ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

tpu.ru

Углубленный курс информатики

Аппроксимация экспериментальных данных

Чузлов Вячеслав Алексеевич

к.т.н.. доцент ОХИ ИШПР

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ АППРОКСИМАЦИИ

Пусть задана функциональная зависимость ***y = f(x),*** полученная в эксперименте:

X	x_1	x_2	x_3	…	x_n
Y	y_1	y_2	y_3	…	y_n

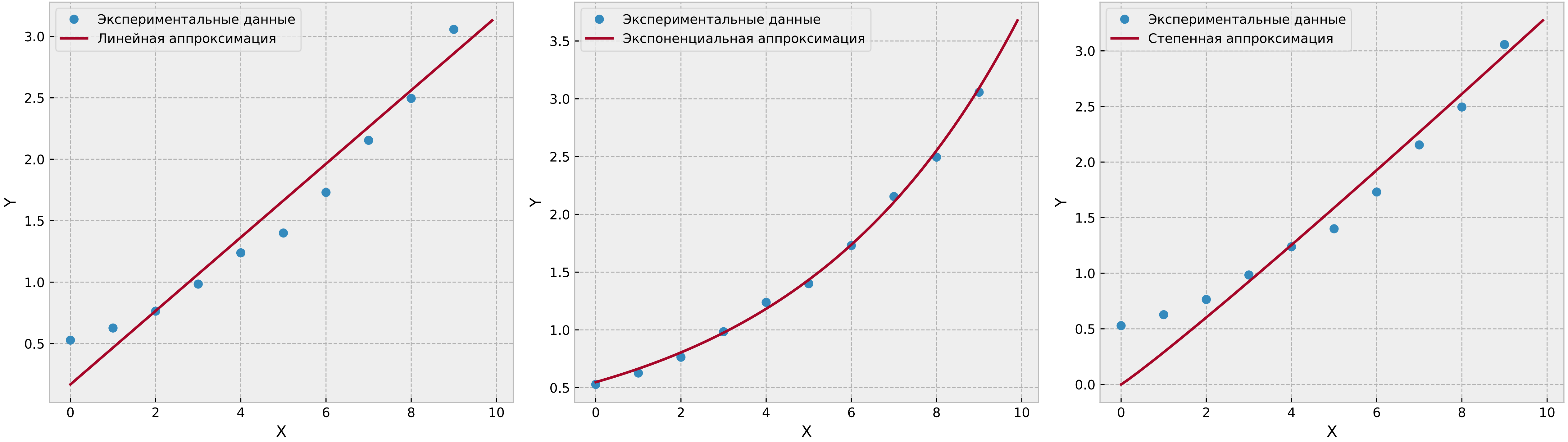
n – количество известных экспериментальных значений. Если аналитическое выражение функции f(x) неизвестно или является сложным, то возникает практически важная задача: найти такую эмпирическую формулу:

$$\tilde{y} = \tilde{f}(x)$$

значения которой при $\boldsymbol{x = x_i}$ были близки к экспериментальным данным $\boldsymbol{y_i}$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ АППРОКСИМАЦИИ

Графическое сравнение аппроксимирующих функций:



- В данном случае экспоненциальная аппроксимация точнее описывает экспериментальные данные.
- Для других экспериментальных данных возможны другие функции, которые будут точнее их описывать.

ЛИНЕЙНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

$$\tilde{y} = a_0 + a_1 x$$

a_0 , a_1 – коэффициенты линейной аппроксимирующей функции

- Для линейной аппроксимирующей функции коэффициенты a_0 и a_1 определяются по методу наименьших квадратов:

$$F = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (a_0 + a_1 x_i)]^2 \to \min$$

где $\boldsymbol{y_i}$ - табличные значения функции; $\boldsymbol{a_0 + a_1 x_i}$ – линейная аппроксимирующая функция

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a_0} = -2 \cdot \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot 1 = 0 \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_1} = -2 \cdot \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot x_i = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} y_i - a_0 \cdot n - a_1 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^{n} (y_i \cdot x_i) - a_0 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i - a_1 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_0 \cdot n + a_1 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i \cdot x_i) \end{cases}$$

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} \sum\limits_{i=1}^{n} y_i & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i) & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n} x_i & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} y_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i)}{n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right)^2}$$

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} n & \sum\limits_{i=1}^{n} y_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n} x_i & \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} n & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \\ \sum\limits_{i=1}^{n} x_i & \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 \end{vmatrix}} = \frac{n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} (x_i \cdot y_i) - \sum\limits_{i=1}^{n} x_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} y_i}{n \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum\limits_{i=1}^{n} x_i \right)^2}$$

$$S_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad S_2 = \sum_{i=1}^{n} y_i \qquad S_3 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \qquad S_4 = \sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i$$

Коэффициенты аппроксимации:

$$a_0 = \frac{S_2 \cdot S_3 - S_1 \cdot S_4}{n \cdot S_3 - S_1^2} \qquad a_1 = \frac{n \cdot S_4 - S_1 \cdot S_2}{n \cdot S_3 - S_1^2}$$

ПРИМЕР

Составить программу для аппроксимации экспериментальных данных:

X	300	400	500	600	700	800
Y	6.97	7.01	7.12	7.28	7.45	7.62

Вычислить значение Y в точке X = 750.

Реализация

```
function LineFit(x, y: array of real): array of real;
begin
  var (s1, s2, s3, s4) := (0.0, 0.0, 0.0, 0.0);
  result := ArrFill(2, 0.0);

  for var i := 0 to x.High do
  begin
    s1 += x[i];
    s2 += y[i];
    s3 += sqr(x[i]);
    s4 += x[i] * y[i]
  end;

  var n := x.Length;
  result[0] := (s2 * s3 - s1 * s4) / (n * s3 - sqr(s1));
  result[1] := (n * s4 - s1 * s2) / (n * s3 - sqr(s1))
end;


function line_func(a: array of real; x: real): real;
begin
  result := a[0] + a[1] * x
end;
```

```
begin
  var x: array of real = (300, 400, 500,
                          600, 700, 800);

  var y: array of real = (6.97, 7.01, 7.12,
                          7.28, 7.45, 7.62);

  var a := LineFit(x, y);
  var y_ := line_func(a, 750);
  println($'При x = 750 y = {y_}')
end.
```

```
При x = 750 y = 7.51195238095238
```

ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

$$P(x) = A * e^{k \cdot x}$$

$$\ln\big(P(x)\big) = \ln(A) + \mathrm{k} \cdot \ln(e) \cdot x$$

Сделаем замену: $\ln\big(P(x)\big) = \mathrm{y}$; $\ln(A) = a_0$; $k = a_1$:

$$\Downarrow$$

$$y = a_0 + a_1 \cdot x$$

Реализация

```
function ExpFit(x, y: array of real): array of real;
begin
  var (s1, s2, s3, s4) := (0.0, 0.0, 0.0, 0.0);
  result := ArrFill(2, 0.0);

  for var i := 0 to x.High do
  begin
    s1 += x[i];
    s2 += ln(y[i]);
    s3 += sqr(x[i]);
    s4 += x[i] * ln(y[i])
  end;

  var n := x.Length;
  result[0] := (s2 * s3 - s1 * s4) / (n * s3 - sqr(s1));
  result[1] := (n * s4 - s1 * s2) / (n * s3 - sqr(s1))
end;


function exp_func(a: array of real; x: real): real;
begin
  result := exp(a[0]) * exp(a[1] * x)
end;
```

```
begin
  var x: array of real = (300, 400, 500,
                          600, 700, 800);

  var y: array of real = (6.97, 7.01, 7.12,
                          7.28, 7.45, 7.62);

  var a := ExpFit(x, y);
  var y_ := exp_func(a, 750);
  println($'При x = 750 y = {y_}')
end.
```

```
При x = 750 y = 7.51206780537444
```

СТЕПЕННАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

$$P(x) = A * x^k$$

$$\ln\big(P(x)\big) = \ln(A) + \mathrm{k} \cdot \ln(x)$$

Сделаем замену: $\ln\big(P(x)\big) = \mathrm{y}$; $\ln(A) = a_0$; $k = a_1$:

$$\Downarrow$$

$$y = a_0 + a_1 \cdot \ln(x)$$

Реализация

```
function PowFit(x, y: array of real): array of real;
begin
  var (s1, s2, s3, s4) := (0.0, 0.0, 0.0, 0.0);
  result := ArrFill(2, 0.0);

  for var i := 0 to x.High do
  begin
    s1 += ln(x[i]);
    s2 += ln(y[i]);
    s3 += sqr(ln(x[i]));
    s4 += ln(x[i]) * ln(y[i])
  end;

  var n := x.Length;
  result[0] := (s2 * s3 - s1 * s4) / (n * s3 - sqr(s1));
  result[1] := (n * s4 - s1 * s2) / (n * s3 - sqr(s1))
end;


function pow_func(a: array of real; x: real): real;
begin
  result := exp(a[0]) * x ** a[1]
end;
```

```
begin
  var x: array of real = (300, 400, 500,
                          600, 700, 800);

  var y: array of real = (6.97, 7.01, 7.12,
                          7.28, 7.45, 7.62);

  var a := PowFit(x, y);
  var y_ := pow_func(a, 750);
  println($'При x = 750 y = {y_}')
end.
```

```
При x = 750 y = 7.48357339816782
```

Задание

Дана зависимость теплоемкости и энтальпии от температуры:

T, K	**Этилбензол C_8H_{10}**	
	C_p°, Дж/(моль·К)	*ΔH, кДж/моль*
300	129.20	29.62
400	170.54	21.88
500	206.48	15.52
600	236.14	10.38
700	260.58	6.40
800	280.96	3.35
900	298.19	1.13
1000	312.84	0.21

1. С использованием линейной, экспоненциальной и степенной аппроксимации определить значения теплоемкости и энтальпии при изменении T в интервале от 300 до 1000 с шагом 50.
2. Построить графики в Excel по табличным данным и результатам аппроксимации. Выбрать аппроксимирующую функцию, которая наиболее точно описывает табличные данные.

ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

ЧУЗЛОВ ВЯЧЕСЛАВ АЛЕКСЕЕВИЧ

к.т.н., доцент ОХИ ИШПР

Учебный корпус №2, ауд. 136

+7-962-782-66-15

chuva@tpu.ru