному закону:

$$R_t = R_o (1 + \alpha \cdot t) = R_o + R_o \cdot \alpha \cdot t$$

Свободный член определяет сопротивление  $R_o$  при температуре 0 °С, а угловой коэффициент - произведение температурного коэффициента  $\alpha$  на сопротивление  $R_o$ .

Результаты расчета приведены в табл., из которой можно найти

$$\alpha \cdot R_o = \frac{\sum_{i=1}^n (t_i - \bar{t}) \cdot (R_i - \bar{R})}{\sum_{i=1}^n (t_i - \bar{t})^2} = \frac{192,3}{78424} = 0,00245 \frac{\text{Ом}}{\text{град}}, \quad \text{и}$$

$$R_o = 1,575 - 0,00245 \cdot 157,0 = 1,190 \text{ Ом, откуда } \alpha = \frac{0,00245}{1,190} = 0,00206 \text{ град}^{-1}.$$

Таким образом  $R_t = 1.190 \text{ Ом} (1 + 0.00206 \text{ Ом} / \text{град} * t)$

Расчет температурного коэффициента сопротивления по методу наименьших квадратов

№ п/п	t°C	R <sub>t</sub> , Ом	t - t <sub>cp</sub>	R <sub>t</sub> - R <sub>cp</sub>	(t - t <sub>cp</sub> )(R <sub>t</sub> - R <sub>cp</sub> )
1	23	1,242	-134	-0,359	+48,2
2	59	1,326	-98	-0,249	+24,4
3	84	1,386	-73	-0,189	+13,8
4	96	1,417	-61	-0,158	+9,4
5	120	1,512	-37	-0,062	+2,3
6	133	1,520	-24	+0,015	-0,1
7	186	1,664	+29	+0,089	+2,5
8	212	1,712	+55	+0,127	+7,5
9	244	1,784	+87	+0,209	+18,2
10	270	1,823	+133	+0,248	+28,0
11	289	1,864	+152	+0,289	+38,1
Σ	1732	17,330	0	0	192,3
Σ/N	157,0	1,575	0	0	-

Удобно в табл. создать дополнительные колонки, например, с  $(t - t_{cp})^2$  и их сумма,  $R - R_{cp}$ ,  $t - t_{cp}$ ,  $(t - t_{cp})(R - R_{cp})$  и их сумма, !

$(t - t_{cp})^2$	R <sub>0</sub> at	R <sub>0</sub> +R <sub>0</sub> at	R <sub>t</sub> -(R <sub>0</sub> +R <sub>0</sub> at)	$[R_t - (R_0 + R_0 at)]^2 \cdot 10^4$
17956	0,066	1,246	0,004	0,16
9604	0,145	1,335	0,009	0,81
5329	0,201	1,391	0,005	0,25
3721	0,230	1,420	0,003	0,09
1369	0,284	1,474	0,028	7,84
16	0,376	1,566	0,024	5,76
841	0,456	1,646	0,018	3,24
3025	0,521	1,711	0,001	0,01
7569	0,602	1,792	0,008	0,64
12770	0,662	1,852	0,029	8,41
17420	0,710	1,900	0,036	12,96
78424	-	-	-	40,17
-	-	-	-	-

Важно вычислить погрешность в определении  $\alpha$ . Пользуясь таблицей, находим

$$S_{\alpha R_o} = \sqrt{\frac{40,17 \cdot 10^{-4}}{9 \cdot 78400}} = 0,76 \cdot 10^{-4} ,$$

$$S_{R_o} = 0,76 \cdot 10^{-4} \cdot \sqrt{\frac{78424 + 271924}{11}} \approx 0,014.$$

Далее по правилу сложения погрешностей, учитывая, что

$$\alpha = \frac{\alpha \cdot R_o}{R_o} , \text{ то } S_{\alpha} = \alpha \cdot \sqrt{\left(\frac{S_{\alpha R_o}}{\alpha R_o}\right)^2 + \left(\frac{S_{R_o}}{R_o}\right)^2}$$

$$S_{\alpha} = 0.00206 \text{град}^{-1} \sqrt{\left(\left(\frac{0.76 \cdot 10^{-4}}{0.00245}\right)^2 + \left(\frac{0.014}{1.190}\right)^2\right)} =$$
$$= 6.83 * 10^{-5}$$

По этим данным определяем доверительные интервалы для исследуемых величин, умножая найденные среднеквадратичные отклонения на коэффициенты Стьюдента.

Коэффициент Стьюдента для 11-ти измерений и доверительной вероятности  $p = 0.95 \%$   $t_{11, 0.95} = 2.23$ , следовательно

$$\Delta R = 2.23 * 0.014 = 0.0312 \text{ Ом}$$

$$\Delta \alpha = 2.23 * 6.83 * 10^{-5} = 3.54 * 10^{-4}$$

Итог, с учётом округления:

$$R_t = 1.19 \text{ Ом} (\pm 0.03) * (1 + 0.0021 (\pm 0.0004) \text{ Ом} / \text{град} * t)$$

# Коэффициент парной корреляции

В математической статистике степень коррелируемости переменных ( $n$  пар случайных величин  $x_i, y_i, i=1, 2, 3, \dots, n$ ) оценивают коэффициентом парной корреляции (для линейной функции !!!):

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

$$-1 < r_{xy} < +1$$

Если  $r_{xy} > 0$ , то при увеличении  $x$  возрастает  $y$ ,  
при  $r_{xy} < 0$ , то с ростом  $x$   $y$  – убывает.

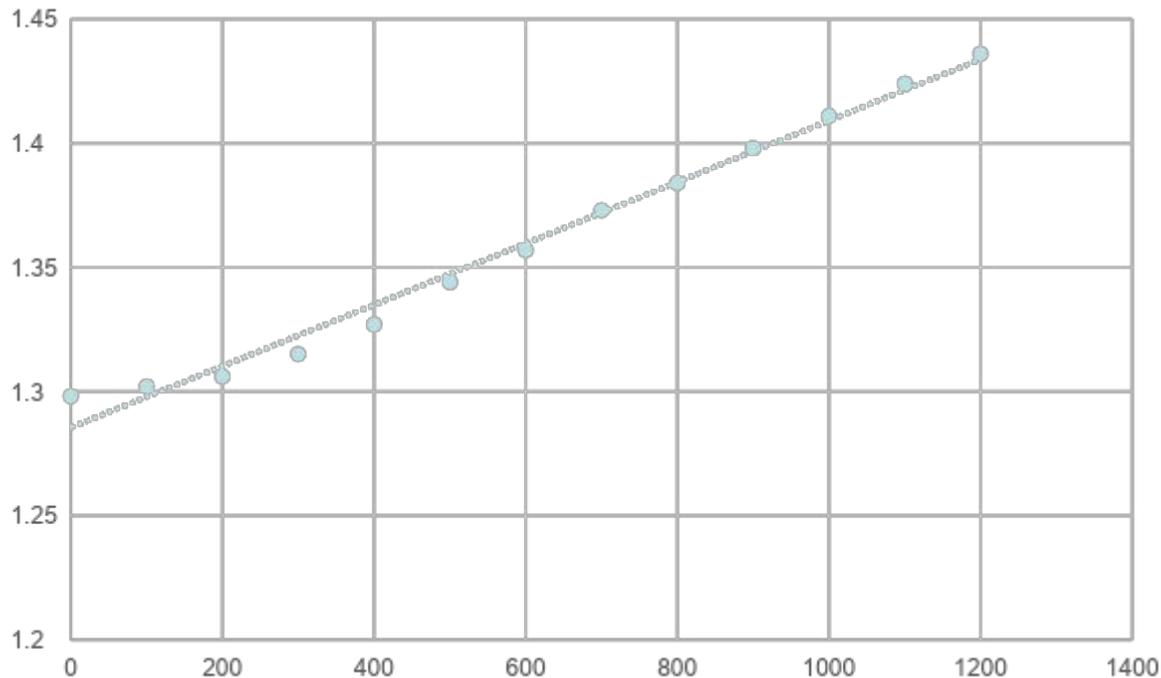
Принято считать, что при выполнении условия  $0,75 < r_{xy} < 0,95$  существует сильная связь,

а при  $0,95 < r_{xy} \leq 1$  – функциональная зависимость.

## Замечание.

Для любой аппроксимирующей функции рассчитывается корреляционное отношение, которое может изменяться в пределах от 0 до 1

(либо её квадрат - *коэффициент детерминации* (обычно рассчитывается в стат. Программах).



## 7.4. Проведение расчётов и построение графиков с использованием компьютерных программ

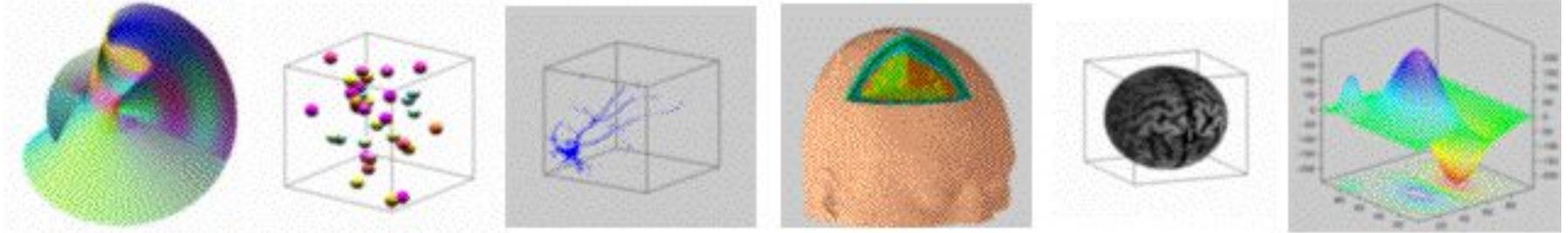
1. OriginPro <http://originlab.com/> - расчёт, анализ, графики



Мощная и удобная программа для обработки и графического представления численных массивов данных. Поддерживает трехмерную графику.

2. Igor Pro [www.wavemetrics.com/products](http://www.wavemetrics.com/products)

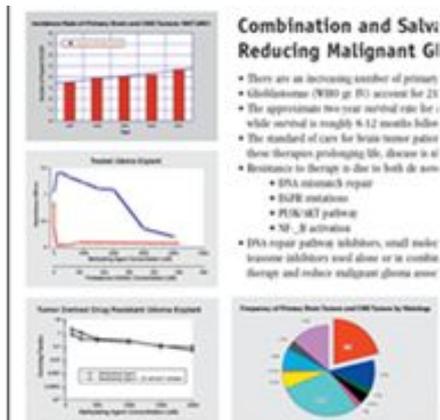
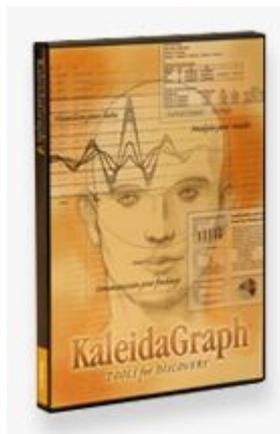
## Technical graphing and data analysis software ... for scientists and engineers



### 3. KaleidaGraph

[www.synergy.com](http://www.synergy.com)

Since the first copy of KaleidaGraph was sold in 1988, KaleidaGraph has remained an exceptional, easy-to-learn graphing and analysis program. We value the trust and loyalty of all these critical-thinkers and discoverers who have chosen to depend on KaleidaGraph.

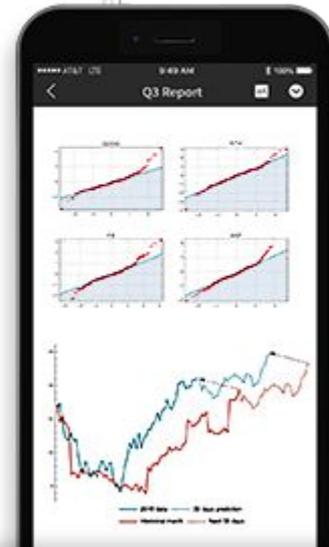
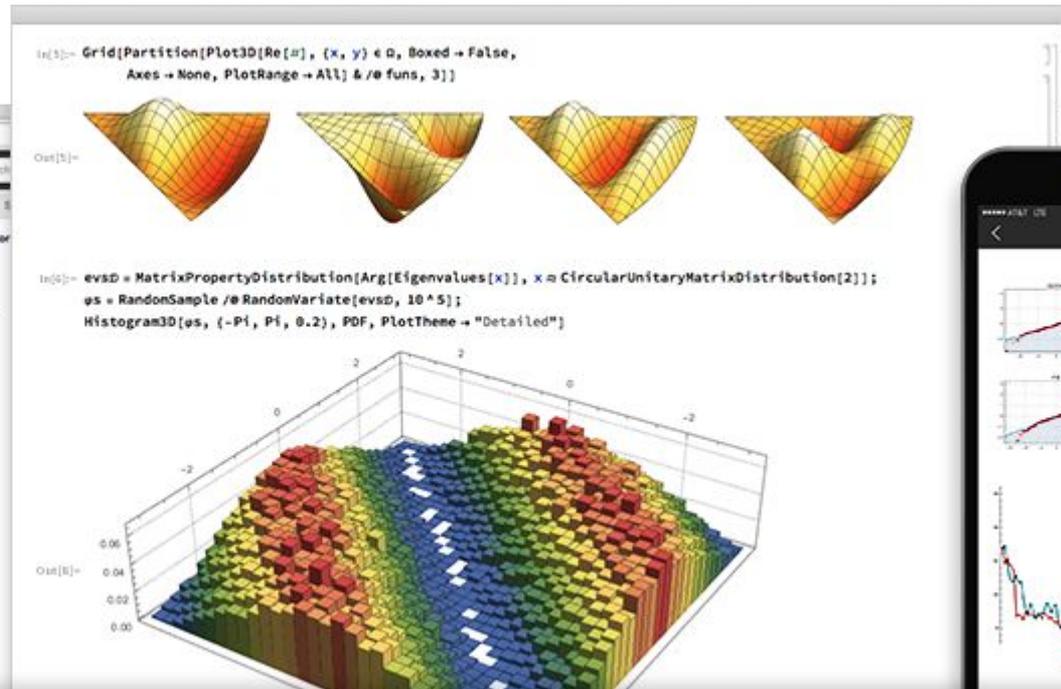
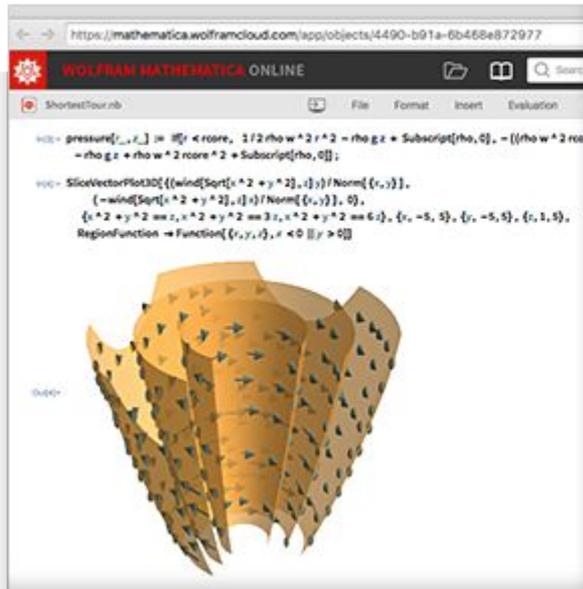


### 4. SigmaPlot

The image shows the SigmaPlot 13 software box on the left, which has a blue and black design with the text 'SigmaPlot 13' and 'The Most Advanced Scientific Graphing and Statistical Analysis Platform for Windows Desktops and Servers'. To the right of the box is a row of six different scientific graphs: a 3D histogram, a line graph with multiple curves, a scatter plot with regression lines, a 3D surface plot, and a line graph with data points and error bars.

# 5. Mathematica <http://www.wolfram.com/>

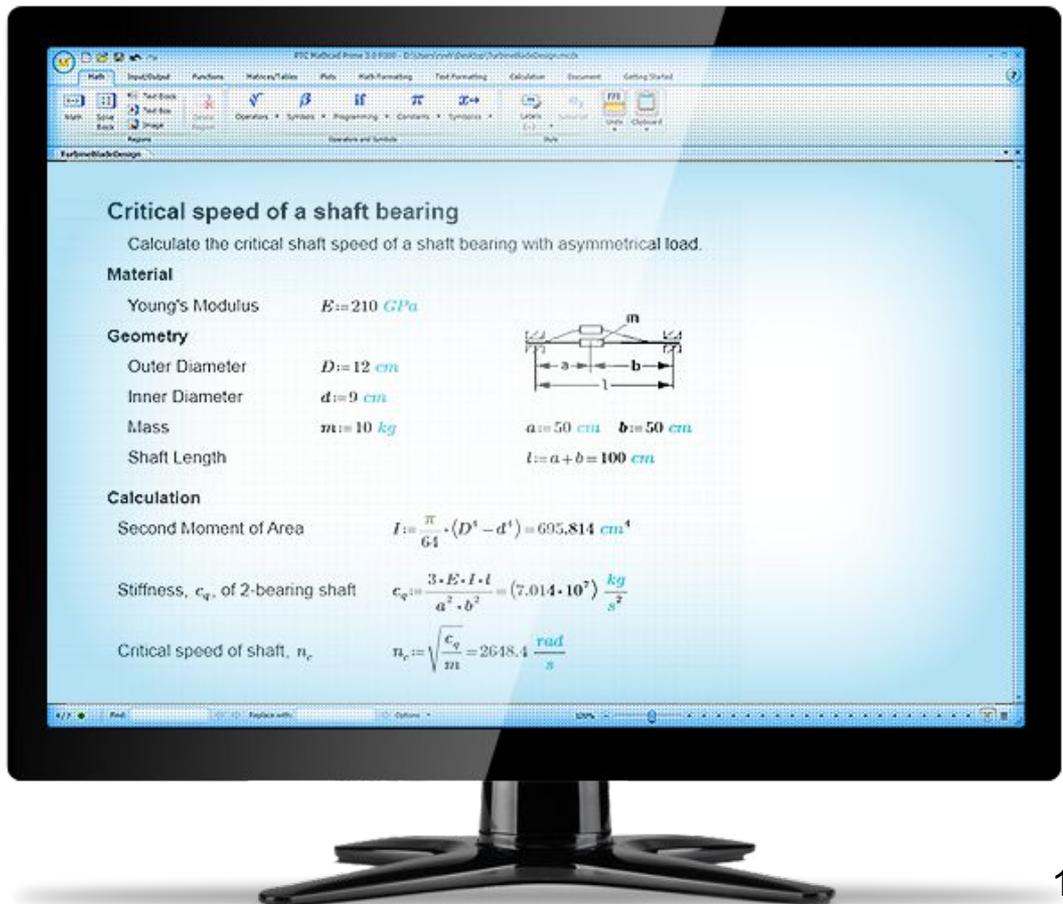
Мощная программа аналитических и численных расчетов.



## 6. Mathcad <http://www.ptc.com/engineering-math-software/mathcad>

Мощная программа аналитических и численных расчетов.

- Программное обеспечение для инженерных вычислений
- Естественные математические обозначения



The screenshot displays the Mathcad software interface with a document titled "Critical speed of a shaft bearing". The document contains the following content:

**Critical speed of a shaft bearing**  
Calculate the critical shaft speed of a shaft bearing with asymmetrical load.

**Material**  
Young's Modulus  $E := 210 \text{ GPa}$

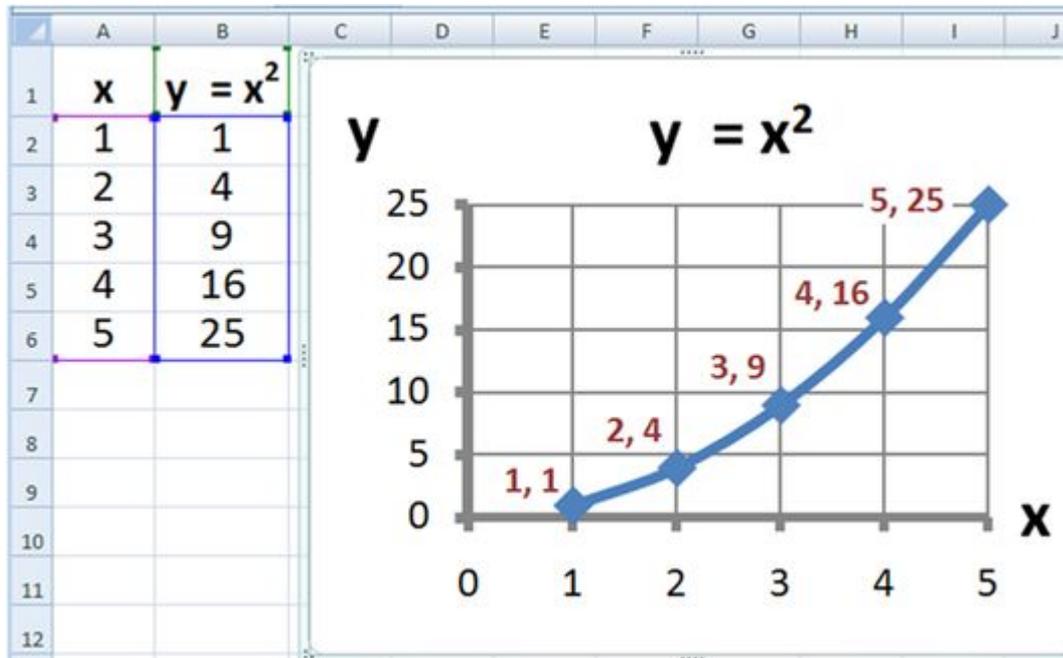
**Geometry**  
Outer Diameter  $D := 12 \text{ cm}$   
Inner Diameter  $d := 9 \text{ cm}$   
Mass  $m := 10 \text{ kg}$   
Shaft Length  $l := a + b = 100 \text{ cm}$

**Calculation**  
Second Moment of Area  $I := \frac{\pi}{64} \cdot (D^4 - d^4) = 695.814 \text{ cm}^4$   
Stiffness,  $c_q$ , of 2-bearing shaft  $c_q := \frac{3 \cdot E \cdot I \cdot l}{a^3 \cdot b^2} = (7.014 \cdot 10^7) \frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$   
Critical speed of shaft,  $n_c$   $n_c := \sqrt{\frac{c_q}{m}} = 2648.4 \frac{\text{rad}}{\text{s}}$

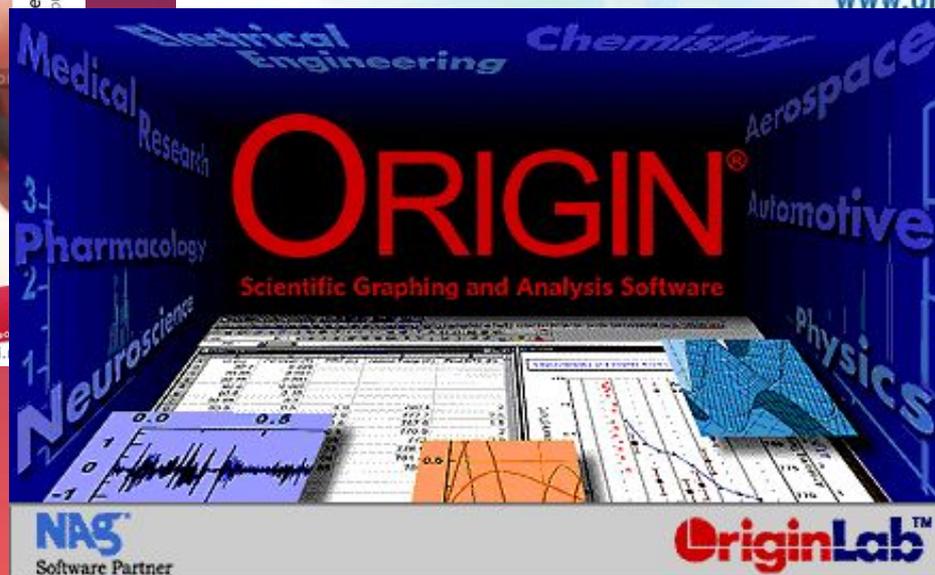
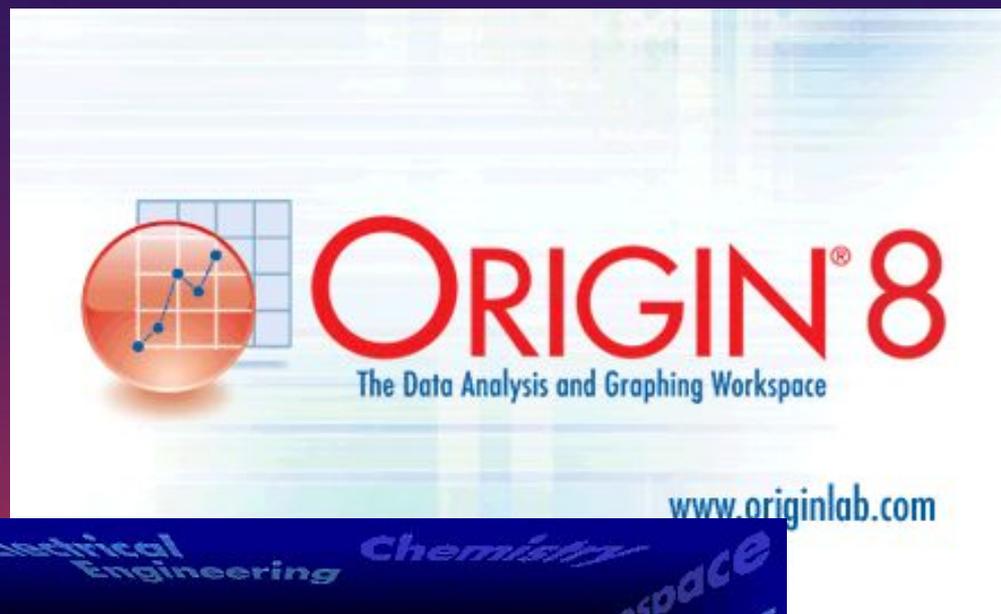
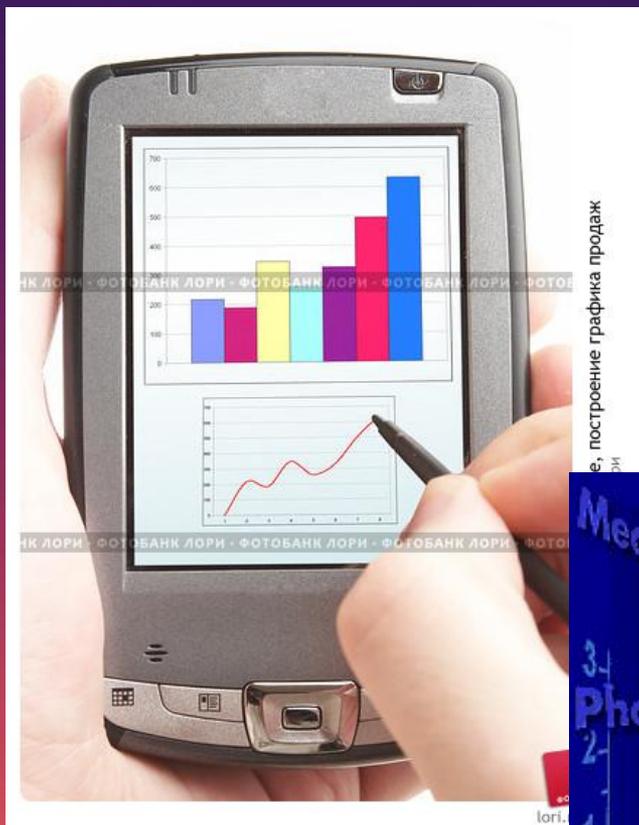
A diagram of a shaft with a bearing is shown, illustrating the asymmetrical load distribution with parameters  $a$ ,  $b$ , and  $l$ .

# 7. Microsoft Excel

Программа для работы с электронными таблицами, созданная корпорацией Microsoft. Она предоставляет возможности экономико-статистических расчетов, графические инструменты. Microsoft Excel входит в состав Microsoft Office и на сегодняшний день Excel является одним из наиболее популярных приложений в мире.



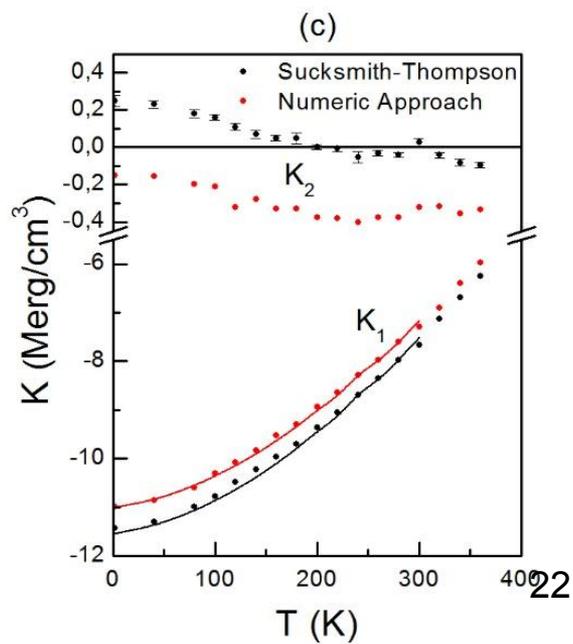
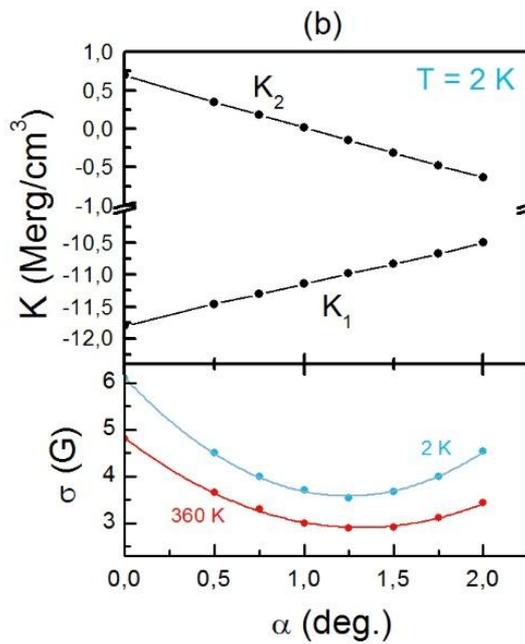
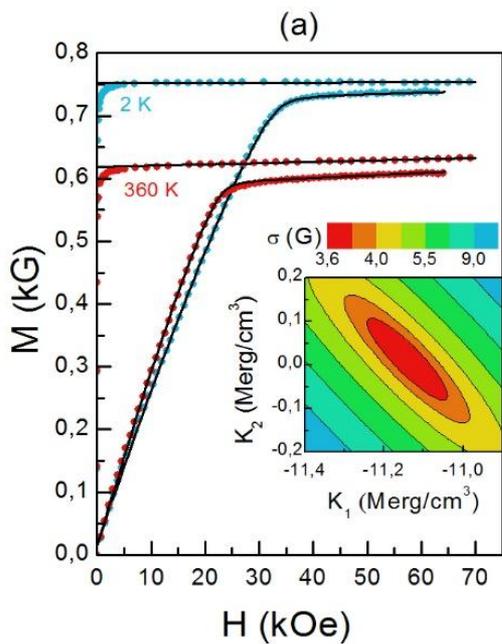
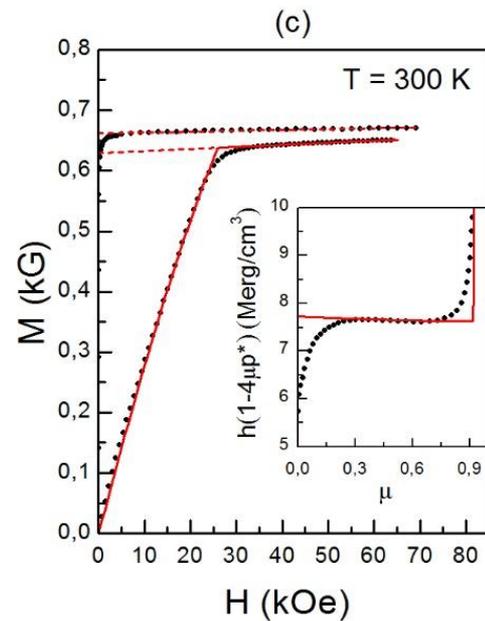
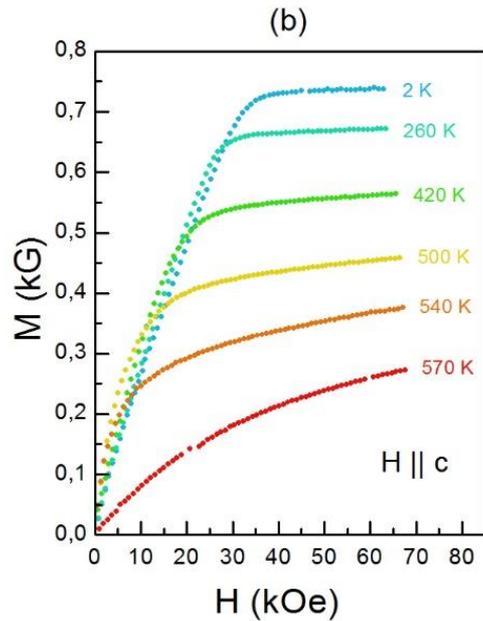
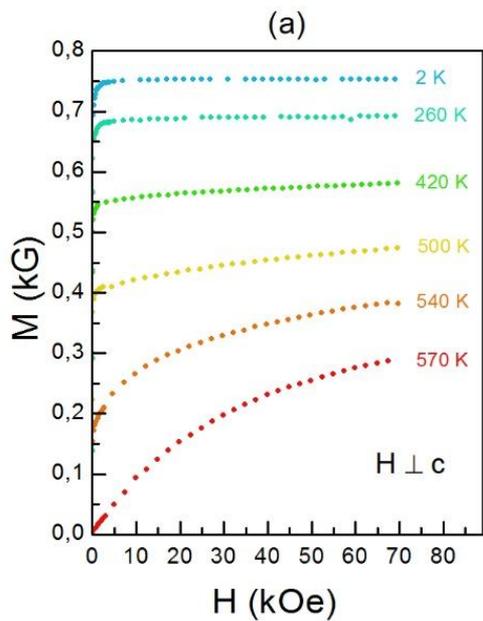
## 7.4. Построение графиков с использованием компьютерных программ





The screenshot displays the OriginPro 7 software interface. The main window is titled "OriginPro 7 - UNTITLED" and contains a menu bar (File, Edit, View, Plot, Column, Analysis, Statistics, Tools, Format, Window, Help) and a toolbar. A data table window titled "Data1" is open, showing a grid with 23 rows and 6 columns labeled A(M), B(M), C(M), D(M), E(M), and F(M). The rows are numbered 1 through 23. At the bottom of the software window, there is a status bar with the text "x = ?, y = ?". The Windows taskbar at the bottom shows the system language as "русск" and several open applications: Total Commander 7.0, Microsoft PowerPoint, Adobe Photoshop, and OriginPro 7 - UNTITLED.

	A(M)	B(M)	C(M)	D(M)	E(M)	F(M)
1						
2						
3						
4						
5						
6						
7						
8						
9						
10						
11						
12						
13						
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						
21						
22						
23						



## Вопросы к зачёту (экзамену):

1. Классификация измерений.
2. Источники погрешностей измерений.
3. Классификация погрешностей: систематические, случайные, грубые.
4. Анализ погрешностей и пути их устранения или учета.
5. Классы точности средств измерений.
6. Выборка и ее характеристики: объем, среднее, СКО.
7. Интервальные оценки параметров нормального закона распределения: доверительный интервал, доверительная вероятность.
8. Проверка выскакивающих результатов на промах.
9. Правила представления результатов измерений.
10. Правила сложения систематической и случайной погрешностей.
11. Вычисление погрешности косвенных измерений.
12. Порядок обработки результатов измерений.
13. Точечные оценки результата распределения.
14. Законы распределения результата распределения.
15. Применение распределения Стьюдента при обработке результатов измерений.
16. Виды измерений: прямые, косвенные, совместные, совокупные.
17. Основные единицы системы СИ.
18. Основное уравнение измерений. В чем состоит смысл измерительного процесса.
19. Формы представления погрешности: абсолютная, относительная, приведенная.
20. Представление результатов однократных измерений.
21. МНК. Линейная аппроксимация.

## Пример билета:

1. Виды измерений: прямые, косвенные, совместные, совокупные

2. Класс точности прибора

0.2

Максимальное значение

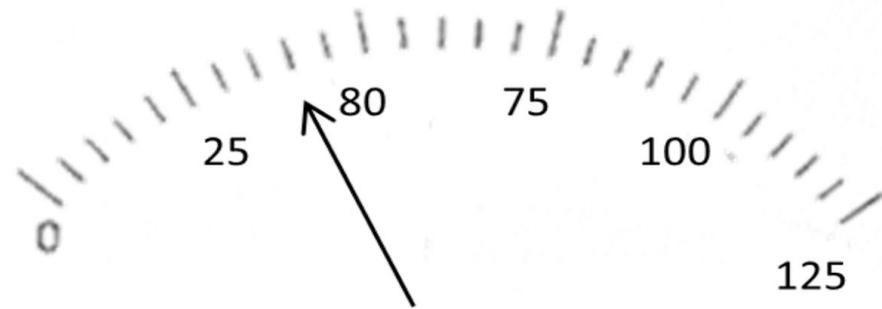
50 В

Определить и записать показание прибора и систематическую погрешность

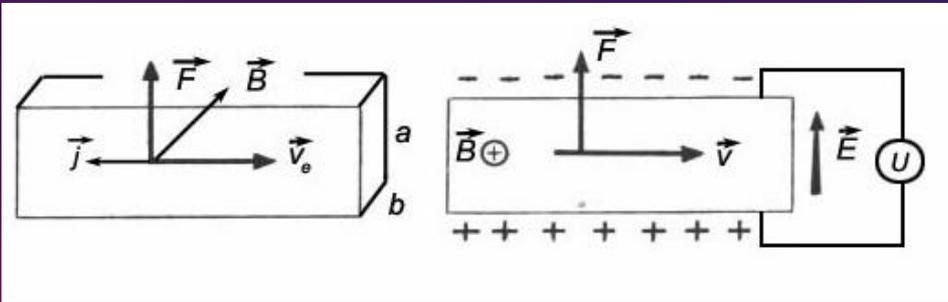
3. Рассчитать погрешность косвенного измерения, если известны результаты измерений

$$F = ma$$

$$m = 10.5 \pm 0.6 \quad a = 9.90 \pm 0.09$$



## Эффект Холла и квантовый эффект Холла



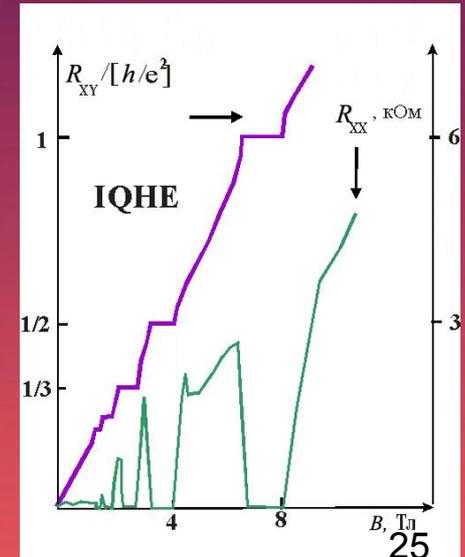
$$\vec{F} = q[\vec{v} \times \vec{B}] \quad R_{xy} = \frac{U_y}{I_x}$$



GaAs/AlGaAs

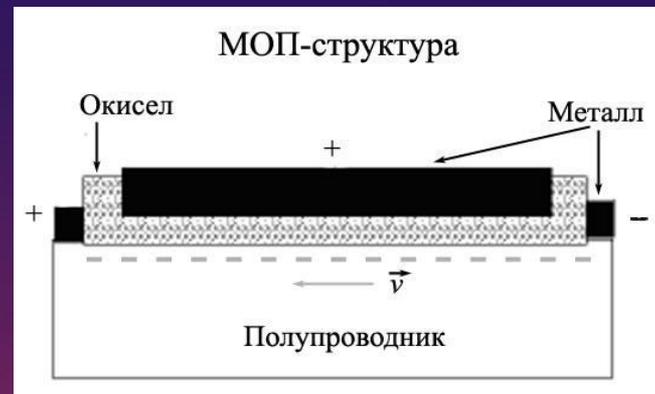
**IQHE** - Integer Quantum Hall Effect.  
Целый (нормальный) квантовый эффект Холла. Открыт в 1980 г. Ноб. премия 1985 г. (K.von Klitzing, G.Dorda, M.Pepper).

$$(R_{xy})_n = \frac{h}{ne^2};$$



К. фон Клитцинг

$$(R_{xy})_1 = 25812,807 \hat{I} \hat{i}$$



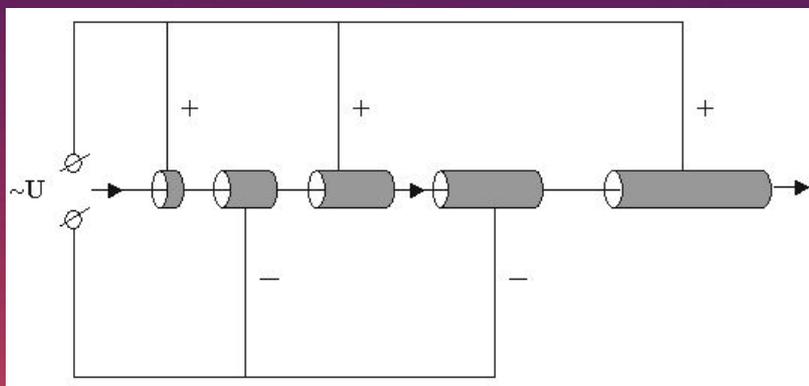
QUANTΩ – автоматизированная, переносная система первичного сопротивления, которая представляет собой экономичное средство для точного переноса сопротивления устройства на основе квантового сопротивления Холла ( $I=2$ ) на вторичные эталоны сопротивления. Переносит сопротивление устройства на основе квантового сопротивления Холла на стандартный резистор сопротивлением  $1000\Omega$  с точностью  $<0,02$  ppm и повторением  $<0,01$  ppm.



## Большой адронный коллайдер – БАК

Ускорители заряженных частиц – устройства для получения элементарных частиц или ионов с большой энергией

### Линейный ускоритель



стерилизация



радиотерапия

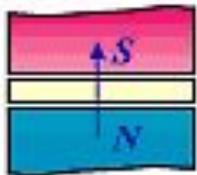
изотопы хим. элементов

## Циклические ускорители: циклотрон, фазотрон, синхротрон, синхроциклотрон

$$\vec{F} = q[\vec{v} \times \vec{B}] \quad f = \frac{Bq}{2\pi m}$$



### Движение заряженной частицы в однородном магнитном поле



## Коллайдер – ускоритель заряженных частиц на встречных пучках

Ускоритель	Центр, город, страна	Годы работы
<a href="#">ВЭПП-200</a>	<a href="#">ИЯФ ИЯФ, Новосибирск</a> , <a href="#">Россия</a>	с <a href="#">2006</a>
<a href="#">БЕРС-II</a>	<a href="#">Китай</a>	с <a href="#">2007</a>
<a href="#">DAFNE</a>	<a href="#">Frascati</a> Frascati, <a href="#">Италия</a>	<a href="#">1999</a> 1999— <a href="#">2008</a>
<a href="#">КЕКВ</a>	<a href="#">КЕК</a> КЕК, <a href="#">Япония</a>	с 1999
<a href="#">PEP-II</a>	<a href="#">SLAC</a> SLAC, <a href="#">Стэнфорд</a> SLAC, Стэнфорд, <a href="#">США</a>	с 1999
<a href="#">SLC</a>	<a href="#">SLAC</a> SLAC, <a href="#">Стэнфорд</a> SLAC, Стэнфорд, <a href="#">США</a>	<a href="#">1989</a> 1989— <a href="#">1999</a>
<a href="#">HERA</a>	<a href="#">DESY</a> DESY, <a href="#">Германия</a>	с <a href="#">1992</a>
<a href="#">RHIC</a>	<a href="#">Brookhaven</a> Brookhaven,	с <a href="#">2000</a>

## Large Hadron Collider – LHC

Франция – Швейцария (CERN)  
Длина кольца – 26,7 км





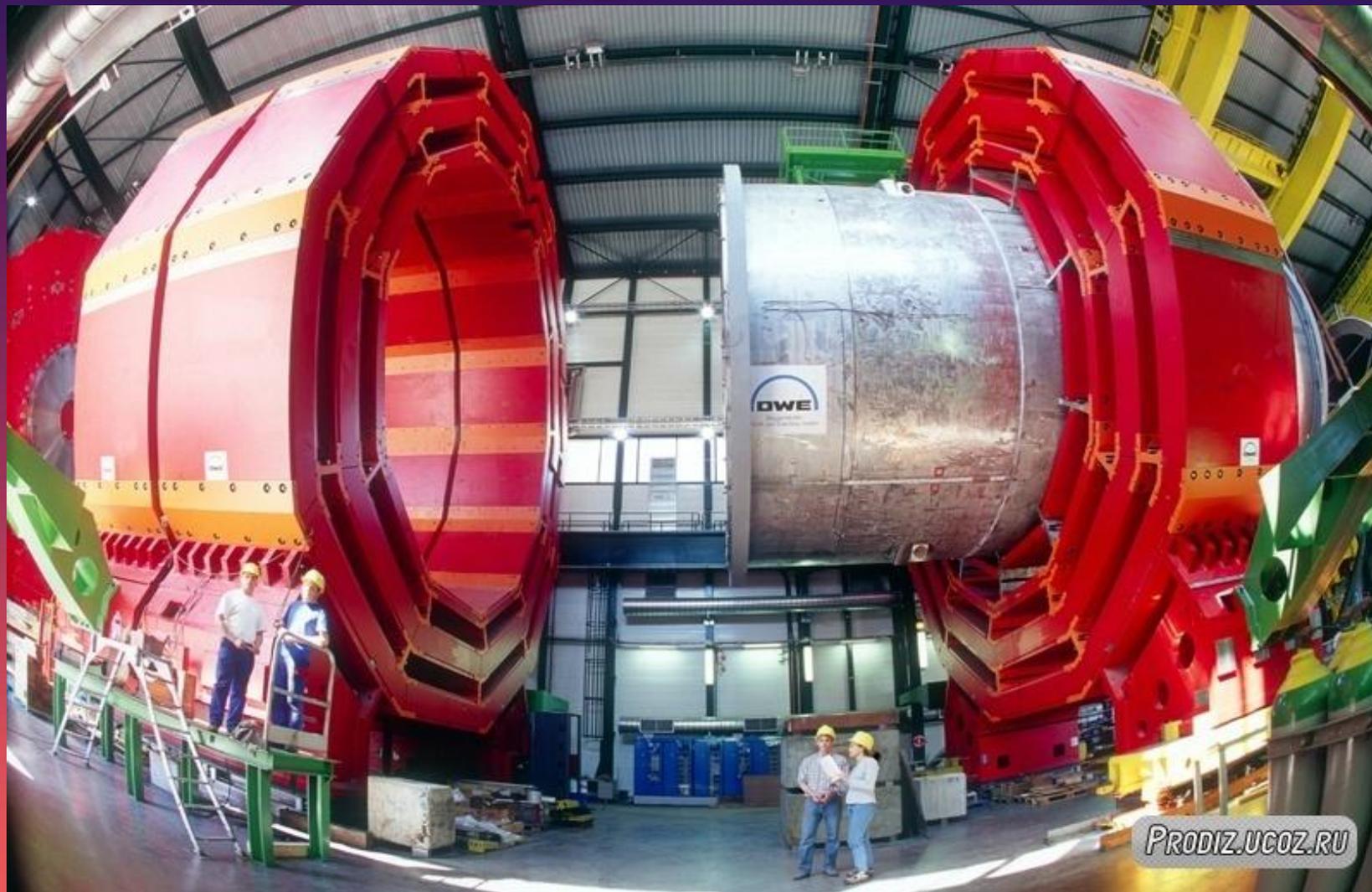
Глубина залегания – 100 м



Магнитное поле создаётся 1624 сверхпроводящими магнитами



В гигантском сооружении высотой с восьмиэтажный дом собрана аппаратура для регистрации взаимодействий адронов





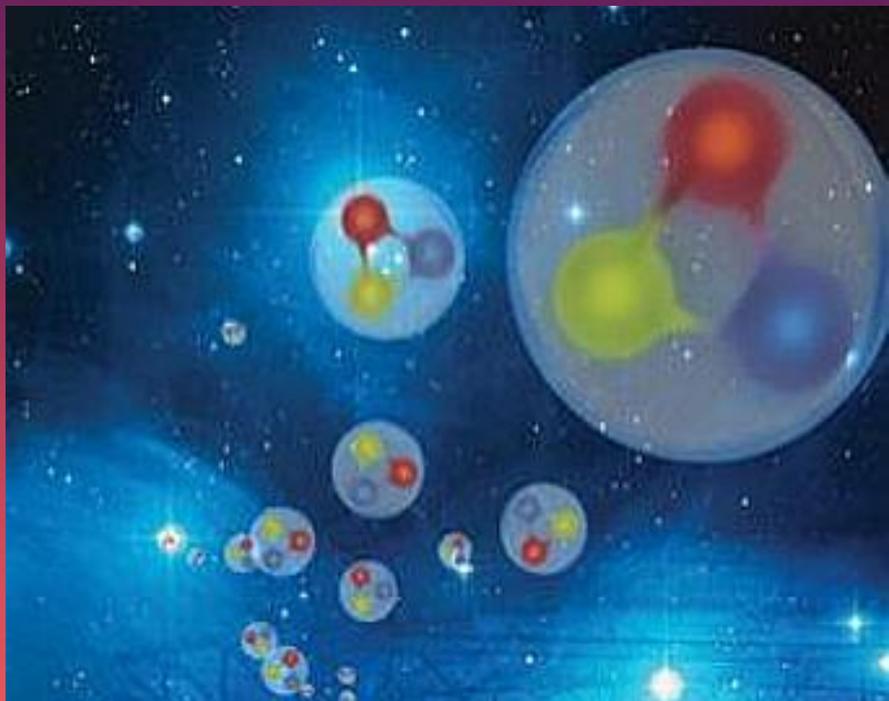
Уральский государственный университет им. А.М.Горького  
кафедра магнетизма и магнитных наноматериалов

Сроки строительства 1995 – 2008 гг, стоимость проекта более 8 млрд. \$

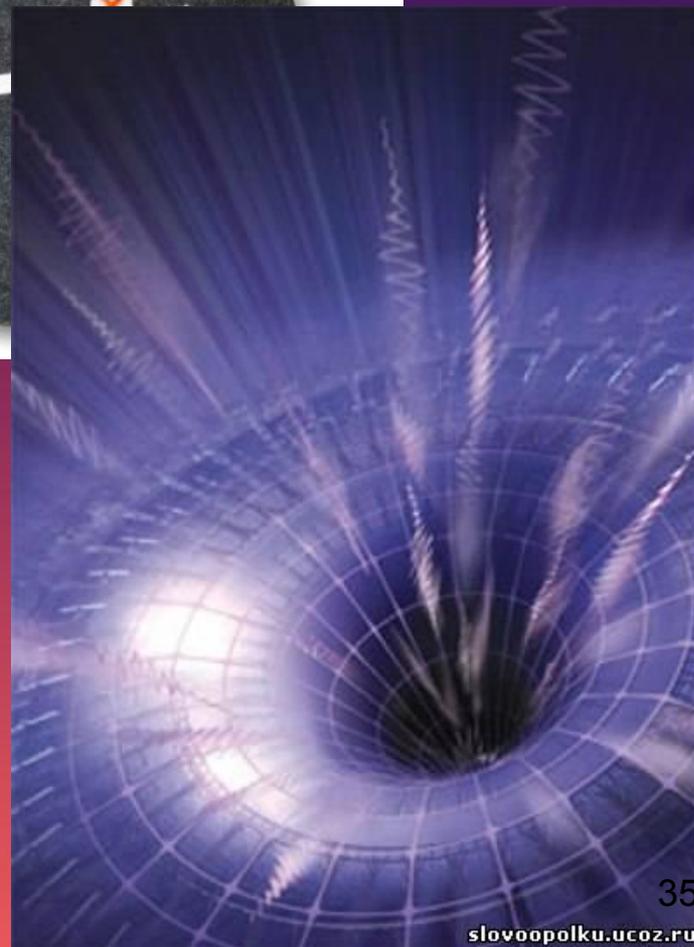
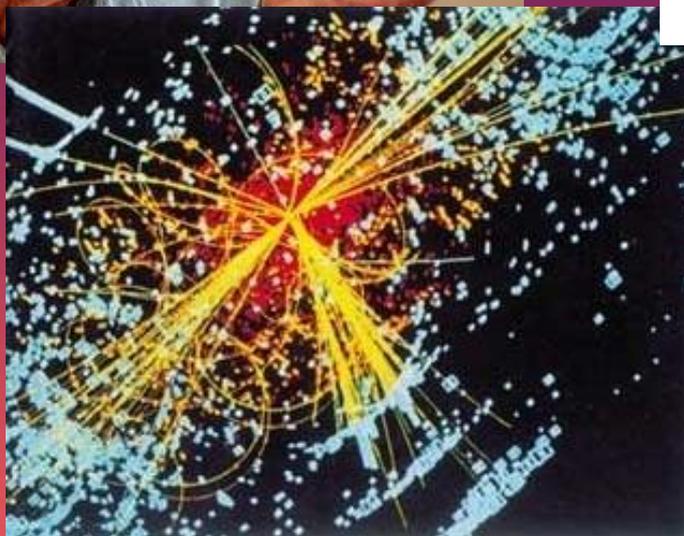
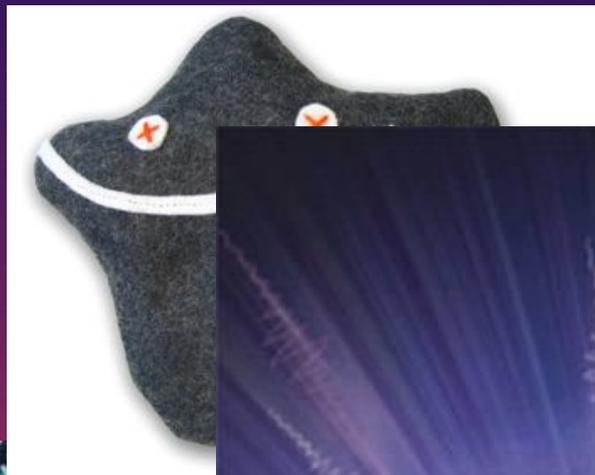
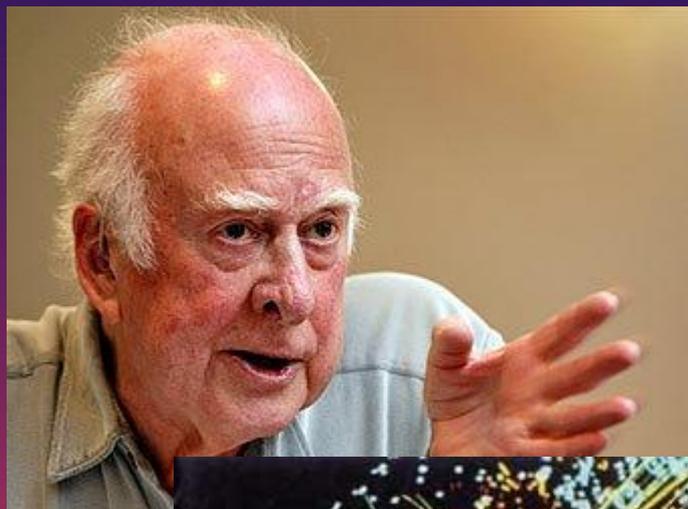


## Поставленные задачи

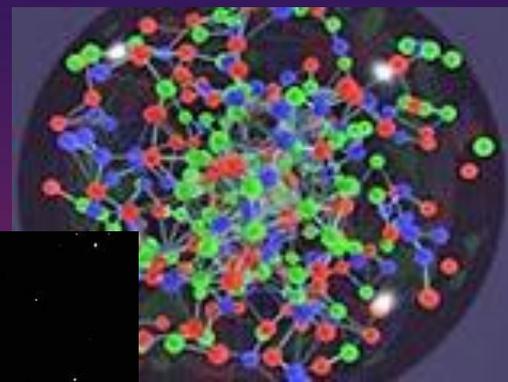
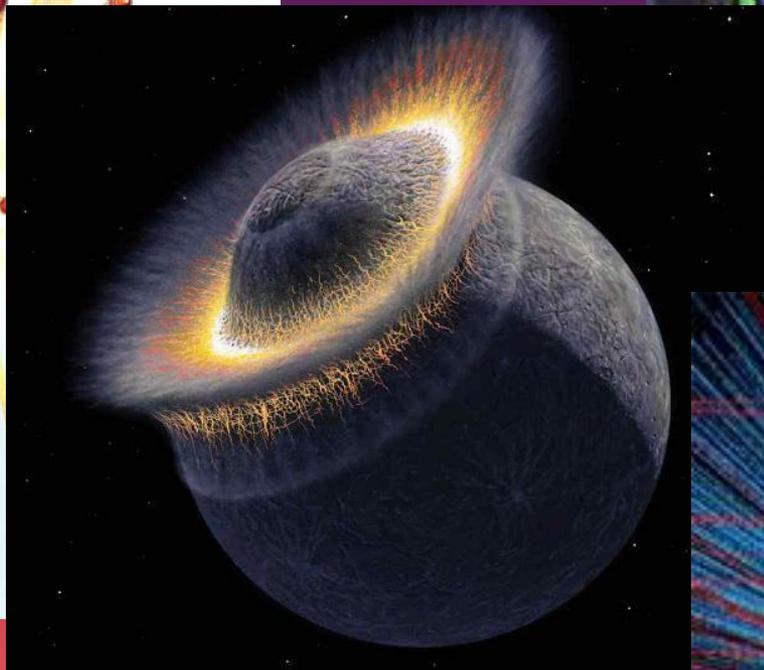
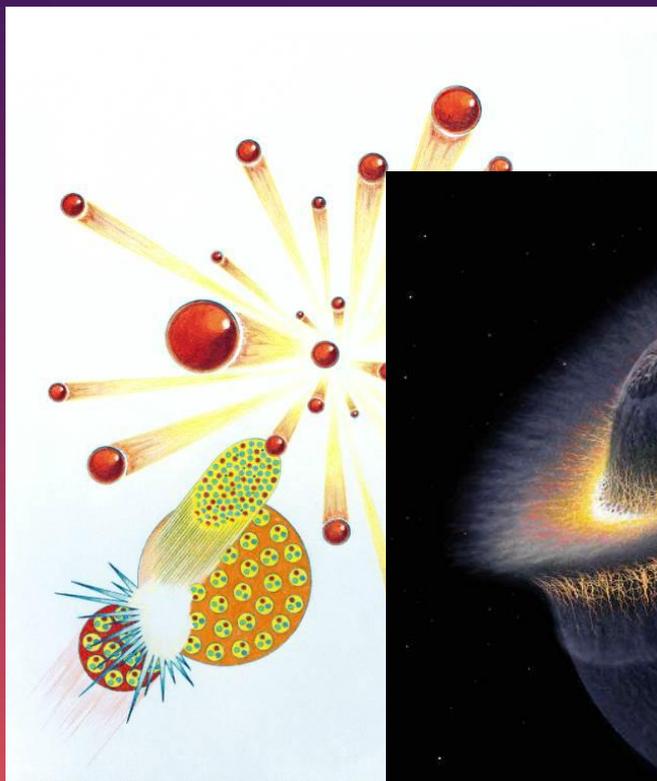
1. Проверка теорий объединяющих стандартную модель (электромагнитное, сильное и слабое взаимодействия) и общую теорию относительности (гравитационное взаимодействие)



## 2. Изучение кварков, поиск бозона Хиггса



### 3. Изучение кварк-глюонной плазмы



Нобелевская премия по физике 2013 года присуждена британскому ученому Питеру Хиггсу и бельгийцу Франсуа Энглеру за теоретическое обоснование существования бозона - частицы, благодаря которой остальные элементарные частицы обретают массу.

В 1960-е годы они входили в группу физиков, которые пытались получить объяснение физического явления массы у элементарных частиц. Предложенная ими теория предсказывала существование частицы, получившей название бозона Хиггса, которая была обнаружена на Большом адронном коллайдере в ЦЕРН в 2012 году.

