Семинар по теме «Обработка результатов пассивного эксперимента»

Примем, что в проводимом эксперименте нет параллельных опытов и, следовательно, все коэффициенты значимы

Построим таблицу пассивного эксперимента:

	T	$P^э$
1	T_1	$P_1^э$
2	T_2	$P_2^э$
…	…	…
n	T_n	$P_n^э$

Цель работы: подобрать такое уравнение регрессии, которое будет адекватно описывать проводимый эксперимент.

Два метода определения коэффициентов регрессии:

1) **Метод наименьших квадратов**
2) **Метод максимума правдоподобия**

Метод МНК

Дано уравнение регрессии:

$$P = exp(A + \frac{B}{T})$$

Где A, B – коэффициенты регрессии

Приведем уравнение к линейному виду:

$$lnP = A + \frac{B}{T} \quad \text{или} \quad lnP = a_0 + a_1 \frac{1}{T}$$

1/T – входная переменная *X*
LnP – выходная переменная *У*
a_0 ,a_1 – коэффициенты регрессии

Параметры определяются из условия минимума критерия.
R – критерий рассогласования

Определим критерий рассогласования R:

$$R = \sum_{i=1}^{n} (\text{y}^{\text{расч}} - \text{y}^{\text{эксп}})^2$$

$$R = \sum_{i=1}^{n} \left(\text{a}_0 - \text{a}_1 \frac{1}{\text{T}} - ln\text{P}\right)^2$$

Представим в виде СЛАУ:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R}{\partial \text{a}_0} = 2 \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \left(\text{a}_0 - \text{a}_1 \frac{1}{\text{T}} - ln\text{P}\right) \cdot 1 = 0 \\ \dfrac{\partial R}{\partial \text{a}_1} = 2 \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \left(\text{a}_0 - \text{a}_1 \frac{1}{\text{T}} - ln\text{P}\right) \cdot \frac{1}{\text{T}} = 0 \end{cases}$$

Приведем СЛАУ к матричному виду

$$\begin{bmatrix} n & \sum \frac{1}{\mathrm{T}} \\ \sum \frac{1}{\mathrm{T}} & \sum \frac{1}{\mathrm{T}^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathrm{a}_0 \\ \mathrm{a}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum ln\mathrm{P} \\ \sum \frac{1}{\mathrm{T}} ln\mathrm{P} \end{bmatrix}$$

где

$$\bar{\bar{\mathrm{A}}} = \begin{bmatrix} n & \sum \frac{1}{\mathrm{T}} \\ \sum \frac{1}{\mathrm{T}} & \sum \frac{1}{\mathrm{T}^2} \end{bmatrix} \qquad \bar{\mathrm{a}} = \begin{bmatrix} \mathrm{a}_0 \\ \mathrm{a}_1 \end{bmatrix} \qquad \bar{b} = \begin{bmatrix} \sum ln\mathrm{P} \\ \sum \frac{1}{\mathrm{T}} ln\mathrm{P} \end{bmatrix}$$

То есть:

$$\bar{\bar{\mathrm{A}}} \cdot \bar{\mathrm{a}} = \bar{b}$$

Воспользуемся методом обратной матрицы

$$\bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{\bar{A}} \cdot \bar{a} = \bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{b}$$

$$\bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{\bar{A}} = \bar{\bar{E}}$$

$$\bar{\bar{E}} \cdot \bar{a} = \bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{b}$$

$$\bar{a} = \bar{\bar{A}}^{-1} \cdot \bar{b}$$

Метод ММП

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x \qquad\qquad x = \frac{1}{T}$$

$$\bar{\bar{\varphi}} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_n \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} 1 & \dfrac{1}{T_1} \\ 1 & \dfrac{1}{T_2} \\ 1 & \dfrac{1}{T_n} \end{bmatrix} \\ \begin{array}{cc} \dfrac{\partial \hat{y}}{\partial a_0} & \dfrac{\partial \hat{y}}{\partial a_1} \end{array} \end{array}$$

$$\bar{\bar{I}}_{(m+1)\cdot(m+1)} = \bar{\bar{\varphi}}^{T}_{(m+1)\cdot n} \cdot \bar{\bar{\varphi}}_{n\cdot(m+1)}$$

$$\bar{b} = \bar{\bar{\varphi}}^{T} \cdot \bar{y}^{э}$$

$$\bar{\mathrm{a}} = (\bar{\bar{\varphi}}^{\mathrm{T}} \cdot \bar{\bar{\varphi}})^{-1} \cdot \bar{\bar{\varphi}}^{\mathrm{T}} \cdot \bar{\mathrm{y}}^{э}$$

$$\bar{\mathrm{a}} = \bar{\bar{I}}^{-1} \cdot \bar{b}$$

Проверка на адекватность

	T	$P^э$	$P^р$
1	T_1	$P_1^э$	$P_1^р$
2	T_2	$P_2^э$	$P_2^р$
…	…	…	…
n	T_n	$P_n^э$	$P_n^р$

Определяем значимость путем сравнения расчетного Критерия Фишера с табличным значением. Критерий Фишера можно рассчитать по формуле (при отсутствии параллельных опытов):

$$F^{\text{расч}} = \frac{S_{\text{ср}}^2}{S_R^2}$$

$$S_R^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\hat{y} - y_i^{\text{эксп}})^2}{n-p}$$

Расчет дисперсий:

$$S_{cp}^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i^{\text{эксп}} - y_i^{\text{эксп}^*})^2}{n-1}$$

$$S_{\text{ср}}^2 = \frac{(y_1^э - y^{э*})^2 + (y_2^э - y^{э*})^2 + (y_3^э - y^{э*})^2 + (y_4^э - y^{э*})^2 + (y_5^э - y^{э*})^2 + (y_6^э - y^{э*})^2 + (y_7^э - y^{э*})^2 + (y_8^э - y^{э*})^2 + (y_9^э - y^{э*})^2 + (y_{10}^э - y^{э*})^2}{10-1}$$

$$y^{э*} = \frac{y_1^э + y_2^э + y_3^э + y_4^э + y_5^э + y_6^э + y_7^э + y_8^э + y_9^э + y_{10}^э}{10}$$

$f_{\text{ср}} = 10 - 1$ (для всех уравнений, кроме №2)

$$y_i^э = \ln p_i^э$$

$$y_i^э = T_i \ln p_i^э$$

Расчет дисперсий:

$$S_R^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\hat{y} - y_i^{\text{эксп}})^2}{n - p}$$

$$S_R^2 = \frac{(\widehat{y_1} - y_1^э)^2 + (\widehat{y_2} - y_2^э)^2 + (\widehat{y_3} - y_3^э)^2 + (\widehat{y_4} - y_4^э)^2 + (\widehat{y_5} - y_5^э)^2 + (\widehat{y_6} - y_6^э)^2 + (\widehat{y_7} - y_7^э)^2 + (\widehat{y_8} - y_8^э)^2 + (\widehat{y_9} - y_9^э)^2 + (\widehat{y_{10}} - y_{10}^э)^2}{10 - p}$$

p – число значимых коэффициентов **линеаризованного** уравнения регрессии

$f_R = 10 – p$

По таблице Критериев Фишера (стр. 412 учебника) определяем

$\upsilon_1 – \upsilon_2$, где $\upsilon_1 = f_{ср}$, $\upsilon_2 = f_R$

$$F^{\text{расч}} \leq F^{\text{табл}}$$