УДК 52—17+519.654

Т. Ю. МАГАКЯН

НАБОР ПРОГРАММ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ОРТОНОРМИРОВАННЫМИ ПОЛИНОМАМИ

Рассмотрены некоторые вопросы подгонки экспериментальных кривых методом наименьших квадратов с помощью ортонормированных полиномов. Показаны их большие преимущества. Представлены листинги пяти подпрограмм для решения этих задач.

Введение. Метод наименьших квадратов (МНК) является одним из основных инструментов для оценки параметров в статистических зависимостях. В астрономии он применяется широчайшим образом для анализа эмпирических закономерностей и уточнения наблюдательных результатов. Особое значение он приобрел в последнее время: в связи с повсеместным распространением автоматизированной обработки данных МНК активно используется для подгонки всевозможных экспериментальных кривых—характеристических, дисперсионных, калибровочных, непрерывных спектров и т. п.

Наибольшей же популярностью пользуется самый простой случай линейного МНК: подгонка с помощью обычных полиномов. Это связано с простотой математического описания, а также с легкостью программирования. Тем не менее, использование в МНК обычных полиномов связано с хорошо известными и взаимосвязанными трудностями: быстрым ростом неустойчивости решений матрицы нормальных уравнений при повышении степени полинома и, как следствие, накоплением ошибок при расчете на ЭВМ.

Одним из наиболее радикальных решений этой проблемы является применение для приближений не обычных, а ортогональных полиномов, что помимо других преимуществ, резко повышает точность и стабильность вычислений. Вопросы применения МНК с использованием ортогональных полиномов детально рассмотрены в [1—3]. Неоднократно предлагались также готовые программы для ЭВМ. Однако настоящую популярность МНК с ортогональными полиномами в астрономической практике пока не завоевал, несмотря на очевидные преимущества. С целью содействия дальнейшему распространению метода мы предлагаем в настоящей статье набор программ (приводятся в конце статьи) на языке ФОРТРАН-IV, позволяющий в легкой и очень удобной для применения форме использовать этот вариант МНК во всех практических задачах.

Основой для написания данного набора послужили подпрограммы построения системы ортонормированных полиномов на заданном множестве, предложенные в [4]. Методика же самого МНК основывается на формулах и программах, приведенных в [5]. Последние подверглись кардинальной переработке, состоявшей в состыковке их с подпрограммами из [4], удалении нормировочных расчетов (ввиду использования ортонормированной системы), введении весовых коэффициентов и тщательном устранении так называемого «красного эффекта» подпрограмм.

Представляемый набор подпрограмм мы, таким образом, не считаем полностью оригинальной разработкой. Но надежная длительная эксплуатация этих подпрограмм, превосходные результаты, показанные ими при тщательном тестировании и очевидное удобство использования позволяют нам надеяться, что они будут интересны для многих астрономов, применяющих ЭВМ в своей работе.

Математический метод. Мы изложим здесь лишь основные формулы и методы, используемые в подпрограммах; за подробной теорией МНК с использованием ортогональных и ортонормированных полиномов следует обратиться к указанным выше руководствам.

Пусть мы имеем набор из N точек, приближаемых с помощью МНК, имеющих абсциссы $x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots, x_N$, ординаты $y_1, y_2, \ldots, y_k, \ldots, y_N$ и веса $w_1, w_2, \ldots, w_k, \ldots, w_N$. При этом абсциссы должны быть отсортированы в строго возрастающем порядке.

Для повышения устойчивости последующих вычислений выполняется преобразование всех абсцисс в отрезок [—1, 1] по формуле

$$x_k = \frac{2\,x_k}{x_{max} - x_{min}} - \frac{x_{max} + x_{min}}{x_{max} - x_{min}}. \tag{1}$$

Определим на множестве точек x_k систему полиномов $p_j(x_k)$ (где j степень полинома) так, чтобы выполнялись условия ортогональности

$$H_{ij} = \sum_{k=1}^{N} p_i(x_k) p_j(x_k) w_k \equiv 0 \qquad (i \neq j) \tag{2}$$

и ортонормированности

$$H_{jj} = \sum_{k=1}^{N} p_j^2(x_k) w_k \equiv 1. \tag{3}$$

Как показано в [4], такие полиномы можно вычислять по рекуррентной формуле:

$$p_{j+1}(x) = c_{j+1}[(x - \alpha_{j+1}) p_j(x) - \beta_j p_{j-1}(x)], \tag{4}$$

положив $p_{-1}(x) = 0, \quad p_0(x) = \dfrac{1}{\beta_0} = \dfrac{1}{(\sum^N w_k)^{1/2}}.$

Рекуррентные коэффициенты определяются следующими выражениями:

$$c_{j+1} = \frac{1}{\beta_{j+1}} = \left[\sum_{k=1}^{N} x_k^2\, p_j^2(x_k) w_k - \alpha_{j+1}^2 - (1 - \delta_{0j}) \beta_j^2 \right]^{-1/2}, \tag{5}$$

$$\alpha_{j+1} = \sum_{k=1}^{N} x_k\, p_j^2(x_k) w_k. \tag{6}$$

Здесь δ—символ Кронекера.

Получив с помощью выражений (4)—(6) набор ортонормированных полиномов, мы имеем целью построить приближение ординат y_k функцией I-й степени

$$y = \sum_{j=0}^{I} S_j\, p_j(x), \tag{7}$$

где коэффициенты S_j должны быть выбраны в смысле условия наименьших квадратов.

Ввиду условия ортогональности матрица нормальных уравнений становится диагональной, и S_j определяются следующей формулой [5]:

$$S_j = \sum_{k=1}^{N} y_k p_j(x_k) w_k = \sum_{k=1}^{N} \left[y_k - \sum_{i=0}^{j-1} S_i \, p_i(x_k) \right] p_j(x_k) w_k. \tag{8}$$

Выражение в квадратных скобках является просто остаточной невязкой после подгонки полинома (j—1)-й степени, что резко упрощает вычисления.

Минимизируемая величина, т. е. сумма квадратов остаточных невязок, определяется также легко:

$$\chi_l^2 = \sum_{k=1}^{N} w_k \left[y_k - \sum_{j=0}^{l} S_j \, p_j(x_k) \right]^2 = \sum_{k=1}^{N} w_k \, y_k^2 - \sum_{j=0}^{l} S_j^2 \approx \chi_{l-1}^2 - S_l^2. \tag{9}$$

Одним из наиболее важных свойств МНК с ортогональными полиномами является то обстоятельство, что при повышении степени аппроксимирующего полинома коэффициенты S_j низших степеней не изменяются. Это открывает возможность автоматического определения оптимальной степени аппроксимации, обрывая вычисление коэффициентов S_j на той стадии, когда они перестанут значимым образом отличаться от нуля. Для нахождения этого момента используем F-критерий, имеющий в данном случае вид

$$F = \left(\frac{N-l-1}{\chi_{l-1}^2 - S_l^2} \right) S_l^2. \tag{10}$$

Таким образом, задача МНК полностью решена. Определив набор коэффициентов S_j, мы можем вычислить значение аппроксимирующей функции (7) в любой точке, не выходящей за пределы отрезка $[x_{min}, x_{max}]$. Ошибка (стандартное отклонение) вычисленного значения y ввиду диагональности ковариантной матрицы параметров дается формулой

$$\sigma^2(y) = \sum_{j=0}^{l} \sigma_j^2(S_j) \, p_j^2(x), \tag{11}$$

причем $\sigma_j^2(S_j) = \chi_l^2$, и выносится из-под знака суммы.

Важным практическим случаем является также решение обратной задачи: используя значения y функции (7), найти соответствующие им аргументы x. Классическим примером может служить приближение характеристической кривой в виде зависимости D=f(lgI) (обратный вариант приближения lgI=f(D) статистически неверен и на практике дает худшие результаты) с последующим вычислением значений lgI из измеренных оптических плотностей D.

Для ортонормированных полиномов нахождение корня уравнения (7) лишь несколько сложнее, чем для обычных. Следуя [5], используем метод Ньютона-Рафсона: имея нулевое приближение x_k^0, определяем поправку к нему как

$$\delta x_k = \frac{y_k - \sum_{j=0}^{l} S_j \, p_j(x_k^0)}{\sum_{j=0}^{l} S_j \, p_j'(x_k^0)}. \tag{12}$$

Производные вычисляются также по рекуррентной формуле

$$p'_{j+1}(x) = c_{j+1}[p_j(x) + (x-\alpha_{j+1})p'_j(x) - \beta_j\, p'_{j-1}(x)],$$

причем $$p'_{-1}(x) = p'_0(x) = 0. \tag{13}$$

Конец итерирования можно определить любым подходящим условием, например при $|\delta x_k| < \sigma(x_k)/10$ или $|\delta x_k| < \varepsilon$, где ε—заранее заданное малое число.

Ошибки вычисленных x_k находятся из выражения

$$\sigma(x_k) = \left(\frac{\sigma^2(y_k) + \sum\limits_{j=0}^{l} \sigma_j^2(S_j)p_j^2(x_k)}{\left[\sum\limits_{j=0}^{l} S_j\, p'_j(x_k) \right]^2} \right)^{1/2}, \tag{14}$$

где $\sigma_j^2(S_j)$ по-прежнему равно χ_1^2, а значения $\sigma^2(y_k)$ задаются заранее и для простоты могут быть взяты все равными.

Описание подпрограмм и замечания по их использованию. Предлагаемый набор (приведен в конце статьи) состоит из 5 подпрограмм: LSORTN, EVORTN, UNORTN, PORTHN и ORTHON, причем две последние являются внутренними. Листинги с подробными комментариями приложены к статье, и здесь мы не будем рассматривать их детально. Набор составлен так, чтобы скрыть от пользователя внутреннюю методику расчетов и дать ему возможность использовать подпрограммы как «черные ящики», не вникая в подробности. В частности, преобразование абсцисс в отрезок [—1, 1] выполняется внутри подпрограммы PORTHN, и необходимые впоследствии параметры преобразования передаются через именованный COMMON-блок. Отметим, что контроль за строгой монотонностью значений x_k возлагается на пользователя, так как наши подпрограммы ее не проверяют и вообще никаких сообщений об ошибках не выдают (хотя при желании такой контроль ввести в них очень легко).

Для приближения по МНК следует лишь задать наборы значений x_k, y_k и w_k, параметры, определяющие степень и режим приближения, а также зарезервировать достаточно места для рабочих и выходных массивов, после чего можно обратиться к подпрограмме LSORTN. На выходе будут получены искомые коэффициенты S_j и другие величины, необходимые для последующего использования. Далее с помощью подпрограммы EVORTN можно вычислить аппроксимирующую функцию в любом количестве точек (не выходящих за пределы отрезка, на котором построена базисная система полиномов), или же с помощью UNORTN решить обратную задачу нахождения аргументов.

Режим автоматического выбора степени полинома в LSORTN построен следующим образом. Каждое полученное значение суммы квадратов невязок тестируется по F-критерию на 95% уровне значимости на отличие от предыдущего. Если значимое уменьшение не обнаружено, соответствующий коэффициент S_j считается тождественно равным нулю, и степень приближения повышается еще на 1. Если и при этом величина χ^2 не уменьшается, то процесс считается стабилизировавшимся, иначе же вычисления продолжаются вплоть до достижения заранее заданной верхней границы степени. Подобный алгоритм имеет ту опасность, что для некоторых специфических наборов точек коэффициенты, например, для четных степеней могут быть близки к нулю,

```
C*
C       ПОДПРОГРАММА PORTHN
C
C       ВЫЧИСЛЕНИЕ РЕКУРРЕНТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ОРТОНОРМИРОВАННЫХ ПОЛИНОМОВ
C
C       ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
C               M - ЧИСЛО ЗНАЧЕНИЙ АРГУМЕНТОВ
C               NNMAX - МАКСИМАЛЬНАЯ СТЕПЕНЬ ПОЛИНОМА  (NNMAX.LE.M-1)
C               X - МАССИВ ЗНАЧЕНИЙ АРГУМЕНТОВ В СТРОГО ВОЗРАСТАЮЩЕМ ПОРЯДКЕ
C               W - МАССИВ ВЕСОВ АРГУМЕНТОВ
C               POLY - РАБОЧИЙ МАССИВ
C
C       ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
C               ALPHA И BETA - МАССИВЫ РЕКУРРЕНТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ:
C               A[1] В ALPHA(1)...A[I] В ALPHA(NNMAX)
C               B[0] В BETA(1)...B[I] В BETA(NNMAX+1)
C
C       ИСПОЛЬЗУЕТСЯ ПОДПРОГРАММА ORTHON В РЕЖИМЕ НЕПОЛНОЙ РЕКУРСИИ
C
C       АВТОРЫ ПРОГРАММЫ:
C               ГАДЖОКОВ В.,БОГДАНОВА Н.,СООБЩ. ОИЯИ Р11-12860,1979
C
C-
      SUBROUTINE PORTHN(M,NNMAX,X,W,ALPHA,BETA,POLY)
      DIMENSION X(1),W(1),ALPHA(1),BETA(1),POLY(1)
      COMMON/ORTNRM/X0,X1
C
C  ПРЕОБРАЗОВАНИЕ В ОТРЕЗОК [-1,1]
C
      X0=X(M)-X(1)
      X1=2./X0
      X0=-(X(M)+X(1))/X0
C
C  ПОЛИНОМ ПОРЯДКА -1
C
      POLY(1)=0.
C
C  ПОЛИНОМ И НОРМИРУЮЩИЙ МНОЖИТЕЛЬ ПОРЯДКА 0
C
      BETA(1)=0.
      DO 30 I=1,M
  30    BETA(1)=BETA(1)+W(I)
      BETA(1)=SQRT(BETA(1))
      POLY(2)=1./BETA(1)
      IF(NNMAX.EQ.0)RETURN
C
C  РЕКУРРЕНТНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ
C
      DO 100 I=1,NNMAX
        IB=I+1
        IPOL=I-1
        ALPHA(I)=0.
        BETA(IB)=0.
        DO 50 K=1,M
          CALL ORTHON(IPOL,X(K),ALPHA,BETA,POLY)
          TR=X1*X(K)+X0
          Z=TR*(POLY(IB)**2)*W(K)
          BETA(IB)=BETA(IB)+TR*Z
 50       ALPHA(I)=ALPHA(I)+Z
        BETA(IB)=BETA(IB)-ALPHA(I)**2
        IF (I.GT.1) BETA(IB)=BETA(IB)-BETA(I)**2
100     BETA(IB)=SQRT(BETA(IB))
      RETURN
      END
```

Рис. 1.

что приведет к замене их точными нулями в автоматическом режиме. В этом случае, получив значение оптимальной степени, можно повторить вычисления, подставив его уже как заранее заданную степень подгонки. Вообще говоря, режимом автоматического выбора степени следует пользоваться осторожно, проверяя получившиеся результаты, что, впрочем, относится ко всем численным методам такого рода.

Результаты численных экспериментов показали превосходную точность вычислений, несмотря на то, что в подпрограммах не используется арифметика с двойной точностью. Как правило, для самых сложных случаев ответы получались не менее чем с 6 верными значащими цифрами. В то же время МНК с обычными полиномами, даже при программировании с двойной точностью, показывал стремительное нарастание ошибок вычислений при степени полинома порядка 6—7. В этом отношении хорошим примером является контрольный тест, предложенный в [6] для сходного типа программ. Надежность работы подпрограмм доказывается и четырехлетним опытом их успешного применения в задачах обработки спектров в Бюракане (см., к примеру, [7, 8]).

Мы надеемся, что тексты этих программ окажутся полезными всем заинтересованным и будут способствовать дальнейшему распространению данного варианта МНК в астрономической практике.

6 января 1986 г.

```
C+
C       ПОДПРОГРАММА ORTHON
C
C       ВЫЧИСЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ОРТОНОРМИРОВАННЫХ ПОЛИНОМОВ ПРИ ДАННОМ АРГУМЕНТЕ
C
C       ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
C               NNMAX - МАКСИМАЛЬНАЯ СТЕПЕНЬ ПОЛИНОМА
C               XX - АРГУМЕНТ
C               ALPHA И BETA - МАССИВЫ РЕКУРРЕНТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ,
C                              ВЫЧИСЛЕННЫЕ В PORTHN,ЗДЕСЬ НЕ МОДИФИЦИРУЮТСЯ
C
C       ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
C               POLY - МАССИВ ЗНАЧЕНИЯ ПОЛИНОМОВ В ТОЧКЕ XX:
C               P(-1) В POLY(1),P(0) В POLY(2),...,P(NNMAX) В POLY(NNMAX+2)
C
C       АВТОРЫ ПРОГРАММЫ
C         ГАДЖОКОВ В.,БОГДАНОВА Н.,СООБЩ. ОИЯИ Р11-12860,1979
C
C-
      SUBROUTINE ORTHON(NNMAX,XX,ALPHA,BETA,POLY)
      DIMENSION POLY(1),ALPHA(1),BETA(1)
      COMMON/ORTNRM/ X0,X1
      IF (NNMAX.EQ.0)RETURN
      TR=X1*XX+X0
      K=NNMAX+2
      DO 10 I=3,K
        IPOL1=I-1
        IPOL2=IPOL1-1
10      POLY(I)=((TR-ALPHA(IPOL2))*POLY(IPOL1)-BETA(IPOL2)*POLY(IPOL2)
     *  )/BETA(IPOL1)
      RETURN
      END
```

Рис. 2.

```
      ПОДПРОГРАММА LSORTN

      АППРОКСИМАЦИЯ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ ПРИ ПОМОЩИ
      ОРТОНОРМИРОВАННЫХ ПОЛИНОМОВ: Y=SUM(S(I)*P(I,X))

      ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
              X - МАССИВ АРГУМЕНТОВ
              Y - МАССИВ ФУНКЦИЙ
              W - МАССИВ ВЕСОВ ТОЧЕК
              M - ЧИСЛО ТОЧЕК
              IORD - СТЕПЕНЬ ПОЛИНОМА
              L - ВЫБОР РЕЖИМА:
                  =1 - СТЕПЕНЬ ПОЛИНОМА ЗАДАНА IORD
                  =0 - АВТОМАТИЧЕСКИЙ ВЫБОР СТЕПЕНИ ПРИБЛИЖЕНИЯ (ДО IORD)
                       ПО F-КРИТЕРИЮ ЗНАЧИМОСТИ НА 95%-УРОВНЕ И ДВУКРАТНОМ
                       ТЕСТИРОВАНИИ СТАБИЛИЗАЦИИ МИНИМИЗИРУЕМОЙ СУММЫ КВАД-
                       РАТОВ НЕВЯЗОК CHISQ
              POLY - РАБОЧИЙ МАССИВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОЛИНОМОВ

      ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
              EPS - ОСТАТОЧНЫЕ НЕВЯЗКИ ПРИБЛИЖЕНИЯ
              A И B - МАССИВЫ РЕКУРРЕНТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПОЛИНОМОВ
              S - МАССИВ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ
              CHISQ - ОСТАТОЧНАЯ СУММА КВАДРАТОВ НЕВЯЗОК
              IORD - ВЫБРАННАЯ СТЕПЕНЬ ПРИБЛИЖЕНИЯ (ПРИ АВТОМАТ. РЕЖИМЕ)

      ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПОДПРОГРАММЫ - PORTHN И ORTHON

      АВТОР ПРОГРАММЫ - Т.Ю.МАГАКЯН (БЮРАКАНСКАЯ ОБСЕРВАТОРИЯ)
              ИСПОЛЬЗОВАНА ЧАСТЬ ПРОГРАММЫ D.PETERSON, P.A.S.P.91,546,1979


      SUBROUTINE LSORTN(X,Y,W,M,EPS,A,B,S,P,CHISQ,IORD,L)
      DIMENSION X(1),Y(1),W(1),EPS(1),A(1),B(1),S(1),P(1)
      IMAX=IORD+1

ПОДГОТОВКА РЕКУРРЕНТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

      CALL PORTHN(M,IORD,X,W,A,B,P)
      DO 10 I=1,IMAX
10      S(I)=0.
      DO 20 N=1,M
        EPS(N)=Y(N)
20      S(1)=S(1)+Y(N)*W(N)*P(2)
      I=1
      XNU=M-1
30    IFF=1
40    II=I
      IF (IMAX.GT.I) I=I+1
      CHISQ=0.

НАХОЖДЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ И НЕВЯЗОК

      DO 70 N=1,M
        CALL ORTHON(II,X(N),A,B,P)
        EPS(N)=EPS(N)-S(II)*P(II+1)
        CHISQ=CHISQ+EPS(N)**2*W(N)
        IF (IMAX.LE.II) GO TO 70
        S(I)=S(I)+EPS(N)*P(I+1)*W(N)
70      CONTINUE
      IF (IMAX.LE.II) GO TO 80
      IF (L.NE.0) GO TO 30
      XNU=XNU-1
      DCHI=S(I)**2
      IF (DCHI.GE.CHISQ) GO TO 30
      F=XNU*DCHI/(CHISQ-DCHI)



F-РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИ ВЕРОЯТНОСТИ 0.05,Y1=1,Y2=X

      F95=3.84+(10.+(12.+(30.+105./XNU/XNU)/XNU)/XNU)/XNU
      IF (F.GT.F95) GO TO 30
      XNU=XNU+1.
      IFF=IFF+1
      S(I)=0.
      IF (IFF.LE.2) GO TO 40
80    IF (L.EQ.0) IORD=II-IFF+1
      RETURN
      END
```

Рис. 3.

```
C+
C         ПОДПРОГРАММА EVORTN
C
C         ВЫЧИСЛЕНИЕ АППРОКСИМИРУЮЩИХ ЗНАЧЕНИЙ РАЗЛОЖЕНИЯ ПО ОРТОНОРМИРОВАННЫ
C         ПОЛИНОМАМ В ЗАДАННЫХ ТОЧКАХ МАССИВА АРГУМЕНТОВ
C
C         ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
C                  X - МАССИВ ЗНАЧЕНИЙ АРГУМЕНТОВ
C                  NN - ЧИСЛО ЗНАЧЕНИЙ
C                  A,B,S - ПАРАМЕТРЫ РАЗЛОЖЕНИЯ, ПОЛУЧЕННЫЕ В LSORTN
C                  CHISQ - ОСТАТОЧНАЯ СУММА КВАДРАТОВ НЕВЯЗОК ИЗ LSORTN
C                  IORD - СТЕПЕНЬ РАЗЛОЖЕНИЯ
C                  P - РАБОЧИЙ МАССИВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОЛИНОМОВ
C
C         ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
C                  Y - МАССИВ ПОЛУЧЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ФУНКЦИЙ
C                  SIGY - МАССИВ ОШИБОК ВЫЧИСЛЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ Y
C
C         ИСПОЛЬЗУЕТСЯ ПОДПРОГРАММА ORTHON
C
C         АВТОР ПРОГРАММЫ - Т.Ю.МАГАКЯН (БЮРАКАНСКАЯ ОБСЕРВАТОРИЯ)
C
C-
      SUBROUTINE EVORTN(X,Y,NN,SIGY,A,B,S,P,CHISQ,IORD)
      DIMENSION X(1),Y(1),A(1),B(1),S(1),SIGY(1),P(1)
      IMAX=IORD+1
      DO 5 N=1,NN
        SUMSQ=0.
        Y(N)=0.
        CALL ORTHON(IORD,X(N),A,B,P)
        DO 4 I=1,IMAX
          SUMSQ=SUMSQ+P(I+1)**2
4         Y(N)=Y(N)+S(I)*P(I+1)
5       SIGY(N)=SQRT(CHISQ*SUMSQ)
      RETURN
      END
```

Рис. 4.

```
      ПОДПРОГРАММА UNORTN

      НАХОЖДЕНИЕ КОРНЕЙ ОРТОНОРМИРОВАННЫХ ПОЛИНОМОВ И ВЫЧИСЛЕНИЕ
      ОБРАТНОЙ ФУНКЦИИ: X=F(Y) С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА НЬЮТОНА-РАФСОНА

      ВХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
                    Y - МАССИВ ФУНКЦИЯ
                    NN - ЧИСЛО ЗНАЧЕНИЙ ФУНКЦИЙ
                    SIGY - ЗАДАННАЯ ОШИБКА ВСЕХ ЗНАЧЕНИЙ Y
                    CHISQ - ОСТАТОЧНАЯ СУММА КВАДРАТОВ НЕВЯЗОК ИЗ LSORTN
                    IORD - СТЕПЕНЬ ПОЛИНОМА
                    A,B,S - МАССИВЫ РЕКУРРЕНТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ И
                          КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ,ПОЛУЧЕННЫЕ В LSORTN
                    P - РАБОЧИЙ МАССИВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОЛИНОМОВ

      ВЫХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ
                    X - МАССИВ ВЫЧИСЛЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ АРГУМЕНТА
                    SIGX - МАССИВ ОШИБОК ЗНАЧЕНИЯ X

      ПРИМЕЧАНИЕ
              НЕ СЛЕДУЕТ БЕЗ НЕОБХОДИМОСТИ ЗАНИЖАТЬ ЗНАЧЕНИЕ SIGY.
              ЭТО ПРИВЕДЕТ К РЕЗКОМУ ВОЗРАСТАНИЮ ВРЕМЕНИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

      АВТОР ПРОГРАММЫ - Т.Ю.МАГАКЯН (БЮРАКАНСКАЯ ОБСЕРВАТОРИЯ)
              ИСПОЛЬЗОВАНА ЧАСТЬ ПРОГРАММЫ D.PETERSON, P.A.S.P.91,546,1979

      SUBROUTINE UNORTN(X,Y,NN,SIGX,SIGY,A,B,S,P,CHISQ,IORD)
      DIMENSION X(1),Y(1),A(1),B(1),S(1),SIGX(1),P(1),PP(32)

 НУЛЕВОЙ И ПЕРВЫЙ ПОРЯДКИ

      DATA PP(1)/0./,PP(2)/0./
      IMAX=IORD+1
      DO 40 N=1,NN

 ПЕРВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

        X(N)=A(1)+B(2)*(B(1)*Y(N)-S(1))/S(2)
 10     CALL ORTHON(IORD,X(N),A,B,P)
        SUMRES=Y(N)-S(1)*P(2)
        SUMPP=0.
        SUMSQ=P(2)**2

 ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ И СУММ

        DO 20 I=2,IMAX
          I1=I+1
          I2=I-1
          PP(I1)=(P(I)+(X(N)-A(I2))*PP(I)-B(I2)*PP(I2))/B(I)
          SUMRES=SUMRES-S(I)*P(I1)
          SUMPP=SUMPP+S(I)*PP(I1)
 20       SUMSQ=SUMSQ+P(I1)**2
        SUMSQ=SIGY**2+CHISQ*SUMSQ
        SIGX(N)=SQRT(SUMSQ/(SUMPP**2))
        DX=SUMRES/SUMPP
        X(N)=X(N)+DX
        IF(SIGX(N)/10..GE.ABS(DX)) GO TO 40
        IF(0.000001.LT.ABS(DX)) GO TO 10
 40     CONTINUE
      RETURN
      END
```

Рис. 5.

Տ. ՅՈՒ. ՄԱՂԱՔՅԱՆ

ՕՐԹՈՆՈՐՄԱՎՈՐՎԱԾ ԲԱԶՄԱՆԴԱՄՆԵՐՈՎ ՄՈՏԱՐԿՄԱՆ ԾՐԱԳՐԵՐԻ ՀԱՎԱՔԱԾՈՒ

Քննարկված են օրթոնորմավորված բազմանդամներով փոքրագույն քառակուսիների եղանակով մոտարկման որոշ հարցեր։ Ցույց են տրված մեթոդի գործնական արժանիքները և տրված են հաշվողական հինգ ծրագրեր քննարկված խնդիրների հաշվարկման համար։

T. YU. MAGAKIAN

THE PACKAGE OF PROGRAMMES FOR APPROXIMATION BY ORTONORMALIZED POLYNOMIALS

Some aspects of least squares fitting by ortonormalized polynomials are discussed. Their advantages are shown, and listings of 5 programmes, solving these problems, are presented.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Дж. Себер,* Линейный регрессионный анализ, М., Мир, 1980.
2. *Л. З. Румшиский,* Математическая обработка результатов эксперимента, М., Наука, 1971.
3. *Д. Худсон,* Статистика для физиков, М., Мир, 1970.
4. *В. Гаджоков, Н. Богданова,* Сообщ. ОИЯИ Р11—12860, 1979.
5. *D. M. Peterson,* Publ. Astron. Soc. Pacific 91, 546, 1979.
6. *В. Н. Вапник и др.* Алгоритмы и программы восстановления зависимостей, М., Наука, 1984.
7. *Т. Ю. Магакян,* Письма в Астрон. ж., 9, 155, 1983.
8. *Т. Ю. Магакян,* Письма в Астрон. ж., 10, 661, 1984.