

最优化原理在实验数据的回归 分析和绘图中的应用

蔡 颀

(基础课部)

前 言

最优化问题普遍存在于国民经济各部门和科学技术的各个领域,最优化原理和方法也是一门重要的数学理论分支,这就决定了它应用的广泛性和发展的巨大潜力。

在实验数据的处理过程中大量遇到的问题是如何寻求两个或几个变量之间的相关关系,以往实验教学所介绍的作图法和图解法大多局限于直观定性的估价,这样绘制的函数曲线和图解求得的参数任意性较大,往往人为引入很大的误差,因而不能适应教学和科研的需要。

回归分析是一种利用最小二乘法原理处理变量之间相关关系的数理统计方法,其实质也是一个如何选择最佳方案去拟合函数曲线的最优化问题。随着微机的普及,逐步引导学生掌握这种有效的数据处理方法是很有必要的。

本文比较系统地介绍了最优化原理在实验数据的回归分析及绘图中的应用,本文在我院教学实践中虽然涉及的是物理问题,使用的是 LASER310微机、PP40 打印绘图机和BASIC语言,但解决问题的原理和途径是具有普遍意义的。

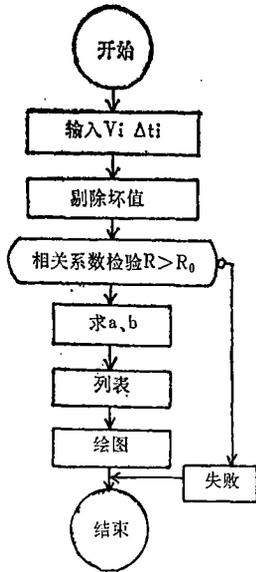
1 一元线性回归

设物理量 Y 、 X 之间近似为线性关系(包括那些通过变换可以“改直”的非线性关系^[1]),即 $Y = a + bX$,又由实验观测到 N 组对应的数据 $(X_i, Y_i) (i = 1, 2, \dots, N)$,则根据最小二乘法可求得最佳参数 a 、 b 为^[1]

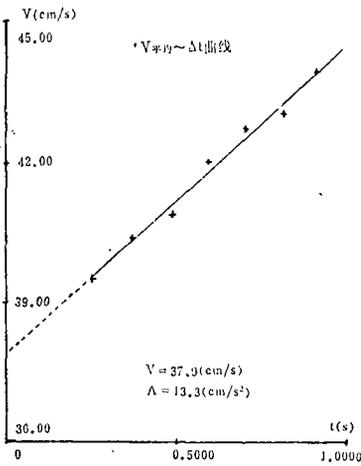
$$b = \frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}$$

$$a = \bar{Y} - b\bar{X}$$

其中 $\bar{X} = 1/N \sum_{i=1}^N X_i, \bar{Y} = 1/N \sum_{i=1}^N Y_i$



(a)流程图



(b) $\bar{v} \sim \Delta t$ 曲线

图 1 气垫导轨实验的 $\bar{v} \sim \Delta t$ 图

为了对实验的质量进行检验和控制，在程序中通常先要对输入的原始数据实施坏值剔除（可用肖维勒方法或 t 检验法^[2]）和相关系数检验^[1]，以气垫导轨实验的 $\bar{v} \sim \Delta t$ 图为例，完整的程序框图及打印样品如图 1 所示。

2 多项式回归和多元线性回归

任何非线性函数只要连续、可导，都可在一定范围内展开为收敛的泰勒级数，这意味着函数至少在一个较小的邻域内可用多项式任意逼近，即

$$Y = b_0 + b_1 X + b_2 X^2 + \dots + b_k X^k$$

如果把 X 的不同幂次定义为若干新的自变量，即令

$$X_1 = X, X_2 = X^2, \dots, X_k = X^k$$

则上述多项式回归也可转化为多元线性回归问题

$$Y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_k X_k$$

根据最小二乘法和实验数据可求得确定系数的线性方程组，再应用高斯消元法解出系数值，这就是多项式回归和多元线性回归的基本原理和主要步骤^[1]。

现以二极管伏安特性曲线为例，说明在应用多项式回归编程绘图中可能遇到的一些实际

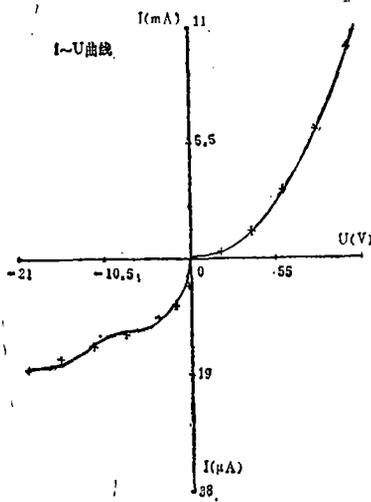


图2 反向曲线形态不理想

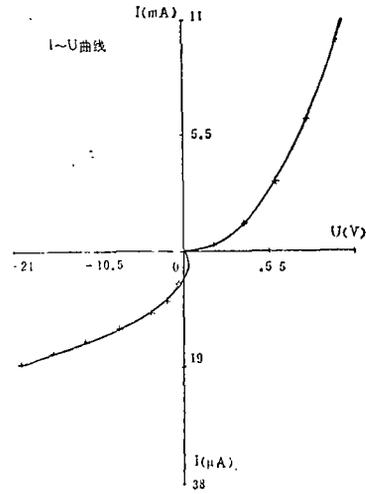


图3 反向曲线进入禁区

问题和解决方法。

2.1 应考虑实际物理过程所施加的约束条件

孤立起来看,多项式回归纯粹是一个数学问题,当实验的散点图确定以后,多项式回归的任务仅仅是按照既定的数学模式求得最佳的系数分布和相应的函数曲线,如果不考虑物理过程的约束条件,有时可能产生荒谬的结果。

2.1.1 回归曲线的形态与实际物理过程不符(图2) 这种情况主要发生于反向区域,原因在于反向函数泰勒展开式的收敛速度较慢,即在满足一定离差条件下所需多项式的幂次较高,因此造成曲线出现不应有的弯曲。

本文是采用变量转换的方法解决这个问题,不难发现,只要将坐标轴 I 、 U 互换(即将 I 作为自变量而将 U 展开为 I 的多项式进行回归),则反向曲线的形态与正向是相当近似的,实践表明,这样处理的结果既大大减小了散点离差,也降低了幂次。

2.2.2 回归曲线有时会通过物理“禁区”(图3) 从物理意义上来说,给二极管加正向(或反向)电压是不可能出现反向(或正向)电流的,但在原点附近区域,曲线的斜率或者极大或者趋于零,致使难以进行多点精确测量,这样往往造成实验点的间距较大,回归曲线的极点有可能进入“禁区”。

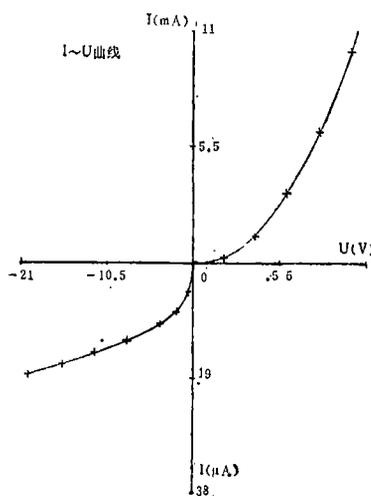
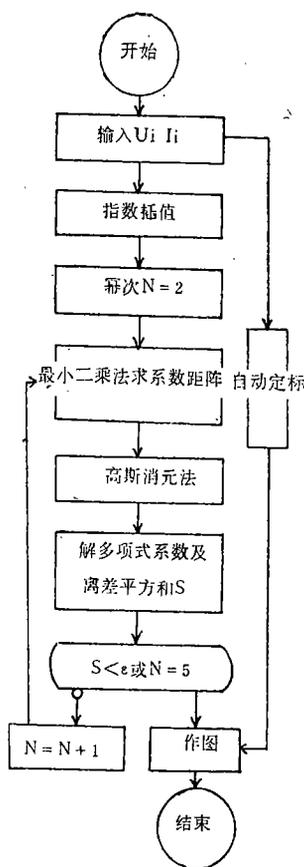
本文针对上述测量条件方面的限制采用了指数插值来解决这个问题,可以认为,在原点附近区域,二极管的 $I \sim U$ 相关关系近似为指数规律 $I = A(e^{BU} - 1)$ (正向)或 $U = A(e^{BI} - 1)$ (反向),这样,根据最接近原点的两个实验点的测值就可确定参数 A 、 B ,然后在第一个实验点与原点之间按照指数规律插入若干假想的实验点并与实测的数据一起参与多项式回归,这样进行处理既解决了问题,物理意义也比较合理。

2.2 通常应限制多项式回归的幂次 $n \leq 5$

幂次太高,不仅耗费大量运算时间,曲线形态也不一定理想,而且易受微机有效数字位数的限制而引入很大的计算误差,本文计算表明,随着幂次的增高,解得的多项式各项的系数往往数值很大而符号各异,这样一类数值相近的大数之间的加减运算容易“丧失”有效数字,甚至有时会产生取的幂次越高、离差反而越大的现象。

完整的二极管 $I \sim U$ 曲线的框图及打印曲线如图 4 所示。

综上所述，多项式回归尽管从理论上来说可以无限逼近任意一种相关曲线，但由于受计算机运算速度、有效数字及物理过程约束条件的限制，它也只能解决一部分回归问题，而对于相关关系比较复杂的情况则无能为力了。



(a) 流程图

(b) $I \sim U$ 曲线

图 4 二极管伏安特性曲线图

3 多维最优化问题的回归分析

有一类曲线形态比较复杂的回归问题虽然不宜采用多项式回归，但变量之间的函数关系的类型是明确的，以单缝实验中的相对光强分布曲线为例，根据理论公式可知

$$I = I_0(\sin u / u)^2$$

其中 I_0 为主极大光强， I 为衍射角为 u 处的光强。

在衍射角很小的情况下，根据主极大与次极大衍射角之间的关系，可将自变量 u 转换为屏上位置 X ，即

$$u = 1.43\pi(X - X_0) / (X_1 - X_0)$$

其中 X_0 、 X_1 分别为主极大和次极大在屏上的位置。又考虑到暗室的背景亮度 I' 不可能绝对为零，因此实际的回归方程可表示为

$$I^* = I_0 \left[\frac{\sin 1.43\pi(X - X_0)/(X_1 - X_0)}{1.43\pi(X - X_0)/(X_1 - X_0)} \right]^2 + I'$$

从上式可知，只要 I_0 、 I' 、 X_0 、 X_1 四个参数已知，则 $I^* \sim X$ 函数曲线唯一地被确定，因此，问题的核心就是如何选择一组最佳参数使得所有的实验点 (X_i, I_i) ($i = 1, 2, \dots, N$) 与理论曲线的离差平方和 S 取极小值，由于 $S = \sum_{i=1}^N (I_i - I_i^*)^2$ 是 I_0 、 I' 、 X_0 、 X_1 的多元非线性函数，所以这是不同于多项式回归的另一类最优化问题——多维无约束极值问题^[3]，考虑到目标函数 S 的求导运算比较困难，以下均采用直接方法进行求解。

3.1 一维最优化问题的直线搜索法

对输入的实验数据进行初步处理即可得到 I_0 、 I' 、 X_0 、 X_1 的初始值，可以认为，在初值的附近， S 分别是 I_0 、 I' 、 X_0 、 X_1 的单谷函数，在此基础上首先应掌握一维直线搜索的基本方法，直线搜索不仅用于寻找一维问题的极值点，而且也是解决多维问题的基础，其主要步骤如下。

3.1.1 用进退算法确定搜索区间 搜索区间太大，则搜索进程太慢，而且有可能不满足单谷条件，区间太小又有可能把极值点排除在外，本文采用常用的进退算法确定搜索区间^[3]。

3.1.2 直线搜索的抛物线插值法 对于目标函数难于求导的情况，通常用黄金分割法和抛物线插值法进行搜索^[4]，本文的实践表明，对于单缝实验的 S 这样连续性较好的目标函数，后者的搜索效率远远高于前者，在同样的终止条件下，抛物线插值各需迭代一二次即可满足，而黄金分割法往往迭代五六次以上。

抛物线插值法的程序框图如图 5 所示，图中以 t 代表搜索方向的坐标值，在每个搜索区间 $\{t_1, t_2, t_3\}$ 均满足 $t_1 < t_2 < t_3$ 和 $S(t_1) > S(t_2) < S(t_3)$ ，通过插值公式可求得极小点

$$t_4 = [(t_2^2 - t_3^2)s_1 + (t_3^2 - t_1^2)s_2 + (t_1^2 - t_2^2)s_3] / 2[(t_2 - t_3)s_1 + (t_3 - t_1)s_2 + (t_1 - t_2)s_3]$$

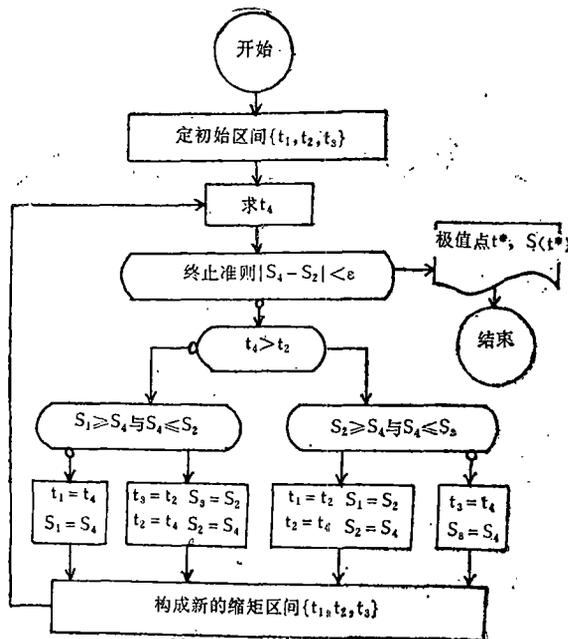


图 5 抛物线插值法框图

3.2 POWELL方向加速法

多元函数求极值的问题远比一元函数复杂得多，在求解多维无约束极值问题的直接方法中最简单的是坐标轮换法^[3]，即在每一轮迭代中都依次沿 n 维空间固定的各坐标轴方向进行直线搜索，显然，由于对每轮搜索的方向没有任何筛选，这种迭代式收敛的速度是较慢的。

POWELL 方向加速法是最有效的一种直接方法^[3]，它本质上属于共轭方向法，共轭方向的概念是在研究具有正定矩阵的 n 元二次函数的极小值问题时产生的，可以证明，从任意初始点出发，沿着 n 个共轭方向进行直线搜索就可以求得目标函数的极小值，根据泰勒展式可知，一般的非二次函数均可用二次函数来近似，因此，上述方法也可以推广应用于非二次函数。POWELL 法的基本思路是通过每轮迭代逐次构造出共轭方向并在下轮迭代中用以替换原坐标向量中较差的方向，这样进行的搜索可以加速逼近目标函数的极小值。

以单缝为例，由于迭代中不存在线性相关的问题，本文采用了 POWELL 基本方法，其迭代过程如下：

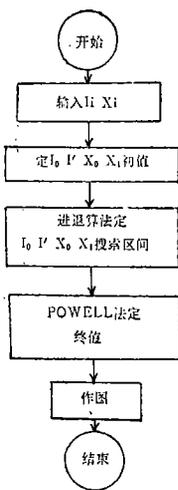
3.2.1 第一轮迭代 以 I_0, I', X_0, X_1 的初值为起点，在四维空间中记为 \vec{P}_0 ，用 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3, \vec{e}_4$ 代表 I_0, I', X_0, X_1 四个线性无关方向的单位向量。

以 \vec{P}_0 为起点，依次沿 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3, \vec{e}_4$ 方向进行直线搜索并到达终点 \vec{P}_0^* ，再以 \vec{P}_0^* 为起点，沿 $\vec{e}_1^* = \vec{P}_0^* - \vec{P}_0$ 方向作直线搜索到 \vec{P}_1 点。

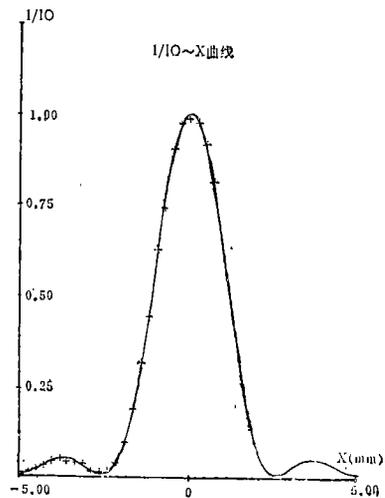
3.2.2 第二轮迭代 以 \vec{P}_1 为起点，用 \vec{e}_1^* 替换 \vec{e}_1 ，然后依次沿 $\vec{e}_2, \vec{e}_3, \vec{e}_4, \vec{e}_1^*$ 方向进行搜索并到达终点 \vec{P}_1^* ，再以 \vec{P}_1^* 为起点，沿 $\vec{e}_2^* = \vec{P}_1^* - \vec{P}_1$ 方向搜索到达 \vec{P}_2 点。

3.2.3 类似上法进行第三、第四轮迭代后，即可近似求得最佳参数 I_0, X_0, X_1

单缝 $I/I_0 \sim X$ 曲线的程序框图及打印曲线如图 6 所示。



(a) 流程图



(b) $I/I_0 \sim X$ 曲线

图 6 单缝 $I/I_0 \sim X$ 图

应指出,为保障 I_0, I', X_0, X_1 的初值不致偏离全局的最优点太远且 S 在初值附近均为 I_0, I', X_0, X_1 的单谷函数,测量间距不宜太大,特别是在各极值点附近应作精细测量。

物理实验中还有一些多维无约束极值的最优化问题也可以用类似的方法解决,例如长直载流螺线管轴线上磁场分布的 $B \sim X$ 曲线,根据理论公式 $B = \frac{1}{2} \mu_0 n I (\cos \beta_1 - \cos \beta_2)$ ^[5]和实验数据,经变换可转化为三维无约束的极小值问题,用上述方法进行处理得到的打印曲线如图7所示。

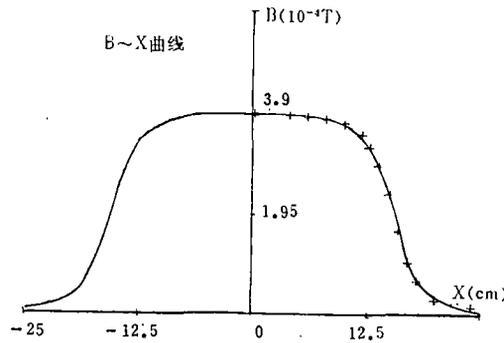


图7 长直载流螺线管 $B \sim X$ 图

4 结 论

在我院物理实验两年来的实践证明,本文根据最优化原理编制的回归程序,其运算和绘图效果均是比较理想的,但是应该指出,这方面的工作还有待进一步完善和提高,另外,上述种种方法并不能解决所有的回归问题,例如,对于象弗兰克—赫兹实验所测得的那种既缺乏明确的函数形式、曲线形态又过于复杂的情况就难以处理了。当然,如果我们的目的仅仅是再现曲线的形态而不在于寻求其准确的函数形式,那么,这类问题也可以通过给微机配以信号自动连续采集、转换、绘图等装置的办法来解决(这已不属于回归分析的范畴)

在本文的工作中,曹家骏副教授提出了不少有益的建议,在此表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] 中国科学院数学研究所数理统计组.回归分析方法.北京:科学出版社,1975
- [2] 龚镇雄.普通物理实验数据处理.西安:西北电讯工程学院出版社,1985
- [3] 余俊,廖道训.最优化方法及其应用.华中工学院出版社,1983
- [4] 薛嘉庆.最优化原理与方法.北京:冶金工业出版社,1983
- [5] 赵凯华,陈熙谋.电磁学.北京:高等教育出版社,1978:282

A8802(9)

碘化汞络合物冷原子荧光光谱分析间接测定碘《无锡轻工业学院学报》1988年,第7卷,第2期

关键词 间接测定碘;冷原子汞原子吸收光谱;碘化络合物

摘要 研究了在高酸度时碘化汞络合物(HgIn, n=1,2,3,4)对汞吸收强度的抑制,用冷原子汞原子吸收光谱间接测定的方法。本方法的特征含量(相当于0.0044吸光度)和检测限分别为 1.1×10^{-8} 和 5×10^{-8} 克碘。碘量在0.05—0.20微克范围内,对汞吸收光度的降低成线性。研究了某些贵金属和其它卤素对测定碘的干扰。用此方法成功地测定了美国国家标准局(NBS)标准参考物质牡蛎纤维和柠檬叶,以及挪威鱼肝油中的碘含量。

作者:孙福生

A880210

二元混合表面活性剂在固液界面上的协同效应《无锡轻工业学院学报》1988年,第7卷,第2期

关键词 协同效应;表面活性剂;固液界面

摘要 本文介绍了以非离子(AEO₉, AEO₃, TX10)和阴离子(C₁₂H₂₅SO₃N₂)表面活性剂组成的二元混合物,在固液界面上存在着十分活跃的增加作用。在Y_{LIV}为0.04牛/米时,C₁₂H₂₅SO₃Na-AEO₉二元混合物在Teflon表面上的粘附自由能,在很宽的区域内呈现稳定的增加作用。与气液界面的协同效应对比,二元混合物在固液界面上的增加作用出现更为频繁而且形式多样。这对润湿剂工业配方提供了依据。

作者:沈京富 袁学易

A880211

高速并条机若干问题剖析《无锡轻工业学院学报》1988年,第7卷,第2期

关键词 并条机;压力棒;集束器;摩擦力界;曲线牵伸;空气加压;弹簧加压

摘要 本文就压力棒牵伸的特点作了分析。并以CHERRY-400MT并条机为例,说明压力棒在三牵伸区中的合理位置。还从振动的概念出发,分析了空气加压与弹簧加压的罗拉轴口压力稳定性问题。通过计算表明,空气加压能扩大皮辊直径的使用范围。此外,对CHERRY并条机集束器的结构作了初步探讨。

作者:刘国涛 顾乃森

A880212

最优化原理在实验数据的回归分析和绘图中的应用《无锡轻工业学院学报》1988年,第7卷,第2期

关键词 最优化原理;回归分析;最小二乘法;Powell方法

摘要 本文介绍了最优化原理在实验数据的回归分析和绘图中的应用。根据最小二乘法原理和Powell方向加速并使使用了微机绘图系统,对一元线性回归、多项式回归和多元无约束极值问题进行了定量计算和曲线拟合,提高了作图法处理实验数据的准确性。

作者:蔡 鲲

AN INDIRECT DETERMINATION OF IODINE BY USING HgI₂ COMPLEXES AND GOLD VAPOUR ATOMIC ABSORPTION ANALYSIS OF MERCURY < Journal of the Wuxi Institute of Light Industry > Vol.7, No.2, 1988

ABSTRACT

An indirect method of determination of iodine by using the formation of iodine mercury complexes (HgI₂, n=1,2,3,4) and cold vapour atomic absorption analysis of mercury is studied. The characteristic content (equal 0.0044 absorbance) and the detection limit of the method are 1.1X10⁻⁸ and 5X10⁻⁸g iodine respectively. The decrease of absorbance of mercury is linear in the iodine content range 0.05-0.20 mg. The effects of some noble metal and other halogens are studied. This method is applied successfully to the determination of iodine content of oyster tissue and lemon leaves.

SUBJECTWORDS

indirect determination of iodine; iodine-mercury complexes

Author: Sun Fusheng; Kasre Julsham

A880211

ANALYSES OF SOME PROBLEMS OF HIGH SPEED DRAWFRAME < Journal of the Wuxi Institute of Light Industry > Vol.7, No.2, 1988

ABSTRACT

This paper analyses the features of the press-bar drafting system in theory and, taking CHERRY D-400MT drawing frame for example, illustrates the suitable position of the press-bar in the main drafting zone. This paper also studies the stability of roller nip pressure under air-weighting and spring-weighting in the light of the concept of vibration and according to accounting, makes clear that the diameter of top leather roller can be extended by air-weighting. Finally, the construct of collector is investigated.

SUBJECTWORDS

drawing frame; press-bar; collector; friction field

Author: Liu Guotao; Gu Weikang

SYNERGISM IN BINARY MIXTURE OF SURFACTANTS AT THE LIQUID/SOLID INTERFACE < Journal of the Wuxi Institute of Light Industry > Vol.7, No.2, 1988

ABSTRACT

The binary mixture of surfactants, composed of anionic and nonionics, demonstrated a very active synergism at the Liquid/Solid interface, and the chosen solid phases were the Teflon and Paraffin. It was found that, when r(,iv) was 0.84 mecton/D, the free enthalpy of absorption of AEO(,9)--C(,12) H(,25) SO(,3) Na mixture showed a steady synergism in a wide region at the Teflon plate. Compared with Liquid/Air interface, the different kinds of synergism of the binary mixture of surfactants at Liquid/Solid interface appeared and had many different patterns. In these mixtures, the synergic effect of the nonionic was the major factor.

SUBJECTWORDS

synergism; surfactants; liquid/solid interface

Author: Shen Jingfu; Yuan Xueyi

A880212

THE APPLICATION OF OPTIMIZATION PRINCIPLE IN REGRESSION ANALYSIS OF EXPERIMENT DATA AND PLOTTING < Journal of the Wuxi Institute of Light Industry > Vol.7, No.2, 1988

ABSTRACT

This paper introduces the application of optimization principle in the regression analysis of experiment data and plotting. One-piece linear regression, multinomial regression and multidimensional non-binding extreme value problems have been calculated and from least square method, "Powell" method and microcomputer. Therefore the accuracy of treating experiment data on plotting is improved.

SUBJECTWORDS

optimization principle; regression analysis; least square method

Author: Cai Kun