

Математическая обработка результатов экспериментальных исследований

Д-р техн. наук Н.С. НИКОЛАЕВ

Московский государственный университет прикладной биотехнологии,
канд. физ.-мат. наук М.А. УРЮПИН

Московское представительство итальянской фирмы Technoblock

Possible versions of mathematical processing of the experimental data array are considered. It is offered to present them as an approximating function, not passing exactly through all experimental points, but bringing to minimum the square quality criterion J. Parameters of this approximating function (this is often an exponential function) for specific processes are determined by analysis of the results of the experiment on the basis of knowledge of the mechanism of physical processes, being described by the function. An example of treatment of experimental data of weight change of chicken blocks, being defrosted under vacuum, is given.

Экспериментальные исследования любых процессов, в том числе и технологических процессов переработки сырья животного происхождения, подразумевают математическую обработку данных. Ее уровень во многом зависит от целей, стоящих перед исследователями. Главными из них являются более глубокое понимание физики происходящих процессов и возможность прогнозирования требуемых результатов.

Результатом экспериментов, как правило, является набор пар чисел: заданное экспериментатором значение аргумента t и полученное экспериментатором значение исследуемой функции $f(t)$. Допустим, что было произведено N таких испытаний: $\{(t_i, f_i), i = 1, 2, \dots, N\}$. Для определенности будем считать, что результаты эксперимента записаны последовательно в порядке возрастания аргумента: $t_1 < t_2 < \dots < t_N$.

После получения результатов эксперимента в виде набора пар чисел возникает потребность наглядного представления этих результатов, обычно в графическом виде.

Самым распространенным способом является использование многочленов вида

$$f(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + \dots,$$

которые аппроксимируют поведение функции между точками t_1, t_2, \dots, t_N ; в них значения функции получены экспериментально и считаются заданными.

Самым простым, но наименее наглядным является представление исследуемой функции в виде кусочно-постоянной:

$$f(t) = f_i, \text{ если } t_i < t < t_{i+1}, i = 1, 2, \dots, N - 1.$$

Недостатком такой аппроксимации является разрывность функции, что не соответствует большинству реальных физических процессов.

Следующим по сложности является представление исследуемой функции в виде ломаной, состоящей из отрезков прямых, соединяющих последовательные точки результатов эксперимента:

$$f(t) = f_i + (f_{i+1} - f_i)(t - t_i)/(t_{i+1} - t_i), \\ \text{если } t_i < t < t_{i+1}, i = 1, 2, \dots, N - 1.$$

Недостатком такого представления является негладкость (разрывность первой производной) функции, что также не соответствует большинству физических процессов.

Можно предложить аппроксимацию в виде кусков кривых второго порядка (парabol), которые соединяются в точках $t_2 < t_3 < \dots < t_{N-1}$ с сохранением гладкости (непрерывности первой производной).

Самой гладкой аппроксимацией результатов будет единый для всего набора точек интерполяционный полином Лагранжа-Сильвестра, график которого проходит через все имеющиеся точки:

$$f(t) = f_1(t - t_2)(t - t_3)\dots(t - t_N)/[(t_1 - t_2)(t_1 - t_3)\dots(t_1 - t_N)] + \\ + f_2(t - t_1)(t - t_3)\dots(t - t_N)/[(t_2 - t_1)(t_2 - t_3)\dots(t_2 - t_N)] + \dots \\ + f_N(t - t_1)(t - t_2)\dots(t - t_{N-1})/[(t_{N-1} - t_1)(t_{N-1} - t_2)\dots(t_{N-1} - t_N)].$$

Недостатками такой аппроксимации являются сложность построения полинома при большом объеме экспериментальных данных (больших N) и его «странное» поведение, особенно когда интервалы между точками измерений сильно различаются между собой.

Поскольку все измерения имеют погрешности, можно отказаться от построения аппроксимирующей функции, точно проходящей через набор точек $\{(t_i, f_i), i = 1, 2, \dots, N\}$, и искать функцию $f(t)$, единую для всего набора точек и проходящую «очень близко» к ним. Выберем квадратичный критерий качества такой аппроксимации:

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [f(t_i) - f_i]^2.$$

Задача состоит в отыскании функции $f(t)$, которая сводит к минимуму критерий качества J .

Вид (тип) искомой функции $f(t)$ будем считать заданным (полином, экспонента и т.п.), но ее параметры a_1, a_2, \dots подлежат отысканию.

Задача состоит в определении точки в пространстве параметров $\{a_1, a_2, \dots\}$, в которой достигается минимум функции $J(a_1, a_2, \dots)$.

Поскольку сама функция f является непрерывной по параметрам a_1, a_2, \dots, a_n , критерий качества J является гладкой функцией этих параметров. Следовательно, необходимым условием минимума функции J является равенство нулю первых частных производных по параметрам a_j :

$$\frac{\partial J}{\partial a_j} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f(t_i)}{\partial a_j} [f(t_i) - f_i] = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

Число уравнений совпадает с числом искомых параметров a_1, a_2, \dots .

Если количество экспериментальных данных N превосходит число искомых параметров a_1, a_2, \dots , то такая задача, по крайней мере, теоретически имеет решение.

Если в качестве искомой функции строится полином заданной степени и требуется найти его коэффициенты, то такая задача имеет точное аналитическое решение, причем единственное, если степень полинома не превосходит $N - 1$. Задача сводится к решению системы линейных уравнений:

$$\begin{vmatrix} N & \sum_{i=1}^N t_i & \sum_{i=1}^N t_i^2 & \dots \\ \sum_{i=1}^N t_i & \sum_{i=1}^N t_i^2 & \sum_{i=1}^N t_i^3 & \dots \\ \sum_{i=1}^N t_i^2 & \sum_{i=1}^N t_i^3 & \sum_{i=1}^N t_i^4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum_{i=1}^N f_i \\ \sum_{i=1}^N f_i t_i \\ \sum_{i=1}^N f_i t_i^2 \\ \dots \end{vmatrix}$$

Некоторые простые решения такой задачи можно привести.

Тривиальное решение с постоянным значением – среднеарифметическое значение всех результатов экспериментов:

$$f(t) = a_0 = (f_1 + f_2 + \dots + f_N)/N.$$

Наилучшая прямая

$$f(t) = a_0 + a_1 t,$$

где

$$a_0 = \left[\left(\sum_{i=1}^N t_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^N f_i \right) - \left(\sum_{i=1}^N t_i \right) \left(\sum_{i=1}^N f_i^2 \right) \right] / \left[N \left(\sum_{i=1}^N t_i^2 \right) + \left(\sum_{i=1}^N t_i \right)^2 \right];$$

$$a_1 = \left[N \left(\sum_{i=1}^N f_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N t_i \right) \left(\sum_{i=1}^N f_i \right) \right] / \left[N \left(\sum_{i=1}^N t_i^2 \right) + \left(\sum_{i=1}^N t_i \right)^2 \right].$$

Результаты экспериментов отражают некие физические процессы, механизмы которых могут быть известны экспериментаторам. В этом случае результаты экспериментов должны укладываться на некоторую кривую известного типа, но, возможно, с неизвестными параметрами. Анализ результатов экспериментов может как раз и состоять в идентификации параметров некоторой выбранной модели.

В качестве таких моделей часто встречаются экспоненты:

$$f(t) = a_0 + a_1 e^{-k(t-m)} = a_0 + a_1 \exp[-k(t-t_0)].$$

Возможно, что экспериментально исследуется многостадийный процесс, который при разных значениях аргументов описывается разными уравнениями.

Вероятно, что границы перехода от одного доминирующего процесса к другому также требуется идентифицировать.

Изложенные выше теоретические результаты применимы к конкретной практической задаче – анализу экспериментальных данных изменения массы размораживающего продукта под вакуумом.

Массив экспериментальных данных (41 измерение массы с шагом по времени 0,1 ч на интервале от 0 до 4 ч):

2900; 2902,5; 2905,1; 2908; 2911,8; 2916,8; 2926; 2935,2; 2943,8; 2952,4; 2960,8; 2970; 2977; 2983,4; 2987,5; 2990,5; 2992; 2993; 2994; 2995; 2995,5; 2995,8; 2996; 2996,2; 2996,4; 2996,6; 2996,8; 2997; 2997,2; 2997,3; 2997,4; 2997,5; 2997,6; 2997,7; 2997,7; 2997,8; 2997,8; 2997,9; 2997,9; 2998.

По экспериментальным данным построена следующая функция:

$$f(t) = \begin{cases} a_1 + a_2 t, & \text{если } 0 < t \leq t_1; \\ a_3 + \exp[a_4(t-a_5)], & \text{если } t_1 < t \leq t_2; \\ a_6 - \exp[a_7(t-a_8)], & \text{если } t_2 < t. \end{cases}$$

Требуется найти ее постоянные параметры $a_1 \dots a_8$, причем размерности параметров таковы:

$[a_1, a_3, a_6] = [\text{масса}], [a_2] = [\text{масса}/\text{время}], [a_4, a_7] = [1/\text{время}], [t_1, t_2, a_5, a_8] = [\text{время}]$.

Параметры не являются независимыми – на них наложены 4 ограничения, связанные с непрерывностью и гладкостью функции $f(t)$ в точках t_1 и t_2 :

$$a_1 + a_2 t_1 = a_3 + \exp[a_4(t_1 - a_5)];$$

$$a_2 = a_4 \exp[a_4(t_1 - a_5)];$$

$$a_3 + \exp[a_4(t_2 - a_5)] = a_6 - \exp[a_7(t_2 - a_8)];$$

$$a_4 \exp[a_4(t_2 - a_5)] = -a_7 \exp[a_7(t_2 - a_8)].$$

Точного аналитического решения такая задача не имеет. Численный поиск точки в пространстве параметров, где достигается минимум квадратичного критерия качества, дает следующие результаты:

$$a_1 = 2900; \quad a_2 = 25; \quad t_1 = 0,3;$$

$$a_3 = 2901,48; \quad a_4 = 4; \quad a_5 = -0,19; \quad t_2 = 0,75.$$

$$a_6 = 2998; \quad a_7 = -3,1; \quad a_8 = 2,04.$$

Уравнение теоретической кривой:

$$t < 0,3 \quad y = 2900 + 25t;$$

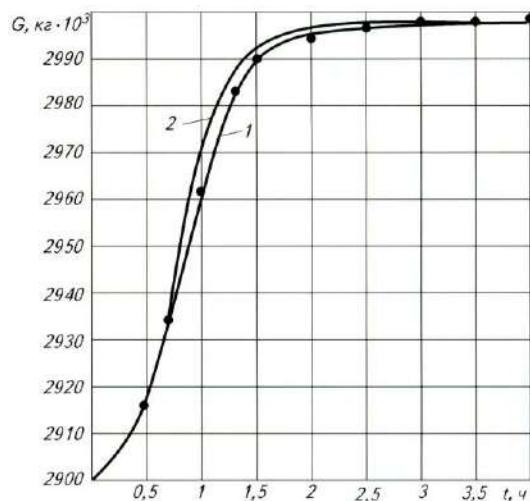
$$0,3 < t < 0,75 \quad y = 2901,48 + \exp[4(t - 0,19)];$$

$$0,75 < t \quad y = 2998 - \exp[-3,1(t - 2,04)].$$

Графики экспериментальных данных и оптимальной аппроксимации приведены на рисунке.

Математическая модель, полученная в результате обработки экспериментальных результатов (см. таблицу и рисунок), имеет свои плюсы и минусы. Главными достоинствами данной модели являются ее простота и хорошая сходимость с экспериментом.

Кроме того, дискретность модели позволяет предположить, что изменение массы продукта при размораживании является результатом нескольких одновременных процессов.



Изменение массы продукта G при вакуумном размораживании курицы в блоках:

1 – экспериментальная кривая; 2 – теоретическая кривая

Время <i>t</i> , ч	Значение функции	
	Эксперимент	Теория (расчет)
0	2900	2900
0,1	2902,5	2902,5
0,2	2905,1	2905
0,3	2908	2908,45
0,4	2911,8	2911,87
0,5	2916,8	2916,97
0,6	2926	2924,58
0,7	2935,2	2935,93
0,8	2943,8	2951,35
0,9	2952,4	2963,8
1	2960,8	2972,92
1,1	2970	2979,61
1,2	2977	2984,52
1,3	2983,4	2988,12
1,4	2987,5	2990,75
1,5	2990,5	2992,69
1,6	2992	2994,1
1,7	2993	2995,14
1,8	2994	2995,91
1,9	2995	2996,46

Время <i>t</i> , ч	Значение функции	
	Эксперимент	Теория (расчет)
2	2995,5	2996,87
2,1	2995,8	2997,17
2,2	2996	2997,39
2,3	2996,2	2997,56
2,4	2996,4	2997,67
2,5	2996,6	2997,76
2,6	2996,8	2997,83
2,7	2997	2997,87
2,8	2997,2	2997,91
2,9	2997,3	2997,93
3	2997,4	2997,95
3,1	2997,5	2997,96
3,2	2997,6	2997,97
3,3	2997,7	2997,98
3,4	2997,7	2997,99
3,5	2997,8	2997,99
3,6	2997,8	2997,99
3,7	2997,9	2997,99
3,8	2997,9	2998
3,9	2997,9	2998
4	2998	2998

временно протекающих процессов (как минимум, процессов поглощения и выделения влаги), причем их взаимное влияние меняется с течением времени, о чем и свидетельствует наличие прямолинейного участка в начале процесса и дальнейших экспоненциальных зависимостей с разными коэффициентами, характеризующими разность скоростей протекания процессов.

Недостатками данной модели являются ее дискретность и формализованный характер, изначально в поста-

новочном плане не отражающий физической сути протекающих в объекте процессов.

Несмотря на перечисленные недостатки, приведенный подход к обработке экспериментальных данных и полученная модель имеют свою практическую ценность и могут быть рассмотрены как определенный этап при моделировании биотехнологических процессов с целью прогнозирования свойств продукта, с учетом закономерностей их протекания и взаимного влияния.