Gymnázium a střední odborná škola Mikulov

příspěvková organizace

Stanovení parametru termočlánku pomocí metody nejmenších čtverců

Mikulov 2020

Autor: Adam Krška

Vedoucí: Mgr. Roman Pavlačka, Ph.D.

Prohlášení:

Prohlašuji, že jsem závěrečnou práci zpracoval samostatně. Souhlasím, aby moje práce byla archivována Gymnáziem a střední odbornou školou Mikulov, příspěvková organizace, případně použita pro další studijní účely.

(podpis)

Obsah

1 Úvod

V dnešní době sbírají vědci (a nejen ti) velké množství dat, převážně potom díky rozmachu digitálních měřících metod, které ve velké míře již nahradily měření analogová. U těch byla nevýhoda ručního zapisování dat a poté i ručního zpracování. Ovšem díky dnešním experimentálním metodám jsme schopni měřit mnohem přesně, vícekrát a s menší námahou. Tato naměřená data jsou dále zpracována pomocí počítačů, což práci zrychluje, zpřesňuje, zmenšuje pravděpodobnost lidské chyby v základních výpočtech a umožňuje zpracovat ono velké množství dat.

Data ovšem nejsou měřena bez nějakého účelu. Většinou se snažíme z dat najít nějakou tendenci, změřit hodnotu závislosti či zkusit predikovat pomocí trendu, jak by vypadala data dosud nezměřená. Tyto problémy umíme řešit pomocí prokládání dat matematickými funkcemi. Proložení dat funkcí[1] nám umožňuje ověřit, zda předpis naší funkce odpovídá naměřeným datům, vypočítat neznámý parametr předpisu (rozšířeno například při počítání různých koeficientů materiálů), nebo vyjádření závislé veličiny pro zatím neměřené vstupní hodnoty (např. predikce počtu nakažených nemocí).

Abychom mohli data proložit křivkou, musíme znát její parametry. A ty mohou být určeny pomocí metody nejmenších čtverců. Ovšem nemůžeme vytvářet křivky bez samotných dat.

Jak již bylo zmíněno, digitální měřící přístroje nahrazují přístroje analogové. Aby toho ovšem mohli dosáhnout, musí být schopné vytvářet signál přijatelný počítačem, což je v velkém počtu případu změna napětí.

U měření teploty můžeme například využít termoelektrického jevu, jenž dělá přesně to, co potřebujeme: při změně teploty se mění výstupní napětí. To jsme schopni měřit a následně odvodit, jakou teplotu zrovna měříme. Jinak řečeno: objekty využívající termoelektrického jevu (tzv. termočlánky) můžeme používat jako teploměry.

Ovšem ne všechny termočlánky jsou identické. Každý typ termočlánku (respektive každá různá kombinace dvou kovů, z nichž je termočlánek vyroben) má jinou závislost napětí na rozdílu teplot. Proto pro každou kombinaci musí být změřena experimentálně a následně je pro ně určena ona závislost.

V této seminární práci si proto ukážeme a vysvětlíme metodu nejmenších čtverců, kterou následně aplikujeme na naměřená data závislosti termoelektrického napětí na teplotním rozdílu mezi oběma konci termočlánku.

[1]známo také jako *fitování* dat z anglického „fit“

2 Cíl práce

Cílem této seminární práce je osvětlit princip a použití metody nejmenších čtverců, převážně poté se zaměřením na speciální případ lineární regrese. Tato metoda bude následně použita pro výpočet parametru termočlánku z experimentálně získaných hodnot, která budou doprovázena odpovídajícím vyobrazením v tabulkách a grafech.

3 Současný stav řešené problematiky

3.1 Proložení dat funkcí

Ve fyzikálních experimentech obvykle měříme veličiny, které jsou závislé na veličině jiné. Ta se během měření mění, což nám umožňuje pomocí měření obou veličin vysledovat vztah mezi závislou a nezávislou veličinou. Nezávislou veličinou velice často bývá čas, ale také jí může být např. teplota, síla, poloha a další.[1]

3.1.1 Aproximace a interpolace

Při prokládání bodů funkcí se můžeme přiklonit k jedné ze dvou metod: k aproximaci, nebo interpolaci.

Interpolace je proces, kdy se snažíme nalézt funkci, která propojí všechny nám známé body. Nejjednodušší metodou, jak toho dosáhnout, je využít lineární interpolace, kdy jednotlivé body propojíme přímkou. Můžeme se s ní setkat například při vytváření grafů v tabulkových editorech (např. MS Excel či LibreOffice Calc), kdy propojení bodů přímkou je obvykle výchozí možnost vykreslování grafů. Nevýhoda této metody je ovšem ostrost funkce, kdy sice je spojitá, ale není diferencovatelná na celém svém oboru. Kvůli své ostrosti zároveň tato metoda mnohdy nepředstavuje reálný průběh původní funkce.

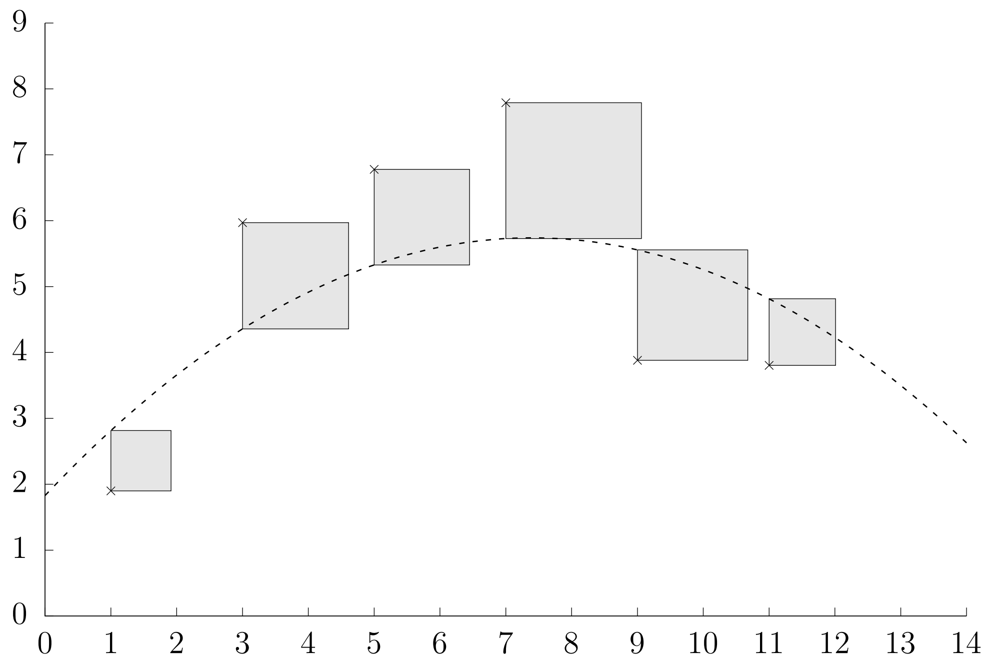
Tyto problémy řeší méně rozšířené metody, jakými jsou kupříkladu kvadratická interpolace či interpolace polynomem. Ty zmenšují interpolační odchylky a díky definici polynomem jsou diferencovatelné na celé definičním oboru. Ovšem jsou také složitější na spočítání, jak už z pohledu matematiky, tak z pohledu výpočetního výkonu.

Aproximace se od interpolace liší v jednom zásadním aspektu: nevyžaduje, aby výsledná funkce procházela všemi body. To nám umožňuje najít o mnoho hladší funkce, které kopírují průběh dat, či získat neznámé parametry závislosti z dat, která mohou obsahovat chybu měření.

Z tohoto důvodu je aproximace vhodnější při prokládání experimentálně získaných dat funkcí a umožňujeme nám porovnat jednotlivé předpisy funkcí a jejich korelaci s daty.

3.1.2 Metoda nejmenších čtverců

Při našich experimentech měříme velké množství dat a přirozeně chceme všechna z nich využít v aproximaci naší funkce, čehož právě metoda nejmenších čtverců dosahuje. Ta je založena na principu, kdy se snažíme minimalizovat součet čtverců odchylek mezi naměřenými daty a aproximovanou funkcí.



Obr. 1: Ukázka metody nejmenších čtverců

Označme si naší teoretickou funkci jako $f(x)$, ve které figurují kupříkladu tři neznámé označené jako a, b a c. Do funkce f tak vstupuje proměnná x a neznámé a, b, c. Aproximace funkce pomocí metody nejmenších čtverců je tedy potom o najít ideální hodnoty a, b, c takové, aby právě součet čtverců odchylek.

Důležitou otázkou na zodpovězení je, proč vlastně se snažíme najít minimum sumy čtverců odchylek. Pokud máme obecný předpis funkce $f(x)$, tak víme, že po dosazení každé jedné naměřené hodnoty x_i bychom měli dostat výslednou hodnotu měření. Rozdíl mezi touto teoretickou hodnotu $f(x_i)$ a ve skutečnosti naměřenou hodnotou y_i si označme jako $\Delta_i = f(x_i) - y_i$. Při aproximaci bychom tak mohli chtít jednoduše minimalizovat tyto jednotlivé rozdíly Δ_i, neboli minimalizovat funkci $\sum_{i=1}^{n} \Delta_i$. Avšak tu není možné minimalizovat, protože minimum jakéhokoliv součtu je vždy $-\infty$. Abychom se tedy vyhnuli tomuto problému, sčítáme hodnoty rozdílů umocněné na druhou mocninu $\sum_{i=1}^{n} \Delta_i^2$, přičemž minimum této funkce se nachází v bodě 0.

Obecně tedy můžeme metodu nejmenších čtverců vyjádřit jako hledaní ideálních parametrů funkce $f(x)$ pro minimalizace funkce S, pro kterou platí

$$S = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 \,. \tag{1}$$

Tento problém se řeší dvěma hlavními metodami: iterativně a analyticky.

Iterativní řešení je obecné, fungující pro každý předpis pracující na principu postupného iterování proměnných, kdy s každou iterací se funkce přibližuje správnému výsledku, dokud funkce nekonverguje. Jsou využívány pro řešení nelineárních problému, které nejsem schopni analyticky řešení. Tato metoda je umožněna využitím optimalizovaných počítačových algoritmů, například pomocí Levenberg-Marquardtova algoritmu.

Analytické řešení funguje na principu nalezení minima pomocí parciálních derivací podle všech neznámých parametrů. Z těchto derivací následně vzniká soustava rovnic, kterou jsme schopni vyřešit. Je využívaná pro řešení lineárních problémů, kdy můžeme naší rovnici zapsat pomocí polynomu n-tého řádu.

3.1.3 Lineární regrese

Speciální případ analytického řešení je lineární regrese. Jedná se o případ, kdy experimentálně získaná data prokládáme lineární funkcí s obecným předpisem

$$f(x) = ax + b \,.$$

V sekci 3.1.2 jsme si definovali rovnici (1), do které tento obecný lineární předpis můžeme dosadit a tím si vyjádřit rovnici sumy konkrétně pro lineární funkci:

$$S = \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)^2 \,.$$

Abychom proložili data funkcí, musíme nalézt minimum funkce S. Toho dosáhneme pomocí položení derivace této funkce rovnou nule, respektive položením jednotlivých parciálních derivací rovných nule, protože se zde nachází dvě neznámé.

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n} \left(2\left(y_i - ax_i - b\right) \cdot (0 - x_i - 0)\right) \qquad \frac{\partial S}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} \left(2\left(y_i - ax_i - b\right) \cdot (0 - 0 - 1)\right)$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n} x_i \left(y_i - ax_i - b\right) \qquad \frac{\partial S}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - ax_i - b\right)$$

$$
\begin{aligned}
-2\sum_{i=1}^{n} x_i\left(y_i - ax_i - b\right) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - a x_i^2 - b x_i\right) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \sum_{i=1}^{n} a x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} b x_i &= 0 \\
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
-2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - ax_i - b\right) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} a x_i - \sum_{i=1}^{n} b &= 0 \\
a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb &= \sum_{i=1}^{n} y_i
\end{aligned}
$$

Po jednotlivém derivování funkce S podle a a b a upravení výrazů dostáváme dvě rovnice, ve kterých a a b figurují jako neznáme. To znamená, že se jedná o soustavu dvou rovnic o dvou neznámých, což můžeme jednoduše pomocí dosazovací metody vyřešit pro a.

$$
a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb = \sum_{i=1}^{n} y_i \quad \Rightarrow \quad b = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \tag{2}
$$

$$
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \quad \Rightarrow \quad a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i
$$

$$
\begin{aligned}
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \sum_{i=1}^{n} x_i - \frac{1}{n}a\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
an\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - a\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 &= n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i \\
a &= \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \qquad (3)
\end{aligned}
$$

A protože znamená rovnici (3) pro a, můžeme jí dosadit do dříve odvozené rovnice (2) pro b, čímž dostáváme řešení této soustavy pro obě neznáme v podobě rovností (3) a (4).

$$
\begin{aligned}
b &= \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - a\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \\
b &= \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i - \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} y_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} \\
b &= \frac{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} y_i\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 - n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i \sum_{i=1}^{n} x_i + \sum_{i=1}^{n} y_i\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2}{n^2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \\
b &= \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \sum_{i=1}^{n} y_i - n\sum_{i=1}^{n} x_i y_i \sum_{i=1}^{n} x_i}{n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2} \qquad (4)
\end{aligned}
$$

3.2 Termoelektrický jev

4 Výsledky

5 Závěr

Zdroje

1. KUMBÁR, Vojtěch. *Fyzikální praktikum.* Brno: Mendelova Univerzita, 2015. ISBN 978-80-7509-335-6.

Seznam obrázků

Seznam tabulek