

附光盘

方利国 陈 砺 编著

计算机

第二版

在化学化工中的应用



化学工业出版社

计算机在化学化工中的应用

第二版

方利国 陈 砾 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书是介绍计算机在化学化工中应用的实用基础教程。全书分为3篇14章。上篇(1~5章)介绍了如何利用计算机高速精确的计算功能,解决化学化工中的实际问题。包括:如何利用计算机解决实验数据处理、模型参数计算;如何利用计算机求解无法解析求解的非线性方程;大型线性方程组在化工中的应用及计算机求解方法;如何利用计算机求解常微分方程及化工稳态模拟;偏微分方程在化工中的应用及化工动态模拟。每章均结合化工实例进行讲解,并配有调试通过的VB程序供读者使用。中篇(6~9章)介绍了Office、Origin、AutoCAD及Aspen Plus四个软件在化学化工中的实际应用。下篇(10~14章)介绍了利用计算机开发的五个化工应用软件实例并配有调试通过的程序。

本书可作为化学化工类本、专科学生的计算机应用教材,也可供化学化工应用技术人员参考。

本书附送光盘一张,该光盘既可作为教师的计算机辅助教学课件,也可作为学生自学的多媒体软件。光盘不仅将书中的主要内容做成PowerPoint演示文档,方便读者快速查找各章节的内容,同时也提供了大量可执行的应用程序,有助于加深读者对书本知识的理解,而且也化学化工实验数据处理及模拟提供了帮助。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在化学化工中的应用 / 方利国, 陈砺编著. —2版.
北京: 化学工业出版社, 2006.5
ISBN 7-5025-8702-0

I. 计… II. ①方… ②陈… III. ①计算机应用—化学
②计算机应用—化学工业 IV. ①06-39 ②TQ015.9

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第051822号

计算机在化学化工中的应用

第二版

方利国 陈 砺 编著

责任编辑: 王丽娜

文字编辑: 余德华

责任校对: 顾淑云

封面设计: 潘 峰

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里3号 邮政编码100029)

购书咨询: (010)64982530

(010)64918013

购书传真: (010)64982630

[http:// www.cip.com.cn](http://www.cip.com.cn)

*

新华书店北京发行所经销

北京云浩印刷有限责任公司印装

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 18½ 字数 469千字

2006年7月第2版 2006年7月北京第4次印刷

ISBN 7-5025-8702-0

定 价: 35.00元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

前 言

随着计算机软硬件的更新速度不断加快,计算机在化学化工中的应用范围及深度也不断发展,由作者编著出版的《计算机在化学化工中的应用》也需要与时俱进,进行修订再版了。本次修订再版的主要修改之处有以下几个方面:

1. 对有些软件进行版本更新,在新版本的基础上进行重新编写;
2. 对第一版中提供的大部分程序进行重新开发完善,以便读者使用,同时会增加第一版没有开发的程序;
3. 对第一版本中某些章节的编写结构进行调整,同时在举例及习题中尽量增加化学化工中的实际例子,以提高读者的学习兴趣及解决实际问题的能力;
4. 将开发篇的内容进行扩充和替换,但仍保持原来简明实用的编写原则;
5. 增加大部分程序的源程序,以便读者二次开发利用。

全书共分3篇14章。上篇(1~5章)是有关数值计算的内容,这是作为一个21世纪化学化工工作者所必须掌握的基本内容,也为本科学生继续深造或攻读硕士研究生打下基础;中篇(6~9章)主要介绍了目前应用较广且较为实用的一些软件,站在化学化工工作者的角度,讲解了它们的主要功能及应用技巧;下篇(10~14章)介绍了计算机在化学化工中成功应用的几个实例。

本书由华南理工大学方利国主编,参加编写的还有华南理工大学陈砺、广东茂名学院的谢颖。其中第1~7章,第9章9.1节、9.2节,第10~14章由方利国编写,第8章由陈砺编写,第9章9.3节由谢颖编写。全书由方利国统稿。王聃、张震宇、甘振华等同学参加了本书的文本输入及编辑等工作。华南理工大学教务处及化工与能源学院对教材的出版给予了大力支持。

本书在编写过程中参考了大量的文献及教材,在此特表示感谢。参考文献中如有遗漏之处,敬请谅解。本书虽经作者多年编写及修订,但由于水平有限,疏漏与不足之处在所难免,望同行及读者予以批评指正。

作者

2006年4月于广州

第一版前言

随着现代科学技术的发展和计算机的广泛使用,各学科对计算机的依赖程度越来越高,化学化工领域也不例外。从实验数据的处理及拟合、模型参数的确定、非线性方程的求解到化工过程模拟,均离不开计算机的帮助,对这方面内容计算机主要发挥的是高速的数值计算功能;另一方面,我们还要利用计算机进行化工信息的发布、化工流程图的制作等一系列其他非计算性的工作,同时还需利用计算机进行化工实用软件的开发工作。

“计算机在化学化工中的应用”是一门旨在提高学生专业计算机应用水平的课程。尽管学生在基础阶段的学习中已经学过了“计算机应用基础”、“VB 编程”等有关计算机的基础课程,但在毕业设计阶段还经常碰到有些学生无法利用计算机进行毕业设计的有关工作:如利用计算机进行网上文献检索,实验模型参数的确定,微分方程的离散化计算,化工论文的编辑,化工信息的多媒体发布,常用化工计算机软件如 CAD、ASPEN、ORIGIN 等的应用以及实用化工程程序或软件的开发。产生上述问题的主要原因是基础阶段的学习中讲授的仅是计算机的基本理论和基本知识,没有讲授这些理论和知识在具体专业中的应用。而“计算机在化学化工中的应用”正是结合专业的实际情况讲授计算机的具体应用,是培养学生开发化学化工应用软件的入门课程。本书遵循简明、实用的原则,对化工实验数据处理、化工计算及模拟等需要用到复杂数学知识的内容,以简单实用的形式呈现给读者,并提供了可供应用的程序代码;对一些常用软件及化工软件的介绍采用化工实例应用的形式;对于新开发的化工应用软件,着重于介绍软件开发的环境、方法及思路,力争为读者提供一种化工软件开发的基本思路。

本书分三篇 12 章。上篇(1~5 章)是有关数值计算的内容,这是作为一个 21 世纪的化学化工工作者所必须掌握的基本内容,也为本科学生继续深造或攻读硕士研究生打下基础;中篇(6~9 章)主要介绍了目前应用较广且较为实用的一些软件,站在化学化工工作者的角度,讲解了它们的主要功能及应用技巧;下篇(10~12 章)介绍了计算机在化工中成功应用的几个实例。本书附送光盘一张,光盘不仅将书中的主要内容做成 PowerPoint 演示文档,方便读者快速查找各章节的内容,同时也提供了大量可执行的应用程序,有助于加深读者对书本知识的理解,而且也能为化学化工实验数据处理及模拟提供了帮助。

本书由华南理工大学的方利国、陈砺主编,参加编写的还有茂名学院的谢颖。其中第 1~7 章,第 9 章第 1、2 节,第 10~12 章由方利国编写,第 8 章由陈砺编写,第 9 章第 3 节由谢颖编写。全书由方利国统稿。向仲华、朱汉材、李娟娟、孙健等同学参加了本书的文本输入及编排等工作;华南理工大学教务处及化工学院对教材的出版给予了大力支持;华南理工大学化工学院现代化工实验中心计算机房及郑玉秀老师对 Aspen Plus 软件的使用提供了方便。

本书在编写过程中,参考了大量的文献及教材,在此特表示感谢。参考文献中如有遗漏之处,敬请谅解。本书虽经作者多年编写,并己以讲义的形式在华南理工大学试用 3 年,但由于作者水平有限,错误在所难免,望同行及读者予以批评指正。

作者

2003 年 4 月于广州

目 录

上篇 化工数据处理及过程模拟

第 1 章 实验数据及模型参数拟合方法	1
1.1 问题的提出	1
1.2 拟合标准	2
1.3 单变量拟合和多变量拟合	3
1.3.1 单变量拟合	3
1.3.2 多变量的曲线拟合	8
1.4 解矛盾方程组	12
1.5 梯度法拟合参数	22
1.6 吸附等温曲线回归	26
1.6.1 吸附等温曲线的常见类型	26
1.6.2 几种常用的吸附等温曲线回归方法	27
1.6.3 回归方法的比较	28
习题	29
第 2 章 非线性方程求解	31
2.1 问题的提出	31
2.2 实根的对分法	32
2.2.1 使用对分法的条件	32
2.2.2 对分法求根算法	32
2.2.3 对分法 VB 程序清单	32
2.3 直接迭代法	35
2.4 松弛迭代法	36
2.5 牛顿迭代法	39
2.5.1 牛顿迭代法的理论推导	39
2.5.2 牛顿迭代法的几何意义	39
2.6 割线法	41
2.7 非线性方程组的牛顿迭代法	42
2.8 应用实例	43
习题	45
第 3 章 线性方程组的迭代求解	46
3.1 问题的提出	46
3.2 简单迭代	47
3.2.1 简单迭代公式	47
3.2.2 简单迭代计算机算法	48
3.2.3 程序清单及实例	49

3.3 紧凑迭代	51
3.3.1 紧凑迭代公式	51
3.3.2 紧凑迭代计算机算法	52
3.3.3 紧凑迭代 VB 程序	54
3.4 松弛迭代	55
3.4.1 松弛迭代公式	55
3.4.2 松弛迭代计算机算法	56
3.4.3 松弛迭代 VB 程序	56
3.4.4 三种迭代方法混合程序示例	57
3.5 高斯消去法	62
3.5.1 高斯消去法原理	62
3.5.2 高斯消去法程序及实例	63
3.5.3 主元最大高斯消去法	64
3.6 三角分解法	65
3.6.1 三角分解法计算公式	65
3.6.2 三角分解法 VB 程序	68
3.7 带状方程组的三角分解法	70
3.7.1 基本原理	70
3.7.2 等带宽方程组的求解	70
3.7.3 带宽为 1 的三对角方程组求解	71
3.7.4 追赶法 VB 程序	73
习题	74
第 4 章 常微分方程数值解	76
4.1 微分方程在化工中的应用	76
4.2 欧拉公式	77
4.2.1 向前欧拉公式	77
4.2.2 向后欧拉公式	79
4.2.3 中心欧拉公式	79
4.2.4 梯形公式	80
4.2.5 VB 程序源码	80
4.3 龙格-库塔法	82
4.3.1 计算公式	82
4.3.2 步长的选择	84
4.4 常微分方程组的数值解法	85
4.4.1 一阶常微分方程组的数值解法	85
4.4.2 高阶常微分方程数值解法	87
4.5 程序示例及应用	88
习题	93
第 5 章 偏微分方程数值解	94
5.1 问题的提出	94
5.2 基本离散化公式	94

5.3 几种常见偏微分方程的离散化计算	95
5.4 吸附床传热传质模型中的偏微分方程求解实例	105
5.4.1 基本设定及假设	105
5.4.2 流体传热模型的建立	106
5.4.3 吸附床内吸附剂传热传质模型的建立	106
5.4.4 吸附器壁面温度轴向分布方程	107
5.4.5 吸附器内/外无量纲化方程	107
5.4.6 模型的离散化	108
5.4.7 模型的数值求解及计算机程序介绍	109
习题	110

中篇 化工常用软件应用

第 6 章 Office 软件在化工中的应用	111
6.1 Word 在化工论文及文献书写中的应用	111
6.1.1 应用背景及内容	111
6.1.2 公式及分子式的输入	112
6.1.3 三线表的制作	115
6.1.4 插图的制作及图文混排	116
6.1.5 其他使用技巧	117
6.2 Excel 在化工数据处理中的应用	118
6.2.1 Excel 功能简介	118
6.2.2 Excel 工作表的建立	118
6.2.3 Excel 表格中数据的处理	119
6.2.4 Excel 图表的建立	121
6.3 PowerPoint 在化工中的应用	123
6.3.1 PowerPoint 的基本功能	123
6.3.2 利用 PowerPoint 制作化工信息发布会幻灯片	124
6.3.3 利用 PowerPoint 制作化工网页	128
习题	129
第 7 章 Origin 在化工实验数据处理中的应用	131
7.1 Origin 简介	131
7.2 Origin 的基本操作	131
7.2.1 Origin 的安装	131
7.2.2 数据输入	131
7.2.3 图形生成	133
7.2.4 坐标轴的标注	135
7.2.5 线条及实验点图标的修改	136
7.2.6 数据的拟合	136
7.2.7 其他功能	137
7.3 应用示例	137

习题	140
第 8 章 AutoCAD 在化工设备制图中的应用	142
8.1 AutoCAD 概述	142
8.2 化工设备图的主要内容	142
8.3 AutoCAD 主要功能介绍	143
8.3.1 AutoCAD 2004 的运行环境	143
8.3.2 AutoCAD 2004 的安装及工作界面	143
8.3.3 AutoCAD 2004 主要功能介绍	144
8.3.4 文本和尺寸标注	155
8.4 化工容器绘制	160
8.4.1 绘制前的准备工作	160
8.4.2 设置图层、比例及图框	162
8.4.3 画中心线	164
8.4.4 画主体结构	166
8.4.5 其他辅助绘制	171
习题	171
第 9 章 Aspen Plus 在化工设计及模拟中的应用	174
9.1 概述	174
9.2 Aspen Plus 基本操作	175
9.2.1 Aspen Plus 的启动	175
9.2.2 模拟流程的设置	176
9.2.3 物流数据及其他参数的输入	176
9.2.4 结果的输出	177
9.3 Aspen Plus 应用实例	178
9.3.1 甲醇-二甲醚-水三元混合物精馏塔模拟	178
9.3.2 苯与丙烯反应合成异丙苯的反应模拟	182
9.3.3 萃取蒸馏模拟	186
习题	188

下篇 化工应用软件开发

第 10 章 换热器计算机辅助设计	189
10.1 基本原理	189
10.2 VB 程序说明	191
10.3 AutoCAD 制图说明	193
10.4 程序源代码及说明	193
习题	207
第 11 章 AutoCAD 二次开发软件——法兰的绘制	208
11.1 开发目的及意义	208
11.2 开发目标	209
11.3 开发工具	209

11.3.1	Visual LISP 基础	210
11.3.2	DCL 基础	212
11.4	窗体开发	215
11.5	主程序开发	219
11.6	加载菜单	221
	习题	223
第 12 章	化学化工过程计算机测量与控制系统开发	224
12.1	计算机测量与控制基本原理	224
12.1.1	概述	224
12.1.2	测量基本原理	224
12.1.3	控制基本原理	225
12.1.4	两种不同的数据处理系统	225
12.2	串行通信测量系统软件开发	226
12.2.1	软件要求及功能	226
12.2.2	基本原理	226
12.2.3	系统软硬件配置	226
12.2.4	软件窗体设置	227
12.2.5	主要源代码及说明	227
12.3	ISA 总线卡数据采集系统软件开发	229
12.3.1	软件要求及功能	229
12.3.2	基本原理	230
12.3.3	系统软硬件配置	230
12.3.4	软件窗体设置	231
12.3.5	主要源代码及说明	231
	习题	240
第 13 章	化学化工通用试题库及机考辅助教学系统软件开发	241
13.1	概述	241
13.2	化工物性数据库软件开发方案的确定	242
13.2.1	软件需求及服务对象分析	243
13.2.2	软件所需资源分析	243
13.2.3	软件开发平台确定	243
13.2.4	软件功能及逻辑结构确定	243
13.3	化工物性数据库软件具体功能代码编写	244
13.3.1	数据库的建立及连接	244
13.3.2	数据绑定及窗体开发	249
13.3.3	教师系统代码开发	251
13.3.4	学生系统代码开发	255
13.4	软件的维护及进一步改进	262
	习题	262
第 14 章	化工仿真软件开发	263
14.1	概述	263

14.1.1	仿真(定义、数模).....	263
14.1.2	化学化工仿真.....	263
14.1.3	仿真软件开发策略.....	264
14.1.4	化工仿真软件基本要求及功能.....	264
14.2	化工仿真软件开发中的几个主要问题.....	265
14.2.1	过程建模.....	265
14.2.2	界面图形.....	266
14.2.3	控制算法.....	266
14.2.4	阀门调节.....	266
14.2.5	动画效果.....	266
14.2.6	帮助系统.....	266
14.2.7	考题系统.....	267
14.3	强化传热过程实验仿真软件开发.....	267
14.3.1	软件要求及功能.....	267
14.3.2	后台数学处理模型.....	267
14.3.3	后台逻辑关系设置.....	269
14.3.4	软件开发环境设置.....	269
14.3.5	软件窗体设置.....	269
14.3.6	主要控件开发.....	271
14.3.7	软件导入及仿真实验窗体源代码及说明.....	273
14.3.8	进一步维护及扩展.....	284
	习题.....	285
	参考文献.....	286

上篇 化工数据处理及过程模拟

第 1 章 实验数据及模型参数拟合方法

1.1 问题的提出

在化工设计及化工模拟计算中，需要大量的物性参数及各种设备参数。这些参数有些可以通过计算得到，但大量的参数还是要通过实验测量得到。实验测量得到的常常是一组离散数据序列 (x_i, y_i) 。例如我们通过实验测量得到某一物质的饱和蒸气压 p 和温度 t 之间的一组数据序列。当所得数据比较准确时，可构造插值函数 $p(t)$ 逼近客观存在的函数 $p=p(t)$ ，构造的原则是要求插值函数通过这些数据点，即 $p(t_i)=p_i, i=1, 2, \dots, m$ 。此时，序列 $Q=(p(t_1), p(t_2), \dots, p(t_m))^T$ 与 $P=(p_1, p_2, \dots, p_m)^T$ 是相等的。当我们需要压力数据时，如果温度刚好等于实验点，则可直接从数据库中获得；如果温度不在实验点上，而在两实验点之间，则可利用插值函数求取。以线性插值函数为例，如所要求压力数据的温度在 t_2 和 t_3 之间，则压力的计算公式如下

$$p(t) = p_2 + \frac{t-t_2}{t_3-t_2}(p_3-p_2) \quad (1-1)$$

如果数据序列 (x_i, y_i) (为一般起见)， $i=1, 2, \dots, m$ ，含有不可避免的误差 (或称“噪声”，如图 1-1 所示)，或者无法同时满足某特定的函数 (如图 1-2 所示)，那么，只能要求所作逼近函数 $\psi(x)$ 最优地靠近样点，即向量 $Q=(\psi(x_1), \psi(x_2), \dots, \psi(x_m))^T$ 与 $Y=(y_1, y_2, \dots, y_m)^T$ 的误差或距离最小。按 Q 与 Y 之间误差最小原则作为“最优”标准构造的逼近函数，称为拟合函数。

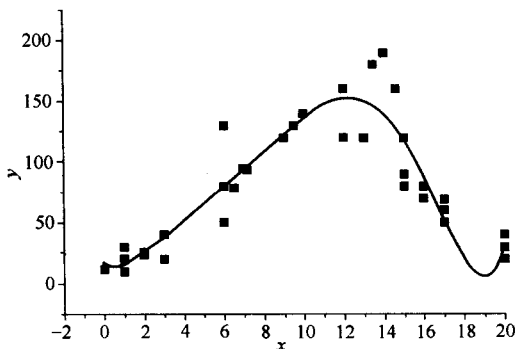


图 1-1 含有“噪声”的数据序列

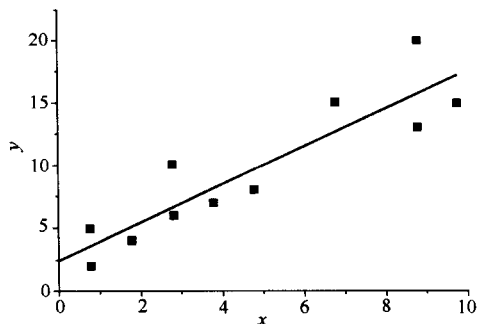


图 1-2 无法同时满足某特定函数的数据序列

除了物性数据及设备参数需要利用数据拟合外，在化学化工中，许多模型也要利用数据拟合技术，求出最佳的模型参数。

如在某一反应工程实验中，我们测得了如表 1-1 所示的实验数据。

表 1-1 反应工程实验数据

序 号	温度 T	转化率 y	序 号	温度 T	转化率 y
1	10	0.1	5	50	0.95
2	20	0.3	6	60	0.68
3	30	0.7	7	70	0.34
4	40	0.94	8	80	0.13

现在要确定在其他条件不变的情况下, 转化率 y 和温度 T 的具体关系, 现拟用两种模型去拟合实验数据, 两种模型分别是

$$y = a_1 + b_1 T + c_1 T^2 \quad (1-2)$$

$$y = \frac{c_2}{a_2 + b_2 (T - 45)^2} \quad (1-3)$$

如何求取上述模型中的参数, 并判断两种模型的优劣是化学化工工作者经常要碰到的问题, 这个问题的求解将在本章下面的有关章节中进行详细的讲解。

1.2 拟合标准

前面已经提到按 Q 与 Y 之间误差最小原则作为“最优”标准构造的逼近函数, 称为拟合函数, 而向量 Q 与 Y 之间的误差或距离有各种不同的定义方法, 一般有以下几种。

(1) 用各点误差绝对值的和表示

$$R_1 = \sum_{i=1}^m |\psi(x_i) - y_i| \quad (1-4)$$

(2) 用各点误差按绝对值的最大值表示

$$R_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} |\psi(x_i) - y_i| \quad (1-5)$$

(3) 用各点误差的平方和表示

$$R = R_2 = \sum_{i=1}^m (\psi(x_i) - y_i)^2 \quad \text{或} \quad R = \|Q(x) - Y\|_2^2 \quad (1-6)$$

式中 R 称为均方误差。由于计算均方误差的最小值的原则容易实现而被广泛采用。按均方误差达到极小构造拟合曲线的方法称为最小二乘法。同时还有许多种其他的方法构造拟合曲线, 感兴趣的读者可参阅有关教材。本章主要讲述如何用最小二乘法构造拟合曲线。

在实际问题中, 怎样由实验测得的数据设计和确定“最贴近”的拟合曲线, 其关键在于选择适当的拟合曲线类型或模型类型, 有时根据专业知识和工作经验即可确定拟合曲线类型; 在对拟合曲线一无所知的情况下, 不妨先绘制数据的粗略图形, 或许可从中观测出拟合曲线的类型; 更一般地, 对数据进行多种曲线类型的拟合, 并计算均方误差, 用数学实验的方法找出在最小二乘法意义下的误差最小的拟合函数。

例如, 实验测得二甲醚 (DME) 的饱和蒸气压和温度的关系, 见表 1-2。

表 1-2 DME 饱和蒸气压和温度的关系

序 号	温度/°C	蒸气压/MPa	序 号	温度/°C	蒸气压/MPa
1	-23.7	0.101	5	20	0.495
2	-10	0.174	6	30	0.662
3	0	0.254	7	40	0.880
4	10	0.359			

由表 1-2 的数据观测可得, DME 的饱和蒸气压和温度有正相关关系, 如果以函数 $p=a+bt$ 来拟合, 则拟合函数是一条直线。通过计算均方误差 $Q(a, b)$ 最小值而确定直线方程 (见图 1-3)。

$$Q(a, b) = \sum_{i=1}^m (p(t_i) - p_i)^2 = \sum_{i=1}^m (a + bt_i - p_i)^2 \quad (1-7)$$

拟合得到直线方程为

$$p = 0.30324 + 0.0121t \quad (1-8)$$

相关系数 R 为 0.97296, 平均绝对偏差 SD 为 0.05065。

如果采用二次拟合, 通过计算下述均方误差

$$Q(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^m (p(t_i) - p_i)^2 = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1t_i + a_2t_i^2 - p_i)^2 \quad (1-9)$$

拟合得二次方程为

$$p = 0.24845 + 0.00957t + 0.00015t^2 \quad (1-10)$$

相关系数 R 为 0.99972, 平均绝对偏差 SD 为 0.0056, 具体拟合曲线见图 1-4。

比较图 1-3 和图 1-4 以及各自的相关系数和平均绝对偏差可知, 对于 DME 饱和蒸气压和温度之间的关系, 在实验温度范围内用二次拟合曲线优于线性拟合。但二次拟合曲线具有局限性, 由图 1-4 观察可知, 当温度低于 -30°C 时, 饱和压力有升高的趋势, 但在拟合的温度范围内, 二次拟合的平均绝对偏差又小于一次拟合, 故对物性数据进行拟合时, 不仅要看在拟合条件下的拟合效果, 还必须根据物性的具体性质, 判断在拟合条件之外的物性变化趋势, 以便使拟合公式在已做实验点数据之外应用。具体的计算方法及编程在下一节里介绍。

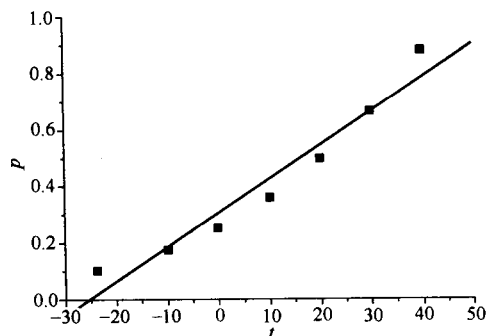


图 1-3 DME 饱和蒸气压和温度之间的线性拟合

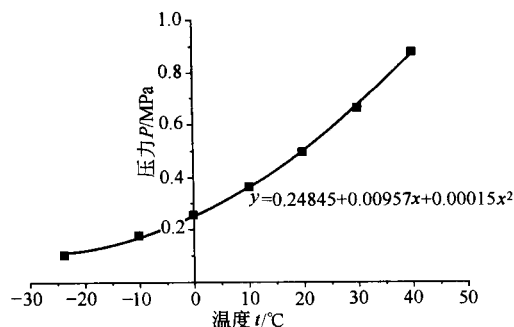


图 1-4 DME 饱和蒸气压和温度之间的二次拟合

1.3 单变量拟合和多变量拟合

1.3.1 单变量拟合

(1) 线性拟合

给定一组数据 (x_i, y_i) , $i=1, 2, \dots, m$, 做拟合直线 $p(x)=a+bx$, 均方误差为

$$Q(a, b) = \sum_{i=1}^m (p(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^m (a + bx_i - y_i)^2 \quad (1-11)$$

由数学知识可知, $Q(a, b)$ 的极小值需满足

$$\frac{\partial Q(a, b)}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^m (a + bx_i - y_i) = 0$$

$$\frac{\partial Q(a,b)}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^m (a + bx_i - y_i)x_i = 0$$

整理得到拟合曲线满足的方程

$$\begin{cases} ma + \left(\sum_{i=1}^m x_i\right)b = \sum_{i=1}^m y_i \\ \left(\sum_{i=1}^m x_i\right)a + \left(\sum_{i=1}^m x_i^2\right)b = \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{cases} \quad (1-12)$$

或

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{pmatrix}$$

式(1-12)称为拟合曲线的法方程。可用消元法或克莱姆方法解得

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

【例 1-1】 下表为实验测得的某一物性和温度之间的关系数据，表中 x 为温度数据， y 为物性数据。请用线性函数拟合温度和物性之间的关系。

序 号	x	y	序 号	x	y	序 号	x	y
1	7	9	8	21	30	15	35	51
2	9	12	9	23	33	16	37	54
3	11	15	10	25	36	17	39	57
4	13	18	11	27	39	18	41	60
5	15	21	12	29	42	19	43	63
6	17	24	13	31	45	20	45	66
7	19	27	14	33	48	21	47	69

解：设拟合直线 $p(x) = a + bx$ ，并计算得下表。

序 号	x	y	xy	x^2
1	7	9	63	49
2	9	12	108	81
3	11	15	165	121
4	13	18	234	169
5	15	21	315	225
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
21	47	69	3243	2209
Σ	567	819	26733	18389

将数据代入法方程组 (1-12) 中，得到

$$\begin{pmatrix} 21 & 567 \\ 567 & 18389 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 819 \\ 26733 \end{pmatrix}$$

解方程得 $a = -1.5$, $b = 1.5$

故拟合直线为 $p(x) = -1.5 + 1.5x$

线性拟合的 VB 界面 (见图 1-5) 及程序清单如下。

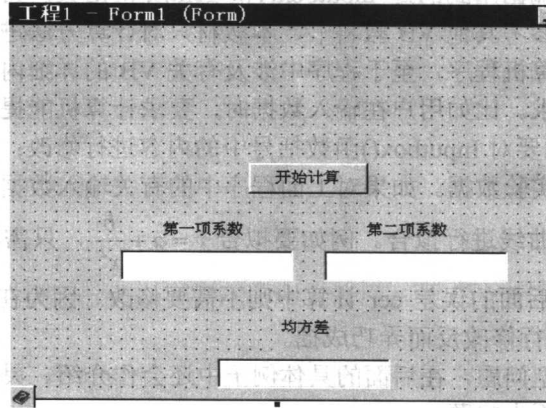


图 1-5 线性拟合的 VB 界面

```
Private Sub Command1_Click()
Dim x(5), y(5), c, d, m, p, a, b, eer
Const n = 5
For i = 1 To 5
    x(i) = InputBox("x(i)=")
    y(i) = InputBox("y(i)=") '数据输入
    Print "x(i)="; x(i)
    Print "y(i)="; y(i)
Next i
c = 0
d = 0
m = 0
p = 0
For i = 1 To 5
    c = c + x(i)
    d = d + x(i) ^ 2
    m = m + y(i)
    p = p + x(i) * y(i)
Next i
a = (m * d - c * p) / (n * d - c ^ 2)
b = (n * p - c * m) / (n * d - c ^ 2) '参数计算
a = Int(a * 1000 + 0.5) / 1000
b = Int(b * 1000 + 0.5) / 1000
Text1.Text = Str(a)
Text2.Text = Str(b) '参数输出
For i = 1 To 5
    eer = eer + (a + b * x(i) - y(i)) ^ 2 '误差计算
    eer = Int(eer * 100000 + 0.5) / 100000
Next i
```



```

eer = eer / 5
Text3.Text = Str(eer)
End Sub

```

程序中数据的输入输出用到的是 Inputbox() 和 Text.text 函数, 为了更加优化数据的输入输出界面, 详细内容可参考其他 VB 教科书, 本教材只对计算方法进行介绍, 并把这些方法变成具体可以实现的计算机程序, 至于程序中涉及有关 VB 的详细内容, 不作具体展开, 但会对程序的功能提出要求。比如用户在输入数据时, 要求计算机能提醒现在输入的是第几组数据, 是 x 还是 y , 这就要对 Inputbox() 函数括号中的内容进行修改; 同时也可更改程序的界面, 直接在界面上输入实验数据。如果对上面程序中的有关输入数据 x 和 y 稍加修改, 就可以对一些其他非线性的曲线进行拟合。例如要拟合 $y = a + \frac{b}{x^2}$, 只需在数据输入后增加一句 $x(i)=1/x(i)^2$, 而在程序后面的误差 eer 计算中则不需要修改。因为在误差计算公式中的 $x(i)$ 其实就是 $1/x(i)^2$, 如进行修改反而弄巧成拙。

有关一次拟合的变型问题, 在后面的具体例子中还会作介绍。灵活地运用一次拟合的方法, 能够帮助我们解决不少问题。

(2) 二次拟合函数

给定数据序列 (x_i, y_i) , $i=1, 2, \dots, m$, 用二次多项式函数拟合这组数据。

设 $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$, 作出拟合函数与数据序列的均方误差表达式

$$Q(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^m (p(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i)^2 \quad (1-13)$$

由数学知识可知, $Q(a_0, a_1, a_2)$ 的极小值满足

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i)x_i = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial a_2} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i)x_i^2 = 0 \end{cases}$$

整理上式得二次多项式函数拟合需满足的条件方程

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 y_i \end{pmatrix} \quad (1-14)$$

解此方程得到在均方误差最小意义下的拟合函数 $p(x)$ 。式 (1-14) 称为多项式拟合的法方程, 法方程的系数矩阵是对称的。当拟合多项式 $n>5$ 时, 法方程的系数矩阵是病态的, 在用通常的迭代方法求解线性方程时会发散, 在计算中要采用一些特殊算法以保护解的准确性。关于线性方程的求解方法, 将在第 3 章中介绍。

上面是二次拟合基本类型的求解方法, 和一次拟合一样, 二次拟合也可以有多种变型,