V. N. Romanov, Choice of models for the approximation of temperature dependences of thermo-physical quantities,
TVT, 1982, Volume 20, Issue 3, 452–456

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

Том 20 1982 № 3

УДК 536.2.023

ВЫБОР МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Романов В. Н.

Рассмотрены преимущества и недостатки различных моделей, применяемых для описания теплофизического эксперимента (полиномов, ортогональных полиномов, физически обоснованных функций). Проведено сравнение указанных моделей на примере обработки экспериментальных данных по тепловому расширению корунда.

При обработке результатов измерений теплофизических величин (теплоемкости, теплопроводности, температурного коэффициента линейного расширения и др.) часто возникает необходимость построения аналитических зависимостей этих величин от температуры. Весьма существенным для повышения точности результатов оказывается выбор подходящего класса моделей (аппроксимирующих функций). Обычно эту задачу приходится решать при дополнительном условии ограниченного числа измерений. Целесообразно рассматривать модели нескольких видов.

1. *Полиномы*, имеющие смысл разложения в ряд неизвестной функции в окрестности некоторой фиксированной температуры T_0

$$f(a_k, T)=\sum_{k=0}^{m} a_k (T-T_0)^k, \tag{1}$$

где a_k — неизвестные параметры; m — число параметров; T — температура. Преимущество таких моделей по сравнению с другими состоит в сравнительной простоте вычислений и в унифицированной форме представления зависимостей. Однако использование их для аппроксимации имеет ряд отрицательных свойств: они применимы в сравнительно узких температурных диапазонах; для адекватного описания экспериментальных данных необходимо определять большое число параметров (иногда до десяти и более), что не может быть сделано достаточно точно (обычно удается надежно определить не более четырех параметров), или использовать кусочно-гладкие полиномы, что также затруднительно, так как требует значительного увеличения числа измерений; параметры не имеют физического смысла, что приводит к неконтролируемым погрешностям при вычислении производных по температуре, интегрировании, экстраполяции. Отрицательным свойством таких моделей является также сильная закоррелированность параметров (коэффициент корреляции $r_{a_k a_j} \simeq 0{,}95$–$0{,}99$), поэтому для вычисления функции параметров необходимо знание всей дисперсионной матрицы. Ряд (1) оказывается часто «расходящимся» (вклады от высоких степеней сравнимы с вкладами от начальных членов и даже превышают их), поэтому результаты расчета чувствительны к малому изменению параметров, а его использование приводит к значительным вычислительным погрешностям на границах диапазона аппроксимации.

2. *Ортогональные полиномы*, построенные по совокупности экспериментальных данных. Модель имеет вид

$$f(a_k, X)=\sum_{k=0}^{m} \alpha_k \varphi_k(X), \tag{2}$$

Таблица 1

Значения параметров a_k, их средних квадратических отклонений S_{a_k}, доверительных интервалов [1] Δa_k и остаточных дисперсий S^2_{0m} для моделей (1), (2), (6)

Вид модели	Характеристика	Корунд перпенд. оси	Корунд парал. оси
Модель (1)	a_1, 10^{-6} К$^{-1}$	$5{,}21_{4;\,9}$ [2]	$5{,}99_{2;\,5}$
	a_2, 10^{-9} К$^{-2}$	$6{,}1_{2;\,5}$	$6{,}3_{1;\,2}$
	a_3, 10^{-12} К$^{-3}$	$-5{,}3_{4;\,9}$	$-5{,}6_{2;\,5}$
	a_4, 10^{-15} К$^{-4}$	$2{,}1_{2;\,5}$	$2{,}3_{2;\,5}$
	S^2_{0m}, 10^{-12} [3]	42,1	11,5
Модель (2)	a_0, 10^{-3}	$3{,}617_{2;\,5}$	$4{,}023_{1;\,2}$
	a_1, 10^{-3}	$1{,}9901_{14;\,30}$	$2{,}2003_{7;\,20}$
	a_2, 10^{-4}	$1{,}274_{13;\,30}$	$1{,}323_{6;\,15}$
	a_3, 10^{-5}	$-1{,}59_{11;\,20}$	$-1{,}46_{5;\,10}$
	a_4, 10^{-6}	$5{,}9_{9;\,20}$	$7{,}3_{4;\,10}$
	S^2_{0m}, 10^{-12}	36,8	9,3
Модель (6)	a_1, 10^{-2}	$0{,}282_{5;\,10}$	$0{,}287_{5;\,10}$
	a_2, К	$734{,}6_{75;\,170}$	$685{,}5_{74;\,170}$
	a_3, 10^{-1}	$0{,}326_{8;\,20}$	$0{,}311_{6;\,10}$
	S^2_{0m}, 10^{-12}	10,0	10,8

[1] В табл. 1—3 значения доверительных интервалов рассчитаны для вероятности $P=0{,}95$.

[2] S_{a_k}, Δa_k — в единицах последнего разряда значения a_k, $\Delta a_k = t_{q/2,\,N-m} S_{a_k}$, $t_{q/2}$ — — квантиль распределения Стьюдента.

[3] $S^2_{0m} = \frac{1}{N-m}\sum_{i=1}^{N}[y_i - f(a_k,\ T_i)]^2$, f — аппроксимирующая функция, y — аппроксимируемая величина ($N=11$).

где X — безразмерная переменная с пределами изменения $[-1,\ 1]$, связанная с температурой T соотношением

$$X = \frac{T-(T_{\text{макс}}+T_{\text{мин}})/2}{(T_{\text{макс}}-T_{\text{мин}})/2}, \tag{3}$$

$\varphi_k(X)$ — набор ортогональных полиномов: $\sum_{i=1}^{N} p_i\varphi_k(X_i)\varphi_j(X_i)=0$, $(k\neq j)$; p_i — вес измерений; N — число измерений.

Функции $\varphi_k(X)$ могут быть построены с помощью стандартной процедуры ортогонализации (например, Грама — Шмидта или аналогичной) [1]. В частности

$$\varphi_0(X)=1, \quad \varphi_1(X)=2(X-\overline{X}) \text{ и т. д.,}$$

где

$$\overline{X} = \sum_{i=1}^{N} p_i X_i \Big/ \sum_{i=1}^{N} p_i. \tag{4}$$

Преимуществом модели (2) является то, что дисперсионная матрица диагонализируется, а значения параметров и их дисперсий не зависят от числа параметров. Например

$$Da_k = S_{0m}{}^2\,\frac{1}{[p\varphi_k{}^2]}, \quad \operatorname{cov}(a_k, a_j)=0, \quad (k\neq j),$$

$$Df = S_{0m}{}^2 \sum_{k=0}^{m}\frac{\varphi_k{}^2}{[p\varphi_k{}^2]} + \sum_{k=0}^{m} a_k{}^2 D\varphi_k, \tag{5}$$

где $\quad [p\varphi_k{}^2] = \sum_{i=1}^{N} p_i\varphi_k{}^2(X_i).$

Таблица 2

Значения тепловой деформации корунда ε_{293-T_i} и доверительных интервалов, рассчитанные по моделям (1), (2), (6)

T_i, К	ε_{293-T}, 10^{-6}							
	эксперимент		расчет по (1)		расчет по (2)		расчет по (6)	
	перпенд. оси	парал. оси	перпенд. оси	парал. оси	перпенд. оси	парал. оси	перпенд. оси	парал. оси
293	0	0	0	0	-3_{20}	-2_{10}	0	0
373	451	515	453_{4} [1]	517_{2}	455_{10}	518_{5}	450_{3}	515_{3}
473	1107	1253	1107_{4}	1253_{2}	1110_{12}	1254_{5}	1109_{4}	1256_{4}
573	1837	2066	1834_{6}	2064_{2}	1835_{12}	2064_{5}	1838_{4}	2068_{4}
673	2618	2930	2615_{9}	2929_{4}	2613_{12}	2928_{5}	2615_{4}	2928_{4}
773	3432	3830	3433_{23}	3832_{5}	3430_{10}	3833_{5}	3429_{4}	3827_{4}
873	4275	4762	4280_{69}	4764_{5}	4277_{10}	4763_{5}	4275_{4}	4759_{4}
973	5141	5719	5149_{112}	5720_{7}	5149_{10}	5720_{5}	5147_{4}	5720_{4}
1073	6045	6700	6041_{202}	6700_{11}	6043_{10}	6702_{5}	6044_{4}	6706_{4}
1173	6970	7718	6960_{332}	7712_{14}	6962_{10}	7713_{5}	6966_{4}	7719_{4}
1273	7909	8761	7917_{510}	8766_{21}	7912_{27}	8763_{12}	7910_{6}	8758_{6}

[1] Доверительный интервал — в единицах последнего разряда значения ε_{293-T_i}, $\Delta\varepsilon = t_{q/2,\ N-m} S_\varepsilon$, S_ε — средние квадратические отклонения ε_{293-T_i}.

Так как аналитический вид зависимости обычно заранее не известен, то ортогональные полиномы имеют нестандартный вид. Оценки параметров и их дисперсии сильно зависят от плана эксперимента. Кроме того, погрешности расчета по таким моделям могут быть значительны, так как сначала строятся по экспериментальным данным полиномы, а затем уже определяются параметры.

3. *Модели, имеющие физический смысл,* обладают рядом преимуществ: малое число параметров ($m=3$), определяемых достаточно точно; возможность использования в более широких температурных диапазонах; возможность уменьшения погрешностей, связанных с неадекватностью модели. Так как при использовании таких моделей соответствующая функциональная зависимость считается в принципе известной, то это позволяет также оценить предельно достижимую точность определения рассматриваемой теплофизической величины как функции температуры по имеющейся совокупности экспериментальных данных. К недостаткам этих моделей следует отнести трудности расчетов при определении параметров.

Например, для аппроксимации экспериментальных данных по тепловой деформации применима модель

$$\varepsilon_{T_0-T_i} = f(T_i) - f(T_0), \quad f(T) = \frac{a_1 \operatorname{cth}(a_2/2T)}{1 - a_3 \operatorname{cth}(a_2/2T)}. \tag{6}$$

Для аппроксимации данных по температурному коэффициенту линейного расширения (ТКЛР) и теплоемкости модель имеет вид

$$f_1(T) = \frac{a_1'/T^2 \cdot \exp(a_2'/T)}{[\exp(a_2'/T) - 1]^2 [1 - a_3' \operatorname{cth}(a_2'/2T)]}. \tag{7}$$

Данные по теплопроводности можно аппроксимировать по модели вида

$$f_2(T) = \frac{a_1''/T^2 \cdot \exp(a_4/T)}{[\exp(a_2''/T) - 1]^2 [1 - a_3'' \operatorname{cth}(a_2''/2T)]}. \tag{8}$$

Функции (6) — (8) применимы в диапазоне температур $0{,}1\theta_Д$ — $2\theta_Д$ ($^2/_3 T_{пл}$) (здесь $\theta_Д$ — дебаевская температура, $T_{пл}$ — температура плавления). Параметры моделей (6) — (8) имеют определенный физический смысл. Например, $a_1'/a_2'^2$ — квазигармоническое значение ТКЛР, a_2' — некоторая характеристическая температура, a_3' — параметр, учитывающий ангармонизм.

Таблица 3

Значения ТКЛР корунда $\alpha(T_i)$ и доверительных интервалов, рассчитанные по моделям (1), (2), (6)

T_i, К	$\alpha(T_i)$, 10^{-6} К$^{-1}$ (расчет)					
	по (1)		по (2)		по (6)	
	перпенд. оси	парал. оси	перпенд. оси	парал. оси	перпенд. оси	парал. оси
293	$5{,}21_{9}$ [1]	$5{,}99_{5}$	$5{,}32_{27}$	$6{,}06_{12}$	$5{,}04_{6}$	$5{,}84_{6}$
373	$6{,}09_{5}$	$6{,}90_{2}$	$6{,}13_{15}$	$6{,}93_{7}$	$6{,}13_{2}$	$6{,}94_{3}$
473	$6{,}94_{2}$	$7{,}77_{2}$	$6{,}93_{6}$	$7{,}77_{3}$	$6{,}98_{1}$	$7{,}80_{1}$
573	$7{,}57_{2}$	$8{,}41_{1}$	$7{,}53_{4}$	$8{,}39_{2}$	$7{,}54_{2}$	$8{,}37_{2}$
673	$8{,}02_{2}$	$8{,}86_{1}$	$7{,}98_{4}$	$8{,}83_{2}$	$7{,}95_{2}$	$8{,}79_{2}$
773	$8{,}34_{5}$	$9{,}19_{1}$	$8{,}31_{4}$	$9{,}16_{2}$	$8{,}28_{2}$	$9{,}12_{2}$
873	$8{,}58_{12}$	$9{,}44_{1}$	$8{,}57_{3}$	$9{,}41_{1}$	$8{,}56_{1}$	$9{,}42_{1}$
973	$8{,}80_{17}$	$9{,}67_{1}$	$8{,}79_{3}$	$9{,}64_{1}$	$8{,}81_{1}$	$9{,}69_{1}$
1073	$9{,}04_{27}$	$9{,}94_{2}$	$9{,}01_{6}$	$9{,}88_{3}$	$9{,}04_{2}$	$9{,}94_{2}$
1173	$9{,}36_{39}$	$10{,}30_{5}$	$9{,}27_{14}$	$10{,}21_{6}$	$9{,}27_{3}$	$10{,}18_{3}$
1273	$9{,}72_{54}$	$10{,}72_{17}$	$9{,}61_{26}$	$10{,}65_{12}$	$9{,}48_{5}$	$10{,}42_{5}$

[1] Доверительный интервал — в единицах последнего разряда значения $\alpha(T_i)$, $\Delta\alpha = t_{q/2,\ N-m} S\alpha$ — средние квадратические отклонения $\alpha(T_i)$.

Для сравнения различных моделей проводилась обработка одной и той же совокупности экспериментальных данных функциями различного вида. Использовались данные по тепловой деформации корунда перпендикулярно и параллельно оси симметрии, полученные во ВНИИМе и ИВТАНе на высокоточных интерференционных и компараторных дилатометрах в диапазоне температур 293—1273 К [2]. Относительная погрешность данных 0,5—1%. В качестве алгоритма обработки применялся взвешенный метод наименьших квадратов. Для нелинейной модели (6) задача минимизации решалась методом сопряженных градиентов [3]. Анализ адекватности модели проводился по методике [4].

В классе моделей (1) адекватным является полином четвертой степени при $a_0=0$, в классе моделей (2) — полином четвертой степени с пятью параметрами, в классе моделей (6) адекватной является функция с тремя параметрами.

В табл. 1 приведены значения параметров, их средние квадратические отклонения, доверительные интервалы и остаточные дисперсии моделей (1), (2), (6), полученные при аппроксимации данных по тепловой деформации корунда.

Из табл. 1 видно, что модель (6) является наиболее приемлемой (в смысле остаточной дисперсии) и имеет наименьшее число параметров среди сравниваемых моделей.

По найденным оценкам параметров для всех трех моделей рассчитаны функции отклика (в рассматриваемом случае — тепловой деформации). В табл. 2 сравниваются результаты расчета и экспериментальные данные.

Для дальнейшего сопоставления моделей рассчитаны ТКЛР, имеющие вид производных от аппроксимирующей функции по температуре

$$\alpha(T_i)=\frac{1}{1+\varepsilon_{293-T_i}}\left.\frac{\partial f}{\partial T}\right|_{T=T_i}. \qquad (9)$$

Результаты расчета приведены в табл. 3. Из табл. 3 видно, что значение производной существенно зависит от вида модели; использование моделей (1), (2) приводит к завышенным значениям ТКЛР на границах диапазона аппроксимации, в то же время модель (6) позволяет уменьшить погрешности, связанные с неадекватностью модели, при вычислении производной по температуре, т. е. получить более корректные значения ТКЛР.

Значения ТКЛР, рассчитанные по моделям (1), (2), (6), сравнивались между собой по критерию попарного сравнения Уилкоксона [5]. Сравнение показало, что модель (6) является более эффективной, чем модели (1), (2) на 10%-м уровне значимости.

НПО ВНИИМ им. Д. И. Менделеева

Поступила в редакцию
26.V.1981

ЛИТЕРАТУРА

1. *Себер Дж.* Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980.
2. *Amatuni A. N. et al.* Standard samples for dilatometry.— High Temp.— High Press, 1976, v. 8, p. 565.
3. *Васильев Ф. П.* Лекции по методам решения экстремальных задач. М.: МГУ, 1974.
4. *Аматуни А. Н., Романов В. Н., Малютина Т. И.* Обработка результатов дилатометрических измерений.— Измерительная техника, 1980, № 1, с. 39.
5. *Siegel S.* Nonparametric statistics for behavioural sciences.— N. Y.: McGraw-Hill Book Co., 1956.