

Andrzej MUCIEK

POLITECHNIKA WROCLAWSKA, KATEDRA METROLOGII ELEKTRONICZNEJ I FOTONICZNEJ
UL. B. PRUSA 53/55, 50-317 WROCLAW

Wyznaczanie modeli wielomianowych obiektów z danych eksperymentalnych

Dr hab. Andrzej Konstanty MUCIEK

Urodził się w 1943 r. w Nałęczowie; mgr inż. elektroniki 1969 r., mgr matematyki 1974 r., dr nauk technicznych. 1975 r., dr hab. 1987 r., prof. ndzw. 1992.; Autor 76 publikacji, 1 książki; prowadził badania naukowe w National Institute of Standards and Technology, USA 1985-1986, Physikalische Technische Bundesanstalt, RFN 1992-1994, Istituto Elettrotecnico Nazionale, Włochy 1995.

e-mail: andrzej.muciek@pwr.wroc.pl



Streszczenie

Przedstawiono metody wyznaczania modeli wielomianowych z danych eksperymentalnych. Zaproponowano algorytm pozwalający na uproszczenie obliczeń i zmniejszenie błędów numerycznych. Opracowano program komputerowy i przeprowadzono badania porównawcze metod przy wykorzystaniu zarówno symulowanych wyników eksperymentu jak i wyników pomiarów rzeczywistych obiektów. Analiza pozwoliła na określeniu własności metod.

Słowa kluczowe: dopasowanie funkcji do danych, wyznaczanie modeli, wyznaczanie stopnia wielomianu.

Determination of polynomial models from experimental data

Abstract

Methods for polynomial models determination from experimental data are presented. An algorithm that simplifies calculations and decreases numerical errors is proposed. A computer program realizing this method has been prepared and analysis of the methods is performed. Properties of the methods and scope of applications are discussed.

Keywords: fitting data to function, polynomial degree determination, model determination: forward selection and backward elimination.

1. Wprowadzenie

Ważnym celem współczesnej metrologii jest wyznaczanie modeli matematycznych obiektów na podstawie wyników pomiarów. Zwykle pierwszą klasą funkcji, której przydatność do konstrukcji modelu jest sprawdzana są wielomiany. Podstawowym problemem, który pojawia się przy wyznaczaniu modeli wielomianowych jest określenie stopnia wielomianu aproksymującego. Zwykle stosowany jest do tego celu test chi-kwadrat [1,2] i metoda "selekcji w przód". Jednak w wielu przypadkach metoda ta zawodzi i proponowana jest alternatywna metoda „wstecznej eliminacji” [2]. Badania wykazują [2], że obie metody mogą prowadzić do różnych rozwiązań. Dodatkowym utrudnieniem jest fakt, że macierz, która pojawia się przy estymacji parametrów wielomianu jest w przybliżeniu macierzą typu Hilberta, która jest znana ze złego uwarunkowania [3].

W artykule podano podstawy matematyczne obu metod i zaproponowano procedurę zmniejszającą problemy numeryczne.

Opracowano program komputerowy i przeprowadzono badania porównawcze własności obu metod. Badania te prowadzone były zarówno przy pomocy symulacyjnego eksperymentu jak i danych rzeczywistych. Określono obszary zastosowań obu metod.

2. Estymacja parametrów wielomianu

Załóżmy, że chcemy określić model matematyczny pewnego obiektu z jednym wejściem x i jednym wyjściem y , czyli funkcję $y = f(x)$. Nie mamy żadnych informacji jakiej klasy jest to funkcja. Możemy jedynie przeprowadzać eksperymenty, w których dla zadanych wartości wejściowych mierzy się wartości wielkości wyjściowej. Zwykle, w pierwszym kroku stawiamy hipotezę, że funkcja ta jest wielomianem postaci

$$y = f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_p x^p, \quad (1)$$

przy czym nie jest znany zarówno stopień p jak i parametry a_0, a_1, \dots, a_p . Założymy, że dokonano n pomiarów wartości $y_i = f(x_i)$, dla $x = x_1, x_2, \dots, x_n$, $n \geq p$, a wyniki Y_i są równe

$$Y_i = y_i + \Delta_i = a_0 + a_1 x_i + \dots + a_p x_i^p + \Delta_i, \quad i=1,2,\dots,n, \quad (2)$$

gdzie Δ_i są losowymi błędami obserwacji. Ponadto zakładamy, że spełniają one warunki: $E[\Delta_i]=0$; $\text{cov}[\Delta_i, \Delta_j]=0$ dla $i \neq j$ oraz $\text{var}[\Delta_i] = \sigma^2$, $i, j = 1,2,\dots,n$. Symbole $E[\]$, $\text{cov}[\]$ oraz $\text{var}[\]$ oznaczają odpowiednio: wartość oczekiwaną, kowariancję i wariancję.

Wyrażenia (2), nazywane *równaniami fundamentalnymi*, zapiszemy w formie macierzowej

$$\mathbf{Y} = \mathbf{y} + \mathbf{\Delta} = \mathbf{X} \mathbf{a} + \mathbf{\Delta}, \quad (3)$$

gdzie

$\mathbf{Y} = [Y_1, Y_2, \dots, Y_n]^T$ jest wektorem, wyników pomiarów,
 $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$ jest wektorem wartości wielkości wyjściowych,
 $\mathbf{\Delta} = [\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_n]^T$ jest wektorem błędów pomiarów,
 $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots, a_p]^T$ jest wektorem parametrów wielomianu,

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^p \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^p \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^p \end{bmatrix} \quad (4)$$

jest macierzą eksperymentu o wymiarze $n \times p$ rzędu $p+1$.

Symbol „ T ” oznacza transpozycję macierzy/wektora.

Optymalny estymator najmniejszych kwadratów (NK) parametrów \mathbf{a} wielomianu (1) otrzymuje się, dla podanych wyżej założeń, jako rozwiązanie *równań normalnych* [2,4]

$$\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}. \quad (5)$$

Macierz kowariancji $D[\hat{\mathbf{a}}]$ tego estymatora jest równa [4]

$$D[\hat{\mathbf{a}}] = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}. \quad (6)$$

Obliczenie elementów macierzy $D[\hat{\mathbf{a}}]$ wymaga, znajomości wariancji σ^2 pojedynczego pomiaru. Nieobciążony estymator S^2 wariancji σ^2 równy jest [4],

$$S^2 = RSS / (n - p - 1) = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) / (n - p - 1) \quad (7)$$

gdzie

$$RSS = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\mathbf{a}}) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad (8)$$

jest sumą różnic kwadratów. Na przekątnej macierzy $D[\hat{\mathbf{a}}]$ znajdują się estymatory wariancji poszczególnych parametrów, $\text{var}[\hat{a}_j] = (D[\hat{\mathbf{a}}])_{jj}$, $j = 1, \dots, p$, gdzie symbol $(\mathbf{C})_{ij}$ dla dowolnej macierzy \mathbf{C} , oznacza ij -ty element tej macierzy t.j. $(\mathbf{C})_{ij} = c_{ij}$

3. Testowanie wartości parametrów wielomianu

Przy wyznaczeniu wielomianu ważną rolę odgrywa sprawdzenie hipotezy, że parametry przyjmują pewną założoną wartość, a w szczególności wartość równą zeru. Załóżmy więc że chcemy testować hipotezę, H_0 , że wartość a_q , q -tego parametru, $0 \leq q \leq p$, wielomianu (1) jest równa a:

$$H_0: a_q = a \quad 1 \leq q \leq p. \quad (9)$$

Wprowadzimy notację macierzową. Wtedy hipoteza H_0 przyjmuje formę

$$H_0: \mathbf{Z}_q \mathbf{a} = a, \quad (10)$$

gdzie $\mathbf{Z}_q = [0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0]$, $1 \leq q \leq p$, jest jednowierszową macierzą składającą się z elementów zerowych z wyjątkiem elementu na q -tej pozycji, z_q , który jest równy jeden, $z_q = 1$.

Do testowania hipotezy H_0 założymy dodatkowo, że błędy pomiarów mają rozkład normalny, więc macierz kowariancji wektora obserwacji \mathbf{Y} jest równa $\Sigma = \sigma^2 \mathbf{I}_n$, gdzie σ^2 jest wariancją pojedynczego pomiaru, a \mathbf{I}_n macierzą jednostkową o wymiarze $n \times n$. Fakt ten zapiszemy krótko $\Delta \sim N_n(0, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$.

Hipoteza (10) jest szczególnym przypadkiem ogólnej hipotezy liniowej. Można ją testować za pomocą statystyki F , ([5], str.112, wzór (101)), która dla hipotezy H_0 , (10), jest równa

$$F_{1, n-p-1} = \frac{(\mathbf{Z}_q \hat{\mathbf{a}} - a)^T [\mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T]^{-1} (\mathbf{Z}_q \hat{\mathbf{a}} - a)}{S^2} \quad (11)$$

z 1 oraz $n-p-1$ stopniami swobody; S^2 jest estymatorem wariancji σ^2 określonym wzorem (7). W analizowanym przypadku $\mathbf{Z}_q \hat{\mathbf{a}} = \hat{a}_q$, natomiast wyrażenie $\mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T$ jest liczbą, więc wzór (11) upraszcza się do postaci

$$F_{1, n-p-1} = \frac{(\hat{a}_q - a)^2}{S^2 \mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T}. \quad (12)$$

Niech $\mathbf{C} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$, wtedy

$$\mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T = c_{qq}, \quad q = 0, 1, 2, \dots, p,$$

gdzie c_{qq} jest q -tym elementem przekątnej macierzy \mathbf{C} i statystykę F , (12), można zapisać w prostej formie

$$F_{1, n-p-1} = \frac{(\hat{a}_q - a)^2}{S^2 c_{qq}}. \quad (13)$$

Wzór (13), inną drogą, otrzymał również Zieliński [7].

Jeśli hipoteza H_0 jest prawdziwa, t.j. $a_q = a$, wtedy obserwowana wartość estymatora jest w przybliżeniu równa wartości parametru, a statystyka $F_{1, n-p-1}$ przyjmuje małe wartości. Ponadto można wykazać [4], że

$$E[F_{1, n-p-1}] \approx (n-p-1)/(n-p-3).$$

Wynika stąd, że gdy liczba pomiarów n jest znacznie większa od liczby parametrów $p+1$, $n \gg p$, to

$$E[F_{1, n-p-1}] \approx 1.$$

Z kolei, jeśli hipoteza H_0 nie jest prawdziwa wtedy wartość statystyki F jest duża. Tak więc duże wartości statystyki F ($F \gg 1$) przemawiają za odrzuceniem hipotezy H_0 , natomiast małe wartości, za jej przyjęciem. Należy jeszcze, określić granicę — wartość krytyczną F_{kryt} , taką, że jeśli $F > F_{kryt}$ to hipotezę H_0 należy odrzucić.

Wartość krytyczną F_{kryt} można odczytać z tablic rozkładu Fishera. Zakłada się, w tym celu poziom istotności α (zwykle $\alpha = 0.05$ lub 0.01) i dla stopni swobody równych 1 i $n-p-1$ odczytuje wartość F_{kryt} . Np. dla $\alpha = 0.05$ i $n-p-1=12$ $F_{kryt} = F_{1,12}(0.05) = 4.75$.

4. Wyznaczenie statystyki F

Wyznaczenie statystyki F , wzór (12), wymaga obliczenia trzech jej składników S^2 , \hat{a}_q i $\mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T$. Wartość S^2 obliczamy ze wzoru (7) natomiast \hat{a}_q z (5), \hat{a}_q jest q -tym elementem wektora $\hat{\mathbf{a}}$. Określmy teraz sposób obliczenia wartości trzeciego elementu $\mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T$.

Przypomnijmy że

$$\mathbf{Z}_q (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{Z}_q^T = c_{qq}, \quad q = 0, 1, \dots, p, \quad (14)$$

gdzie c_{qq} jest q -tym elementem przekątnej macierzy $\mathbf{C} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$, $c_{qq} = (\mathbf{C})_{qq}$. Głównym problemem numerycznym obliczania statystyki F (wzór (13)) jest wyznaczenie macierzy $\mathbf{C} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ — czyli odwrócenie macierzy $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})$.

Macierz \mathbf{C} ma wymiar $(p+1) \times (p+1)$ i dla $p > 5$ charakteryzuje się złym uwarunkowaniem [3], co oznacza dużą wrażliwość na błędy obliczeń numerycznych. Dlatego zaleca się stosowanie specjalnych algorytmów. Łatwo sprawdzić, że $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną, więc można stosować skuteczne algorytmy obliczeniowe takich macierzy, np. faktoryzację Cholecky'ego.

Dodatkowy sposób poprawy dokładności obliczeń numerycznych przedstawił autor w pracy [8]. Polega on na rozłożeniu macierzy $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ na bloki i wykorzystaniu techniki odwracania macierzy blokowych.

Niech

$$\mathbf{X} = [\mathbf{1}_n, \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_p] = [\mathbf{1}_n, \mathbf{X}_{1p}], \quad (15)$$

gdzie $\mathbf{1}_n = [1, 1, \dots, 1]^T$ jest jednokolumnową macierzą, która powstaje z pierwszej kolumny macierzy \mathbf{X} ; $\mathbf{X}_1 = [x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1}]^T$, $\mathbf{X}_2 = [x_{12}, x_{22}, \dots, x_{n2}]^T$, ..., $\mathbf{X}_p = [x_{1p}, x_{2p}, \dots, x_{np}]^T$ są kolejnymi

kolumnami macierzy X , natomiast $X_{1p} = [X_1, X_2, \dots, X_p]$. Zdefiniujmy wektor

$$\bar{x} = [\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_p]^T, \quad (16)$$

którego elementami są średnie poszczególnych kolumn macierzy X , tj

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^j, j=1, 2, \dots, p. \quad (17)$$

Z tej definicji wynika

$$\mathbf{1}_n^T \mathbf{1}_n = n \quad \text{oraz} \quad \mathbf{1}_n^T X_{1p} = n\bar{x}^T, \quad (18)$$

więc

$$X^T X = \begin{bmatrix} n & n\bar{x}^T \\ n\bar{x} & X_{1p}^T X_{1p} \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Do obliczenia odwrotnej macierzy $X^T X$ zastosujemy metodę macierzy blokowych [8], skąd otrzymuje się wyrażenie

$$(X^T X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{n} + \bar{x}^T V^{-1} \bar{x} & -\bar{x}^T V^{-1} \\ -V^{-1} \bar{x} & V^{-1} \end{bmatrix}. \quad (20)$$

Obliczanie odwrotności macierzy $X^T X$ zostało zastąpione obliczaniem odwrotnej do macierzy V , która ma mniejszy rozmiar. Elementy macierzy V można obliczyć ze wzorów [8]

$$v_{jk} = \sum_{i=1}^n (x_i^j - \bar{x}_j)(x_i^k - \bar{x}_k), j, k=1, 2, \dots, p. \quad (21)$$

Kładąc

$$U = [u_{jk}] = V^{-1} \quad (22)$$

otrzymuje się wyrażenie pozwalające obliczyć trzeci element c_{qq} statystyki F

$$c_{qq} = u_{qq} \quad \text{dla } q=1, 2, \dots, p \quad (23)$$

oraz

$$c_{00} = \frac{1}{n} + \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p u_{jk} \bar{x}_j \bar{x}_k \quad \text{dla } q=0. \quad (24)$$

Można wykazać że V jest macierzą symetryczną i dodatnio określoną, więc rekomendowaną procedurą do obliczenia odwrotnej jest dekompozycja Cholecky'ego [4].

5. Wyznaczanie stopnia wielomianu

Istnieje kilka metod wyznaczania stopnia wielomianu. Najbardziej znanymi są: *kryterium Akaike'a*, *metoda selekcji w przód* (SP) i *metoda wstecznej eliminacji* (WE). Kryterium Akaike, oparte jest na analizie funkcji wiarygodności, co ogranicza jej zastosowanie w praktyce. Omówimy obecnie dwie pozostałe metody.

Metoda selekcji w przód polega na kolejnym dopasowywaniu wielomianów do danych. Najpierw dla minimalnego stopnia, zwykle $p = p_{\min} = 1$, a następnie dla $p = p_{\min} + 1$, $p = p_{\min} + 2$, ...

Za każdym razem obliczamy wartość różnicowej sumy kwadratów, $Q_i = \text{RSS}$, (wzór (8)). W idealnym przypadku, gdy rzeczywistym modelem analizowanego obiektu jest wielomian stopnia p , ciąg wartości $\{Q_i\} = Q_1, Q_2, Q_3, \dots$ szybko maleje aż do elementu Q_p i dalej zmienia się nieznacznie. Ten punkt stabilizacji wskazuje na stopień wyznaczanego wielomianu. W przypadku pojawienia się wątpliwości, należy wykorzystać test istotności, testując wartość najwyższego współczynnika ostatniego wielomianu. Jednakże procedurę tę należy stosować ostrożnie ponieważ może ona prowadzić do błędnych wyników. Na przykład "dopasowując" wielomian do w przybliżeniu symetrycznej funkcji współczynniki o nieparzystych numerach będą miały małe wartości w porównaniu ze współczynnikami o parzystych numerach i mogą być nieistotne. Ciąg $\{Q_i\}$, będzie się na przemian stabilizował i znacznie się zmniejszał. Mogą pojawić się również sytuacje, gdy ciąg różnicowych sum kwadratów $\{Q_i\}$ stabilizuje się na określonym poziomie przez kilka kolejnych elementów, aby potem ponownie istotnie się zmniejszyć. W przypadku pojawienia się wątpliwości należy się odwołać do metody (WE), która bazuje na statystyce F omówionej niżej.

Metoda wstecznej eliminacji bazuje na omówionej w poprzednich punktach statystyce F . Procedurę zaczynamy od dopasowania wielomianu o możliwie najwyższym stopniu p . Następnie testujemy hipotezę H_0 , przy użyciu statystyki F badając czy współczynnik a_p , przy najwyższej potędze równy jest zeru, $a_p = 0$. Jeśli wynik testu jest pozytywny to najwyższy współczynnik eliminujemy obniżając stopień wielomianu o jeden. Procedurę powtarzamy kolejno dla wielomianu o coraz niższym stopniu, aż do momentu otrzymania negatywnej odpowiedzi, tzn gdy akceptujemy alternatywną hipotezę H_1 , $a_p \neq 0$. Przyjmujemy, że aktualna wartość p jest właściwym stopniem wielomianu. Pozostało jeszcze skontrolowanie wartości pozostałych współczynników i jeśli np. jeden z nich, lub więcej, jest bliski zeru, to należy sprawdzić hipotezę, czy można przyjąć, że jest on równy zeru. Sprawdzenie to można dokonać przy pomocy ogólnej formy statystyk F , wzór (12).

6. Analiza porównawcza obu metod

Jak wspomniano, nawet w przypadku gdy wielomian jest właściwym modelem obie metody mogą dać rozbieżne wyniki. Ponadto dopasowywany wielomian jest tylko przybliżeniem rzeczywistych relacji co powoduje dodatkowe komplikacje. Dlatego ważnym zadaniem jest ocena "skuteczności" obu metod wyznaczania wielomianu dopasowanego do danych i podjęcie próby określenia ich zakresu zastosowań.

Dla realizacji sformułowanego wyżej celu opracowany został specjalizowany program komputerowy [6] działający w środowisku Matlab. Program wyznacza modele wielomianowe obu metodami dla zadanych danych. Pozwala na symulacyjne badania poprzez generację wyników eksperymentu dla założonego wielomianu, symulowanie różnego rodzaju błędów pomiarowych zarówno szumy losowe jak i obciążenia systematyczne. Ważną zaletą programu jest wszechstronna prezentacja graficzna otrzymanych wyników, zarówno bezpośrednio jak i w formie analizy reziduów (reszt). Wykorzystując ten program przeprowadzono badania, których wyniki i płynące stąd wnioski przedstawimy teraz krótko.

Wstępne badania wykazały, że do analizy skuteczności obu metod najlepiej nadają się modele wielomianowe piątego lub zbliżonego stopnia. Zakres zmian argumentu niezależnego ograniczono do przedziału liczbowego $\langle -1, 1 \rangle$, upraszcza to analizę, a wnioski są uniwersalne.

Rozpocznijmy od prezentacji wyników badań wpływu poziomu szumów pomiarowych na skuteczność obu metod. Zakładano wartości współczynników wielomianu, zwykle piątego stopnia, na przykład $y = f(x) = 0.5 - x + 0.5x^2 + x^5$, (wektor współczynników $a = [0.5, -1, 0.5, 0, 0, 1]^T$). Wyniki obserwacji generowane były ze wzoru $Y_i = f(x_i) + \Delta_i = y_i + \Delta_p$ gdzie

przyjmowano różny poziom szumów pomiarowych Δ_i charakteryzowanych odchyleniem standardowym σ ($\text{var}[\Delta_i] = \sigma^2$). Dla każdego założonego wielomianu i poziomu odchylenia standardowego σ losowano wyniki obserwacji i wyznaczano wielomian obu metodami. Wyniki badań wykazały, że dla $\sigma < 0.04$ obie metody wyznaczały za każdym razem poprawnie stopień wielomianu, a ze wzrostem wartości odchylenia standardowego σ procent poprawnie wyznaczonych stopni wielomianu malał opadając poniżej sensownej granicy użyteczności 10%, dla metody (WE), gdy $\sigma = 0.19$ oraz dla metody SP, gdy $\sigma = 0.15$. Metoda (WE) charakteryzuje się więc istotnie mniejszą wrażliwością na błędy losowe. Na podstawie tych badań przyjęto, że odchylenie standardowe $\sigma = 0.07$ jest graniczną wartością dla której odsetek błędnie wyznaczonych stopni wielomianu jest pomijalnie mały i dla tej wartości badano różnice między wartościami parametrów wyznaczonych obu metodami. A oto przykładowy i zarazem reprezentatywny wynik:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= [-0.5, -2, 1, 0, 0, 1]^T, \\ \mathbf{a}_p &= [-0.489, -1.807, 0.855, -0.746, -0.164, 1.613]^T, \\ \mathbf{a}_w &= [-0.466, -1.992, 0.929, 0, 0, 1.018]^T, \end{aligned}$$

gdzie \mathbf{a} jest wektorem założonych parametrów, \mathbf{a}_p jest wektorem estymat otrzymanych metodą SP i \mathbf{a}_w wektorem estymat otrzymanych metodą (WE). Jak widać, z wyjątkiem wyrazu wolnego, a_0 , gdzie metoda SP dała dokładniejszy wynik, dla wszystkich pozostałych parametrów metoda WE dostarcza istotnie dokładniejsze estymaty. To przemawia za metodą WE

Analogiczne badania przeprowadzono dla pomiarów niejednakowej dokładności. Zakładano w nich, że odchylenie standardowe σ obserwacji Y_i rośnie proporcjonalnie do wartości mierzonej, począwszy od założonego poziomu. Zakładano, że pomiary nie są skorelowane. Parametry estymowano stosując uogólnioną metodę najmniejszych kwadratów (takie możliwości ma omówiony wyżej program komputerowy). Otrzymane wyniki potwierdziły wnioski z poprzednich badań, że metoda WE znacznie częściej daje poprawny wynik niż metoda SP.

Następnym kierunkiem badań było porównanie efektywności obu metod w przypadku występowania błędów systematycznych (oprócz losowego szumu pomiarowego). Skupiono się na jednym rodzaju błędów, a mianowicie o charakterze sinusoidalnym. Wynika to z faktu, że często pomiary zakłócone są siecią energetyczną. Przeprowadzono szereg eksperymentów z których wynika, że błędy systematyczne mogą w istotny sposób zakłócić proces wyznaczania modeli i dla uniknięcia ich wpływu zakłócenie sinusoidalne powinno mieć przynajmniej cztery okresy (dla obu metod). Końcowy wniosek z badań jest taki, że obie metody wykazują zbliżoną efektywność, przy czym metoda WE daje lepsze wyniki w przypadku zakłóceń sinusoidalnych o mniejszej amplitudzie a metoda SP przy większej.

7. Wyznaczanie modelu czujnika Pt 100

Postanowiono sprawdzić skuteczność obu metod na rzeczywistym obiekcie i wybór padł na rezystancyjny czujnik temperatury Pt100. Zależność rezystancji R_t wyrażonej w Ω od temperatury t wyrażonej w $^{\circ}\text{C}$ aproksymowana jest następującym wielomianem [9]

$$R_t = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4, \quad (25)$$

gdzie

$$\begin{aligned} a_0 &= 100, a_1 = 0.39083, a_2 = -5.775 \times 10^{-5}, \\ a_3 &= 4.183 \times 10^{-8} \text{ jeśli } t < 0 \text{ i } a_3 = 0 \text{ jeśli } t > 0, \\ a_4 &= -4.183 \times 10^{-10} \text{ jeśli } t < 0 \text{ i } a_4 = 0 \text{ jeśli } t > 0. \end{aligned}$$

Model jest więc funkcją sklejaną składającą się z dwóch wielomianów jeden drugiego stopnia dla temperatur dodatnich, a

drugi czwartego stopnia dla temperatur ujemnych. Sprawdzimy jakie modele (wielomiany) otrzyma się stosując opisane metody. Do obliczeń numerycznych wykorzystano dane z Polskiej Normy PN-59/M-53852. Zakres temperatur od -225°C do $+550^{\circ}\text{C}$, ze skokiem co 5°C .

Dla ujemnych temperatur stosując metodę WE otrzymuje się wielomian szóstego stopnia o parametrach:

$$a_0 = 100, a_1 = 0.4007, a_2 = 3.759 \times 10^{-4}, a_3 = 8.416 \times 10^{-6}, \\ a_4 = 7.756 \times 10^{-8}, a_5 = 3.454 \times 10^{-8}, a_6 = 5.845 \times 10^{-13},$$

natomiast metodą SP wielomian ósmego stopnia o parametrach:

$$a_0 = 100, a_1 = 0.3916, a_2 = -1.61 \times 10^{-4}, a_3 = -2.991 \times 10^{-6}, a_4 = -1.734 \times 10^{-8}, \\ a_5 = 2.699 \times 10^{-10}, a_6 = 3.959 \times 10^{-12}, a_7 = 1.849 \times 10^{-14}, a_8 = 3 \times 10^{-17}.$$

Dla dodatnich temperatur stosując metodę WE otrzymuje się wielomian szóstego stopnia o parametrach

$$a_0 = 99.99, a_1 = 0.392, a_2 = -8.626 \times 10^{-5}, a_3 = 2.606 \times 10^{-7}, a_4 = -1.047 \times 10^{-9}, \\ a_5 = 1.902 \times 10^{-12}, a_6 = -1.281 \times 10^{-15},$$

natomiast metodą SP wielomian drugiego stopnia o parametrach

$$a_0 = 99.98, a_1 = 0.3912, a_2 = -5.873.$$

Tak więc obie metody dają różne wyniki, ponadto wyniki te różnią się od modelu (25) proponowanego w literaturze. Co ciekawe wystąpiła zbieżność jednego wyniku, a mianowicie stosując metodę SP dla dodatnich temperatur otrzymaliśmy ten sam stopień wielomianu jaki jest we wzorze (25) – jednakże przy różnych wartościach współczynników. Może to świadczyć, że model (25) otrzymano metodą SP. Metoda ta jak wynika z przeprowadzonych badań jest mniej efektywna niż metoda WE. Należy tu podkreślić, że dla dodatnich temperatur ciąg różnicowych sum kwadratów $\{Q_i\}$ maleje szybko do $i = 2$ i dalej wolno i w przybliżeniu jednostajnie, stąd określenie stopnia wielomianu metodą SP nie jest jednoznaczne. Końcowy wniosek jest taki, że poprawne określenie wielomianu modelującego charakterystykę czujnika Pt100 wymaga głębszej analizy, dokładniejszych danych i stosowania jednocześnie obu metod.

7. Podsumowanie

Z przeprowadzonej analizy wynika, że żadna z analizowanych metod nie gwarantuje sukcesu w różnych złożonych sytuacjach praktycznych. Na ogół bardziej skuteczna jest metoda WE i ona powinna być brana jako podstawa. Jednak najlepiej zastosować obie metody i w przypadku różnych wyników zastosować inne podejście, a w szczególności analizę reszt.

8. Literatura

- [1] P. G. Hoel, On testing for the degree of a polynomial, *Technometrics*, **10**, 1968.
- [2] A. Muciek: Wyznaczanie stopnia wielomianu aproksymującego wyniki pomiarów, Konferencja PPM'05, Ustroń, 8-12 maja 2005.
- [3] J. Told, Computational problems concerning the Hilbert matrix, *J. Res. Nat. Bur. St.*, **65**, 1961.
- [4] G. A. F. Seber, *Linear Regression Analysis*, John Wiley & Sons, New York 1977.
- [5] S. E. Searle, *Linear Models*, Wiley & Sons, New York 1971.
- [6] D. Rejczak, Wyznaczanie modelu wielomianowego dopasowanego do wyników pomiarów, Praca dyplomowa, Pol. Wrocławska 2006.
- [7] R. Zieliński, *Wybrane zagadnienia optymalizacji statystycznej*, PWN Warszawa 1974.
- [8] A. Muciek, On Determination of Polynomials Approximating Measurement Results, Krajowy Kongres Metrologii, Wrocław 2004.
- [9] <http://picotech.com/applications/pt100.html>.