Osnovna numerična orodja

Kemijsko inženirstvo 2
Metoda najmanjših kvadratov

(Vir: Plazl in Lakner: Uvod v modeliranje procesov)

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

- Iz naslednjih eksperimentalnih podatkov določimo empirično enačbo za specifično toplotno kapaciteto etilen-glikola pri konstantnem tlaku

T (^{o}C)	-40	0	40	80	120	160	200
C_p (cal/gK)	0.508	0.555	0.600	0.645	0.690	0.738	0.780

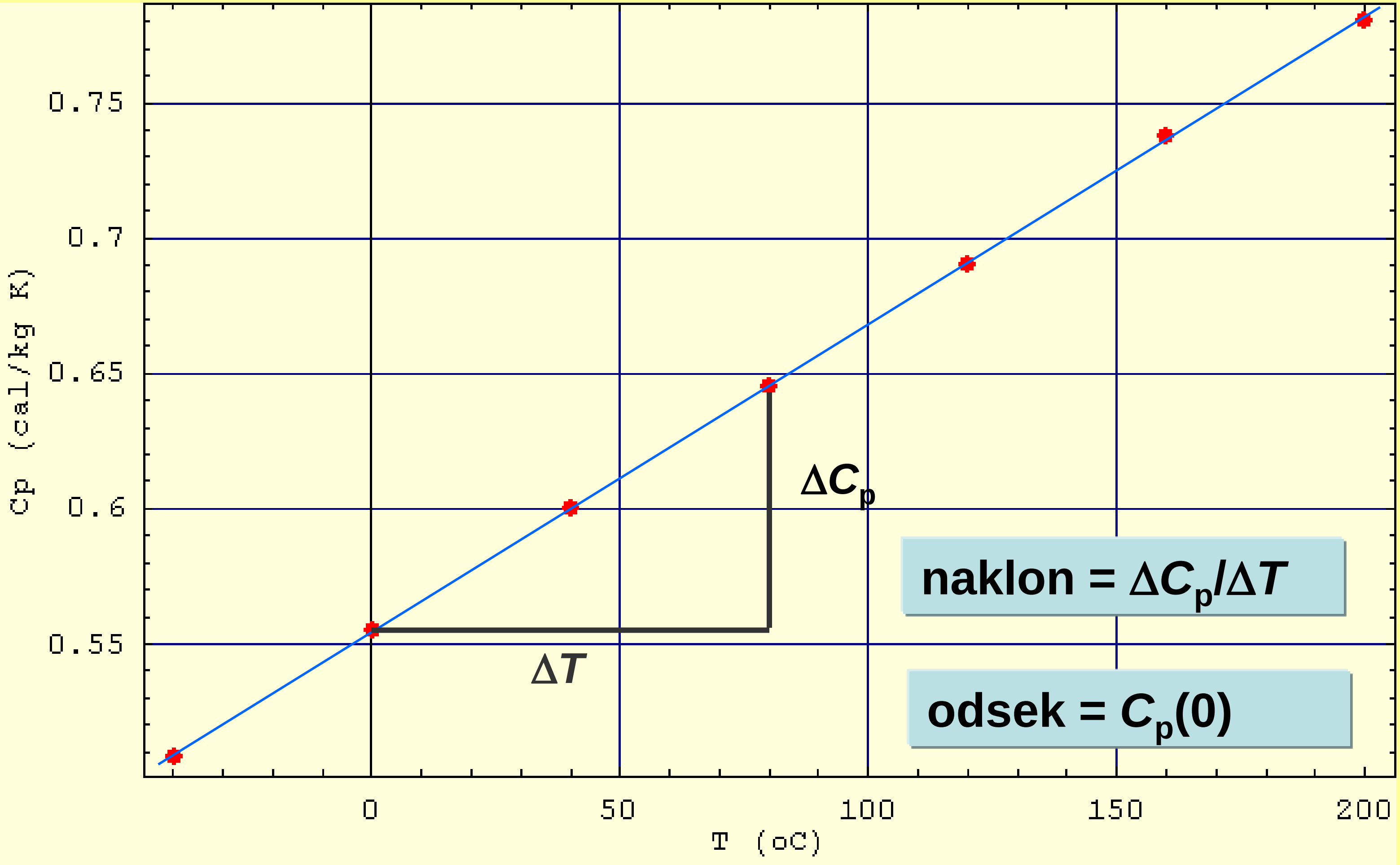
- Grafična določitev
- Numerična določitev

$$C_P = f(T) = ?$$

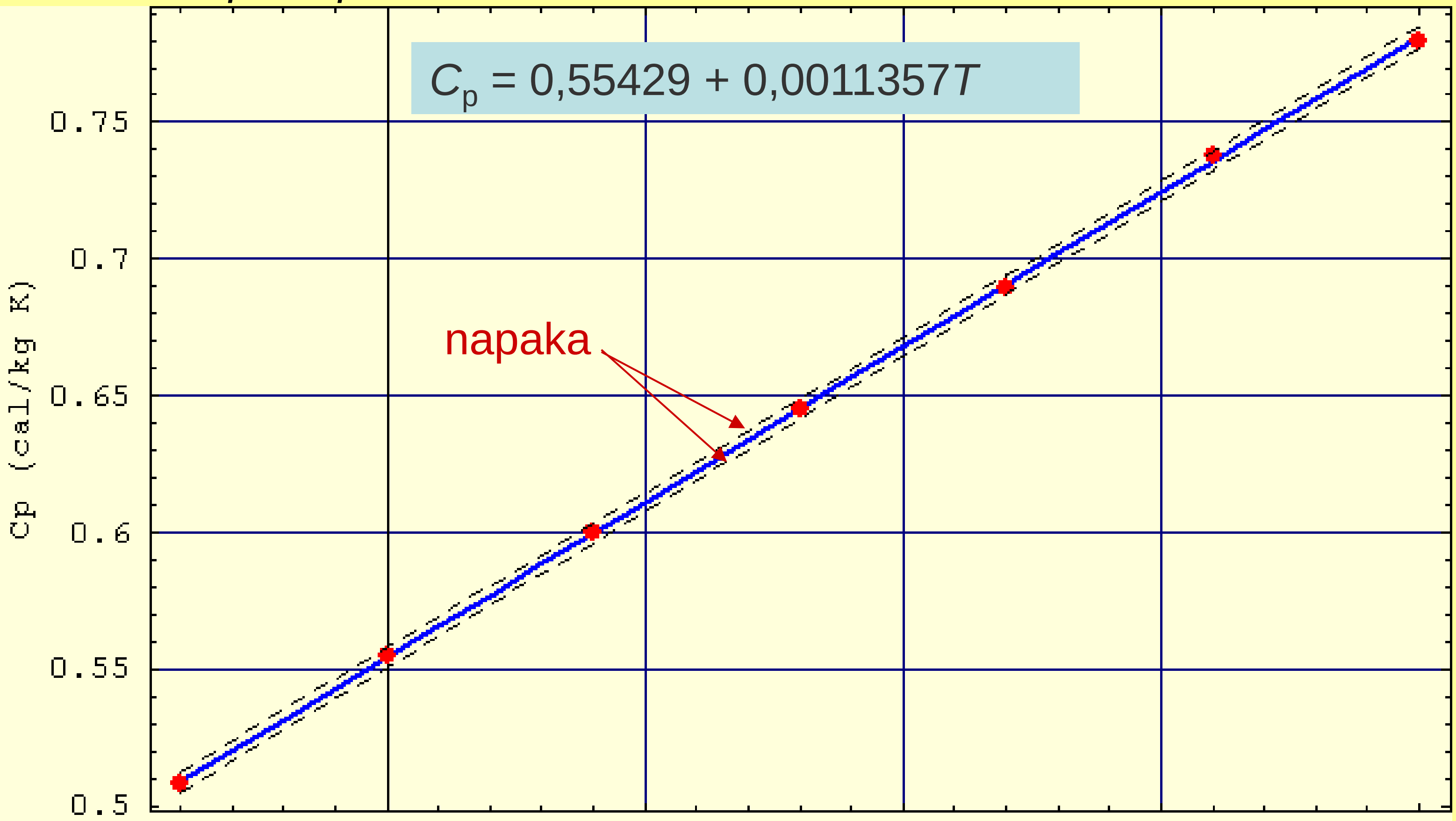
Univerza v Ljubljani
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

enačba premice: C_p = 0,555 + (0,645-0,555)/80T = ?

Grafični pristop



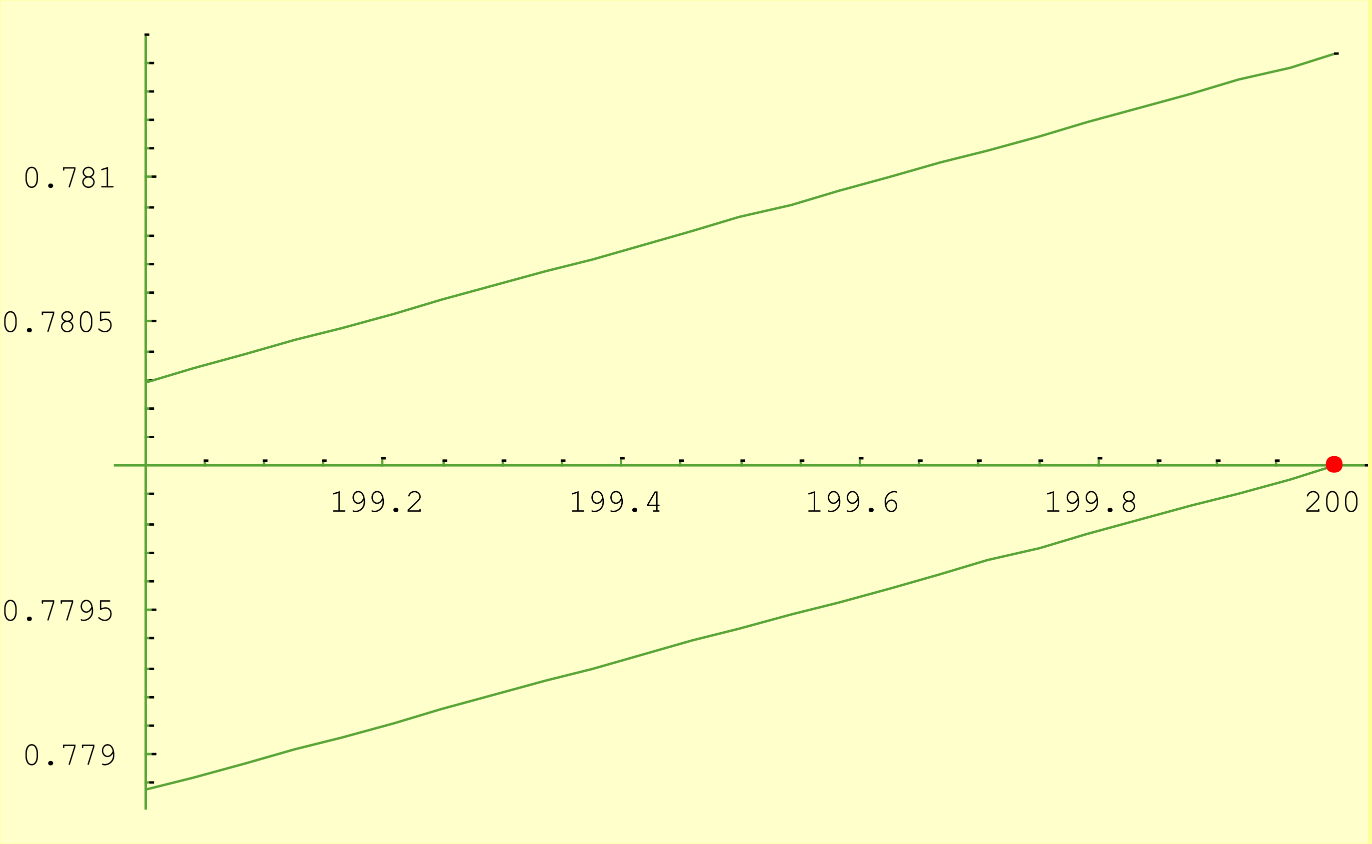
Numerični pristop



{ParameterTable →

	Estimate	SE	TStat	PValue
1	0.554286	0.00066394	834.843	0
x	0.00113571	5.86846×10^{-6}	193.529	0

, RSquared → 0.999867 , AdjustedRSquared → 0.99984 *primerjava...*



- Hitrost hidrolize trsnega sladkorja v vodni raztopini je proporcionalna koncentraciji sladkorja. Določimo konstanto proporcionalnosti na osnovi naslednjih eksperimentalnih podatkov.

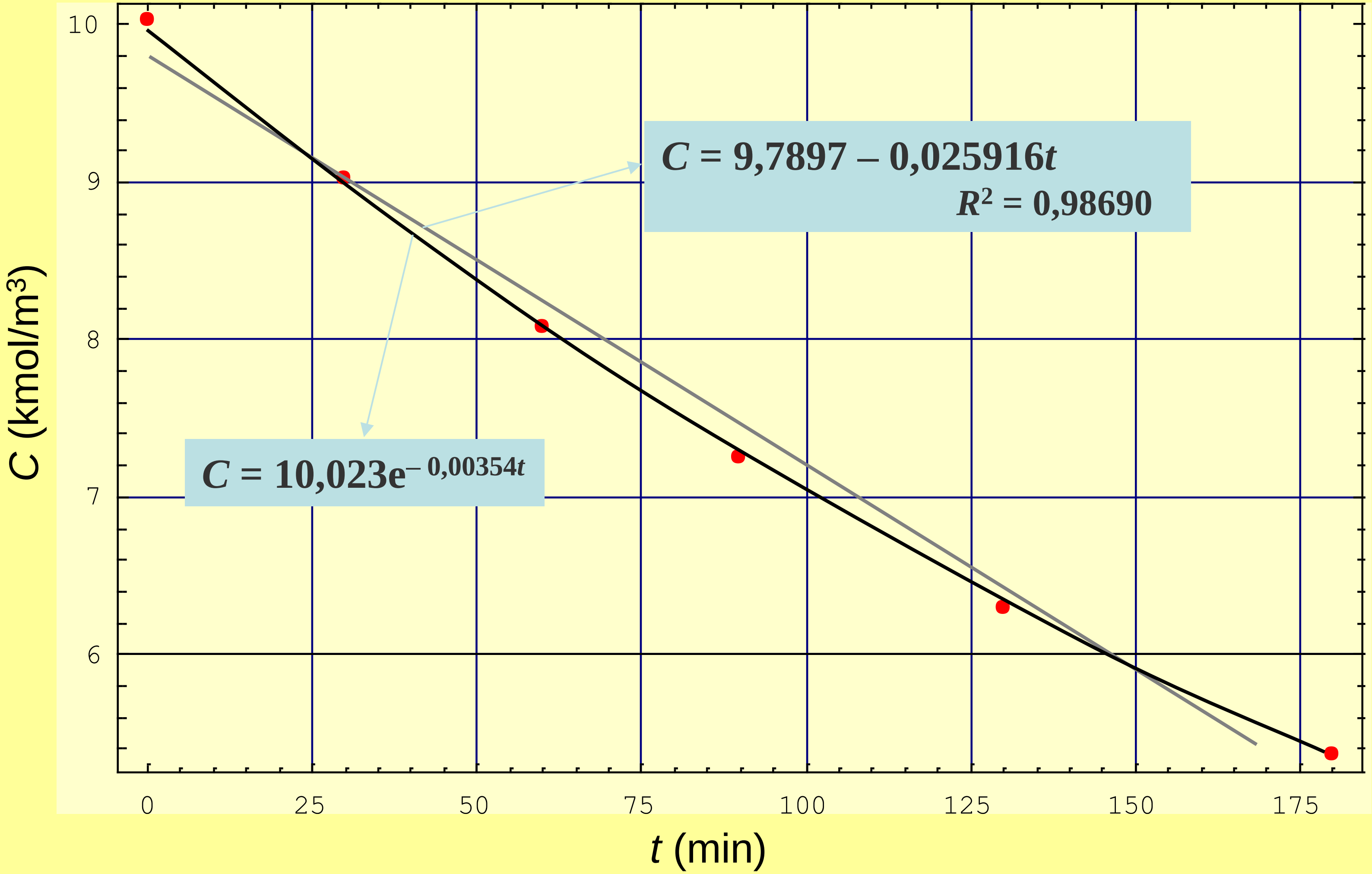
t (min)	0	30	60	90	130	180
C ($kmol/m^3$)	10.023	9.022	8.077	7.253	6.297	5.367

$$\frac{dC}{dt} \propto C$$

$$C = f(t) = ?$$

- Grafična določitev
- Numerična določitev

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo



10
9
8
7
6
0
25
50
75
100
125
150
175
C (kmol/m3)
t (min)
C = 9,7897 – 0,025916t
R2 = 0,98690
C = 10,023e– 0,00354t

Reakcijska kinetika...

$$\left(-r\right)=\frac{dC}{dt}=k\left(T\right)C^{n}$$

Naj hitrost izginevanja reaktanta sledi preprosti reakciji prvega reda, torej n = 1.

$$\frac{dC}{dt}=-kC$$

$$\frac{dC}{C}=-kdt$$

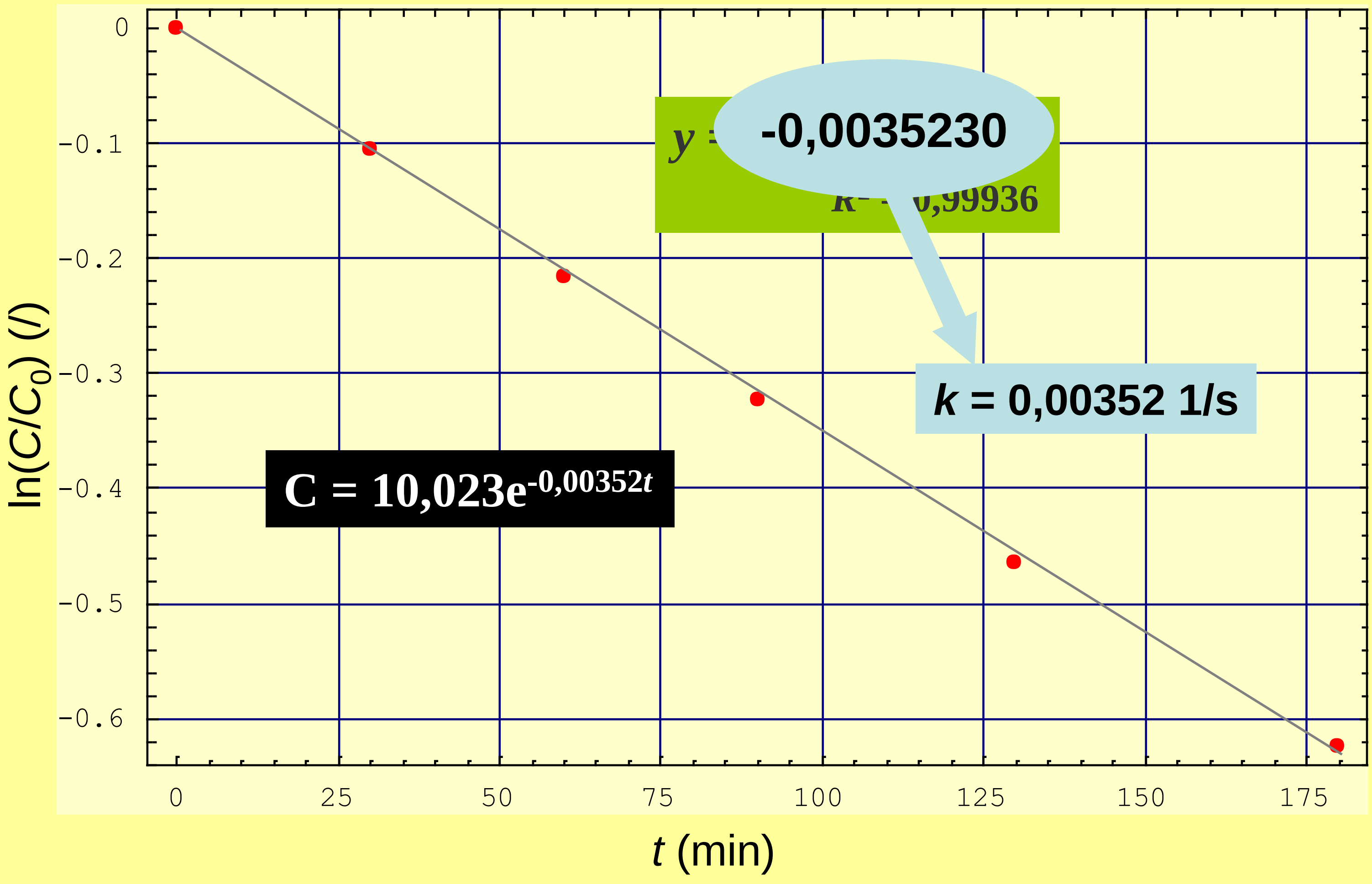
$$\int_{C_0}^{C}\frac{dC}{C}=\int_{t_0}^{t}-kdt$$

$$\ln\frac{C}{C_0}=-kt$$

0

$$Y = a\ X + \mathrm{b}$$

$$C = C_0\ \mathrm{e}^{-k\ t}$$



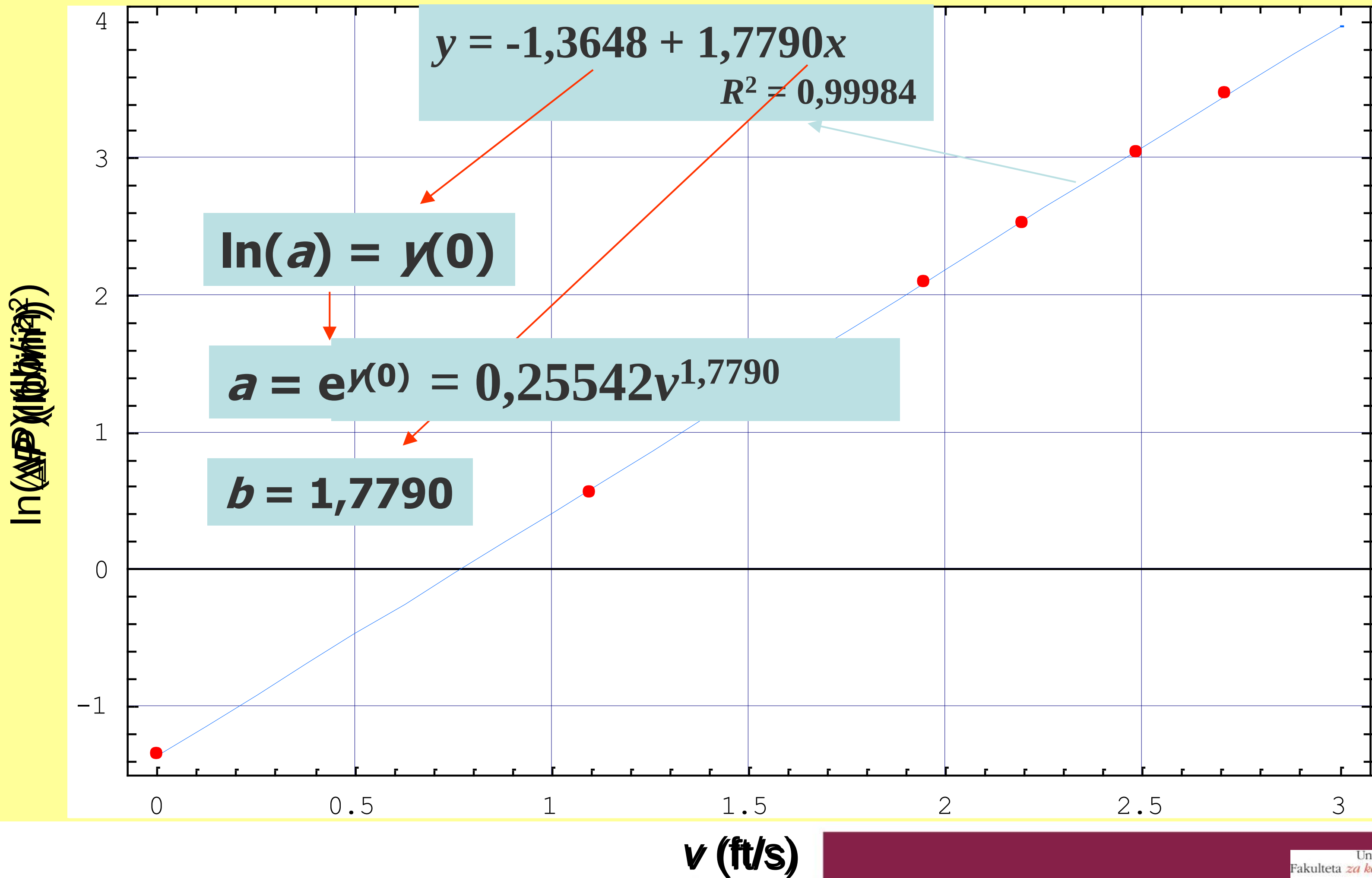
y =
-0,0035230
R² = 0,99936
k = 0,00352 1/s
C = 10,023e^-0,00352t
ln(C/C0) (/)
t (min)
0
-0.1
-0.2
-0.3
-0.4
-0.5
-0.6
0
25
50
75
100
125
150
175

- Meritve padca tlaka kot posledica izgub zaradi trenja pri pretoku vode skozi cev so dale naslednje podatke.

v (ft/s)	1	3	5	7	9	12	15
ΔP (lb/in.^{2})	0.26	1.75	4.5	8.2	12.5	21.0	32.5

Padec tlaka lahko popišemo z naslednjo enačbo:

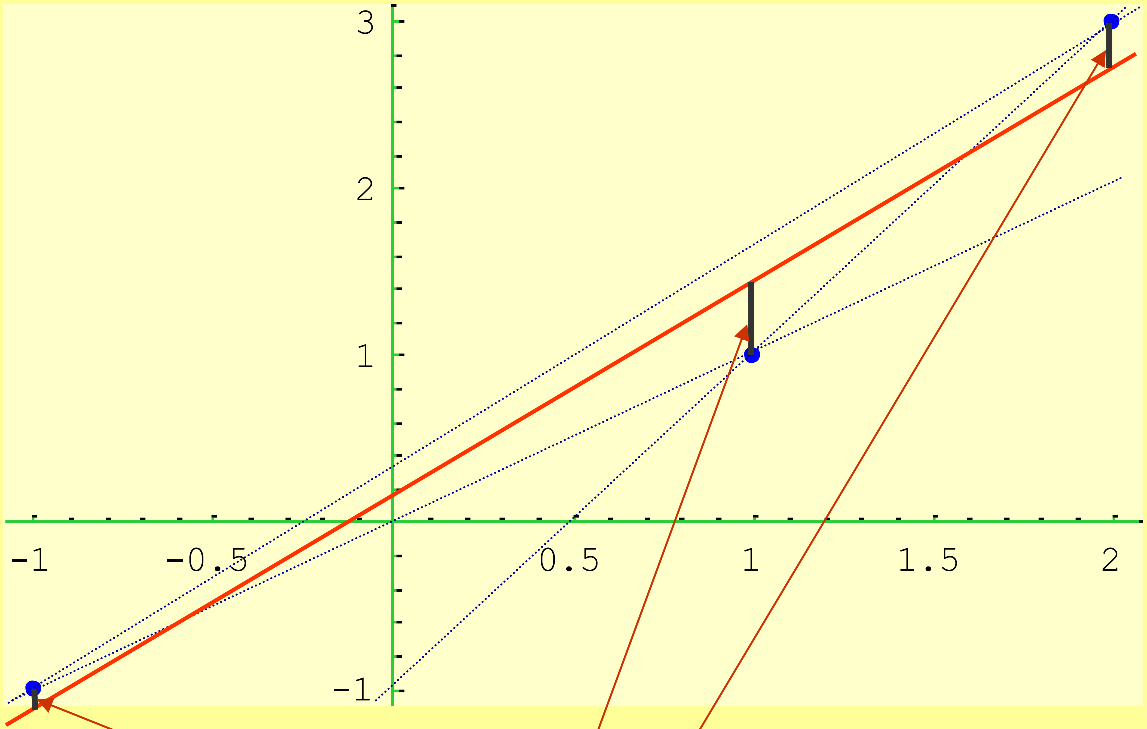
$$\boxed{\Delta P = b \cdot v^a}$$



$y = -1,3648 + 1,7790x$
$R^2 = 0,99984$
$\ln(a) = y(0)$
$a = e^{y(0)} = 0,25542v^{1,7790}$
$b = 1,7790$
4
3
2
1
0
−1
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
v (ft/s)

Metoda najmanjših kvadratov

Vzemimo tri točke $T_1(-1,-1)$, $T_2(1,1)$ in $T_3(2,3)$



"Želja":
postavimo najbolje prilegajočo premico

$$v = k\,w + n$$

skozi vse tri točke.

Rešiti bi morali sistem z več enačbami kot je neznank:

$$\begin{aligned} -k + n &= -1 \\ k + n &= 1 \\ 2k + n &= 3 \end{aligned}$$

Matrični zapis:

$$A\,x = B$$

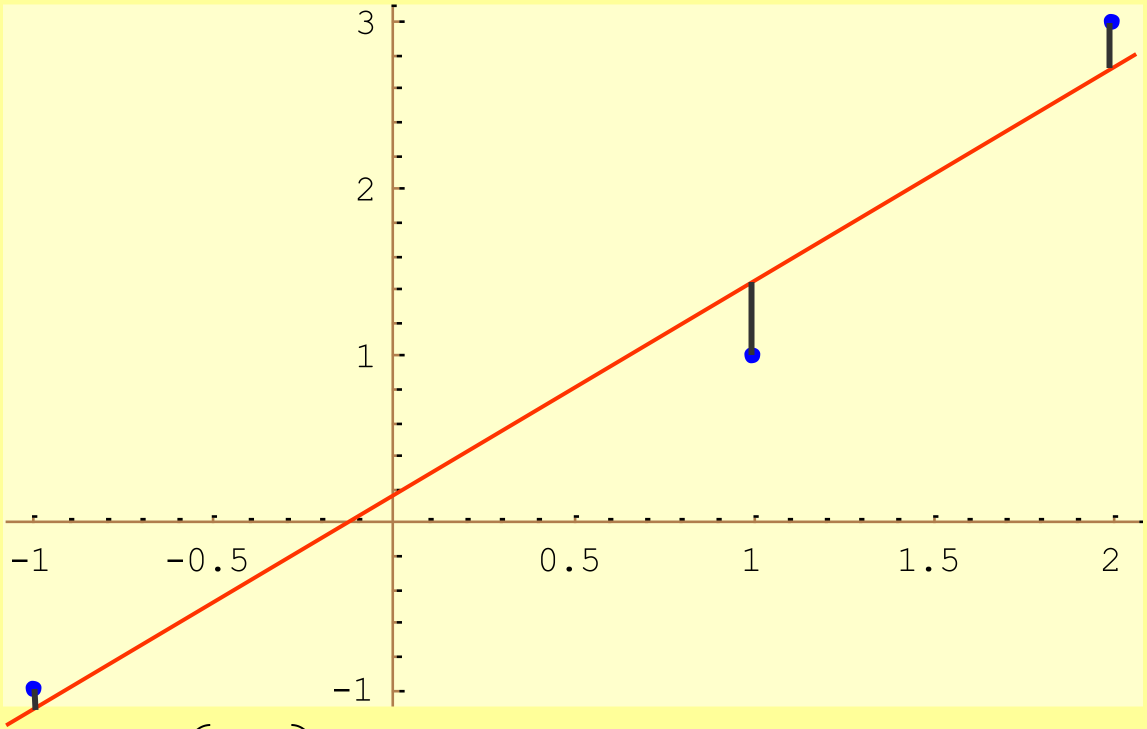
$$\begin{pmatrix} \mathbf{-1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{2} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k} \\ \boldsymbol{n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{-1} \\ \mathbf{1} \\ \mathbf{3} \end{pmatrix}$$

Izraz:

$$y = A\,x - B = \begin{pmatrix} -k + n + 1 \\ k + n - 1 \\ 2k + n - 3 \end{pmatrix}$$

Napaka konkretno izbrane premice!

Najmanjši kvadrati - premica



Želja je določiti k in n (to je premico), tako da bo *skupna napaka čim manjša*!

$$y = A\,x - B = \begin{pmatrix} -k + n + 1 \\ k + n - 1 \\ 2k + n - 3 \end{pmatrix}$$

To skupno napako običajno predstavlja razdalja, $\mathbf{R}^3$ (Evklidska norma)

Če je $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$ naj bo norma vektorja y,

$$\|y\| = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2}$$

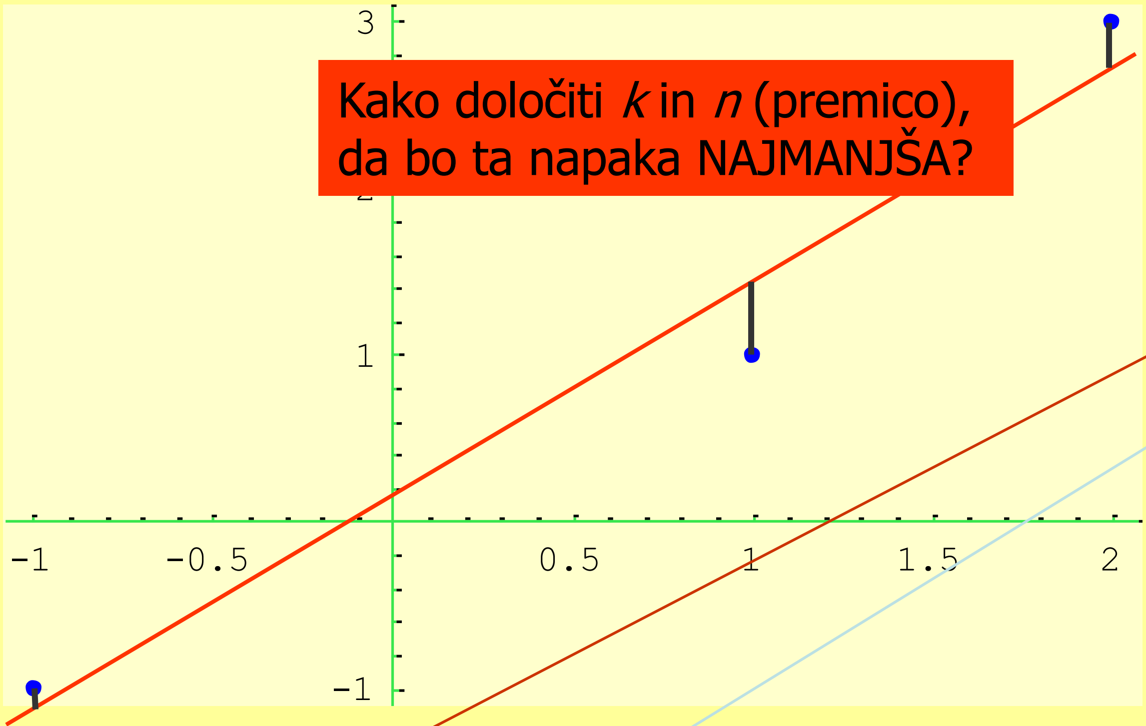
V našem primeru:

$$\|y\| = \sqrt{(-k+n+1)^2+(k+n-1)^2+(2k+n-3)^2}$$

KOREN VSOTE KVADRATOV ODMIKOV

KOREN VSOTE KVADRATOV ODMIKOV

$$\|y\| = \sqrt{(-k+n+1)^2 + (k+n-1)^2 + (2k+n-3)^2}$$



Kako določiti *k* in *n* (premico), da bo ta napaka NAJMANJŠA?

Rešimo NORMALNO ENAČBO:

$$A^T A x = A^T B$$

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 3 \end{pmatrix}$$

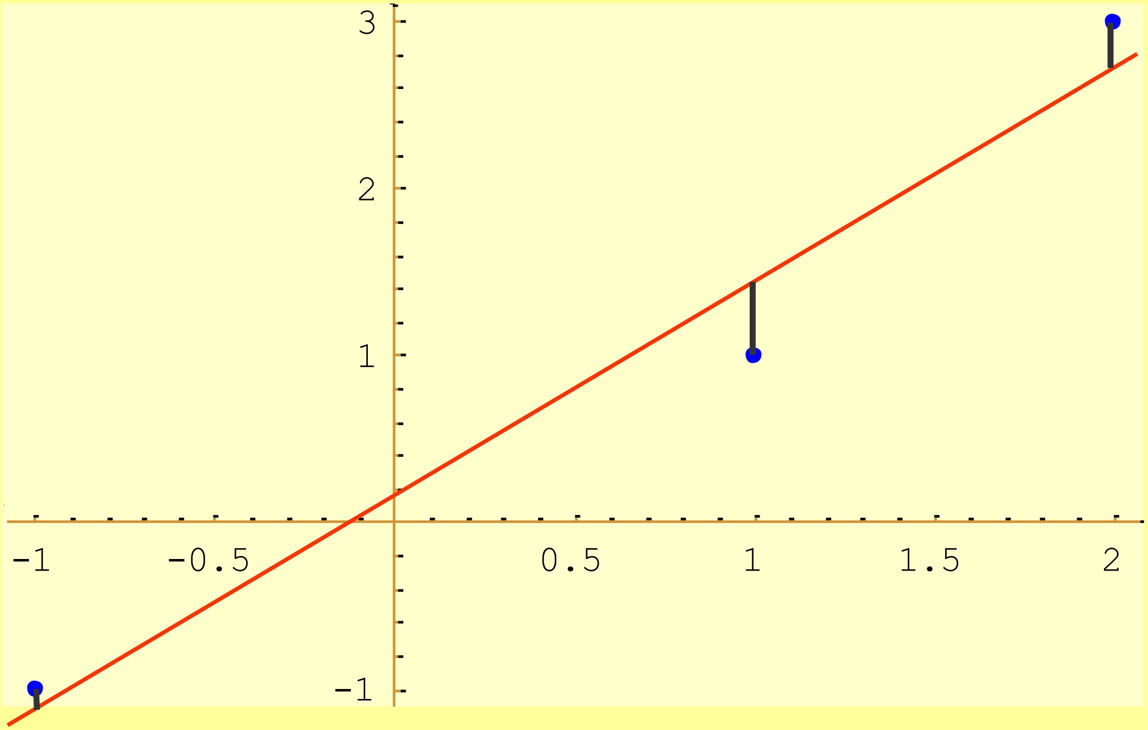
$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\underset{(2\times 3)}{\begin{pmatrix} -1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}} \times \underset{(3\times 2)}{\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}} = \underset{\mathbf{(2\times 2)}}{\begin{pmatrix} & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}}$$

$$(-1\times -1) + (1\times 1) + (2\times 2) = 6$$

KOREN VSOTE KVADRATOV ODMIKOV

$$\|y\| = \sqrt{(-k+n-1)^2 + (k+n-1)^2 + (2k+n-3)^2}$$



Rešimo
NORMALNO ENAČBO:

$$A^T A x = A^T B$$

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$6k + 2n = 8$$
$$2k + 3n = 3$$

$k = 9/7$; $n = 1/7$

$$v = \frac{9}{7} w + \frac{1}{7}$$

Opomba:

Uporabili smo izrek: $\|A x_0 - B\|$ je minimalno, če je x_0 rešitev normalne enačbe
$A^T A x_0 = A^T B$

Univerza v Ljubljani
kemijo in kemijsko tehnologijo

Najmanjši kvadrati - PREMICA

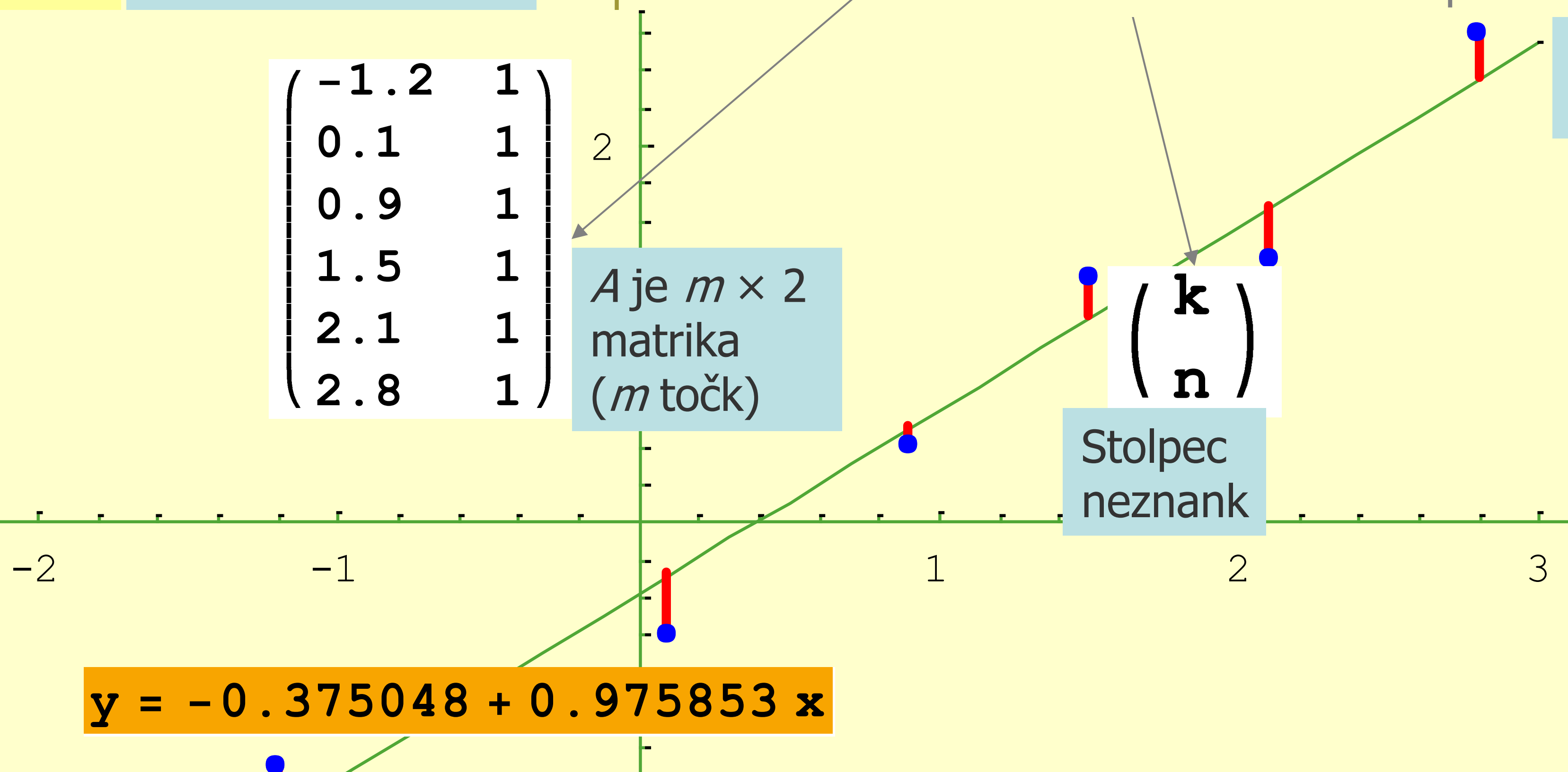
Točke: (-1,2, -1,3), (0,1, -0,6), (0,9, 0,4), (1,5, -1,3), (2,1, 1,4) in (2,8, 2,6)

$$
\begin{aligned}
-1{,}2\,k + n &= -1{,}3\\
0{,}1\,k + n &= -0{,}6\\
0{,}9\,k + n &= -0{,}4\\
1{,}5\,k + n &= 1{,}3\\
2{,}1\,k + n &= 1{,}4\\
2{,}8\,k + n &= 2{,}6
\end{aligned}
$$

Pripadajoča normalna enačba

$$A^T A\, x = A^T b$$

je vedno rešljiva. Rešitev minimizira vsoto kvadratov odmikov od premice.



$$
\begin{pmatrix} -1.2 & 1 \\ 0.1 & 1 \\ 0.9 & 1 \\ 1.5 & 1 \\ 2.1 & 1 \\ 2.8 & 1 \end{pmatrix}
$$

A je *m* × 2 matrika (*m* točk)

$$\begin{pmatrix} k \\ n \end{pmatrix}$$

Stolpec neznank

Stolpec z *m* elementi

$$
\begin{pmatrix} -1.3 \\ -0.6 \\ 0.4 \\ 1.3 \\ 1.4 \\ 2.6 \end{pmatrix}
$$

$$y = -0.375048 + 0.975853\, x$$

Metoda najmanjših kvadratov - povzetek

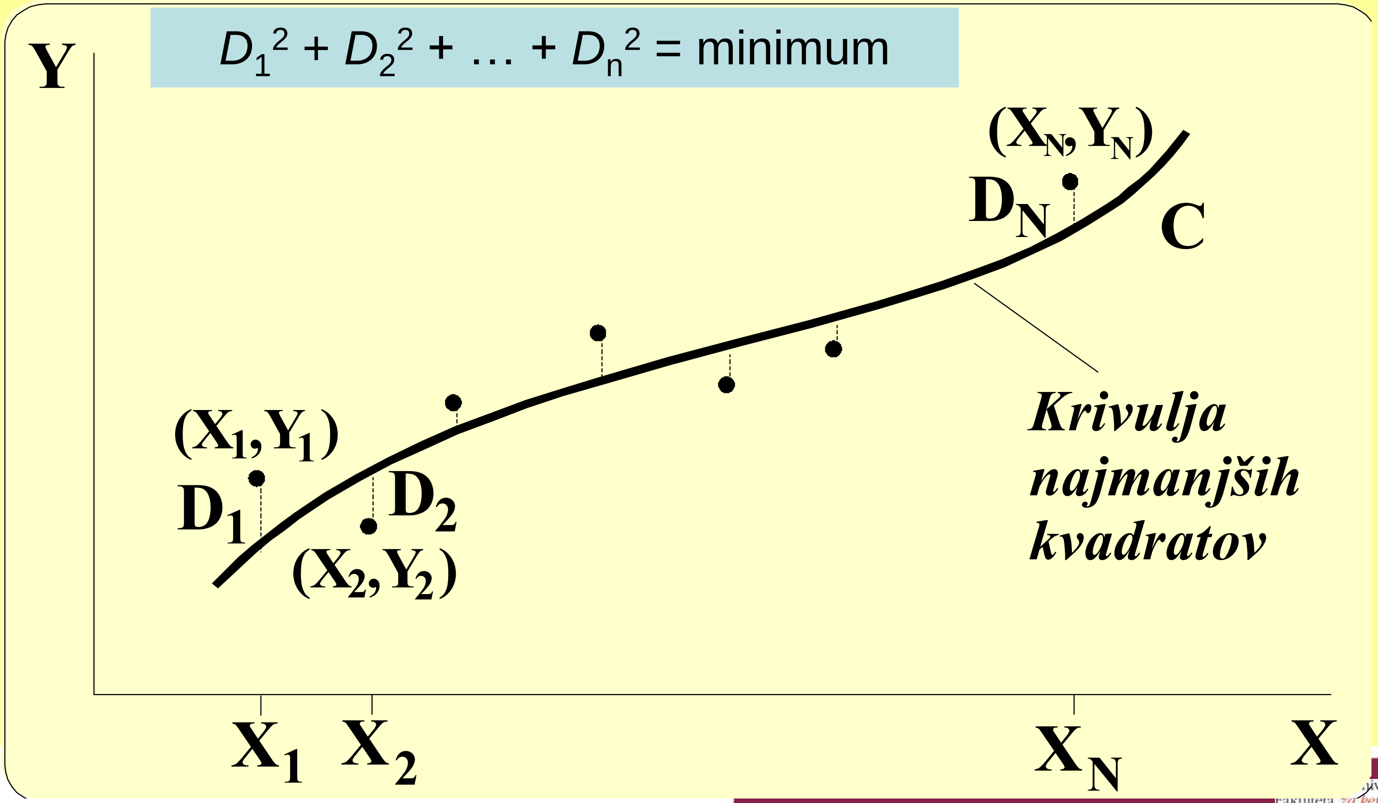
- Če se hočemo izogniti posamični presoji pri načrtovanju premice, parabole ali druge izbrane krivulje pri prileganju nizov podatkov, moramo sprejeti določilo "***najbolje prilegajoče premice***", "***najbolje prilegajoče parabole***", itd.

Določba:

Od vseh krivulj za dani niz točk, imenujemo "najbolje prilegajočo krivuljo" tisto, za katero velja:

$$D_1^2 + D_2^2 + \ldots + D_n^2 = \text{minimum}$$

- Na sliki je prikazan niz podatkov (*x1*,*y1*), (*x2*,*y2*),…, (*xn*,*yn*). Za dano vrednost *x*, npr. *x1*, obstaja razlika med vrednostjo *y1* in pripadajočo vrednostjo, določeno iz krivulje *C*. To razliko, označeno kot *D1*, imenujemo ODKLON, NAPAKA ali OSTANEK in je lahko pozitivna, negativna ali enaka nič. Podobno določimo odklone *D2*,…, *Dn*.



Metoda najmanjših kvadratov – klasičen zapis

- Črta najmanjših kvadratov ***(„least square line“)*** za set točk (*x1*,*y1*), (*x2*,*y2*),…, (*xn*,*yn*):

$$\mathbf{Y = a_0 + a_1 X}$$

- konstanti *a0* in *a1* določimo s hkratno rešitvijo naslednjih enačb:

$$\begin{aligned} \sum Y &= a_0 N + a_1 \sum X \\ \sum XY &= a_0 \sum X + a_1 \sum X^2 \end{aligned}$$

- ali pa iz formul:

$$a_0 = \frac{\left(\sum Y\right)\left(\sum X^2\right) - \left(\sum X\right)\left(\sum XY\right)}{N \sum X^2 - \left(\sum X\right)^2}$$

$$a_1 = \frac{N \sum XY - \left(\sum X\right)\left(\sum Y\right)}{N \sum X^2 - \left(\sum X\right)^2}$$

$$\sum X = \sum_{j=1}^{N} X_j$$

- Parabola najmanjših kvadratov (***„least square parabola"***) za set točk (*x1*,*y1*), (*x2*,*y2*),…, (*xn*,*yn*):

$$\mathbf{Y = a_0 + a_1 X + a_2 X^2}$$

- konstante *a0*, *a1* in *a2* določimo s hkratno rešitvijo naslednjih enačb:

$$\begin{aligned}
\sum \mathbf{Y} &= \mathbf{a_0 N + a_1 \sum X + a_2 \sum X^2} \\
\sum \mathbf{XY} &= \mathbf{a_0 \sum X + a_1 \sum X^2 + a_2 \sum X^3} \\
\sum \mathbf{X^2 Y} &= \mathbf{a_0 \sum X^2 + a_1 \sum X^3 + a_2 \sum X^4}
\end{aligned}$$

$$\sum \mathbf{X} = \sum_{\mathbf{j=1}}^{\mathbf{N}} \mathbf{X_j}$$