

УДК: 519.233.5+519.248:53

Новый метод точечной оценки параметров парной регрессии

А. В. Михеев^{1,a}, Б. Н. Казаков^{2,b}

¹Казанский национальный исследовательский технологический университет,

Россия, 420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, 68

²Казанский (Приволжский) федеральный университет,

Россия, 420008, г. Казань, ул. Кремлёвская, 18

E-mail: ^a veehima@gmail.com, ^b bor300@yandex.ru

Получено 16 января 2014 г.,
после доработки 20 февраля 2014 г.

Описывается новый метод отыскания параметров однофакторной регрессионной модели: метод наибольшего косинуса. Реализация метода предполагает разделение параметров модели на две группы. Параметры первой группы, отвечающие за угол между вектором экспериментальных данных и вектором регрессионной модели, определяются по максимуму косинуса угла между этими векторами. Во вторую группу входит масштабный множитель. Он определяется «спрямлением» зависимости координат вектора экспериментальных данных от координат вектора регрессионной модели. Исследована взаимосвязь метода наибольшего косинуса с методом наименьших квадратов. Эффективность метода проиллюстрирована примерами из физики.

Ключевые слова: парная регрессия, точечная оценка, метод наименьших квадратов, двухэкспоненциальная кинетика люминесценции, температура кипения воды, удельное электрическое сопротивление, модель Блоха–Грюнайзена

A New Method For Point Estimating Parameters Of Simple Regression

A. V. Mikheev¹, B. N. Kazakov²

¹Kazan National Research Technological University, 68 Karl Marx st., Kazan, 420015, Russia

²Kazan Federal University, 18 Kremlyovskaya street, Kazan, 420008, Russia

Abstract. — A new method is described for finding parameters of univariate regression model: the greatest cosine method. Implementation of the method involves division of regression model parameters into two groups. The first group of parameters responsible for the angle between the experimental data vector and the regression model vector are defined by the maximum of the cosine of the angle between these vectors. The second group includes the scale factor. It is determined by means of “straightening” the relationship between the experimental data vector and the regression model vector. The interrelation of the greatest cosine method with the method of least squares is examined. Efficiency of the method is illustrated by examples.

Keywords: simple regression, point estimation, method of least squares, two-exponential luminescence decay, boiling point of water, electrical resistivity, Bloch–Gruneisen function

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no. 1, pp. 57–77 (Russian).

Введение

Для определения параметров функциональной зависимости, описывающей релаксацию в оптических системах, Феофилов и др. предложили использовать оригинальный экспериментальный метод, названный ими методом «спрямления» [Толстой, Феофилов, 1950]. На экране осциллографа сравнивались два электрических сигнала. Один из них создавался световым потоком, испускаемым изучаемой оптической системой, и подавался на вертикальную развертку осциллографа, а другой — радиоэлектронным устройством, моделирующим изучаемый релаксационный процесс, и подавался на горизонтальную развертку. Изменяя вручную параметры радиоэлектронного устройства, авторы [Толстой, Феофилов, 1950] добивались того, чтобы на экране осциллографа наблюдалась прямая линия, то есть модельный релаксационный процесс стал пропорционален исследуемому процессу. В этом случае считалось, что математическая модель релаксационного процесса адекватна исследуемому процессу, а ее параметры равны подобранным значениям соответствующих параметров радиоэлектронного устройства. В тех случаях, когда прямая линия не наблюдалась ни при каких сочетаниях параметров радиоэлектронного устройства, математическая модель считалась несоответствующей исследуемому релаксационному процессу.

Этим методом авторы [Толстой, Феофилов, 1950] исследовали наиболее часто встречающиеся в оптической спектроскопии релаксационные процессы, такие как одно- и двухэкспоненциальные процессы, а также гиперболические, следующие закону Беккереля. Разработанные в [Толстой, Феофилов, 1950] схемы радиоэлектронных устройств позволили успешно исследовать типичные релаксационные процессы и определять их параметры.

Метод «спрямления» — это эмпирический метод определения параметров регрессионной модели, который могли бы использовать во многих физических экспериментах еще в те времена, когда была написана статья [Толстой, Феофилов, 1950]. Сегодняшний уровень электроники существенно упростил создание радиоэлектронных устройств, моделирующих физический процесс. Соответственно расширился круг регрессионных задач в физическом эксперименте, которые можно решить методом «спрямления».

Однако предложенный метод «спрямления» [Толстой, Феофилов, 1950] неизбежно содержит недостатки, рассмотренные нами в [Михеев, Казаков, 2013]:

- 1) чувствительность и точность метода «спрямления» невысока из-за возникающих в радиоэлектронных устройствах случайных и систематических искажений сигналов, характер и значения которых достаточно сложно контролировать;
- 2) во многих случаях радиоэлектронное устройство, создающее модельный сигнал, оказывается слишком сложным, а его параметры невозможно варьировать в широких пределах;
- 3) при небольшом отношении «сигнал/шум» в исследуемом сигнале его сравнение с модельным сигналом на экране осциллографа затруднено;
- 4) визуальный контроль «спрямления»: человеческий глаз не в состоянии обнаружить небольшие отклонения от прямой линии на экране осциллографа.

Первые три недостатка легко преодолеваются, если заменить физическое моделирование компьютерным. Однако это не решает четвертой проблемы — определения на глаз наилучшего набора параметров регрессионной модели, описывающей изучаемый физический процесс. Для решения этой проблемы необходим математический критерий «спрямления» зависимости исследуемого сигнала от модельного.

В работе [Михеев, Казаков, 2013], основываясь на идее «спрямления», мы предложили новый метод определения параметров релаксационных процессов. Исследуемый электрический

сигнал оцифровывался и сравнивался с соответствующими значениями аппроксимирующей их функции путем отыскания максимума коэффициента линейной корреляции между двумя выборочными последовательностями — экспериментальной и модельной. Найденный в результате такого сравнения набор значений параметров математической модели «спрямлял» зависимость оцифрованного исследуемого сигнала от соответствующих значений аппроксимирующей их функции. Поэтому можно было считать данную математическую модель и ее параметры адекватными исследуемому релаксационному процессу.

Наш метод [Михеев, Казаков, 2013] мы успешно применили для определения параметров кинетики люминесценции ионов Tb^{3+} (переход ${}^5D_4 - {}^7F_5$) в кристалле TbF_3 . Однако математическое обоснование выбора критерия «спрямления» в виде максимума коэффициента корреляции между экспериментальной и модельной выборочными последовательностями проведено не было. Кроме того, не был рассмотрен метод наименьших квадратов как критерий «спрямления».

Как показал анализ работы [Толстой, Феофилов, 1950], существуют две группы параметров регрессионной модели: одна из них влияет на «спрямление», а другая — нет. Поэтому необходимо разделить эти две группы параметров в математической формулировке критерия «спрямления». В методе наименьших квадратов параметры регрессионной модели равноправны и определяются совместно, поэтому их нельзя разделить. Учитывая изложенное выше, мы создали новый метод определения параметров парной регрессии — метод наибольшего косинуса. Он включает в себя метод наименьших квадратов в виде частного случая.

Данная работа посвящена изложению метода наибольшего косинуса и его апробации при решении некоторых регрессионных задач:

- определение параметров двухэкспоненциальной функции релаксации на примере люминесценции ионов Cr^{3+} в кристалле $KZnF_3$;
- зависимость температуры кипения воды от давления;
- зависимость удельного сопротивления золота и хрома от температуры.

Метод наибольшего косинуса

Предположим, что в ходе эксперимента было получено N значений физической величины Y , y_1, y_2, \dots, y_N , в зависимости от N значений другой физической величины — X , x_1, x_2, \dots, x_N . Значения зарегистрированных в эксперименте физических величин можно интерпретировать как координаты двух векторов \mathbf{y} и \mathbf{x} в N -мерном евклидовом пространстве:

$$\mathbf{y} = \{y_1; y_2; \dots; y_N\}, \quad \mathbf{x} = \{x_1; x_2; \dots; x_N\}.$$

Под однофакторной регрессионной моделью (далее просто регрессионной моделью), описывающей экспериментальные данные, будем понимать функциональную связь между физическими величинами Y и X : $Y = k \cdot f(X, p_1, p_2, \dots, p_M)$, где k и p_1, p_2, \dots, p_M — параметры модели, несущие информацию о процессах, протекающих в исследуемой физической системе. Количество $(M + 1)$ параметров должно быть меньше размерности N пространства экспериментальных данных, так как в противном случае вместо регрессионной мы получим интерполяционную задачу.

Введем в рассмотрение вектор параметров, $\mathbf{p} = \{p_1; p_2; \dots; p_M\}$, и вектор регрессионной модели, $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \{f(x_1, \mathbf{p}); f(x_2, \mathbf{p}); \dots; f(x_N, \mathbf{p})\}$.

Значения координат вектора параметров \mathbf{p} отвечают за ориентацию вектора регрессионной модели в пространстве экспериментальных данных, то есть за угол между \mathbf{y} и $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$.

В то же время масштабный множитель k позволяет увеличивать или уменьшать длину вектора регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ по отношению к длине вектора экспериментальных данных \mathbf{y} .

Если регрессионная модель адекватна экспериментальным данным, то при некотором \mathbf{p} для всех координат векторов \mathbf{y} и \mathbf{x} должно выполняться приближенное равенство $y_j \approx kf(x_j, \mathbf{p})$, $j = 1, 2, \dots, N$, векторная форма которого имеет вид $\mathbf{y} \approx k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$.

Основная задача регрессионного анализа состоит в отыскании таких значений параметров p_1, p_2, \dots, p_M , при которых вектор экспериментальных данных \mathbf{y} наиболее близок вектору $k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, пропорциональному вектору регрессионной модели. Для ее решения необходим критерий близости векторов \mathbf{y} и $k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$.

В классическом (невзвешенном) методе наименьших квадратов таким критерием является минимум по вектору параметров \mathbf{p} и коэффициенту k квадрата длины вектора остатков: $\min_{k, \mathbf{p}} (|\mathbf{y} - k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|^2)$.

Идея нашего метода основана на следующем простом соображении: поскольку при оптимальных значениях параметров регрессионной модели приближенное равенство $\mathbf{y} \approx k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ выполняется наиболее точно, то векторы \mathbf{y} и $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ оказываются практически коллинеарными. Следовательно, при оптимальных значениях параметров угол $\alpha(\mathbf{p})$ между вектором экспериментальных данных \mathbf{y} и вектором регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ наиболее близок к нулю (при $k > 0$) или к 180° (при $k < 0$). При этом косинус угла $\alpha(\mathbf{p})$ оказывается наиболее близок к своему максимальному значению, равному 1 (при $k > 0$), или к своему минимальному значению, равному -1 (при $k < 0$).

Нисколько не ограничивая общность рассуждений, будем далее считать, что вектор регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ выбран таким образом, чтобы коэффициент пропорциональности k был положителен. Тогда наш критерий численной оценки вектора параметров \mathbf{p} , при которой экспериментальные данные наилучшим образом описываются регрессионной моделью, состоит в поиске максимума по вектору \mathbf{p} косинуса угла $\alpha(\mathbf{p})$: $\max_{\mathbf{p}} (\cos \alpha(\mathbf{p}))$. Здесь $\cos \alpha(\mathbf{p})$ вычисляется через скалярное произведение векторов \mathbf{y} , $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ и их длины в N -мерном евклидовом пространстве:

$$\cos \alpha(\mathbf{p}) = \frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle}{|\mathbf{y}| \cdot |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|}, \quad (1)$$

где

$$\langle \mathbf{y}, \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle = \sum_{j=1}^N y_j f(x_j, \mathbf{p}), \quad |\mathbf{y}| = \sqrt{\sum_{j=1}^N y_j^2}, \quad |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})| = \sqrt{\sum_{j=1}^N f^2(x_j, \mathbf{p})}.$$

Пусть \mathbf{p}_0 — оценка вектора параметров регрессионной модели, найденная по максимуму функции $\cos \alpha(\mathbf{p})$. Если регрессионная модель была выбрана верно, то зависимость координат вектора экспериментальных данных \mathbf{y} от соответствующих координат вектора регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)$ оказывается «спрямленной» в том смысле, что наилучшей аппроксимацией этой зависимости является функция прямой пропорциональности $y = k \cdot x$. Этот факт можно использовать для определения значения последнего параметра регрессионной модели: коэффициента пропорциональности k , который не влияет на угол $\alpha(\mathbf{p})$, и поэтому его оценка не может быть найдена с помощью критерия $\max_{\mathbf{p}} (\cos \alpha(\mathbf{p}))$.

Финальную подгонку прямой линии $y = k \cdot x$ под облако точек $(f(x_j, \mathbf{p}_0), y_j)$, $j = 1, 2, \dots, N$, можно осуществить разными методами. Например, можно воспользоваться стандартным методом наименьших квадратов. В этом случае искомое значение коэффициента пропорциональности

определяется по формуле

$$k_0 = \frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) \rangle}{|\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)|^2} = \frac{|\mathbf{y}|}{|\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)|} \cdot \cos \alpha(\mathbf{p}_0). \quad (2)$$

При наличии в облаке точек $(f(x_j, \mathbf{p}_0), y_j)$, $j = 1, 2, \dots, N$, выбросов может оказаться полезным значительно менее чувствительный к ним метод Тейла [Лагутин, 2013].

Однако мы полагаем, что наилучшим решением является поиск по этому облаку точек первой главной компоненты [Лагутин, 2013]. Он заключается в минимизации по параметру k суммы квадратов расстояний от точек $(f(x_j, \mathbf{p}_0), y_j)$, $j = 1, 2, \dots, N$, до прямой $y = k \cdot x$. Поскольку расстояние d_j от точки $(f(x_j, \mathbf{p}_0), y_j)$ до прямой $y = k \cdot x$ вычисляется по формуле

$$d_j = \frac{|y_j - k \cdot f(x_j, \mathbf{p}_0)|}{\sqrt{1 + k^2}},$$

то поиск первой главной компоненты сводится к решению оптимизационной задачи

$$\min_k \left(\sum_{j=1}^N d_j^2 \right) = \min_k \left(\frac{|\mathbf{y} - k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)|^2}{1 + k^2} \right).$$

Искомое значение k_0 коэффициента пропорциональности, являющееся решением этой задачи, имеет вид

$$k_0 = \sqrt{z^2(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) + 1} + z(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0), \quad (3)$$

где $z(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) = \left(\frac{|\mathbf{y}|}{|\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)|} - \frac{|\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)|}{|\mathbf{y}|} \right) \cdot \frac{1}{2 \cos \alpha(\mathbf{p}_0)}$.

После того как значения k_0 и \mathbf{p}_0 параметров найдены, необходимо проверить, насколько регрессионная модель адекватна экспериментальным данным при этих значениях параметров. Выяснить это можно с помощью исследования либо вектора остатков

$$\mathbf{e}(k_0, \mathbf{p}_0) = \{y_1 - k_0 \cdot f(x_1, \mathbf{p}_0); y_2 - k_0 \cdot f(x_2, \mathbf{p}_0); \dots; y_N - k_0 \cdot f(x_N, \mathbf{p}_0)\},$$

либо вектора $\mathbf{d}(k_0, \mathbf{p}_0) = \frac{\mathbf{e}(k_0, \mathbf{p}_0)}{\sqrt{1+k_0^2}}$, модули координат которого представляют собой расстояния от точек $(f(x_j, \mathbf{p}_0), y_j)$, $j = 1, 2, \dots, N$, до прямой $y = k_0 \cdot x$. Существующие методы исследования остатков подробно рассмотрены в [Draper, Smith, 1998]. Наиболее важными из них, по признанию самих авторов этой монографии, являются исследования графиков зависимостей координат вектора остатков от различных переменных, например от координат вектора регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)$ или от координат вектора \mathbf{x} . Если эти зависимости не обнаруживают неслучайного поведения, а сумма координат вектора остатков близка к нулю, то можно считать регрессионную модель адекватной экспериментальным данным, а найденные значения параметров этой модели близкими к их истинным значениям. В противном случае регрессионную модель необходимо скорректировать.

Подытожим. Предлагаемый нами метод решения регрессионных задач может быть кратко записан в виде следующего алгоритма.

Первый шаг. Выбирается регрессионная модель, то есть выдвигается гипотеза о том, что вектор экспериментальных данных \mathbf{y} как функция предикторной переменной \mathbf{x} должен удовлетворять равенству $\mathbf{y} \approx k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$. При этом необходимо позаботиться о том, чтобы выполнялось неравенство $k > 0$.

Второй шаг. Ищется максимум косинуса угла между векторами \mathbf{y} и $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$. Значение \mathbf{p}_0 вектора параметров \mathbf{p} , при котором достигается этот максимум, обеспечивает наилучшее согласие между экспериментальными данными и регрессионной моделью.

$$\max_{\mathbf{p}} (\cos \alpha(\mathbf{p})) = \max_{\mathbf{p}} \left(\frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle}{|\mathbf{y}| \cdot |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|} \right) \Rightarrow \mathbf{p} = \mathbf{p}_0.$$

Третий шаг. Для окончательного согласования вектора экспериментальных данных с регрессионной моделью ищется оценка коэффициента пропорциональности k . Подгонка прямой линии $y = k \cdot x$ под облако точек $(f(x_j, \mathbf{p}_0), y_j)$ может быть осуществлена разными методами. При использовании метода наименьших квадратов наилучшее значение коэффициента пропорциональности k_0 вычисляется по формуле (2). Если же ищется первая главная компонента, то необходимо пользоваться формулой (3). Могут использоваться и другие методы [Лагутин, 2013].

Четвертый шаг. Исследуются зависимости координат вектора остатков $\mathbf{e}(k_0, \mathbf{p}_0)$ или вектора $\mathbf{d}(k_0, \mathbf{p}_0)$ от координат векторов \mathbf{x} и $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)$. Отсутствие каких-либо закономерностей в этих зависимостях, а также близость к нулю сумм координат (длин) векторов $\mathbf{e}(k_0, \mathbf{p}_0)$ и $\mathbf{d}(k_0, \mathbf{p}_0)$ будут свидетельствовать об адекватности регрессионной модели и правильном определении значений ее параметров. Если окажется, что регрессионная модель не адекватна экспериментальным данным, то ее нужно скорректировать. Для этого необходимо вернуться на первый шаг и повторить весь алгоритм сначала.

Отметим, что если на первом шаге по каким-либо причинам не удастся или неудобно, обеспечить выполнение неравенства $k > 0$, то значение коэффициента пропорциональности можно оставить отрицательным. Тогда на втором шаге нужно будет искать минимум косинуса угла между векторами \mathbf{y} и $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, а на третьем немного изменится формула (3):

$$k_0 = -\sqrt{z^2(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) + 1} + z(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0).$$

Все остальное останется без изменений.

Еще одно важное замечание. Регрессионная модель может быть центрированной:

$$y_j - \bar{y} \approx k \cdot (f(x_j, \mathbf{p}) - \bar{f}(\mathbf{p})), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (4)$$

Здесь $\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j$, $\bar{f}(\mathbf{p}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j, \mathbf{p})$ — выборочные средние физической величины Y и координат вектора регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ соответственно. В этом случае максимизируемый на втором этапе $\cos \alpha(\mathbf{p})$ в точности равен выборочному коэффициенту корреляции величин y_j и $f(x_j, \mathbf{p})$ [Лагутин, 2013]. Идея поиска параметров регрессионной модели по максимуму выборочного коэффициента корреляции была реализована нами в [Михеев, Казаков, 2013]. Как видим, такой подход оправдан, только если регрессионная модель имеет специальный вид (4).

Из четырех этапов предложенного нами алгоритма решения регрессионных задач ключевым является второй этап: определение значения \mathbf{p}_0 вектора параметров \mathbf{p} по максимуму функции $\cos \alpha(\mathbf{p})$. В конце этого этапа, при условии, что регрессионная модель была выбрана правильно, зависимость координат вектора экспериментальных данных \mathbf{y} от соответствующих координат вектора регрессионной модели $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)$ оказывается «спрямленной». Последующие два этапа необходимы главным образом для качественной и количественной оценки степени «спрямления». По этой причине мы решили назвать весь предложенный нами алгоритм решения регрессионных задач методом наибольшего косинуса.

В следующих разделах мы продемонстрируем эффективность метода наибольшего косинуса, обсудим его возможности и сравним его с методом наименьших квадратов.

Сравнение метода наибольшего косинуса с методом наименьших квадратов

Сравнение методов наибольшего косинуса и метода наименьших квадратов проведем на примере той же регрессионной модели $\mathbf{y} \approx k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, что была описана в предыдущей части. Напомним, что в ней разделены набор параметров \mathbf{p} , определяющий угол между вектором регрессионной модели и вектором экспериментальных данных \mathbf{y} , и параметр k , отвечающий за длину вектора регрессионной модели.

Вначале найдем оценки параметров регрессионной модели методом наименьших квадратов. С этой целью вычислим частные производные от квадрата длины вектора остатков $e^2(k, \mathbf{p}) = |\mathbf{y} - k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|^2$ по всем параметрам регрессионной модели: k и $\mathbf{p} = \{p_1; p_2; \dots; p_M\}$; приравняем эти производные к нулю:

$$\frac{\partial}{\partial k} e^2(k, \mathbf{p}) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial p_j} e^2(k, \mathbf{p}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

В результате на координаты вектора параметров \mathbf{p}_0 , при которых достигается минимум квадрата длины вектора остатков, возникает система уравнений

$$\langle \mathbf{y}, \mathbf{F}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) \rangle |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)|^2 = \langle \mathbf{y}, \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) \rangle \langle \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0), \mathbf{F}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0) \rangle. \quad (5)$$

Здесь $\mathbf{F}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\partial}{\partial p_j} \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \left\{ \frac{\partial}{\partial p_j} f(x_1, \mathbf{p}); \frac{\partial}{\partial p_j} f(x_2, \mathbf{p}); \dots; \frac{\partial}{\partial p_j} f(x_N, \mathbf{p}) \right\}$ и $j = 1, 2, \dots, M$.

При этом оптимальное значение коэффициента пропорциональности k_0 регрессионной модели по-прежнему вычисляется по формуле (2). Таким образом, система уравнений (5) вместе с формулой (2) решают задачу определения значений параметров регрессионной модели методом наименьших квадратов.

Теперь найдем оценки параметров той же регрессионной модели методом наибольшего косинуса. Для этого, используя формулу (1), вычислим частные производные от косинуса угла между вектором регрессионной модели и вектором экспериментальных данных по всем координатам вектора параметров \mathbf{p} . Поскольку

$$\frac{\partial}{\partial p_j} |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})| = \frac{\partial}{\partial p_j} \sqrt{\langle \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}), \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle} = \frac{\langle \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}), \mathbf{F}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle}{|\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|},$$

то

$$\frac{\partial}{\partial p_j} \cos \alpha(\mathbf{p}) = \frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{F}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|^2 - \langle \mathbf{y}, \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle \langle \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}), \mathbf{F}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \rangle}{|\mathbf{y}| |\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})|^3}.$$

Приравнивая к нулю частные производные от $\cos \alpha(\mathbf{p})$, вновь приходим к системе уравнений (5) на координаты вектора параметров \mathbf{p}_0 , при которых теперь уже достигается максимум косинуса угла между вектором регрессионной модели и вектором экспериментальных данных.

Таким образом, оценка вектора параметров \mathbf{p} , входящего в регрессионную модель $\mathbf{y} \approx k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, определяется в методе наибольшего косинуса из той же самой системы уравнений (5), что и в методе наименьших квадратов. Однако оптимальное значение коэффициента пропорциональности k_0 регрессионной модели в методе наименьших квадратов вычисляется исключительно по формуле (2). В то же время при использовании метода наибольшего косинуса, в зависимости от конкретной решаемой задачи, значение этого параметра может быть найдено разными способами. Если, например, требуется получить нечувствительную к выбросам оценку

параметра k , то можно попытаться применить метод Тейла. В других случаях можно использовать поиск первой главной компоненты (3), а также обычный линейный метод наименьших квадратов (2). В последнем случае метод наибольшего косинуса дает те же самые оценки параметров, что и метод наименьших квадратов. Такая гибкость в способе определения значения параметра k при использовании метода наибольшего косинуса, безусловно, позволяет добиваться лучшего согласия экспериментальных данных и регрессионной модели, чем при простом применении метода наименьших квадратов.

Тот факт, что оценки координат вектора параметров \mathbf{p} , получаемые методом наибольшего косинуса, совпадают с соответствующими оценками метода наименьших квадратов, означает, что их статистические свойства — несмещенность, состоятельность и эффективность — будут точно такими же, как и в методе наименьших квадратов. Статистические свойства оценки параметра масштаба k зависят от метода, которым она определяется.

Итак, метод наименьших квадратов применительно к регрессионной модели вида $\mathbf{y} \approx k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ является частным случаем метода наибольшего косинуса: оценки координат вектора параметров \mathbf{p} в обоих методах определяются из системы уравнений (5), а для оценки коэффициента пропорциональности k в методе наименьших квадратов используется формула (2), в то время как в методе наибольшего косинуса могут использоваться и другие подходы.

Интересна геометрическая интерпретация результата применения метода наибольшего косинуса в том случае, когда коэффициент пропорциональности k определяется по формуле (2), то есть методом наименьших квадратов: вектор $k_0 \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)$, который принимается за наилучшее приближение к вектору экспериментальных данных \mathbf{y} , является ортогональной проекцией вектора \mathbf{y} на направление вектора регрессионной модели. Использование в качестве наилучшего приближения к заданному вектору его ортогональной проекции на подпространство возможных форм этого вектора является ключевой геометрической идеей метода наименьших квадратов [Draper, Smith, 1998]. В частности, эта идея нашла особенно яркое выражение в основанных на методе наименьших квадратов морфологических методах анализа изображений, подробно изложенных в [Пытьев, Чуличков, 2010].

При других способах определения коэффициента пропорциональности k , не связанных с методом наименьших квадратов, метод наибольшего косинуса имеет совершенно иную геометрическую интерпретацию. Однако, как мы только что показали, во всех случаях применение метода наибольшего косинуса до этапа нахождения значения коэффициента пропорциональности порождает бесконечное множество векторов $k \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}_0)$, близких к вектору экспериментальных данных в смысле критерия $\max_{\mathbf{p}} (\cos \alpha(\mathbf{p}))$. Вектор ортогональной проекции является лишь одним из элементов этого множества. Выбор этого вектора в качестве наилучшего приближения к вектору экспериментальных данных, как уже говорилось, не всегда оправдан.

Отметим, что на практике оптимальная оценка вектора параметров \mathbf{p}_0 не всегда определяется как решение системы уравнений (5). Существуют, например, методы оптимизации, так называемые прямые методы или методы нулевого порядка [Аоки, 1977], в которых отыскание максимума или минимума целевой функции осуществляется без использования частных производных по параметрам. Если минимум квадрата длины вектора остатков и максимум $\cos \alpha(\mathbf{p})$ ищутся одним из таких численных алгоритмов, то метод наибольшего косинуса может оказаться неэквивалентным методу наименьших квадратов, даже когда финальная аппроксимация функцией прямой пропорциональности ($y = k \cdot x$) производится по формуле (2). Несмотря на то что глобальный экстремум целевых функций $e^2(k, \mathbf{p})$ и $\cos \alpha(\mathbf{p})$ достигается при одной и той же оценке вектора параметров \mathbf{p}_0 , приближенные значения координат вектора \mathbf{p} , найденные с одинаковой точностью одним из таких численных методов по целевым функциям метода наименьших квадратов и метода наибольшего косинуса, будут различными. И вообще, любой численный

алгоритм, определяющий оптимальную оценку вектора параметров \mathbf{p}_0 не как решение системы уравнений (5), будет давать различные приближенные значения для координат вектора \mathbf{p}_0 в зависимости от того, используется этот алгоритм в рамках метода наименьших квадратов или в рамках метода наибольшего косинуса.

Целевая функция $\cos \alpha(\mathbf{p})$ метода наибольшего косинуса, в отличие от целевой функции $\mathbf{e}^2(k, \mathbf{p})$ метода наименьших квадратов, является ограниченной при любых наборах параметров \mathbf{p} : $|\cos \alpha(\mathbf{p})| \leq 1$. Этот факт позволяет значительно повысить эффективность численных алгоритмов поиска максимума $\cos \alpha(\mathbf{p})$. Например, можно заменить целевую функцию метода наибольшего косинуса на $\cos^q \alpha(\mathbf{p})$, где q — натуральное число. Такая замена не приведет к смещению положения максимума целевой функции: оптимальная оценка вектора параметров \mathbf{p}_0 , при которой функция $\cos^q \alpha(\mathbf{p})$ достигает своего максимального значения, будет одной и той же для любых натуральных q . В то же время при такой замене ширина максимума целевой функции уменьшается. Пусть Δ_q — ширина (в радианах) максимума функции $\cos^q \alpha(\mathbf{p})$, вычисленная на уровне $1/2$, тогда

$$\Delta_q = 2 \arccos\left(\frac{1}{2^{1/q}}\right).$$

Величина Δ_q стремится к нулю при $q \rightarrow \infty$. Например, при $q = 100$ получим $\frac{\Delta_{100}}{\Delta_1} \approx 0,11$. Это значит, что использование в методе наибольшего косинуса целевой функции $\cos^{100} \alpha(\mathbf{p})$ вместо $\cos \alpha(\mathbf{p})$ сужает максимум на уровне $1/2$ приблизительно в 10 раз. Уменьшение ширины максимума целевой функции очевидным образом улучшает сходимость численных алгоритмов поиска этого максимума даже в том случае, когда начальное значение вектора параметров \mathbf{p} сильно отличается от истинного значения.

Разумеется, параметр q нельзя увеличивать до бесконечности. На это есть две причины. Во-первых, как бы ни была близка к реальности регрессионная модель, ее вектор не будет строго коллинеарен вектору экспериментальных данных ни при каком оптимальном значении \mathbf{p}_0 вектора параметров. Поэтому всегда справедливо неравенство $\cos \alpha(\mathbf{p}_0) < 1$. Это значит, что использование целевой функции $\cos^q \alpha(\mathbf{p})$ вместо $\cos \alpha(\mathbf{p})$ не только сужает ее максимум, но и уменьшает значение этой функции в максимуме. Однако простейшие оценки показывают, что при не слишком больших значениях q и реалистичных значениях $\cos \alpha(\mathbf{p}_0)$ уменьшение значения целевой функции в максимуме оказывается незначительным. Например, при не очень хорошем показателе коллинеарности $\cos \alpha(\mathbf{p}_0) = 0,999$ и $q = 100$ находим

$$\frac{\cos \alpha(\mathbf{p}_0)}{\cos^q \alpha(\mathbf{p}_0)} \approx 1,1,$$

то есть значение функции в максимуме уменьшилось всего на 10 %, тогда как ширина максимума уменьшилась практически в 10 раз.

Вторая причина, по которой не следует брать q слишком большим, состоит в том, что у функции $\cos^q \alpha(\mathbf{p})$ при больших q могут появиться локальные экстремумы, близкие к искомому максимуму. Их наличие сильно затруднит численное решение оптимизационной задачи $\max_{\mathbf{p}} (\cos^q \alpha(\mathbf{p}))$ в методе наибольшего косинуса.

Как известно, одним из главных недостатков метода наименьших квадратов является его чувствительность к наличию выделяющихся значений («выбросов») в экспериментальных данных, то есть он не является робастным [Лагутин, 2013]. Это связано с тем, что его целевая функция $\mathbf{e}^2(k, \mathbf{p})$ пропорциональна квадратам координат вектора экспериментальных данных \mathbf{y} . В то же время целевая функция метода наибольшего косинуса (1) пропорциональна нормированному вектору экспериментальных данных $\mathbf{y}/|\mathbf{y}|$. Поэтому метод наибольшего косинуса гораздо более устойчив к «выбросам», чем метод наименьших квадратов.

Таким образом, метод наибольшего косинуса представляет собой гораздо более гибкий и точный инструмент определения параметров регрессионной модели, чем метод наименьших квадратов. Более того, он включает в себя последний в виде частного случая.

В следующей части будет продемонстрирована эффективность метода наибольшего косинуса при решении различных регрессионных задач.

Определение параметров двухэкспоненциальной функции релаксации

Начнем с регрессионной задачи, которая очень часто встречается в спектроскопии — аппроксимации зарегистрированной в эксперименте кинетики люминесценции двухэкспоненциальной функцией релаксации:

$$k \cdot f(t_j, \tau_1, \tau_2, p) = k \left(\frac{1-p}{\tau_1} \exp\left(-\frac{t_j}{\tau_1}\right) + \frac{p}{\tau_2} \exp\left(-\frac{t_j}{\tau_2}\right) \right). \quad (6)$$

Здесь $j = 1, 2, \dots, N$; $k \cdot f(t_j, \tau_1, \tau_2, p)$ — величина, пропорциональная интенсивности люминесценции, в момент времени t_j ; τ_1, τ_2 — характерные времена высвечивания независимо излучающих оптических центров; p — доля оптических центров второго типа среди всех излучающих центров; t_1, t_2, \dots, t_N — моменты времени, в которые производилась регистрация кинетики люминесценции.

Отметим, что мы заменили обозначения, использовавшиеся в предыдущих разделах для описания регрессионной модели, на общеупотребительные в спектроскопии: координатами вектора \mathbf{x} являются моменты времени регистрации кинетики люминесценции $\mathbf{x} = \{t_1; t_2; \dots; t_N\}$, а вектор параметров регрессионной модели равен $\mathbf{p} = \{\tau_1; \tau_2; p\}$.

Нелинейная регрессионная задача, основанная на двухэкспоненциальной модели релаксации (6), может быть очень сложной, если оба типа излучающих центров имеют близкие времена жизни, $\tau_1 \approx \tau_2$, и вносят примерно одинаковый вклад в результирующую кинетику люминесценции $p \approx 0,5$. Для решения именно такой сложной задачи в [Казаков, Михеев, 1999] нами был предложен специальный метод. Недостатком этого метода являются сложные нелинейные преобразования вектора экспериментальных данных \mathbf{y} , которые необходимы для его реализации. Поэтому оценки параметров τ_1, τ_2 , получаемые с его помощью, часто оказываются немного смещенными по отношению к истинным значениям этих параметров. Метод, предложенный в [Казаков, Михеев, 1999], прекрасно подходит для определения начальных значений времен высвечивания люминесценции τ_1, τ_2 , если нет никакой предварительной информации об их численных значениях. Впоследствии эти начальные значения легко могут быть уточнены либо методом наименьших квадратов, либо методом наибольшего косинуса.

Для иллюстрации возможностей метода наибольшего косинуса при определении параметров регрессионной модели (6) воспользуемся тем же экспериментальным примером, что и в [Казаков, Михеев, 1999] — люминесценцией ионов Cr^{3+} в кристалле KZnF_3 . Люминесценция ионов Cr^{3+} возбуждалась лазером на красителе (длительность импульса 10 нс, длина волны возбуждения 440 нм) и регистрировалась на длине волны 800 нм при комнатной температуре ФЭУ-106, работавшим в режиме счета фотонов. При этом моменты времени, в которые регистрировалась кинетика люминесценции, были равны (в мкс) $t_j = 4,5 + (j-1)\Delta t$, $j = 1, 2, \dots, N$, $\Delta t = 10$ мкс, а $N = 1024$.

Применение метода наибольшего косинуса к этим экспериментальным данным начиналось с численного решения оптимизационной задачи $\max_{\mathbf{p}} (\cos^q \alpha(\mathbf{p}))$. Оно проводилось одним из лучших прямых методов поиска экстремумов — методом Брента [Antia, 2002]. Параметр q варьировался в пределах от 1 до 50. Это делалось, с одной стороны, для улучшения сходимости

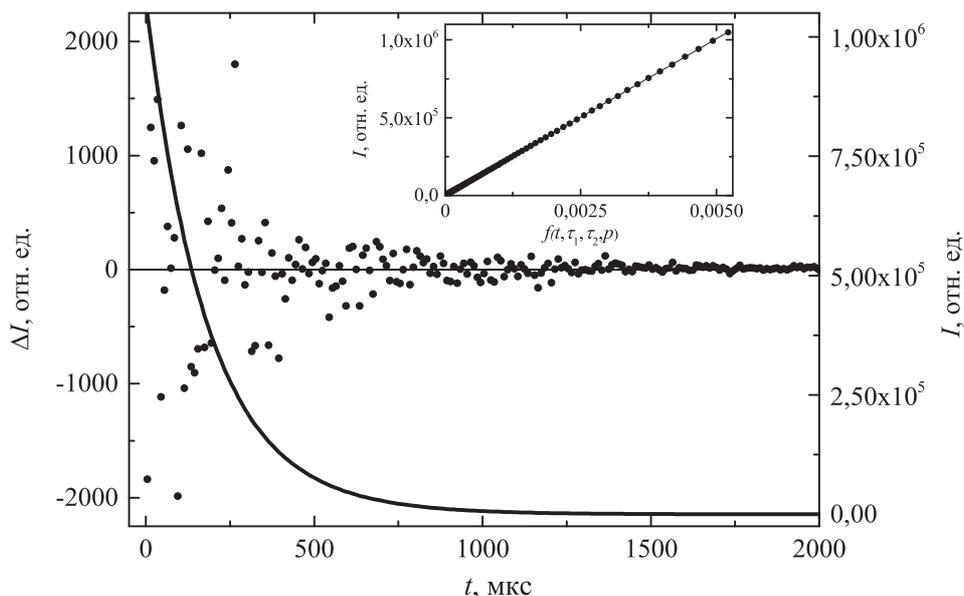


Рис. 1. График зависимости от времени интенсивности I люминесценции ионов Cr^{3+} в кристалле KZnF_3 (сплошная линия, правая шкала), а также временная зависимость разности ΔI между экспериментальными значениями интенсивности люминесценции и значениями, вычисленными с помощью регрессионной модели (6), параметры (7) которой были определены методом наибольшего косинуса (точки, левая шкала). На вставке изображена «спрямленная» зависимость значений интенсивности I люминесценции от соответствующих значений $f(t, \tau_1, \tau_2, p)$ регрессионной модели (6) с параметрами (7)

алгоритма Брента, а с другой — для более надежного определения координат вектора параметров $\mathbf{p} = \{\tau_1; \tau_2; p\}$: при правильно найденном оптимальном значении этого вектора его координаты не должны зависеть от q . Последующий поиск коэффициента пропорциональности k осуществлялся методом первой главной компоненты, то есть с помощью формулы (3). В результате были получены следующие оценки координат вектора параметров \mathbf{p} и коэффициента пропорциональности k :

$$\tau_1 \approx 160,18 \text{ мкс}; \quad \tau_2 \approx 234,77 \text{ мкс}; \quad p \approx 0,4523; \quad k \approx 2,0144 \cdot 10^8 \text{ отн. ед.} \quad (7)$$

На рисунке 1 точками изображен график зависимости от времени координат вектора остатков (левая шкала):

$$\Delta I_j \equiv e_j(k, \mathbf{p}) = y_j - k \cdot f(t_j, \tau_1, \tau_2, p),$$

вычисленного для набора параметров (7). На том же рисунке сплошной линией показана временная зависимость интенсивности $I_j \equiv y_j$ люминесценции (правая шкала). Вставка этого рисунка — «спрямленная» методом наибольшего косинуса зависимость экспериментальных значений интенсивности люминесценции от значений, рассчитанных по формуле (6) с параметрами (7).

Отметим, что на этом рисунке (за исключением вставки) приведена только небольшая часть точек, использовавшихся для определения параметров регрессионной модели (6) методом наибольшего косинуса. Точки, находящиеся за пределами временного интервала $t_j \in (0; 2\text{мс})$, были удалены с рисунка, поскольку не несли никакой визуальной информации: и координаты вектора остатков, и интенсивность люминесценции за пределами указанного интервала времени практически не отличаются от нуля.

Как видно из рисунка 1, регрессионная модель (6) со значениями параметров (7) действительно хорошо описывает люминесценцию ионов Cr^{3+} в кристалле KZnF_3 . На это указывают,

во-первых, абсолютно случайный и симметричный разброс координат вектора остатков относительно нулевого уровня, а во-вторых, малая величина этих координат по отношению к интенсивности люминесценции: значения координат вектора остатков по абсолютной величине составляют не более 0,2 % от соответствующих значений интенсивности люминесценции.

Для сравнения приведем параметры двухэкспоненциальной функции релаксации, которые были найдены для этих же экспериментальных данных методом нелинейной цифровой фильтрации [Казаков, Михеев, 1999]:

$$\tau_1 \approx 167,2 \text{ мкс}; \quad \tau_2 \approx 239,5 \text{ мкс}; \quad p \approx 0,3576; \quad k \approx 1,9595 \cdot 10^8 \text{ отн. ед.} \quad (8)$$

и методом наименьших квадратов [Казаков, Михеев, 1999]:

$$\tau_1 \approx 159,8 \text{ мкс}; \quad \tau_2 \approx 233,9 \text{ мкс}; \quad p \approx 0,4595; \quad k \approx 2,0121 \cdot 10^8 \text{ отн. ед.} \quad (9)$$

Отметим, что в работе [Казаков, Михеев, 1999] использовалась отличающаяся от (6) формулировка двухэкспоненциальной регрессионной модели:

$$y_1 \cdot f(t_j, \tau_1, \tau_2, p_1, p_2) = y_1 \left(p_1 \exp\left(-\frac{t_j}{\tau_1}\right) + p_2 \exp\left(-\frac{t_j}{\tau_2}\right) \right). \quad (10)$$

Здесь $y_1 = 1048569$ отн. ед. — значение интенсивности люминесценции в момент времени $t_1 = 4,5$ мкс. Поэтому значения параметров k , p , приведенные в (8), (9), являются вычисленными по формулам, связывающим k и p с параметрами p_1 , p_2 :

$$p = \frac{p_2 \tau_2}{p_1 \tau_1 + p_2 \tau_2}; \quad k = y_1 (p_1 \tau_1 + p_2 \tau_2).$$

Эти формулы получаются в результате приравнивания коэффициентов при одноэкспоненциальных слагаемых регрессионной модели (6) соответствующим коэффициентам при тех же слагаемых модели (10).

Как видим, найденный методом наибольшего косинуса набор параметров (7) очень близок по своим числовым значениям набору параметров (9), найденному методом наименьших квадратов и довольно сильно отличается от набора параметров (8). Этот результат вполне ожидаем, поскольку в предыдущем разделе было показано, что метод наименьших квадратов является частным случаем метода наибольшего косинуса. Однако возникает вопрос: для какого из трех наборов параметров двухэкспоненциальная функция релаксации является наиболее адекватной экспериментальным данным? Наилучшими в этом смысле будут те значения параметров регрессионной модели (6), при которых она наиболее точно описывает экспериментальные данные. В качестве простой меры этой точности описания экспериментальных данных можно использовать отношение длины вектора остатков к длине вектора экспериментальных данных:

$$\varepsilon(k, \mathbf{p}) = \frac{|\mathbf{e}(k, \mathbf{p})|}{|\mathbf{y}|}. \quad (11)$$

Чем меньше величина $\varepsilon(k, \mathbf{p})$, тем точнее при данных параметрах регрессионная модель аппроксимирует экспериментальные данные.

Важно заметить, что значение величины (11) не связано напрямую с точностью оценок параметров регрессионной модели. Поэтому здесь и далее величина $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ используется нами исключительно для определения степени адекватности регрессионной модели экспериментальным данным при некоторых оценках параметров, а не для установления точности самих оценок.

Вычисление $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ для всех трех наборов параметров приводит к следующим результатам: для параметров (7) — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00167$; для параметров (8) — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,02667$; для параметров (9) — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00196$. Следовательно, наихудшее согласие теории с экспериментом

достигается в случае параметров (8), найденных в [Казаков, Михеев, 1999] с помощью нелинейных цифровых фильтров, разделяющих двухэкспоненциальный процесс релаксации на два одноэкспоненциальных процесса. Наилучшим набором параметров, как показывает величина $\varepsilon(k, \mathbf{p})$, является набор (7), полученный методом наибольшего косинуса. Таким образом, двухэкспоненциальная функция релаксации (6), при значениях параметров (7), наиболее точно описывает кинетику люминесценции ионов Cr^{3+} в кристалле KZnF_3 .

Зависимость температуры кипения воды от давления

Простейшая математическая модель, устанавливающая зависимость температуры кипения жидкости от давления ее пара, может быть найдена с помощью уравнения Клаузиуса–Клапейрона [Фейнман и др., 2012]:

$$\frac{\partial P}{\partial T} = \frac{Lm}{T(V_G - V_L)}, \quad (12)$$

где L — удельная теплота парообразования жидкости; m — масса пара; P, T — давление и температура пара; V_G, V_L — объемы газовой и жидкой фазы соответственно. Уравнение (12) легко интегрируется при следующих упрощающих предположениях:

- 1) удельная теплота парообразования L не зависит от давления;
- 2) объем газовой фазы намного больше объема жидкой фазы;
- 3) пар, образующийся над кипящей жидкостью, является идеальным газом.

Общее решение уравнения (12) при этих предположениях имеет вид [Фейнман и др., 2012]

$$P = P_0 \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right).$$

Здесь $T_0 = ML/R$, M — молярная масса вещества, $R = 8,31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}\cdot\text{К}}$ — универсальная газовая постоянная, P_0 — постоянная интегрирования, имеющая размерность давления. Отсюда уже несложно найти зависимость температуры кипения жидкости от давления ее пара:

$$T = T_0 f(P, P_0) = \frac{T_0}{\ln(P_0/P)}. \quad (13)$$

В основу регрессионной модели положим формулу (13) и применим ее для описания зависимости температуры кипения воды от давления водяного пара. В этом случае координатами вектора экспериментальных данных \mathbf{y} являются температуры кипения воды. Координатами вектора предикторной переменной \mathbf{x} служат давления водяного пара, при которых зарегистрированы температуры кипения. Вектор параметров \mathbf{p} имеет всего одну координату — давление P_0 , а коэффициент пропорциональности k — это температура T_0 .

Регрессионная модель (13) является нелинейной, поскольку параметр P_0 входит в нее нелинейным образом. Однако с помощью несложных алгебраических преобразований и введения новых параметров она может быть линеаризована. Несмотря на такую возможность, для демонстрации эффективности метода наибольшего косинуса мы не стали выполнять линеаризацию регрессионной модели (13) и применили ее к экспериментальным данным в непроброзованной форме, «как есть».

Одна из наиболее подробных таблиц, содержащих температуры кипения воды для различных давлений, находится в книге [Ривкин, Александров, 1984]. Мы взяли выборку из этой

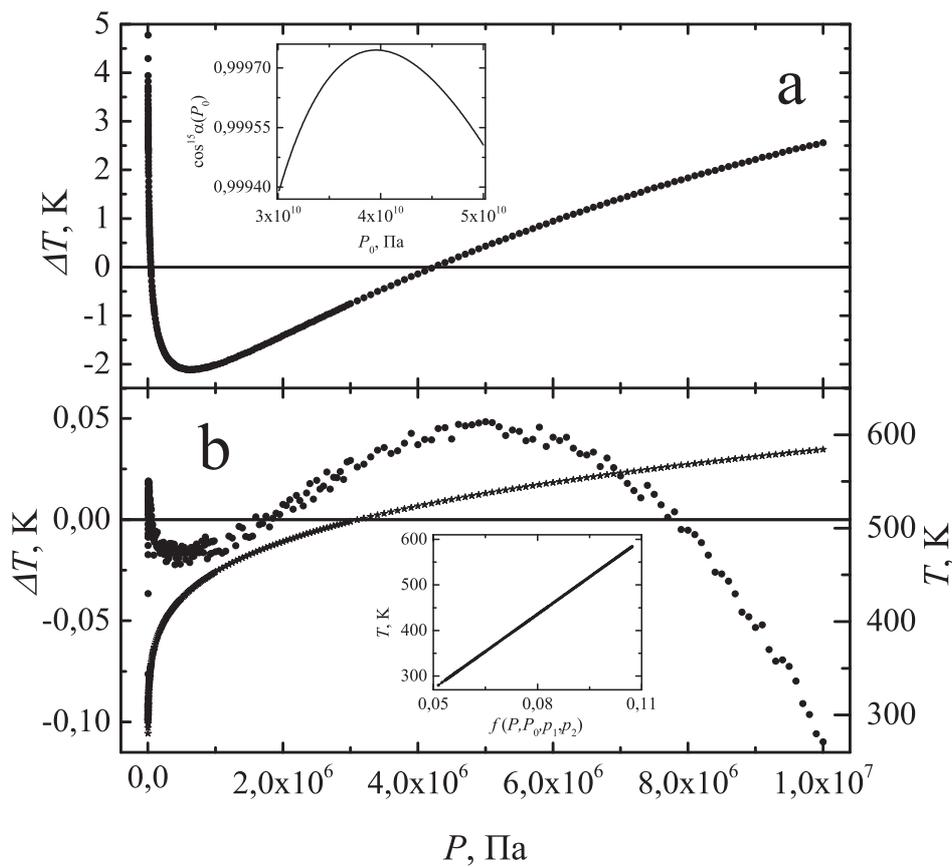


Рис. 2. Зависимость от давления разности ΔT между экспериментальными значениями температуры кипения воды и значениями, рассчитанными по формуле (13) с параметрами (14) (график *a*), а также по формуле (15) с параметрами (16) (график *b*). На вставке рисунка 2*a* приведена зависимость от параметра P_0 целевой функции $\cos^{15} \alpha(P_0)$ метода наибольшего косинуса. Вставка рисунка 2*b* — «спрямленная» зависимость экспериментальных значений температуры кипения воды от соответствующих значений $f(P, P_0, p_1, p_2)$ регрессионной модели (15) с параметрами (16). Звездочки (★) показывают экспериментальную зависимость от давления температуры кипения воды (график *b*, правая шкала)

таблицы: 259 значений температуры кипения в диапазоне значений давления от 10^3 Па до 10^7 Па, аппроксимировали ее функциональной зависимостью (13).

На этапе применения метода наибольшего косинуса, как и раньше, оптимизационная задача $\max_{\mathbf{p}} (\cos^q \alpha(\mathbf{p}))$ решалась методом Брента для разных значений параметра q : от 1 до 20. Коэффициент пропорциональности T_0 по-прежнему определялся методом первой главной компоненты. В результате был получен следующий наилучший набор параметров регрессионной модели (13):

$$P_0 \approx 3,955 \cdot 10^{10} \text{ Па}; \quad T_0 \approx 4816,831 \text{ К.} \quad (14)$$

На рисунке 2*a* приведен график зависимости от давления разности ΔT между табличными значениями температуры кипения и значениями, рассчитанными по формуле (13) с параметрами (14). На вставке этого рисунка изображена зависимость от параметра P_0 целевой функции $\cos^{15} \alpha(P_0)$ метода наибольшего косинуса, которая дает представление о характере максимумов, определяемых этим методом. График зависимости от давления самих табличных значений температуры кипения воды приведен на рисунке 2*b* (правая шкала).

Как следует из рисунка 2а, регрессионная модель (13) даже при наилучшем наборе параметров (14) не отражает всех особенностей взятой из [Ривкин, Александров, 1984] зависимости температуры кипения воды от давления: отклонения координат вектора остатков от нулевого уровня носят явно неслучайный характер. Однако величина координат вектора остатков по сравнению со значениями температуры кипения является не слишком большой: $|\Delta T|$ не превышает 5 К, в то время как температура кипения T находится в диапазоне от 280 К до 600 К. Таким образом, регрессионную модель (13) можно рассматривать как неплохое первое приближение к истинной зависимости температуры кипения воды от давления.

Главная причина расхождений экспериментальных данных и регрессионной модели (13) заключается в том, что формула (13) выведена при условии независимости удельной теплоты парообразования L от давления. Однако анализ таблиц книги [Ривкин, Александров, 1984] показывает, что удельная теплота парообразования воды уменьшается с ростом давления. Поэтому регрессионную модель (13) необходимо уточнить.

Обычный подход к построению простых интерполяционных формул, описывающих экспериментальную зависимость между давлением и температурой кипения жидкости, состоит в аппроксимации величины $\ln(P_0/P) - T_0/T$ рядом по степеням абсолютной температуры T . Иногда к степенным функциям добавляют логарифмическую $\ln T$. Несколько примеров интерполяционных формул такого рода для различных жидкостей могут быть найдены в [American Institute of Physics Handbook, 1972]. Все они могут быть получены из уравнения Клаузиуса–Клапейрона (12) в предположении, что удельная теплота парообразования жидкости хорошо описывается многочленом от абсолютной температуры.

Наши численные эксперименты показали, что приемлемое согласие экспериментальных данных с такой полиномиальной регрессионной моделью достигается только при высоких степенях многочлена от абсолютной температуры T : начиная с четвертой степени и выше. Поскольку рост степени многочлена увеличивает количество параметров в регрессионной модели, она быстро теряет свою практическую ценность: наилучшей является такая регрессионная модель, которая обеспечивает наивысшую точность описания экспериментальных данных при наименьшем числе используемых параметров.

Оказалось, что высокую точность описания зависимости температуры кипения воды от давления можно получить с помощью регрессионной модели

$$T = T_0 f(P, P_0, p_1, p_2) = T_0 \left(\frac{1}{\ln(P_0/P)} + (p_1 \sqrt{P/P_0} + p_2 \sqrt{P_0/P}) \ln(P_0/P) \right), \quad (15)$$

которая по сравнению с (13) содержит всего два новых безразмерных параметра — p_1 и p_2 . В результате применения этой модели к тем же самым 259 табличным значениям температуры кипения воды, взятым из [Ривкин, Александров, 1984], с помощью метода наибольшего косинуса и метода первой главной компоненты мы получили следующий набор параметров:

$$T_0 \approx 5447,004 \text{ К}; \quad P_0 \approx 3,098 \cdot 10^{11} \text{ Па}; \quad p_1 \approx 0,1796; \quad p_2 \approx 2,782 \cdot 10^{-10}. \quad (16)$$

На рисунке 2b (левая шкала) показан график зависимости от давления разности ΔT между табличными значениями температуры кипения и значениями, рассчитанными по формуле (15) с параметрами (16). Как видим, по сравнению с рисунком 2а эта зависимость зашумлена, а значения ΔT по абсолютной величине почти в 100 раз меньше!

Вставка рисунка 2b показывает, что зависимость экспериментальных значений температуры кипения воды от соответствующих значений регрессионной модели (15) с параметрами (16) действительно «спрямляется»: график этой зависимости практически полностью сливается с аппроксимирующей его прямой линией.

Для более объективного сравнения моделей (13) и (15) по точности, с которой они описывают зависимость от давления температуры кипения воды, мы вычислили для них параметр $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ (см. формулу (11)): для модели (13) с параметрами (14) — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,004$, для модели (15) с параметрами (16) — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00006$. Таким образом, величина параметра $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ также свидетельствует о том, что регрессионная модель (15) с параметрами (16), безусловно, лучше согласуется с экспериментальными данными, чем простейшая модель (13) с параметрами (14). Однако физическая интерпретация регрессионной модели (15), в отличие от (13), уже затруднена. Кроме того, график на рисунке 2b, будучи зашумленным, все еще далек от идеального графика координат вектора остатков, когда точки абсолютно случайно разбросаны вокруг нулевого уровня. Это говорит о том, что регрессионная модель (15), по-видимому, очень близка к истинной функциональной зависимости температуры кипения воды от давления, но тем не менее не является таковой.

В заключение напомним, что параметр T_0 , который определялся для обеих моделей (13) и (15), теоретически равен $T_0 = ML/R$, $M = 0,018 \frac{\text{кг}}{\text{моль}}$ — молярная масса воды. Поскольку удельная теплота парообразования L зависит от давления, интересно выяснить, каким значениям L соответствуют найденные нами значения этого параметра. Для параметра $T_0 \approx 4816,831 \text{ К}$ из набора (14) значение удельной теплоты парообразования воды составляет $L \approx 2223,8 \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$. По таблицам книги [Ривкин, Александров, 1984] находим, что вода обладает такой удельной теплотой парообразования при давлении, приблизительно равном $P \approx 1,56 \cdot 10^5 \text{ Па}$, когда температура кипения воды составляет $T \approx 386 \text{ К}$. В случае параметра $T_0 \approx 5447,004 \text{ К}$ из набора (16) значение удельной теплоты парообразования воды приближенно равно $L \approx 2514,7 \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$. Это значение является очень близким к максимально возможной удельной теплоте парообразования $L_{\text{max}} \approx 2501 \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$, которой вода обладает при давлении $P \approx 610,8 \text{ Па}$ и температуре кипения $T = 273,15 \text{ К}$ [Ривкин, Александров, 1984].

Зависимость удельного сопротивления золота и хрома от температуры

Для описания температурной зависимости удельного электрического сопротивления ρ металлов, как правило, используется формула Блоха–Грюнайзена [Ziman, 1960; Cvijović, 2011]:

$$\rho = \rho_0 f(T, \theta_R, n) = \rho_0 (T/\theta_R)^n \cdot \mathcal{F}_n(\theta_R/T). \quad (17)$$

Здесь ρ_0 — коэффициент пропорциональности, имеющий размерность удельного сопротивления, различный для разных металлов (то же, что и k в ранее использовавшихся нами обозначениях параметров регрессионной модели); T — абсолютная температура; θ_R — характеристическая температура, являющаяся аналогом температуры Дебая θ_D , определяемой из температурной зависимости теплоемкости твердого тела (обычно θ_R и θ_D близки по величине); $\mathcal{F}_n(x)$ — функция Блоха–Грюнайзена порядка n и аргумента x [Cvijović, 2011]:

$$\mathcal{F}_n(x) = \int_0^x \frac{t^n}{(\exp(t) - 1)(1 - \exp(-t))} dt. \quad (18)$$

Порядок n функции Блоха–Грюнайзена в зависимости от механизма рассеяния электронов принимает следующие значения:

- $n = 5$ — сопротивление металла обусловлено электрон-фононным взаимодействием;
- $n = 3$ — сопротивление металла обусловлено $s - d$ рассеянием электронов;
- $n = 2$ — сопротивление металла обусловлено электрон-электронным взаимодействием.

Модель Блоха–Грюнайзена (17), (18) была использована нами для описания экспериментальных температурных зависимостей удельного сопротивления золота и хрома. Экспериментальные данные мы позаимствовали из книги [American Institute of Physics Handbook, 1972]: 19 значений удельного сопротивления золота в диапазоне температур от 10К до 250К и 18 значений удельного сопротивления хрома в диапазоне температур от 15 К до 250 К.

Как известно, преобладающим механизмом, формирующим сопротивление простых немагнитных металлов, является электрон-фононное взаимодействие. Поэтому первоначально в модели Блоха–Грюнайзена мы зафиксировали параметр $n = 5$. Далее методом наибольшего косинуса была подобрана характеристическая температура θ_R . При этом ни высокотемпературные, ни низкотемпературные асимптотики функции Блоха–Грюнайзена не использовались: метод наибольшего косинуса применялся в условиях, когда эта функция определялась непосредственно интегралом (18). Коэффициент пропорциональности ρ_0 , как обычно, вычислялся методом первой главной компоненты (3). В результате нами были получены следующие наборы параметров модели Блоха–Грюнайзена для золота:

$$\theta_R \approx 179,702 \text{ К}, \quad \rho_0 \approx 5,403 \text{ мкОм} \cdot \text{см}; \quad (19)$$

для хрома:

$$\theta_R \approx 525,257 \text{ К}, \quad \rho_0 \approx 116,031 \text{ мкОм} \cdot \text{см}. \quad (20)$$

При этом параметр $\varepsilon(k, \mathbf{p})$, характеризующий точность описания регрессионной моделью экспериментальных данных, для золота оказался равным $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00554$, а для хрома — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00845$. Таким образом, механизм электрон-фононного взаимодействия лучше объясняет температурную зависимость удельного сопротивления золота, чем аналогичную зависимость для хрома.

Интересно также сравнить найденные методом наибольшего косинуса характеристические температуры θ_R с температурами Дебая золота и хрома. В той же книге [American Institute of Physics Handbook, 1972] находим, что для золота — $\theta_D \approx 165 \text{ К}$, а для хрома — $\theta_D \approx 630 \text{ К}$. Как видим, характеристическая температура θ_R золота незначительно отличается от температуры Дебая этого металла, в то время как для хрома это различие значительно больше.

Существуют исследования, в которых аппроксимация экспериментальных данных функцией Блоха–Грюнайзена приводила к нецелым значениям ее порядка: $n = 1,5$ [Takagi et al., 1992], $n = 4,5$ [Varshney, Kaurav, 2005]. А каким будет порядок n функции Блоха–Грюнайзена, если сделать n одним из параметров регрессионной модели (17), (18), а затем аппроксимировать получившейся моделью температурные зависимости удельного сопротивления золота и хрома? Мы нашли ответ на этот вопрос, и он оказался неожиданным.

Наборы параметров регрессионной модели (17), (18) с варьируемым параметром n , найденные нами методом наибольшего косинуса в связке с методом первой главной компоненты, оказались следующими:

$$\theta_R \approx 194,134 \text{ К}, \quad \rho_0 \approx 4,194 \text{ мкОм} \cdot \text{см}, \quad n \approx 3,87 \quad (21)$$

в случае золота и

$$\theta_R \approx 541,617 \text{ К}, \quad \rho_0 \approx 107,652 \text{ мкОм} \cdot \text{см}, \quad n \approx 4,58 \quad (22)$$

в случае хрома. При этом параметр $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ для золота оказался равным $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00515$, а для хрома — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00821$, то есть для обоих металлов модель Блоха–Грюнайзена с дробным n немного точнее описывает экспериментальные данные, чем модель с $n = 5$.

Отметим, что, определяя наборы параметров (21), (22) мы, по-прежнему использовали функцию Блоха–Грюнайзена в изначальном виде (18), никак ее не упрощая. Это демонстрирует высокую эффективность метода наибольшего косинуса при решении сложных нелинейных регрессионных задач.

Большой неожиданностью является то, что подобранное для золота по экспериментальным данным значение порядка функции Блоха–Грюнайзена (21) оказалось весьма далеким от значения $n = 5$, свойственного электрон-фононному механизму рассеяния электронов. Оно даже ближе к значению $n = 3$, связанному с $s - d$ рассеянием электронов. В тоже время для хрома значение порядка функции Блоха–Грюнайзена (22) оказалось очень близким к $n = 5$.

Нецелые значения порядка функции Блоха–Грюнайзена применительно к золоту и хрому указывают на то, что температурная зависимость удельного сопротивления этих металлов обусловлена не только рассеянием электронов на фононах, но также и другими механизмами рассеяния, например $s - d$ рассеянием электронов.

В соответствии с правилом Матиссена результирующее удельное сопротивление металла, при наличии нескольких механизмов рассеяния электронов, равно сумме парциальных удельных сопротивлений, формируемых каждым отдельным механизмом [Ziman, 1960]. Основываясь на этом правиле, мы уточнили модель Блоха–Грюнайзена с $n = 5$, добавив в нее слагаемое, отвечающее за $s - d$ рассеяние электронов:

$$\rho = \rho_0 f(T, \theta_R^{(1)}, \theta_R^{(2)}, p) = \rho_0 \left(p \left(T / \theta_R^{(1)} \right)^3 \cdot \mathcal{F}_3 \left(\theta_R^{(1)} / T \right) + (1 - p) \left(T / \theta_R^{(2)} \right)^5 \cdot \mathcal{F}_5 \left(\theta_R^{(2)} / T \right) \right). \quad (23)$$

Здесь $p \in [0; 1]$ — доля удельного сопротивления металла, приходящаяся на механизм $s - d$ рассеяния электронов; $\theta_R^{(1)}$ — характеристическая температура для механизма $s - d$ рассеяния электронов; $\theta_R^{(2)}$ — характеристическая температура для механизма рассеяния электронов на фононах.

Отметим, что, используя правило Матиссена, модель Блоха–Грюнайзена можно было представить в виде линейной комбинации всех трех механизмов рассеяния электронов с $n = 5$, $n = 3$ и $n = 2$. Однако мы располагали очень малым количеством экспериментальных данных, что не позволило нам надежно определить значения всех параметров такой модели.

Результаты аппроксимации экспериментальных температурных зависимостей удельного сопротивления золота и хрома регрессионной моделью (23), (18), полученные методом наибольшего косинуса (значения параметров p , $\theta_R^{(1)}$, $\theta_R^{(2)}$) и методом первой главной компоненты (значение параметра ρ_0), оказались следующими:

$$\theta_R^{(1)} \approx 827,125 \text{ К}, \quad \theta_R^{(2)} \approx 171,95 \text{ К}, \quad \rho_0 \approx 5,617 \text{ мкОм} \cdot \text{см}, \quad p \approx 0,109 \quad (24)$$

для золота и

$$\theta_R^{(1)} \approx 45,098 \text{ К}, \quad \theta_R^{(2)} \approx 534,022 \text{ К}, \quad \rho_0 \approx 117,217 \text{ мкОм} \cdot \text{см}, \quad p \approx 5,22 \cdot 10^{-4} \quad (25)$$

для хрома.

Как и следовало ожидать, для хрома поправка на наличие механизма $s - d$ рассеяния электронов получилась небольшой: параметр p очень мал. Кроме того, из-за маленькой характеристической температуры, $\theta_R^{(1)} \approx 45,098 \text{ К}$, вклад этого механизма рассеяния в удельное сопротивление хрома обнаруживается лишь при очень низких абсолютных температурах.

Ситуация с золотом совершенно иная: значение параметра $p \approx 0,109$ говорит о том, что не менее 10,9 % всех актов рассеяния электронов в золоте приходится именно на $s - d$ рассеяние, а очень большая характеристическая температура, $\theta_R^{(1)} \approx 827,125 \text{ К}$, приводит к тому, что вклад в удельное сопротивление золота от этого механизма рассеяния обнаруживается во всем исследованном нами температурном диапазоне (от 10 К до 250 К).

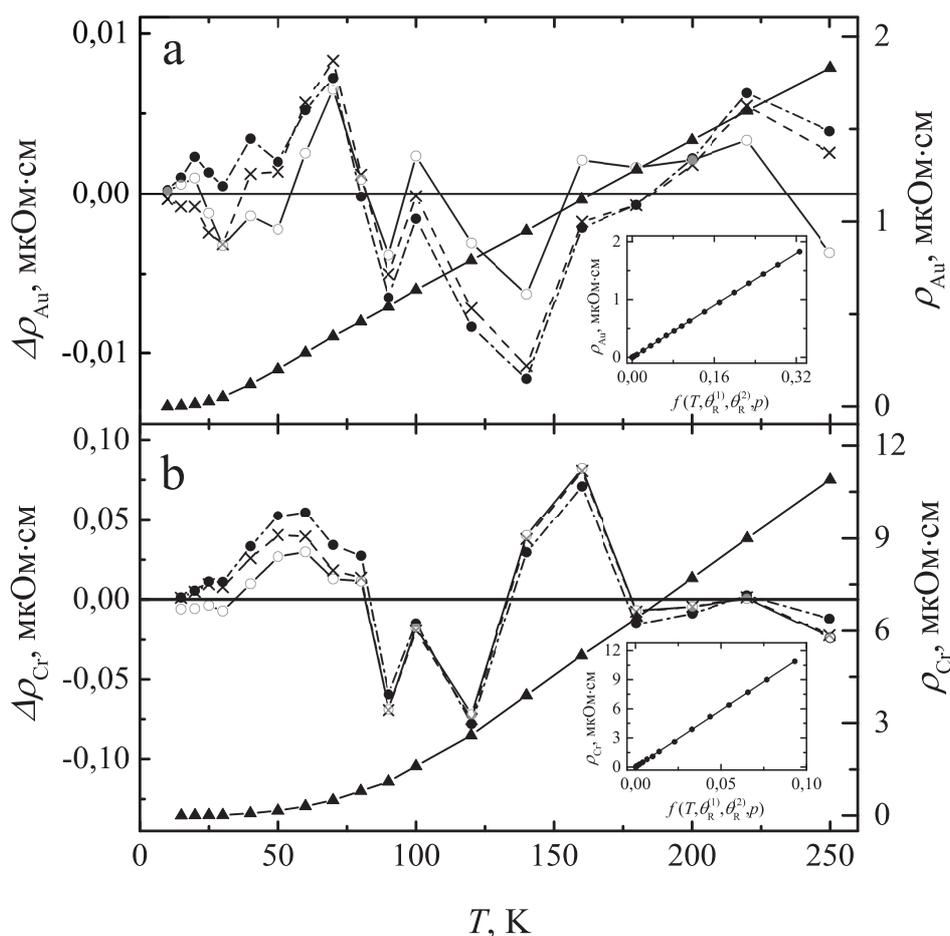


Рис. 3. Абсолютная погрешность $\Delta\rho$ аппроксимации экспериментальных температурных зависимостей удельного сопротивления золота (график *a*, левая шкала) и хрома (график *b*, левая шкала) с помощью различных регрессионных моделей: точки (●) — модель Блоха–Грюнайзена (17), (18) с $n = 5$ и параметрами (19), (20); крестики (×) — та же модель с варьируемым значением n и параметрами (21), (22); кружочки (○) — модель (23) с параметрами (24), (25). Треугольники (▲) показывают экспериментальные температурные зависимости удельного сопротивления золота (график *a*, правая шкала) и хрома (график *b*, правая шкала). На вставках изображены «спрямленные» зависимости экспериментальных значений удельного сопротивления золота и хрома от соответствующих значений $f(T, \theta_R^{(1)}, \theta_R^{(2)}, p)$ регрессионной модели (23) с параметрами (24), (25) соответственно

Значение параметра $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ для регрессионной модели (23), (18) со значениями параметров (24), (25) в случае золота составило $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00358$, а в случае хрома — $\varepsilon(k, \mathbf{p}) \approx 0,00777$. В обоих случаях значения $\varepsilon(k, \mathbf{p})$ меньше аналогичных значений этого параметра, полученных для модели Блоха–Грюнайзена с наборами параметров (21), (22). Таким образом, регрессионная модель (23), (18) со значениями параметров (24), (25) дает наилучшее (из рассмотренных нами) описание экспериментальных температурных зависимостей удельного сопротивления золота и хрома.

На рисунке 3*a* представлены графики зависимости от температуры разности $\Delta\rho$ между экспериментальными значениями удельного сопротивления золота и значениями удельного сопротивления, рассчитанными с помощью рассмотренных нами регрессионных моделей: точки (●) соответствуют модели Блоха–Грюнайзена (23), (18) с $n = 5$ и набором параметров (19); крестики (×) — та же модель, но с дробным значением n (см. набор параметров (21)); кружочки (○) —

линейная комбинация функций Блоха–Грюнайзена с $n = 3$ и $n = 5$ (регрессионная модель (23) с набором параметров (24)). Правой шкале рисунка 3а соответствует график экспериментальной температурной зависимости удельного сопротивления ρ золота (треугольники (\blacktriangle)). Графики аналогичных температурных зависимостей величин $\Delta\rho$ и ρ для хрома изображены на рисунке 3б.

Вставки рисунка 3 демонстрируют «спрямленные» зависимости экспериментальных значений удельного сопротивления золота и хрома от соответствующих значений регрессионной модели (23), вычисленных для наборов параметров (24), (25). Как для золота, так и для хрома графики этих зависимостей внешне практически не отличаются от графика прямой пропорциональности.

Как видим, рисунок 3 подтверждает сделанные нами заключения о точности рассмотренных регрессионных моделей. Как для золота, так и для хрома переход от классической модели Блоха–Грюнайзена с $n = 5$ к модели с дробным n лишь ненамного улучшил согласие экспериментальных данных с регрессионной моделью: по абсолютной величине остаток $\Delta\rho$ уменьшился незначительно. В тоже время регрессионная модель (23) значительно лучше согласуется с экспериментальными данными, чем две предыдущие модели. Для золота это заметно во всем исследованном температурном диапазоне: отдельные значения величины $\Delta\rho$ уменьшились по модулю почти в два раза, а их разброс вокруг нулевого уровня стал более хаотичным. В случае хрома существенное уменьшение величины $|\Delta\rho|$ произошло лишь в низкотемпературной области: от 0 К до приблизительно 50 К, что находится в хорошем согласии с оценкой характеристической температуры $\theta_R^{(1)} \approx 45,098$ К механизма $s - d$ рассеяния электронов, полученной нами для хрома.

Разумеется, мы не ставили перед собой цель разобраться в механизмах рассеяния электронов, определяющих температурную зависимость удельного сопротивления золота и хрома. Самым важным для нас было показать возможности метода наибольшего косинуса при определении параметров регрессионных моделей, имеющих сложную зависимость от параметров. Именно такими являются модель Блоха–Грюнайзена (17) с варьируемым параметром n и регрессионная модель (23). Тот факт, что нам без каких-либо трудностей удалось определить методом наибольшего косинуса параметры данных моделей, говорит о высокой эффективности этого метода в решении сложных регрессионных задач.

Заключение

Традиционно задачи регрессионного анализа решаются методом наименьших квадратов. При этом параметры регрессионной модели считаются равноправными, а их значения определяются совместно, причем так, чтобы проекция вектора экспериментальных данных на вектор регрессионной модели была максимальна [Лагутин, 2013]. В методе «спрямления», предложенном в [Толстой, Феофилов, 1950], неявно присутствует идея разделения параметров модельного сигнала на две группы. Первая группа параметров отвечает за «спрямление» зависимости экспериментального сигнала от модельного. Вторая группа состоит из масштабных множителей, не влияющих на «спрямление».

Опираясь на эту идею, мы выделили группу параметров, определяющих угол между вектором экспериментальных данных и вектором регрессионной модели, и предложили находить значения этих параметров по максимуму косинуса угла между данными векторами. Кроме того, любая регрессионная модель содержит масштабный множитель, от которого зависит лишь длина вектора регрессионной модели, но не угол между векторами. Определить его можно, аппроксимируя зависимость координат вектора экспериментальных данных от соответствующих координат вектора регрессионной модели функцией прямой пропорциональности: $y = k \cdot x$.

Предложенный нами метод наибольшего косинуса оказался очень простым в реализации, робастным и эффективным для регрессионного анализа сложных физических процессов. Однако область его применения не ограничивается решением регрессионных задач в физике. Очевидно,

что любая задача, в любой области науки, успешно решаемая методом наименьших квадратов, может быть не менее успешно решена и нашим методом.

Список литературы

- Аоки М. Введение в методы оптимизации. — М.: Наука, 1977. — 344 с.
- Казаков Б. Н., Михеев А. В. Использование прямоугольных функций при обработке экспериментальных данных по кинетике люминесценции // Оптика и спектроскопия. — 1999. — Т. 87, № 6. — С. 934–942.
- Лагутин М. Б. Наглядная математическая статистика. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. — 472 с.
- Михеев А. В., Казаков Б. Н. Анализ релаксационных процессов компьютерным моделированием метода «спрямления» // Сборник трудов XXVI Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях». — Нижний Новгород: Нижегород. гос. техн. ун-т, 2013. — Т. 10. — С. 66–70.
- Пытьев Ю. П., Чуличков А. И. Методы морфологического анализа изображений. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 336 с.
- Ривкин С. Л., Александров А. А. Термодинамические свойства воды и водяного пара. — М.: Энергоатомиздат, 1984. — 80 с.
- Толстой Н. А., Феофилов П. П. Новый метод исследования релаксационных процессов и его применение к изучению некоторых физических явлений // Успехи физических наук. — 1950. — Т. XLI, вып. 1. — С. 44–107.
- Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике Т. 4: Кинетика. Теплота. Звук. — М.: Либроком, УРСС, 2012. — 264 с.
- American Institute of Physics Handbook (Coord. Ed. Gray D. E.). — New York: McGraw-Hill, 1972. — 2368 p.
- Antia H. M. Numerical Methods for Scientists and Engineers. — Boston–Basel–Berlin: Birkhäuser Verlag, 2002. — 864 p.
- Cvijović D. The Bloch–Grüneisen function of arbitrary order and its series representations // Theoretical and Mathematical Physics. — 2011. — Vol. 166, No. 1. — P. 37–42.
- Draper N. R., Smith H. Applied Regression Analysis. — New York: Wiley, 1998. — 706 p.
- Takagi H., Batlogg B., Kao H. L., Kwo J., Cava R. J., Krajewski J. J., and Peck W. F. Systematic Evolution of Temperature-Dependent Resistivity in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ // Physical Review Letters. — 1992. — Vol. 69. — P. 2975–2978.
- Varshney D., Kaurav N. Interpretation of Temperature-Dependent Resistivity of La–Pb–MnO_3 : Role of Electron–Phonon Interaction // Journal of Low Temperature Physics. — 2005. — Vol. 141, No. 3–4. — P. 165–178.
- Ziman J. M. Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids. — Oxford: Clarendon Press, 1960. — 555 p.