https://doi.org/10.26552/com.C.1999.2.52-58

KOMUNIKÁCIE COMMUNICATIONS

Jaromír Máca - Bohuš Leitner *

NELINEÁRNA METÓDA NAJMENŠÍCH ŠTVORCOV

NONLINEAR LEAST SQUARES METHOD

Príspevok sa zaoberá porovnaním lineárnej a nelineárnej verzie metódy najmenších štvorcov. Jeho cieľom je ukázať, že transformácie nelineárnych vzťahov na lineárne nedávajú vždy dostatočne presné výsledky. Preto jedinou možnosťou dobrej aproximácie nelineárnych funkcií je využitie niektorej z nelineárnych metód najmenších štvorcov, z ktorých najefektívnejšou sa javí Levenberg - Marquardtov kompromis.

The paper deals with a comparison of linear and nonlinear least squares approximation. Its aim is to show that the well known transformations of nonlinear dependencies on linear dependencies do not always give exact results. Therefore, the only right possibility of approximation of nonlinear functions is to use one of nonlinear least squares procedures. The Levenberg - Marquardt compromise seems to be by far the best one.

1. Úvod

Experiment a jeho vyhodnotenie je stále základom a motorom rozvoja vedy, dnes už nielen v oblasti vied prírodných a technických, ale aj v ďalších oblastiach. Preto ovládnutie základných metód vyhodnocovania experimentov by malo patriť k základnej teoretickej výbave výskumníka - experimentátora.

Medzi základné metódy aproximácie experimentálnych závislostí stále patrí Gaussova metóda najmenších štvorcov. Najčastejšie sa využíva jej lineárna verzia určená pre polynomickú aproximáciu závislostí jednej premennej alebo pre lineárne závislosti viac premenných. V literatúre [2, 3, 4] sa uvádza a v praxi sa často využíva i transformácia niektorých jednoduchých nelineárnych závislostí na lineárny tvar s následným využitím lineárnej metódy najmenších štvorcov.

Cieľom článku je upriamiť pozornosť na menej známy nelineárny variant metódy najmenších štvorcov a ukázať, že jeho využitím je možné dosiahnuť kvalitatívne lepšie výsledky aproximácie i tých nelineárnych závislostí, ktoré sa zvyknú transformovať na lineárne.

2. Lineárna metóda najmenších štvorcov

Lineárna metóda najmenších štvorcov, presnejšie metóda najmenších štvorcov aproximácie experimentálnych údajov polynomickými alebo lineárnymi funkciami je založená na tom, že súboru nameraných (pozorovaných) hodnôt

$$Y = [y_1, y_2 \dots y_m]^T ,$$

u ktorých sa predpokladá závislosť od jednej alebo viacerých nezávisle premenných je možné priradiť model v tvare

1. Introduction

Experimentation and its evaluation is still a basis of scientific development not only in the area natural and technical sciences but in also many others. Therefore, mastering the basic methods of planning and evaluation of experiments should belong to the principal knowledge of any researcher - experimentator.

The Gaussian method of the least squares is still the principal method of experimental data approximation. Its linear version is most frequently used, which determines a polynomial approximation of one variable function or linear functions of more independent variables. References [2, 3, 4] show and practice uses the transformation of some simple nonlinear functions into the linear ones which can be solved by using linear least squares procedure.

The aim of this paper is to call attention to a lesser known nonlinear method of the least squares and to show that by using it better, qualitative results of approximation can also be reached by these nonlinear dependencies, which are used to transform to linear ones.

2. Linear least squares procedure

A linear least squares method (more exactly a method of least squares to approximy experimental data using polynomial or linear functions) is based on a set of measured (observed) values

$$Y = [y_1, y_2 \dots y_m]^T ,$$

by which dependency is supposed on one or more independent variables. This can be modelled as

* **Prof. Ing. Jaromír MÁCA, PhD., Ing. Bohuš LEITNER**
Faculty of Special Engineering, University of Žilina, SK-010 26 Žilina, Slovakia

$$Y = X \,.\, A + E \qquad (1)$$

kde Y a E sú stĺpcové vektory pozorovaní a odchýlok, X je matica funkcií nezávislej premennej prípadne premenných a A je vektor hľadaných parametrov zvoleného tvaru závislosti. Súčet štvorcov odchýlok $S(A)$ je kvadratickou funkciou parametrov A.

Hodnoty parametrov A, ktoré ho minimalizujú, dostaneme, ak položíme deriváciu $S(A)$ podľa A rovnú nule, čo vedie na výraz

$$A = (X^T \,.\, X)^{-1} \,.\, X^T \,.\, Y = S^{-1} \,.\, T\,, \qquad (2)$$

tzn. na riešenie sústavy n algebraických lineárnych rovníc pre n hľadaných parametrov zvolenej závislosti.

3. Transformácie nelineárnych funkcií na lineárne

Bežne sa uvádzajú (a využívajú) transformácie exponenciálnych, polytropických a lomených funkcií na lineárne výrazy. Napr. exponenciálny výraz

$$y(x) = A \,.\, e^{b\,.\,x}$$

logaritmovaním upravíme na výraz

$$\ln y = \ln A + b \,.\, x$$

čo po substitúcii $Y = \ln y$, $a_0 = \ln A$, $a_1 = b$ vedie na lineárny tvar

$$Y = a_0 + a_1 \,.\, x\,,$$

ktorého konštanty získame jednoducho aplikáciou lineárnej metódy najmenších štvorcov. Podobne je možné získať i parametre zložitejších výrazov napr. Fourierov rozvoj vo všeobecnom tvare (diskrétne hodnoty x)

$$y(x) = a_0 + a_1 \,.\, \cos x + a_2 \,.\, \cos 2.x + \ldots\ldots. + a_n \,.\, \cos n.x +$$

$$b_1 \,.\, \sin x + b_2 \,.\, \sin 2.x + \ldots\ldots. + b_n \,.\, \sin n.x$$

je možné transformáciou

$$X_1 = \cos x\,,\ X_2 = \cos 2.x\,,\ \ldots\ldots.,\ X_n = \cos n.x\,,$$

$$X_{n+1} = \sin x\,,\ X_{n+2} = \sin 2.x\,,\ \ldots\ldots.,\ X_{2.n} = \cos n.x$$

upraviť na lineárny výraz

$$y(x) = a_0 + a_1 \,.\, X_1 + a_2 \,.\, X_2 + \ldots\ldots.. + a_n \,.\, X_n +$$

$$b_1 \,.\, X_{n+1} + b_2 \,.\, X_{n+2} + \ldots\ldots..\ b_n \,.\, X_{2.n}\,,$$

ktorého $(2n + 1)$ parametrov a_0, a_1, ..., a_n, b_1, b_2, ... b_n je možné určiť zo sústavy $(2n + 1)$ algebraických lineárnych rovníc, pretože ku zvoleným hodnotám nezávisle premennej x je možné

$$Y = X \,.\, A + E \qquad (1)$$

where Y and E are column vectors of observations and errors respectively, X is the matrix of functions of an independent variable or variables and A is column vector of the chosen form of dependence parameters. The sum of squares of linear model $S(A)$ is a quadratic function of parameters A.

The values of parameters A that minimise the sum of squares of (it's $S(A)$, can be obtained by setting the derivative of $S(A)$ with respect to A to zero. This leads to the expression as

$$A = (X^T \,.\, X)^{-1} \,.\, X^T \,.\, Y = S^{-1} \,.\, T\,, \qquad (2)$$

which is a set of n linear equations for n unknown parameters of dependence.

3. Transformation of nonlinear functions into linear ones

It is well known (and often used) that exponential, polytropial and rational functions could be transformed easily into a linear one. For example, the expression

$$y(x) = A \,.\, e^{b\,.\,x}$$

can be logaritmized into form

$$\ln y = \ln A + b \,.\, x$$

which, after an elementary substitution as $Y = \ln y$, $a_0 = \ln A$, $a_1 = b$, leads to the linear expression

$$Y = a_0 + a_1 \,.\, x\,,$$

whose constants a_0 and a1 can be obtained by application of the linear least squares method. Similarly, it is possible to get parameters of more complicated functions, too. For example, the well known Fourier expansion in the form (for discrete values of x)

$$y(x) = a_0 + a_1 \,.\, \cos x + a_2 \,.\, \cos 2.x + \ldots\ldots. + a_n \,.\, \cos n.x +$$

$$b_1 \,.\, \sin x + b_2 \,.\, \sin 2.x + \ldots\ldots. + b_n \,.\, \sin n.x$$

can be transformed to

$$X_1 = \cos x\,,\ X_2 = \cos 2.x\,,\ \ldots\ldots.,\ X_n = \cos n.x\,,$$

$$X_{n+1} = \sin x\,,\ X_{n+2} = \sin 2.x\,,\ \ldots\ldots.,\ X_{2.n} = \cos n.x$$

and converted to the linear expression as

$$y(x) = a_0 + a_1 \,.\, X_1 + a_2 \,.\, X_2 + \ldots\ldots.. + a_n \,.\, X_n +$$

$$b_1 \,.\, X_{n+1} + b_2 \,.\, X_{n+2} + \ldots\ldots..\ b_n \,.\, X_{2.n}\,,$$

uvedené goniometrické funkcie potrebné pre zostrojenie matice funkcií X dorátať.

4. Nelineárna metóda najmenších štvorcov

Uvedený postup však nie je možné použiť tam, kde u nelineárnych funkcií (goniometrických, transcendentných) sú hľadané parametre závislosti v argumentoch funkcií. Napr. najjednoduchšiu rovnica tlmených kmitov jednej hmoty v tvare

$$x(t) = A \,.\, e - b.t \,.\, \cos \omega t$$

nie je možné žiadnou transformáciou upraviť na lineárny tvar a preto je potrebné k určeniu jej parametrov A, b, ω využiť nelineárnu metódu najmenších štvorcov, presnejšie metódu najmenších štvorcov pre nelineárne výrazy. Známych je viacej variantov, my uvedieme tri najvýznamnejšie - Gaussovu metódu linearizácie, metódu „najstrmšieho zostupu" (Steepest Descent) a Levenberg - Marquardtov kompromis.

4.1 Gaussov algoritmus

Gaussov algoritmus je možné popísať ako postupnosť lineárnych krokov metódy najmenších štvorcov. Zvolená funkcia je najskôr linearizovaná s využitím Taylorovho rozvoja okolo začiatočného odhadu parametrov $A^{(0)}$. Ak napíšeme pre každý ľubovoľný bod

$$y_i = f_i^{(0)} + (a_1 - a_1^{(0)}) \,.\, \frac{\partial f_i}{\partial a_1} + (a_2 - a_2^{(0)}) \,.\, \frac{\partial f_i}{\partial a_2} + \dots + (a_n - a_n^{(0)}) \,.\, \frac{\partial f_i}{\partial a_n} + \varepsilon_i \quad (3)$$

kde

$$f_i(0) = f_i(x_i, a_1^{(0)}, a_2^{(0)}, \dots a_n^{(0)})$$

označíme

$$v_i = y_i - f_i^{(0)}\,,\ \Delta_j = a_j - a_j(0)\ \ a\ z_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial a_j}\Bigg|_{A = A^{(0)}}$$

dostaneme vzťah (3) v tvare

$$v_i = \Delta_1 \,.\, z_{i1} + \Delta_2 \,.\, z_{i2} + \dots + \Delta_n \,.\, z_{in}\,,$$

čo je pre všetky v_i možné napísať v maticovom tvare

$$V = Z \,.\, \Delta$$

z čoho hľadaný vektor zmien parametrov Δ dostaneme riešením sústavy lineárnych rovníc

whose $(2n+1)$ parameters a_0, a_1, ..., a_n, b_1, b_2, ... b_n can be determined from the set of $(2n+1)$ algebraic linear equations, because to each of the selected values of x it is possible to compute the introduced goniometric functions needed for construction of the matrix of functions X.

4. Nonlinear least square method

The above mentioned procedure of transformation cannot be used where nonlinear functions (goniometric, transcendent) of the searched parameters of dependencies are in disagreement with the functions. For example, the simplest equation of one mass damped vibrations in the form

$$x(t) = A \,.\, e - b.t \,.\, \cos \omega t$$

cannot be in any way transformed into a linear form. Therefore, it is necessary to get their parameters A, b, ω by using nonlinear least squares, more exactly the least square procedure for nonlinear expressions. More variants are known. We will show just three of the most important: Gaussian algorithm of linearization, the steepest descent method and the Levenberg - Marquardt compromise.

4.1 The Gaussian Algorithm

This algorithm may be described as a sequence of linear least squares procedures. The model is first linearized by Taylor's expansion about the initial guesses of $A^{(0)}$. We can write for each point of function

$$y_i = f_i^{(0)} + (a_1 - a_1^{(0)}) \,.\, \frac{\partial f_i}{\partial a_1} + (a_2 - a_2^{(0)}) \,.\, \frac{\partial f_i}{\partial a_2} + \dots + (a_n - a_n^{(0)}) \,.\, \frac{\partial f_i}{\partial a_n} + \varepsilon_i \quad (3)$$

where

$$f_i(0) = f_i(x_i, a_1^{(0)}, a_2^{(0)}, \dots a_n^{(0)})\,.$$

If we determine

$$v_i = y_i - f_i^{(0)}\,,\ \Delta_j = a_j - a_j(0)\ \ a\ z_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial a_j}\Bigg|_{A = A^{(0)}}$$

we can get the formula (3) in the form as

$$v_i = \Delta_1 \,.\, z_{i1} + \Delta_2 \,.\, z_{i2} + \dots + \Delta_n \,.\, z_{in}\,,$$

which can be for all v_i 's written in a matrix form as

$$V = Z \,.\, \Delta$$

from which the searched vector of changes of parameters Δ can be found by solving the set of linear equations as

$$\Delta = A^{(1)} - A^{(0)} = (Z^T . Z)^{-1} . Z^T . V \qquad (4)$$

Rozdiel oproti lineárnej metóde najmenších štvorcov je v tom, že maticu sústavy a vektor pravej strany tentoraz nedostaneme pomocou matice funkcií, ale pomocou matice parciálnych derivácií zvolenej funkcie podľa jej parametrov vo všetkých bodoch (matica Z)[1]. V naznačenom iteračnom postupe sa pokračuje, pokiaľ získaná zmena parametrov nie je menšia ako požadovaná presnosť riešenia.

4.2 Metóda „najstrmšieho zostupu" (Steepest Descent)

Uvedená metóda patrí medzi metódy gradientné. Ráta sa pri nej sklon povrchu súčtu štvorcov odchýlok pri počiatočnom odhade parametrov $A^{(0)}$ a pokračuje sa v smere jeho najstrmšieho spádu k novému odhadu parametrov $A^{(1)}$. Postup sa opakuje až do dosiahnutia hodnôt parametrov, ktoré minimalizujú súčet štvorcov odchýlok.

Keďže

$$y_i = f_i(X_i, A) + \varepsilon_i$$

je súčet štvorcov odchýlok určený ako

$$S(A) = \Sigma[y_i - f_i(X_i, A)]^2$$

Potom

$$\left.\frac{\partial S(A)}{\partial a_j}\right|_{A = A^{(0)}} = -\,2.\Sigma[y_i - f_i(X_i, A^{(0)})].\,\frac{\partial f_i}{\partial a_j}\,.$$

Ak označíme (v súlade s predchádzajúcim)

$$v_i = y_i - f_i \quad \text{a} \quad \frac{\partial f_i}{\partial a_j} = z_{ij}\,,$$

potom bude

$$\left.\frac{\partial S(A)}{\partial a_j}\right|_{A = A^{(0)}} = -\,2.\Sigma\,.\,y_i\,.\,z_{ij}\big|A = A^{(0)}$$

alebo

$$\frac{\partial S(A)}{\partial A} = -2\,.\,Z\,.\,V\,.$$

Potom vektor zmeny parametrov bude

$$\Delta = A^{(1)} - A^{(0)} = (Z^T . Z)^{-1} . Z^T . V \qquad (4)$$

The main difference in comparison with the linear method is that the matrix of the set is not obtained by using the matrix of functions but by using the matrix of partial derivatives of the chosen function with respect to its parameters in each point of discretization (matrix Z)[1]. This iterative procedure continues until a change of parameters less than the wanted accuracy of solution is obtained.

4.2 The Steepest Descent Method

This method belongs to a group of gradient methods. In this method the slope of the sum of squares surface at initial guesses $A^{(0)}$ is computed and proceeds a certain distance along the direction of the steepest descent to obtain new parameter guesses $A^{(1)}$. This procedure is repeated till the parameter values that minimise the sum of squares are obtained.

Since,

$$y_i = f_i(X_i, A) + \varepsilon_i$$

the sum of squares function is given by

$$S(A) = \Sigma[y_i - f_i(X_i, A)]^2$$

Hence,

$$\left.\frac{\partial S(A)}{\partial a_j}\right|_{A = A^{(0)}} = -\,2.\Sigma[y_i - f_i(X_i, A^{(0)})].\,\frac{\partial f_i}{\partial a_j}\,.$$

Let (with accordance with chapter 4.1)

$$v_i = y_i - f_i \quad \text{a} \quad \frac{\partial f_i}{\partial a_j} = z_{ij}\,,$$

then

$$\left.\frac{\partial S(A)}{\partial a_j}\right|_{A = A^{(0)}} = -\,2.\Sigma\,.\,y_i\,.\,z_{ij}\big|A = A^{(0)}$$

or

$$\frac{\partial S(A)}{\partial A} = -2\,.\,Z\,.\,V\,.$$

Then the vector of parameter changes will be

[1] Aby bol algoritmus využiteľný všeobecne, je výhodné určovať naznačené parciálne derivácie numericky.
For the algorithm to be generally usable it is advantageous to determine the shown partial derivative numerically.

$$\Delta^{(1)} = A^{(1)} - A^{(0)} = 2 \, . \, \lambda \, . \, Z^T \, . \, V \, . \qquad (5)$$

Problémom je voľba konštanty λ, ktorú je možné zvoliť pevne, alebo ju pri každom kroku riešenia optimalizovať.

4.3 Levenberg - Marquardtov kompromis

Pre väčšinu nelineárnych modelov, skutočný súčet štvorcov odchýlok blízko riešenia je možné dobre aproximovať kvadratickým povrchom, zatiaľ čo ďaleko od riešenia nie je kvadratická aproximácia vhodná. Preto blízko riešenia pracuje dobre Gaussov algoritmus, zatiaľ čo ďalej od riešenia je vhodné využiť metódu „najstrmšieho zostupu“.

Ponúka sa preto myšlienka, že najvhodnejšia by bola metóda, ktorá by pracovala v začiatočných fázach riešenia ako metóda „najstrmšieho zostupu“ a postupne - ako sa iterácie blížia ku konečnému riešeniu - by sa menila na metódu Gaussovu. Metóda založená na takomto princípe bola vyvinutá Levenbergom a Marquardtom a volá sa Levenberg -Marquardtov kompromis.

Všeobecný iteračný postup zostáva zachovaný ako v predchádzajúcich prípadoch s tým rozdielom, že vektor zmeny parametrov je daný vzťahom

$$\Delta^{(k)} = A^{(k+1)} - A^{(k)} = (Z^T \, . \, Z + \overline{\lambda} \, . \, J) - 1 \, . \, Z^T \, . \, V \qquad (6)$$

kde $\overline{\lambda} = \dfrac{1}{2\lambda}$ z rovnice (5).

Posledne uvedená metóda je v súčasnosti najpoužívanejšia predovšetkým preto, že je veľmi málo citlivá na voľbu počiatočnej aproximácie hľadaných parametrov.

5. Príklad aproximácie zvoleného súboru údajov

Na demonštráciu uvedených metód pre aproximáciu nelineárnych výrazov bol náhodne zvolený súbor údajov uvedený v tab. 1.

Súbor experimentálnych údajov pre aproximáciu Tab. 1.

i	1	2	3	4	5	6	7	8
x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	0.1	1.5	0.9	1.5	1.4	1.2	2.6	2.5

Uvedený súbor experimentálnych údajov bol aproximovaný prostredníctvom troch zvolených jednoduchých funkcií: (a) parabolou, (b) exponenciálou, (c) polytropou.

Aproximácie exponenciálou a polytropou boli vykonané najskôr všeobecne používanou transformáciou na lineárne vzťahy (logaritmovaním) a potom i s využitím nelineárnej metódy najmenších štvorcov. Získané výsledky po aproximácii transformáciou na lineárne vzťahy a prostredníctvom nelineárnej metódy najmenších štvorcov sú uvedené v tab. 2.

Z uvedeného prehľadu získaných výsledkov je zrejmé, že pokiaľ by sme použili iba lineárnu metódu najmenších štvorcov

$$\Delta^{(1)} = A^{(1)} - A^{(0)} = 2 \, . \, \lambda \, . \, Z^T \, . \, V \, . \qquad (5)$$

The only problem is to choose the value of λ properly. It can be determined as a constant or can be computed and optimized at each step of solution.

4.3 The Levenberg - Marquardt Compromise

For most nonlinear models, the true sum of squares surface near the solution is well approximated by a quadratic surface, but far from the solution, the quadratic approximation is poor. Hence, near the solution, the Gaussian algorithm works well; however, far from the solution the steepest descent is more suitable.

This offers an idea that the most suitable method could be the one behaving like the steepest descent in early stages of iteration and gradually changes to Gaussian algorithm as the iteration proceeds to the final solution. This method was developed by Levenberg and Marquardt and is called the Levenberg - Marquardt compromise.

The general iterative procedure remains the same as in former cases except for an expression of the vector of parameter changes Δ which is given by

$$\Delta^{(k)} = A^{(k+1)} - A^{(k)} = (Z^T \, . \, Z + \overline{\lambda} \, . \, J) - 1 \, . \, Z^T \, . \, V \qquad (6)$$

where $\overline{\lambda} = \dfrac{1}{2\lambda}$ from formula (5).

The latest method is the most used at present as it is not very sensitive to the initial parameters guess.

5. An example of approximation of a set of data

To demonstrate the above mentioned method, a set of data according to Tab.1 was chosen.

A set of data for approximation Tab. 1

i	1	2	3	4	5	6	7	8
x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	0.1	1.5	0.9	1.5	1.4	1.2	2.6	2.5

This set of data was approximated by three simple functions: (a) parabolic, (b) exponential, (c) polytropial.

That approximation by exponential and polytropial functions was made for the first time using a generally accepted logarithmic transformation and for the second time using a non-linear least square procedure. The results can be seen in Tab. 2.

These results show that if we only use the linear least squares method and try to judge the most suitable function form after its results, we would obviously choose a parabolic function (nearly

Zhrnutie výsledkov aproximácie Tab.2

Krivka		Parabola	Exponenciála	Polytropa
Tvar funkcie		$y(x) = a_0 + a_1 . x + a_2 . x^2$	$y(x) = A . e^{b . x}$	$y(x) = B . x^n$
Koeficienty	*transformácia na lineárny tvar*	$a_0 = 0.359$ $a_1 = 0.195$ $a_2 = 0.009$	A = 0.273 b = 0.310	B = 0.212 n = 1.244
	nelineárna metóda najmenších štvorcov	-	A = 0.569 b = 0.190	B = 0.569 n = 1.209
Súčet odchýlok štvorcov	*transformácia na lineárny tvar*	$S_c = 1.429$	$S_c = 2.370$	$S_c = 1.880$
	nelineárna metóda najmenších štvorcov	-	$S_c = 1.435$	$S_c = 1.435$
Index korelácie	*transformácia na lineárny tvar*	$I_{yx} = 0.831$	$I_{yx} = 0.698$	$I_{yx} = 0.770$
	nelineárna metóda najmenších štvorcov	-	$I_{yx} = 0.830$	$I_{yx} = 0.830$

Results of approximation Tab. 2

Curve		Parabola	Exponent	Polytropic
Form of function		$y(x) = a_0 + a_1 . x + a_2 . x^2$	$y(x) = A . e^{b . x}$	$y(x) = B . x^n$
Coefficients	*transformation to linear form*	$a_0 = 0.359$ $a_1 = 0.195$ $a_2 = 0.009$	A = 0.273 b = 0.310	B = 0.212 n = 1.244
	non-linear least square procedure	-	A = 0.569 b = 0.190	B = 0.569 n = 1.209
The sum of squares	*transformation to linear form*	$S_c = 1.429$	$S_c = 2.370$	$S_c = 1.880$
	non-linear least square procedure	-	$S_c = 1.435$	$S_c = 1.435$
Index of correlation	*transformation to linear form*	$I_{yx} = 0.831$	$I_{yx} = 0.698$	$I_{yx} = 0.770$
	non-linear least square procedure	-	$I_{yx} = 0.830$	$I_{yx} = 0.830$

a posudzovali podľa jej výsledkov najvhodnejšiu funkciu k aproximácii uvedeného súboru hodnôt, zrejme by sme zvolili parabolu (prakticky priamku), zatiaľ čo polytropa i exponenciála dávajú výsledky o poznanie horšie.

Po aplikácii nelineárnej metódy najmenších štvorcov je však možné zistiť, že všetky tri zvolené tvary aproximačných funkcií dávajú prakticky rovnaké výsledky a voľba typu aproximácie bude zrejme závisieť od podstaty skúmaného problému. Markantný rozdiel je najmä u aproximácie exponenciálou, kedy rozdiel súčtov štvorcov odchýlok získaných obidvoma postupmi je rozhodne štatisticky významný.

Zrejmé je to i z grafického znázornenia (obr. 1), kde krivka K2 určená nelineárnou metódou najmenších štvorcov dáva viditeľne lepšiu aproximáciu experimentálnych hodnôt, ako krivka K1, získaná transformáciou na lineárny tvar.

Na skutočnosť, že transformácia exponenciálneho vzťahu na lineárny logaritmovaním určuje iba minimálny súčet štvorcov odchýlok logaritmov funkčných hodnôt upozorňuje v literatúre iba Linczényi [3], praktické dôsledky sme však objavili až náhodou pri príprave zadaní na cvičenia a testovaní spracovaných programov aproximácie experimentálnych údajov. Pokiaľ je však experimentálna závislosť takmer funkčná (index korelácie sa blíži 1),

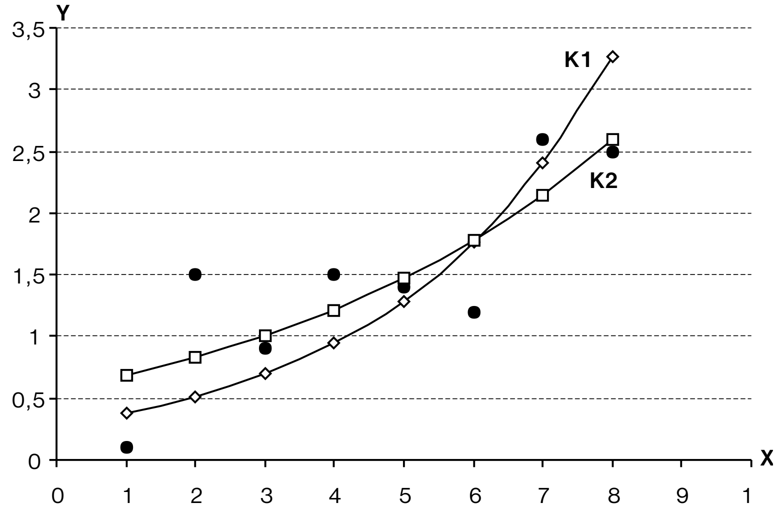
linear) because the results of exponential and polytropial function are a little bit worse.

On the other hand, after using the non-linear least squares procedure we can see that almost all three dependencies give nearly the same results and the judgement as to which type of approximation to use should depend on the basic principles of the examined problem. A striking difference can be seen namely in the exponential approximation when the difference of the sum of squares of both methods is evidently statistically significant.

We can see it from the graphs in Fig.1 too, where the curve K2 determined by the non-linear least squares method evidently gives better approximation of the experimental data than the curve K1 determined by transformation into a linear form.

Only Linczényi mentioned in his work [3] that by transformation of an exponential form into a linear one, only a minimum sum of squares of logarithm can be obtained. Practical consequences were found accidentally by testing some programs of approximation of the experimental data. As a matter of fact, if an experimental dependence is nearly functional (index of correlation equals nearly one) the results determined by both

i	Y_{t1}	Y_{t2}
1	0.372	0.687
2	0.508	0.831
3	0.693	1.005
4	0.945	1.215
5	1.289	1.468
6	1.759	1.775
7	2.400	2.146
8	3.270	2.595
Σv_i^2	2.371	1.435



Obr. 1. Porovnanie aproximácie exponenciálou
Obr.1. Comparison of approximations by exponential functions

výsledky získané oboma spôsobmi sú prakticky rovnaké. Rozdiely sa zväčšujú so znižujúcou sa koreláciou závislosti.

6. Záver

Cieľom príspevku bolo predovšetkým ukázať, že všeobecne používané transformácie i jednoduchých nelineárnych výrazov na lineárne s následným použitím aproximácie experimentálnych hodnôt metódou najmenších štvorcov môžu dať pri nižších indexoch korelácie i zásadne chybné výsledky, a že teda jediným správnym postupom aproximácie experimentálnych hodnôt nelineárnymi funkciami je využitie niektorej z nelineárnych metód najmenších štvorcov, pre ktorých uplatnenie súčasný rozvoj výpočtovej techniky vytvára vhodné podmienky.

Literatúra

[1] WU, S. M., PANDIT, S. M.: Time Series and System Analysis. University of Wisconsin Press, Madison 1979.
[2] HARANT, M.: Matematické metódy v experimentálnej praxi. VŠD, Žilina 1970.
[3] LINCZÉNYI, A.: Inžinierska štatistika. Alfa, Bratislava 1973.
[4] KROPÁČ, O.: Metody experimentálního výskumu. ČVUT, Praha 1988.
[5] MÁCA, J.: Identifikácia a modelovanie dynamických systémov. VF VŠDS, Žilina 1991.

Recenzenti: A. Linczényi, P. Marušiak

methods are practically identical. The differences grow with a sinking correlation of dependence.

6. Conclusion

The aim of this paper was to show that the generally used transformations of simple non-linear functions into the linear ones (followed by approximation of experimental data by the least squares method) may also sometimes give the dependencies with lower correlation principally wrong results. The only correct way to approximate experimental data by non-linear function is to use non-linear least squares procedures (from which the best one is Levenberg - Marquardt compromise), for which the present state of computing equipment creates the best conditions.

References

[1] WU, S. M., PANDIT, S. M.: Time Series and System Analysis. University of Wisconsin Press, Madison 1979.
[2] HARANT, M.: Matematické metódy v experimentálnej praxi. VŠD, Žilina 1970.
[3] LINCZÉNYI, A.: Inžinierska štatistika. Alfa, Bratislava 1973.
[4] KROPÁČ, O.: Metody experimentálního výskumu. ČVUT, Praha 1988.
[5] MÁCA, J.: Identifikácia a modelovanie dynamických systémov. VF VŠDS, Žilina 1991.

Reviewed by: A. Linczényi, P. Marušiak