三系数一元非线性回归的程序设计

陈 明 浚

（化工系）

本文针对化工中常用的七种方程推导整理出如表1所示的求待定系数的方程组，并从中找出内在规律，提出以通式表示的方程组，为编制通用程序创造了有利条件。新编制的程序已在Pc—1500计算机上通过。

由于化工现象的复杂性，故经验方法在化工研究中常占有很大的比重，即用经验方程来描述所研究的对象。其中一元和多元线性回归已经有较成熟的程序，而包括a、b、c三个待定系数的一元非线性回归的通用程序尚未见报道。考虑到该类方程在化工中应用较多，例如液体温度和饱和蒸气压的关系，常用的Antoine公式即是一例；此外，一些高分子合成的动力学曲线常可用$1/y=a+be^{cx}$型式的方程表示，因此，有必要尽可能准确地确定回归方程的待定系数。本文就化工中常用的七种类型方程设计了通用的回归程序，并提出对分法或0.618法求根时，含根区间端点值确定的简易方法，以加速方程组求解时迭代过程的收敛，并得到较为准确的回归方程。

一、回归方法简述

对于包括a、b、c三个待定系数的一元非线性方程，若常数项a已知，则可化为线性方程，若a未知，比较简单的方法是先估算a值，然后按线性方程由最小二乘法确定待定系数。由于在确定a的估算值时带有一定的随意性，因比，得到的回归方程其拟合程度可能很不理想。

比较准确的方法是直接从一元非线性方程出发，根据最小二乘法原理将残差平方和分别对三个系数求偏导，得到方程组，然后用迭代法求解方程组。以方程$y=a+bx^c$为例：

当残差平方和$\sum\limits_{i=1}^{N}\delta_i^2=\sum\limits_{i=1}^{N}(y_i-a-bx_i^c)^2$为极小值时，回归方程应满足

$$\frac{\partial\sum\limits_{i=1}^{N}\delta_i^2}{\partial a}=0$$

$$\frac{\partial\sum\limits_{i=1}^{N}\delta_i^2}{\partial b}=0$$

$$\frac{\partial\sum\limits_{i=1}^{N}\delta_i^2}{\partial c}=0$$

以上三式经整理后可得到如下方程组：

$$a=\frac{\Sigma y\cdot\Sigma x^{2C}-\Sigma x^{C}\Sigma y x^{C}}{N\Sigma x^{2C}-(\Sigma x^{C})^{2}} \tag{A}$$

$$b=\frac{N\Sigma y x^{C}-\Sigma y\Sigma x^{C}}{N\Sigma x^{2C}-(\Sigma x^{C})^{2}} \tag{B}$$

$$a\Sigma x^{C}\ln x+b\Sigma x^{2C}\ln x-\Sigma y x^{C}\ln x=0 \tag{C}$$

然后用对分法或0.618法求解方程组。

表1 列出七种类型方程的求解待定系数的方程组。本文提出一种简易方法以估算含根区间的端点值，即从给定的实验数据中选取两组数据（x_1，y_1）和（x_2，y_2），利用求x（或y）的算术平均值或几何平均值的简单关系式，便可从原方程消去a、b而求得c的估算值，表2列出七种类型方程的c值估算式。一般说来即可据此确定含根区间的端点值。

二、程序设计及框图

从表1可以看出方程组的形式是比较复杂的，而且由不同类型方程得到方程组也有很大差异。但是，各方程组的基本型式却有类似之处，这样就为编制通用程序创造了有利条件。方程组的各式可以分别用下列通式表示：

$$a=\frac{F\cdot H-G\cdot I}{N\cdot F-G^{2}} \tag{D}$$

$$b=\frac{N\cdot I-H\cdot G}{N\cdot F-G^{2}} \tag{E}$$

$$a\cdot J+b\cdot K-L=0 \tag{F}$$

式中：$F=f_1(x, c)$

$H=f_2(y)$

$G=f_3(x, c)$

$I=f_4(x, y, c)$

$J=f_5(x, c)$

$K=f_6(x, c)$

$L=f_7(x, y, c)$

N为实验数据组数

通式中各变量的计算式分别列于表3。

本程序的框图见附表4。

三、应用实例

简捷法计算精馏塔理论板数时需要使用Gilliand关联图，为了适应电算的需要，要求能以经验方程代替原关联图。为此，我们对Gilliand关联图所关联的几十组原始数据进行了回

归。在表1所列举的七种方程中，以方程（2）$y=a+bx^c$的回归效果最好。

由表2可知，方程（2）的c值可由下式计算：

$$c=\ln\left(\frac{y_1-y_3}{y_2-y_3}\right)^2\Big/\ln\frac{x_1}{x_2} \qquad (G)$$

式（G）中的y_3系与$x_3(=\sqrt{x_1x_2})$对应的实验点值。从选取两组数据（0.156，0.506）和（1，0）求出x_3，便可得到第三组数据为（0.395，0.34），将此三组数据代入式（G）便可求得c＝0.77。现若取含根区间的端点值为0.6和0.8，则由PC—1500电子计算机便可得到回归方程的待定系数和剩余标准差分别为

a＝0.6916770102

b＝－0.6919568567

c＝0.6399689438

s＝0.01586296666

与文献上已发表的几种经验方程相比较，由本文所述方法得到的回归方程计算而得的理论板数与逐板法计算结果最为接近。电算结果还表明：对于Gilliland图所依据的数十组原始数据来说，回归方程$y=0.692-0.692x^{0.64}$的剩余标准差和相关指数等均优于其它各经验方程。

表1　　求七种方程的待定系数的方程组

序号	方程类型	方程组
1	$\lg y=a+\frac{b}{c+x}$	$a=\dfrac{\Sigma\lg y\,\Sigma\frac{1}{(c+x)^2}-\Sigma\frac{1}{c+x}\Sigma\frac{1}{c+x}\lg y}{N\Sigma\frac{1}{(c+x)^2}-\left(\Sigma\frac{1}{c+x}\right)^2}$ $b=\dfrac{N\Sigma\frac{1}{c+x}\lg y-\Sigma\frac{1}{c+x}\Sigma\lg y}{N\Sigma\frac{1}{(c+x)^2}-\left(\Sigma\frac{1}{c+x}\right)^2}$ $a\Sigma\frac{1}{(c+x)^2}+b\Sigma\frac{1}{(c+x)^3}-\Sigma\frac{1}{(c+x)^2}\lg y=0$
2	$y=a+bx^c$	$a=\dfrac{\Sigma y\Sigma x^{2c}-\Sigma x^c\Sigma yx^c}{N\Sigma x^{2c}-(\Sigma x^c)^2}$ $b=\dfrac{N\Sigma yx^c-\Sigma y\Sigma x^c}{N\Sigma x^{2c}-(\Sigma x^c)^2}$ $a\Sigma x^c\ln x+b\Sigma x^{2c}\ln x-\Sigma yx^c\ln x=0$

表 1 （续）

序号	方程类型	方程组
3	$y=a+be^{Cx}$	$a=\dfrac{\sum y\sum e^{2Cx}-\sum e^{Cx}\sum ye^{Cx}}{N\sum e^{2Cx}-(\sum e^{Cx})^2}$ $b=\dfrac{N\sum ye^{Cx}-\sum y\sum e^{Cx}}{N\sum e^{2Cx}-(\sum e^{Cx})^2}$ $a\sum xe^{cx}+b\sum xe^{2Cx}-\sum xye^{Cx}=0$
4	$y=a+bc^x$	$a=\dfrac{\sum y\sum c^{2x}-\sum c^x\sum yc^x}{N\sum c^{2x}-(\sum c^x)^2}$ $b=\dfrac{N\sum yc^x-\sum c^x\sum y}{N\sum c^{2x}-(\sum c^x)^2}$ $a\sum c^x(\dfrac{x}{c})+b\sum c^{2x}(\dfrac{x}{c})-\sum yc^x(\dfrac{x}{c})=0$
5	$y=a(x+c)^b$ 变量代换： $Y=\ln y$，$X=x$， $A=\ln a$，$B=b$ $C=c$ 化为 $Y=A+B\ln(X+c)$	$A=\dfrac{\sum y\sum[\ln(x+c)]^2-\sum y\ln(x+c)\sum\ln(x+c)}{N\sum[\ln(x+c)]^2-[\sum\ln(x+c)]^2}$ $B=\dfrac{N\sum y\ln(x+c)-\sum y\sum\ln(x+c)}{N\sum[\ln(x+c)]^2-[\sum\ln(x+c)]^2}$ $A\sum\dfrac{1}{x+c}+B\sum\ln(x+c)\dfrac{1}{x+c}-\sum y\dfrac{1}{x+c}=0$

表1 （续）

序号	方程类型	方程组
6	$y=a+\dfrac{x}{b+cx}$ 变量代换： $X=\dfrac{1}{x}$，$Y=y$，$A=a$， $B=1/b$，$C=c/b$ 化为 $Y=A+\dfrac{B}{X+C}$	$A=\dfrac{\sum Y\sum(\dfrac{1}{X+C})^2-\sum\dfrac{1}{X+C}\sum Y\dfrac{1}{X+C}}{N\sum(\dfrac{1}{X+C})^2-(\sum\dfrac{1}{X+C})^2}$ $B=\dfrac{N\sum Y\dfrac{1}{X+C}\sum Y\sum\dfrac{1}{X+C}}{N\sum(\dfrac{1}{X+C})^2-(\sum\dfrac{1}{X+C})^2}$ $A\sum(\dfrac{1}{X+C})^2+B\sum(\dfrac{1}{X+C})^3-\sum Y(\dfrac{1}{X+C})^2=0$

表 1（续）

7	$y=\dfrac{b}{a+x^{c}}$ 变量代换 $X=x$，$Y=1/y$ $A=a/b$，$B=1/b$， $C=c$ 化为方程式 $Y=A+BX^{C}$	$A=\dfrac{\Sigma Y\Sigma X^{2C}-\Sigma X^{C}\Sigma YX^{C}}{N\Sigma X^{2C}-(\Sigma X^{C})^{2}}$ $B=\dfrac{N\Sigma YX^{C}-\Sigma Y\Sigma X^{C}}{N\Sigma X^{2C}-(\Sigma X^{C})^{2}}$ $A\Sigma X^{C}\ln X+B\Sigma X^{2C}\ln X-\Sigma YX^{C}\ln X=0$

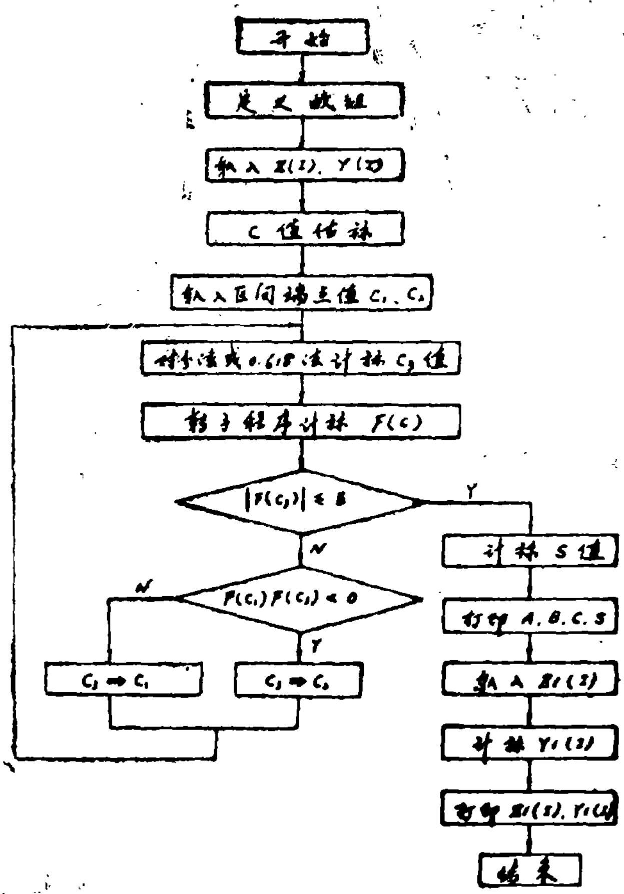
表 2　　七种方程的C值估算式

序号	方程类型	C 值估算式	备注
1	$\lg y=a+\dfrac{b}{x+c}$	$\dfrac{2x_1x_2-x_2x_3-x_1x_3}{2x_5-x_2-x_1}$	$y_3=\sqrt{y_1y_2}$
2	$y=a+bx^{c}$	$\ln\left(\dfrac{y_1-y_3}{y_2-y_3}\right)^2/\ln\dfrac{x_1}{x_2}$	$x_3=\sqrt{x_1x_2}$
3	$y=a+be^{cx}$	$\dfrac{1}{x_1-x_2}\ln\left(\dfrac{y_1-y_3}{y_2-y_3}\right)^2$	$x_3=\frac{1}{2}(x_1+x_2)$
4	$y=a+bc^{x}$	$\left(\dfrac{y_1-y_3}{y_2-y_3}\right)^{\frac{2}{x_1-x_2}}$	$x_3=\frac{1}{2}(x_1+x_2)$
5	$y=a(x+c)^{b}$	$\dfrac{X_3^2-X_1X_2}{X_1+X_2-2X_3}$	$Y_3=\sqrt{Y_1Y_2}$
6	$y=a+\dfrac{x}{b+cx}$ 化为 $Y=A+\dfrac{B}{X+C}$	$\dfrac{X_1X_3+X_2X_3-2X_1X_2}{X_1+X_2-2X_3}$	$X_3=\frac{1}{2}(Y_1+Y_2)$
7	$y=\dfrac{b}{a+x^{c}}$ 化为 $Y=A+BX^{C}$	$\ln\left(\dfrac{Y_1-Y_3}{Y_2-Y_3}\right)^2/\ln\dfrac{X_1}{X_2}$	$X_3=\sqrt{X_1X_2}$

表3 通式中各变量的计算式

序号	方程类型	F	H	G	I	J	K	L
1	$l_g y = a + \frac{b}{x+c}$	$\Sigma(\frac{1}{c+x})^2$	$\Sigma l_g y$	$\Sigma\frac{1}{c+x}$	$\Sigma\frac{1}{c+x}l_g y$	$\Sigma(\frac{1}{c+x})^2$	$\Sigma(\frac{1}{c+x})^3$	$\Sigma(\frac{1}{c+x})^2 l_g y$
2	$y = a + bx^C$	Σx^{2C}	ΣY	Σx^C	$\Sigma y x^C$	$\Sigma X^C \ln x$	$\Sigma x^{2C}\ln x$	$\Sigma y x^C \ln x$
3	$y = a + be^{Cx}$	Σe^{2Cx}	ΣY	Σe^{Cx}	$\Sigma y e c^x$	$\Sigma X e^{Cx}$	$\Sigma x e^{2Cx}$	$\Sigma x y e^{Cx}$
4	$y = a + bc^x$	Σc^{2x}	ΣY	Σc^x	$\Sigma y e^x$	$\Sigma c^x(\frac{x}{c})$	$\Sigma c^{2x}(\frac{x}{c})$	$\Sigma y^{Cx}(\frac{x}{c})$
5	$y = a(x+c)^b$	$\Sigma[\ln(x+c)]^2$	ΣY	$\Sigma\ln(x+c)$	$\Sigma Y\ln(x+c)$	$\Sigma\frac{1}{x+c}$	$\Sigma\frac{1}{x+c}\ln(x+c)$	$\Sigma Y\frac{1}{X+c}$
6	$y = a + \frac{x}{b+cx}$	$\Sigma(\frac{1}{X+c})^2$	ΣY	$\Sigma\frac{1}{X+c}$	$\Sigma Y\frac{1}{X+c}$	$\Sigma(\frac{1}{X+c})^2$	$\Sigma(\frac{1}{X+c})^3$	$\Sigma Y(\frac{1}{X+c})^2$
7	$y = \frac{b}{a+x^C}$	Σx^{2x}	$\Sigma 1/y$	Σx^C	$\Sigma\frac{1}{y}x^C$	$\Sigma X^C \ln x$	$\Sigma X^{2C}\ln x$	$\Sigma\frac{1}{y}X^C\ln x$

表4　框图



参 考 文 献

[1]　Gilliland, E·R·, I·E·C·, 1220～1223, VO1·32, （1940）

[2]　河村祐治等，化工数学，1980

[3]　回归分析方法，中国科学院数学研究所，1975

[4]　冯师颜编，误差理论及实验数据处理，1964

[5]　数学手册，1979