

$D-u$ 关系的最小绝对值线性拟合法^{*}

陈修芳¹, 陈高波², 龚自正¹

(1. 西南交通大学物理研究所, 四川成都 610031;

2. 武汉工业学院数理科学系, 湖北武汉 430023)

摘要: 采用最小绝对值方法对几类物质的冲击波速度 D 与波后粒子速度 u 的关系进行了直线拟合, 并将其与常用的最小二乘法拟合的结果进行了比较。结果显示: 对于实验数据分散性较小的密实材料(金属、离子晶体、氧化物等), 两种方法拟合的线性系数一致; 而对于实验数据分散性较大的一些疏松材料(包括液体等), 两种方法拟合的线性系数有差异。对所有物质, 最小绝对值法拟合的平均绝对误差比最小二乘法拟合的要小, 因而最小绝对值法较最小二乘法有更高的准确性。同时讨论了导致这两种拟合差异的因素。

关键词: $D-u$ 线; 线性拟合; 最小绝对值法; 最小二乘法

中图分类号: O521.3; O347.1

文献标识码: A

1 引言

在冲击波实验测量中, 技术成熟、精度高的方法是速度测量法, 实验测量的量是样品中的冲击波速度 D 和波后粒子速度 u 。在无相变的情况下, 实验和理论都证明, 冲击波速度 D 和波后粒子速度 u 具有线性关系^[1]

$$D = c_0 + \lambda u \quad (1)$$

式中: c_0 为零压体积声速, λ 为依赖于样品材料性质的常数, 它们可通过拟合实验数据 (u_i, D_i) ($i=1, 2, \dots, n$) 而得到。(1)式也称为雨贡纽(Hugoniot)关系。精确地拟合出 c_0 和 λ , 对建立材料的高压物态方程、理解材料在冲击载荷下的动态响应特性等有着十分关键的作用。

为了由实验数据得到准确的 $D-u$ 关系, 人们常用近似标定曲线的拟合直线代表 $D-u$ 关系, 并希望得到误差最小的直线。求取拟合直线的方法也是各种各样的, 其中最小二乘法^[2]因使用方便而成为使用最多的一种拟合方法。

本工作应用最小绝对值直线拟合法对几类物质的 $D-u$ 实验数据进行了拟合, 得到了较好的拟合直线和较小的平均绝对误差, 并把所得的结果和最小二乘法拟合的结果进行了比较。

2 最小绝对值线性拟合法

假设在实验中测得的冲击波速度与波后粒子速度的数据为 (u_i, D_i) ($i=1, 2, \dots, n$), 常用的最小二乘法^[2]是求属于直线型类 H 的函数 $\Phi(u_i)$, 使得拟合的残差平方和最小, 即

$$\min_{\Psi \in H} \sum_{i=1}^n [D_i - \Psi(u_i)]^2 = \min_{c_0, \lambda} \sum_{i=1}^n (D_i - c_0 - \lambda u_i)^2 \quad (2)$$

* 收稿日期: 2004-07-24; 修回日期: 2004-11-01

基金项目: 国家自然科学基金重大项目(10299040); 国家自然科学基金面上项目(40474033)

作者简介: 陈修芳(1975—), 女, 硕士研究生

通讯作者: 龚自正, 博士, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为高压物理、地球深部物理、冲击动力学。

E-mail: zzhgong@swjtu.edu.cn

最小二乘法对直线(1)式的拟合系数是

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^n (u_i - \bar{u})(D_i - \bar{D})}{\sum_{i=1}^n (u_i - \bar{u})^2}$$

$$c_0 = \bar{D} - \lambda \bar{u}$$

式中: $\bar{u} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u_i$, $\bar{D} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D_i$ 。

最小绝对值拟合的原理非常简单,就是使拟合的残差绝对值之和最小,即

$$\min_{\Psi \in H} \sum_{i=1}^n |D_i - \Psi(u_i)| = \min_{c_0, \lambda} \sum_{i=1}^n |D_i - c_0 - \lambda u_i| \quad (3)$$

设有测量数据 $(u_i, D_i) (i=1, 2, \dots, n)$, 利用最小绝对值拟合直线(1)式的算法如下:

第1步, 固定 $i (i=1, 2, \dots, n)$, 把原点移至第 i 个数据点 (u_i, D_i) 处, 得 (X_j, Y_j) , 其中

$$X_j = u_j - u_i, Y_j = D_j - D_i \quad (j=1, 2, \dots, i-1)$$

$$X_j = u_{j+1} - u_i, Y_j = D_{j+1} - D_i \quad (j=i, i+1, \dots, n-1)$$

第2步, 计算 $Y_1/X_1, Y_2/X_2, \dots, Y_{n-1}/X_{n-1}$, 将其按由小到大的次序排列为

$$Y_{(1)}/X_{(1)} \leq Y_{(2)}/X_{(2)} \leq \dots \leq Y_{(n-1)}/X_{(n-1)}$$

第3步, 计算 $T = \sum_{i=1}^{n-1} |X_i|$;

第4步, 依次计算 $T_1 = |X_{(1)}|, T_2 = |X_{(1)}| + |X_{(2)}|, \dots, T_k = |X_{(1)}| + |X_{(2)}| + \dots + |X_{(k)}|$, 直到达到某个 k , 使得 $T_k \geq T/2$ 为止, 则 $\lambda_i = Y_{(k)}/X_{(k)}$;

第5步, 求 $M_i = \sum_{j=1}^{n-1} |Y_j - \lambda_i X_j|$;

第6步, 对每个 $i (i=1, 2, \dots, n)$ 重复第1~第5步, 得 n 个数, 即 $M_1, M_2, \dots, M_n$, 从中找出最小者, 设为 M_k , 则所寻求的拟合直线系数为

$$c_0 = D_k - \lambda_k u_k$$

$$\lambda = \lambda_k$$

3 算例及讨论

3.1 密实材料

利用最小绝对值法对一些金属、离子晶体、氧化物等密实材料的实验数据 (u_i, D_i) 进行了拟合, 实验数据均取自文献[3], 拟合结果列入表1, 并和最小二乘法拟合的结果(也列入表1)进行对比。从表1和图1、图2可以看出, 对密实材料而言, 最小绝对值法与最小二乘法拟合出的 c_0, λ 非常一致, 这说明最小绝对值法的拟合结果是合理的、可靠的。但是, 最小绝对值方法拟合所获得的平均绝对误差均比最小二乘法拟合的要小。

3.2 疏松材料

利用最小绝对值法对一些疏松孔材料和液体的 (u_i, D_i) 实验数据进行了拟合, 实验数据均取自文献[3], 拟合结果列入表1, 并和最小二乘法拟合的结果进行对比。从表1和图3、图4可以看出: 两种方法拟合出来的 c_0 和 λ 有差异, 但是最小绝对值方法拟合所获得的平均绝对误差 $(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |D_i - c_0 - \lambda u_i|)$ 比最小二乘法拟合的结果小。

表 1 最小绝对值直线拟合和最小二乘法直线拟合的比较

Table 1 Comparison between the least absolute value method and the least squares method

Material	ρ_0 /(g/cm ³)	c_0 /(km/s)		λ		Average error	
		LA	LS	LA	LS	LA	LS
Ta	16.656	3.412 2	3.414 4	1.207 2	1.200 2	0.019 1	0.021 4
Fe	7.861	3.769 4	3.775 0	1.679 3	1.684 4	0.055 0	0.056 3
2024Al	2.785	5.370 3	5.376 4	1.280 1	1.274 8	0.071 4	0.071 8
Diamond	3.191	7.797 8	7.807 2	1.441 5	1.432 4	0.013 1	0.014 8
MgO	3.584	6.637 4	6.639 5	1.347 6	1.349 7	0.082 8	0.083 1
Enstatite	2.950	4.406 4	4.438 8	1.309 8	1.287 7	0.055 5	0.058 1
LiCl	2.075	3.946 7	3.925 9	1.394 9	1.406 4	0.040 8	0.043 4
Enstatite	3.830	7.202 0	7.381 3	1.317 9	1.218 3	0.126 4	0.133 3
Hydrogen liquid	0.072	1.738 5	2.351 4	1.393 0	1.259 5	0.165 3	0.179 6
Graphite powder	0.466	0.710 0	0.435 9	1.088 5	1.144 3	0.129 7	0.136 5
Copper powder	3.007	0.358 7	0.540 9	1.338 5	1.319 8	0.241 5	0.258 7
Copper sintered	4.508	0.524 2	0.940 9	1.706 3	1.514 4	0.227 0	0.274 1
2024Al sintered	1.700	-1.583 8	-2.517 1	2.343 3	2.542 0	0.056 6	0.066 7

Note: ‘LA’ in the Table 1 is the least absolute value method, and ‘LS’ is the least square method.

The experiment data is from Ref. [3].

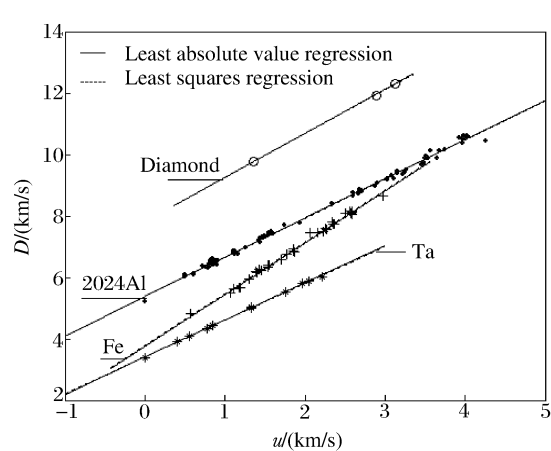


图 1 金刚石、2024 铝、铁、钽的冲击波速度与粒子速度的关系

Fig. 1 Relationship between shock wave velocity and particle velocity of diamond, 2024Al, iron and tantalum

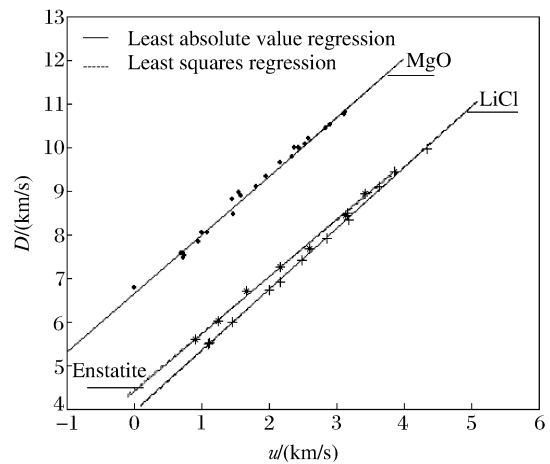


图 2 方镁石、氯化锂、顽火辉石的冲击波速度和粒子速度的关系

Fig. 2 Relationship between shock wave velocity and particle velocity of periclase, lithium chloride and enstatite

对于粉末状、烧结体等疏松材料而言,初始样品的均匀性一般较差,这就使得其测量数据相对密实材料而言分散性较大。而最小二乘法考虑的是偏差的平方,故受个别异常值的影响很大。由于异常值与真值有较大的偏差,其平方的相对偏差更大,为了压低平方和,异常点会把拟合直线拉得离它更近一些,从而使拟合直线与真实直线相差较远。对最小绝对值法而言,由于仅考虑偏差的一次方而非平方,因此它受异常点的影响比最小二乘法要小得多。因此,对于分散性较大的实验数据(D,u)拟合而言,最

小绝对值更接近真实值,结果更准确些。对于分散性很小的实验数据(u_i, D_i)而言,此时最小绝对值法和最小二乘法得到的拟合结果一致,但最小绝对值方法拟合所获得的平均绝对误差均比最小二乘法拟合的要小。

另外,通常假定观测数据的随机误差服从正态分布。当观测误差服从正态分布时,最小二乘法有着很好的统计性质;当观测误差不服从正态分布时,最小二乘法仍然适用。但此时“最小绝对值线性拟合法”的统计性质比最小二乘法的统计性质更为优越。同时,最小绝对值方法的提出很自然、合理,而且得到的直线上的点与对应的实验点的平均绝对误差最小,更具有实际的物理意义。所以,最小绝对值直线拟合方法相对最小二乘法而言,在处理实验点的异常值时更有优越性。而且,最小绝对值法至少经过两个数据点^[4],因而对数据比较少的拟合也有其自身的优势。

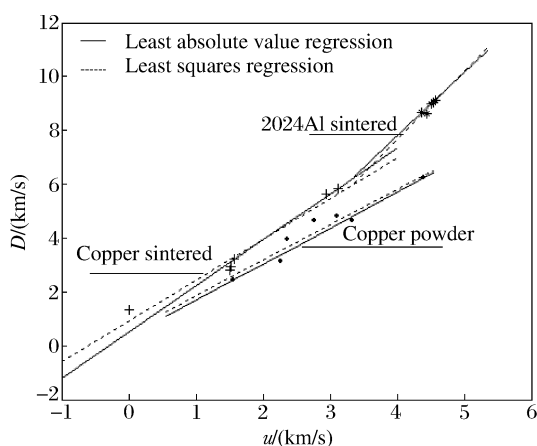


图3 2024 铝烧结体、铜烧结体和铜粉末的冲击波速度和粒子速度的关系

Fig. 3 Relationship between shock wave velocity and particle velocity of 2024Al sintered, copper sintered and powder

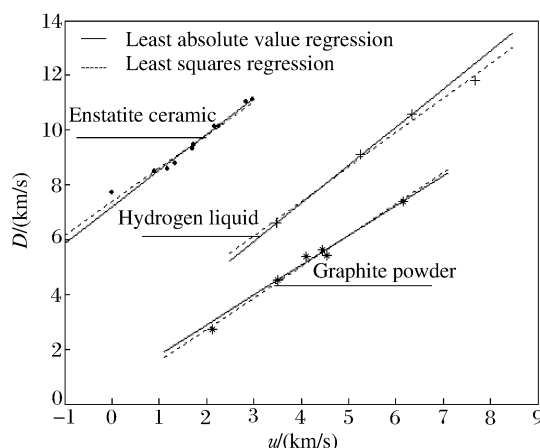


图4 顽火辉石、液态氢、石墨粉末的冲击波速度和粒子速度的关系

Fig. 4 Relationship between shock wave velocity and particle velocity of enstatite, hydrogen liquid and graphite powder

4 结 论

(1) 对于实验数据分散性较小的密实材料而言,最小绝对值方法和最小二乘法拟合得到的线性系数 c_0 和 λ 一致。

(2) 而对于实验数据分散性较大的一些疏松材料而言,两种方法得到的线性系数 c_0 和 λ 有差异,但最小绝对值法的结果更准确、真实。

(3) 对所有材料,最小绝对值法拟合的平均绝对误差比最小二乘法拟合的要小,因而最小绝对值法较最小二乘法有更高的准确性。

另外,最小绝对值法对于其它任何直线拟合都是适用的,所以这种方法具有普遍的使用价值和指导意义。

References:

- [1] Jing F Q. Introduction to Experimental Equation of State(2nd ed) [M]. Beijing: Science Press, 1999. 199—200. (in Chinese)
- 经福谦. 实验物态方程导引(第二版) [M]. 北京: 科学出版社, 1999. 199—200.

- [2] Ding L J. Numerical Computing Method [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1997. 127—128. (in Chinese)
丁丽娟. 数值计算方法 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1997. 127—128.
- [3] Stanley P. LASL Shock Hugoniot Data [Z]. Berkeley: University of California Press, 1979.
- [4] Chen X R. Least Absolute Linear Regress (I) [J]. Mathematical Statistics and Management, 1989, (5): 48—55. (in Chinese)
陈希孺. 最小一乘线性回归(上) [J]. 数理统计与管理, 1989, (5): 48—55.

The Least Absolute Value Linear Fitting of $D-u$ Line

CHEN Xiu-Fang¹, CHEN Gao-Bo², GONG Zi-Zheng¹

(1. *Institute of Physics, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China;*

2. *Department of Math and Physics, Wuhan Polytechnic University, Wuhan 430023, China*)

Abstract: The Linear relationship between shock wave velocity D and particle velocity u is very important to obtain high pressure equation of state and dynamic properties of materials under shock loading. In this paper, the least absolute value method is adopted to fit the $D-u$ line of several kinds of materials, and comparing with the generally accepted least square method. Results show that for the experimental data which scatter small (e. g. , non-porous samples), the two methods obtain almost the same results; but for the experimental data which scatter large (e. g. , porous samples), the two methods obtain different results. Anyway, the least absolute value method has small average absolute error than the least square method. The reason of the different result between the two methods was addressed.

Key words: $D-u$ line; fitting; the least absolute value; the least square method