

附光盘

方利国 陈 砺 编著

计算机

在化学化工中的应用



化学工业出版社
电子出版中心



计算机在化学化工中的应用

方利国 陈 砺 编著

化学工业出版社
电子出版中心
·北京·

(京)新登字 039 号

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.
北京: 化学工业出版社, 2003.6
ISBN 7-5025-4540-9

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 ②TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 043375 号

计算机在化学化工中的应用

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: 凌亚男

封面设计: 潘 峰

*

化学工业出版社
电子出版中心 出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

[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刷
三河市延风装订厂装订

开本 787 毫米×1092 毫米 1/16 印张 15¼ 字数 384 千字

2003 年 8 月第 1 版 2003 年 8 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-4540-9/TP·329

定 价: 30.00 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,并已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

内 容 提 要

本书是介绍计算机在化学化工中应用的实用基础教程。全书分为三篇 12 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（10~12 章）介绍了利用计算机开发的 3 个化工应用软件实例，分别为换热器的设计、化工数据库查询系统及化工车间计算机监控系统，以上内容均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，而且也为化学化工实验数据处理及模拟提供了帮助。

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 线性拟合和二次拟合函数.....	4
1.4 多变量的曲线拟合.....	11
1.5 解矛盾方程组.....	15
1.6 吸附等温曲线回归.....	21
1.6.1 吸附等温曲线的常见类型.....	21
1.6.2 几种常用的吸附等温曲线回归方法.....	22
1.6.3 回归方法的比较.....	23
习题.....	23
第 2 章 非线性方程求解	25
2.1 问题的提出.....	25
2.2 实根的对分法.....	26
2.2.1 使用对分法的条件.....	26
2.2.2 对分法求根算法.....	26
2.2.3 对分法 VB 程序清单.....	27
2.3 直接迭代法.....	29
2.4 松弛迭代法.....	31
2.5 韦格斯坦法.....	33
2.6 牛顿迭代法.....	36
2.6.1 牛顿迭代法的理论推导.....	36
2.6.2 牛顿迭代法的几何意义.....	36
2.7 割线法.....	38
2.8 非线性方程组的牛顿迭代法.....	39
2.9 应用实例.....	41
习题.....	42
第 3 章 线性方程组的迭代求解	43
3.1 问题的提出.....	43
3.2 简单迭代.....	44
3.2.1 简单迭代公式.....	44
3.2.2 简单迭代计算机算法.....	45
3.2.3 程序清单及实例.....	46

3.3 紧凑迭代	48
3.3.1 紧凑迭代公式	48
3.3.2 紧凑迭代计算机算法	50
3.3.3 紧凑迭代 VB 程序	51
3.4 松弛迭代	53
3.4.1 松弛迭代公式	53
3.4.2 松弛迭代计算机算法	54
3.4.3 松弛迭代 VB 程序	54
3.4.4 三种迭代方法混合程序示例	55
3.5 高斯消去法	61
3.5.1 高斯消去法原理	61
3.5.2 高斯消去法程序及实例	62
3.6 三角分解法	63
3.6.1 三角分解法计算公式	63
3.6.2 三角分解法 VB 程序	66
3.7 带状方程组的三角分解法	68
3.7.1 基本原理	68
3.7.2 等带宽方程组的求解	68
3.7.3 带宽为 1 的三对角方程组求解	69
3.7.4 追赶法 VB 程序	71
习题	72
第 4 章 常微分方程数值解	73
4.1 微分方程在化工中的应用	73
4.2 欧拉公式	74
4.2.1 向前欧拉公式	74
4.2.2 向后欧拉公式	76
4.2.3 中心欧拉公式	76
4.2.4 梯形公式	77
4.2.5 VB 程序源码	78
4.3 龙格-库塔法	79
4.3.1 计算公式	79
4.3.2 步长的选择	81
4.4 常微分方程组的数值解法	82
4.4.1 一阶常微分方程组的数值解法	82
4.4.2 高阶常微分方程数值解法	85
4.5 程序示例	85
习题	88
第 5 章 偏微分方程数值解	89
5.1 问题的提出	89
5.2 基本离散化公式	89

5.3 几种常见偏微分方程的离散化计算	90
5.4 吸附床传热传质模型中的偏微分方程求解实例	101
5.4.1 基本设定及假设	101
5.4.2 流体传热模型的建立	102
5.4.3 吸附床内吸附剂传热传质模型的建立	103
5.4.4 吸附器壁面温度轴向分布方程	103
5.4.5 吸附器内/外无量纲化方程	103
5.4.6 模型的离散化	104
5.4.7 模型的数值求解及计算机程序介绍	106
习题	107

中篇 化工常用软件应用

第6章 Office 软件在化工中的应用	109
6.1 Word 在化工论文及文献书写中的应用	109
6.1.1 应用背景及内容	109
6.1.2 公式及分子式的输入	110
6.1.3 三线表的制作	113
6.1.4 插图的制作及图文混排	114
6.1.5 其他使用技巧	115
6.2 Excel 在化工数据处理中的应用	116
6.2.1 Excel 功能简介	116
6.2.2 Excel 工作表的建立	116
6.2.3 Excel 表格中数据的处理	118
6.2.4 Excel 图表的建立	119
6.3 PowerPoint 在化工中的应用	122
6.3.1 PowerPoint 的基本功能	122
6.3.2 利用 PowerPoint 制作化工信息发布会幻灯片	123
6.3.3 利用 PowerPoint 制作化工网页	127
习题	128
第7章 Origin 在化工实验数据处理中的应用	130
7.1 Origin 简介	130
7.2 Origin 的基本操作	130
7.2.1 Origin 的安装	130
7.2.2 数据输入	130
7.2.3 图形生成	132
7.2.4 坐标轴的标注	134
7.2.5 线条及实验点图标的修改	135
7.2.6 数据的拟合	136
7.2.7 其他功能	136
7.3 应用示例	137

习题	141
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 的启动及基本设置	143
8.3.2 各种线条及图形的绘制	148
8.3.3 文本和尺寸标注	155
8.4 化工设备图例	160
8.4.1 画图的基本设置	161
8.4.2 边框的绘制及中心线的确定	161
8.4.3 主视图及左视图的绘制	162
8.4.4 绘制剖面线及标注	163
8.4.5 标题栏、管口表、技术特性表及技术要求	164
8.5 AutoLISP 简介	165
8.5.1 概述	165
8.5.2 基本运算	165
8.5.3 其他常用函数的计算	166
8.5.4 绘图命令简介	167
8.5.5 命令调用过程及绘图实例	167
习题	168
第9章 Aspen Plus 在化工设计及模拟中的应用	170
9.1 概述	170
9.2 Aspen Plus 基本操作	171
9.2.1 Aspen Plus 的启动	171
9.2.2 模拟流程的设置	173
9.2.3 物流数据及其他参数的输入	174
9.2.4 结果的输出	174
9.3 Aspen Plus 应用实例	174
9.3.1 甲醇-二甲醚-水三元混合物精馏塔模拟	174
9.3.2 苯与丙烯反应合成异丙苯的反应模拟	179
9.3.3 萃取蒸馏模拟	183
习题	186

下篇 化工应用软件开发

第10章 换热器计算机辅助设计	187
10.1 基本原理	187
10.2 VB 程序说明	188
10.3 AutoCAD 制图说明	190
10.4 程序源代码及说明	190

习题	205
第 11 章 化工物性数据库网络查询系统设计	206
11.1 物性数据简介	206
11.2 架设网站开发平台	207
11.2.1 平台的组成	207
11.2.2 平台的构建	208
11.3 构建物性数据库	209
11.3.1 化工数据结构简介	209
11.3.2 数据型物性数据的处理	210
11.3.3 数值型物性数据的处理	211
11.3.4 辅助表格的建立	212
11.4 数据库浏览及查询	212
11.4.1 网站概述	213
11.4.2 浏览数据库功能的实现	214
11.4.3 查询功能的实现	216
11.4.4 单位转换功能的实现	217
11.4.5 计算功能的实现	219
11.4.6 数据车功能的实现	221
11.4.7 其他辅助功能的实现	223
习题	224
第 12 章 醋酸生产车间计算机监控系统开发	225
12.1 计算机监控系统概述	225
12.2 监控系统的原理及功能	226
12.2.1 监控系统原理	226
12.2.2 本监控系统主要功能	227
12.3 监控系统的软硬件配置	227
12.3.1 软件配置	227
12.3.2 硬件配置	228
12.4 界面设计	228
12.5 监控系统软件代码	229
12.6 数据采集及转换	238
习题	239
参考文献	240

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取;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。

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。

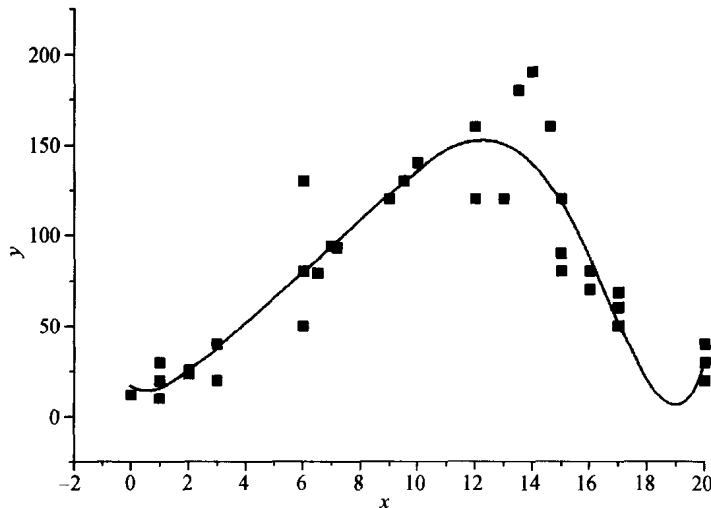


图 1-1 含有“噪声”的数据序列

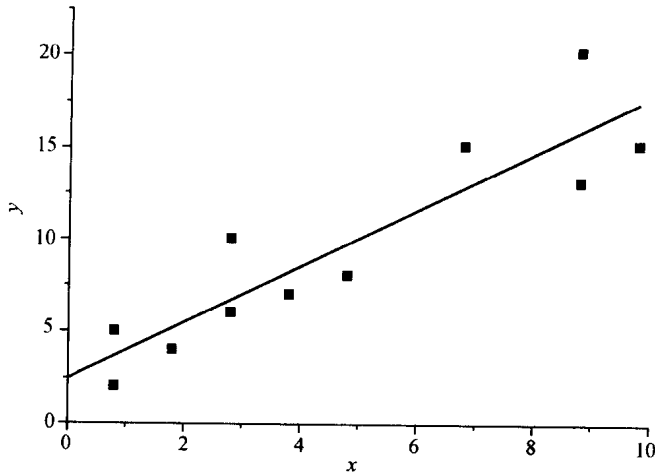


图 1-2 无法同时满足某特定函数的数据序列

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,实验测得二甲醇(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 0.0707。

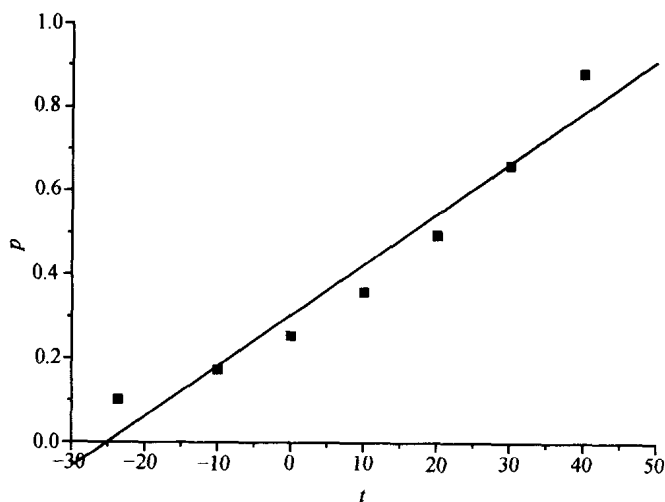


图 1-3 DME 饱和蒸气压和温度之间的线性拟合

如果采用二次拟合,通过计算下述均方误差

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

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 0.00815, 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, 用二次曲线拟合优于线性拟合。具体的计算方法及编程在下一节里介绍。

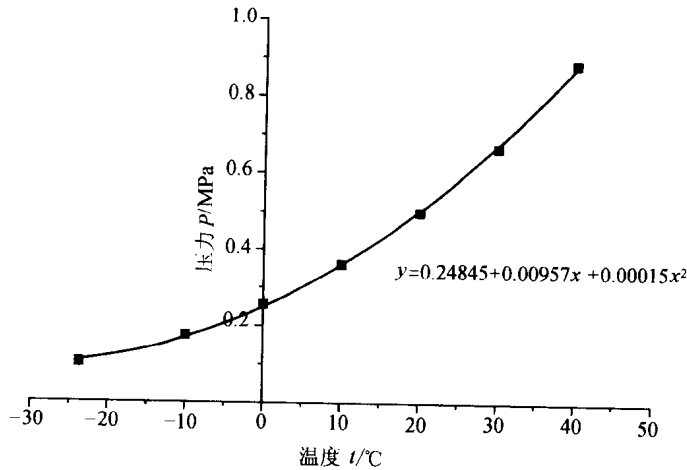


图 1-4 DME 饱和蒸气压和温度之间的二次拟合

1.3 线性拟合和二次拟合函数

(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

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

$$= \frac{(\sum_{i=1}^m y_i \sum_{i=1}^m x_i^2 - \sum_{i=1}^m x_i \sum_{i=1}^m x_i y_i)}{(m \sum_{i=1}^m x_i^2 - (\sum_{i=1}^m x_i)^2)}$$

$$b = \frac{(m \sum_{i=1}^m x_i y_i - \sum_{i=1}^m x_i \sum_{i=1}^m y_i)}{(m \sum_{i=1}^m x_i^2 - (\sum_{i=1}^m x_i)^2)}$$

【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。

```
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)=")
```

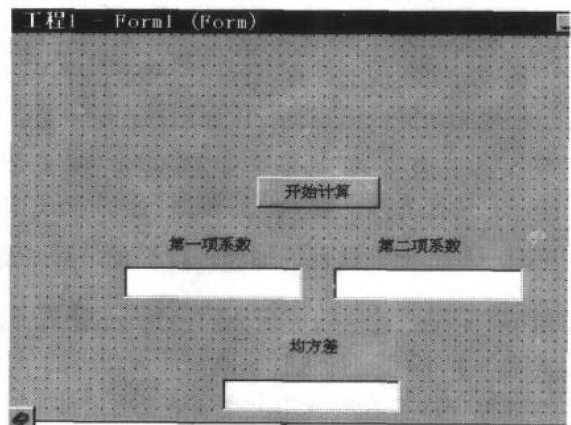


图 1-5 线性拟合的 VB 界面

```

        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
    Next i
    eer = Int(eer * 100000 + 0.5) / 100000
    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, 例如 $p(x) = a_0 + a_1x^3 + a_2x^5$, 套用上面的公式, 可以得到关于求解此拟合函数的法方程式(1-15)。值得注意的是在此法方程的构建过程中, 进行了变量的代换。首先是拟合函数中变量的代换: $x^3 \rightarrow x, x^5 \rightarrow x^2$ 。其次是法方程的代换: 将相应拟合函数中的代换引入法方程中。同时应注意法方程中 x 的4次幂是由两个2次幂相乘得到, x 的3次幂是由一个2次幂和一个1次幂相乘得到, 而2次幂就是变量本身, 而非两个1次幂相乘得到。这个概念至关重要, 在以后的二次拟合的各类变型中, 均需利用这个概念, 千万不要用常规的思路去进行代入计算。

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^5 \\ \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^5 & \sum_{i=1}^m x_i^8 \\ \sum_{i=1}^m x_i^5 & \sum_{i=1}^m x_i^8 & \sum_{i=1}^m x_i^{10} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^3 y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^5 y_i \end{pmatrix} \quad (1-15)$$

如果需要求解是下面的拟合函数

$$\ln y = a_0 + \frac{a_1}{x + 273} + b_1 \times (x + 273)^{1.5}$$

参照上面的方法, 很容易得到求解该拟合函数的法方程