

И. А. Конопелько

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДА МАТЕМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Различные процессы и обуславливающие их физико-химические явления характеризуются взаимосвязью между переменными величинами (параметрами, факторами и т.д.). При изучении тех или иных процессов и явлений, закономерностей между структурой и свойствами вещества или материала, а также факторами, их определяющими, желательно установить функциональную зависимость между переменными величинами, т.е. определить количественное соотношение действительного мира. Однако в практике научно-экспериментальных исследований не всегда представляется возможным выразить эту зависимость аналитически. В таких случаях закономерность многих явлений, обусловленную взаимосвязью между переменными величинами, обычно выражают в виде таблиц, графиков, диаграмм и номограмм. Существующие методы обработки экспериментальных данных позволяют вывести эмпирические формулы, которые лишь приближенно отражают взаимосвязь между переменными величинами, притом в ограниченной области их значений.

В настоящей работе приведены результаты теоретического исследования по установлению общей аналитической зависимости между переменными величинами многих физико-химических явлений.

Проведенный анализ основных положений матема-

тической физики [1] позволил нам установить, что при выражении функциональной зависимости между переменными величинами должно соблюдаться соответствие их значений по граничным условиям. Это правило, положенное в основу вывода общей функциональной взаимосвязи между переменными величинами, подтверждается многими законами физики, химии и других естественных наук, которые теоретически выражаются и обосновываются определенными уравнениями. Большинство таких уравнений отражает взаимосвязь между переменными величинами x и y в виде степенной функции $Y = mX^n$, граничными условиями которой являются $0 \leq X \leq \infty$ и $0 \leq Y \leq \infty$.

Основываясь на вышеуказанном правиле путем преобразования исходных переменных величин x и y с несогласованными их начальными и конечными значениями, нами выведено общее уравнение степенной функции

$$\frac{y - b_1}{b_2 - y} = m \left(\frac{x - a_1}{a_2 - x} \right)^n, \quad (1)$$

где x и y — исходные переменные величины; a_1, b_1 и a_2, b_2 — соответственно начальные и конечные значения исходных переменных величин;

$\frac{x - a_1}{a_2 - x} = X$ и $\frac{y - b_1}{b_2 - y} = Y$ — преобразованные переменные величины.

Действительно, когда $x = a_1$ и $y = b_1$, то $X = 0$ и $Y = 0$; когда $x = a_2$ и $y = b_2$, то $X = \infty$ и $Y = \infty$.

Нетрудно заметить, что значения $x - a_1$ и $a_2 - x$ являются выражением долевой части интервала $a_2 - a_1$. Поэтому, приняв интервал $a_2 - a_1$ за единицу и $\frac{x - a_1}{a_2 - a_1} = \alpha$ (соответственно $b_2 - b_1 = 1$ и $\frac{y - b_1}{b_2 - b_1} = \beta$),

уравнение степенной функции можно записать в следующем виде:

$$\frac{\beta}{1 - \beta} = m \left(\frac{\alpha}{1 - \alpha} \right)^n. \quad (2)$$

Исследования показали, что уравнением (1) описываются многие физико-химические явления в области монотонной (возрастающей или убывающей) зависимости между переменными величинами.

Если функция сохраняет монотонность в бесконечном интервале, то уравнение справедливо для всего интервала исходных значений переменных величин; если функции присущи экстремальные точки, то оно применимо в отдельности для каждого интервала между точками экстремума и перегиба.

Достоверность степенной функциональной зависимости преобразованных переменных величин подтверждается прямолинейным ходом логарифмических кривых, изображенных на рис. 1. Выражения зависимости для каждой кривой рисунка приведены в табл. 1.

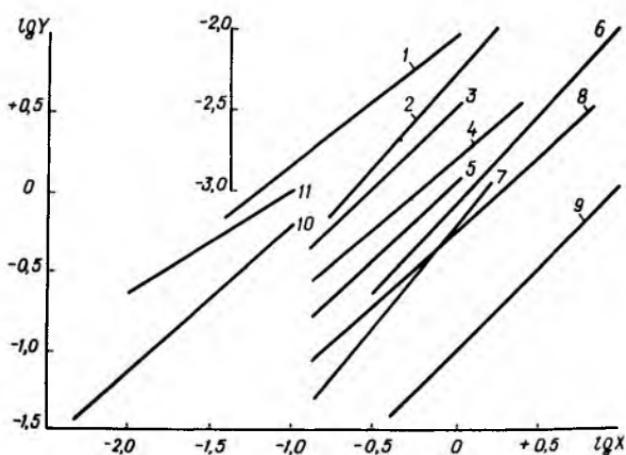


Рис. 1. Зависимость $\lg Y = \lg m + n \lg X$ для некоторых физико-химических явлений.

Тангенс угла наклона прямой к оси $\lg X$ численно равен показателю степени n , а отрезок, отсекаемый прямой на оси $\lg Y$, определяет значение $\lg m$.

Учитывая то обстоятельство, что большинство закономерностей выражается уравнениями кривых первого, второго, третьего и четвертого порядка, рассмот-

Таблица 1

Номер кривой	Описание явления	$Y = m X^n$	Литературный источник, откуда взяты исходные данные
1	2	3	4
1.	Деформация (ΔL , мм) шамотных масс с добавкой 20% пека в зависимости от температуры нагрева (t °C)	$\frac{\Delta L}{L - \Delta L} = 0,01 \left(\frac{t - t_H}{t_K - t} \right)^{0,78}$	[2], [3]
2.	Ползуемость ($\epsilon, 1/r$) корундовой керамики с размером кристаллов 5—20 мк при напряжении 6 кгс/см ² в зависимости от температуры (t °C)	$\epsilon = 0,0055 \left(\frac{t - t_H}{t_K - t} \right)^{1,2}$	[4]
9.	Деформация (ΔL , мм) под нагрузкой шамотного огнеупора (класс IIIA) в зависимости от температуры (t °C)	$\frac{\Delta L}{L - \Delta L} = 0,09 \left(\frac{t - t_H}{t_K - t} \right)^{1,0}$	[5]
3.	Кристаллизация расплавов системы $SiO_2 - Na_2O$. Кривая ликвидуса 0—26,1 вес. % Na_2O . (A—вес. часть Na_2O, T °K)	$A \frac{A}{34 - A} = 3,80 \left(\frac{1986 - T}{T} \right)^{1,0}$	[6]
5.	Кристаллизация расплавов системы $SiO_2 - Na_2O \cdot 2SiO_2$. Кривая ликвидуса 100—48,1 мол. % SiO_2 (M—мол. % SiO_2, T °K)	$\frac{100 - M}{M} = 1,16 \left(\frac{1986 - T}{T} \right)^{1,0}$	[6]

1	2	3	4
11.	Кристаллизация расплавов системы $SiO_2-Na_2O-2SiO_2$ Кривая ликвидуса 0—48,1 мол % SiO_2 (M — мол. % SiO_2 , T °K)	$\frac{M}{100-M} = 8,26 \left(\frac{1147 - T}{T} \right)$ [6]	$1147 - T, 0,63$
7.	Кристаллизация расплавов системы Au-Sb. Кривая ликвидуса 0—25 вес. % Sb (A — вес. % Sb, T °K)	$\frac{A}{100-A} = 0,74 \left(\frac{1336 - T}{T} \right)$ [7]	$1336 - T, 1,3$
4.	Кристаллизация Cu-Ni —сплавов. Кривая ликвидуса t — 1083, t °C)	$\frac{100-A}{A} = 1,72 \left(\frac{1452 - t}{-1083} \right)$ [8]	$1452 - t, 0,96$
8.	Кристаллизация Cu-Ni сплавов. Кривая солидуса (A — вес. % Ni, t °C)	$\frac{100-A}{A} = 0,63 \left(\frac{1452 - t}{t - 1083} \right)$ [8]	$1452 - t, 0,98$
10.	Замерзание растворов NaCl. Кривая ликвидуса 0—23,1 % NaCl (A — вес. % NaCl, T °K)	$\frac{A}{62-A} = 6,73 \left(\frac{273 - T}{T} \right)$ [9]	$273 - T, 0,97$
6.	Поверхностное натяжение (σ , эрг/см ²) воды на линии насыщения в зависимости от температуры (t °C).	$\frac{75,6 - \sigma}{\sigma} = 0,87 \left(\frac{t}{374 - t} \right)$ [10]	$1,2$

рим возможные случаи их преобразования в виде степенной функции. Общие уравнения соответствующих кривых имеют следующий вид:

$$C_1 + C_2 y + C_3 x = 0; \quad (3)$$

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy + C_5 x^2 + C_6 y^2 = 0; \quad (4)$$

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy + C_5 x^2 + C_6 x^2 y + C_7 x^3 = 0; \quad (5)$$

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy + C_5 x^2 + C_6 x^2 y + C_7 x^3 + C_8 x^3 y + C_9 x^4 = 0. \quad (6)$$

Запишем соответствующие им уравнения степенной функции:

$$\frac{y - b_1}{b_2 - y} = m \left(\frac{x - a_1}{a_2 - x} \right)^1; \quad \frac{y - b_1}{b_2 - y} = m \left(\frac{x - a_1}{a_2 - x} \right)^2;$$

$$\frac{y - b_1}{b_2 - y} = m \left(\frac{x - a_1}{a_2 - x} \right)^3; \quad \frac{y - b_1}{b_2 - y} = m \left(\frac{x - a_1}{a_2 - x} \right)^4,$$

или в общем виде:

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy = 0; \quad (7)$$

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy + C_5 x^2 + C_6 x^2 y = 0; \quad (8)$$

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy + C_5 x^2 + C_6 x^2 y + C_7 x^3 + C_8 x^3 y = 0; \quad (9)$$

$$C_1 + C_2 y + C_3 x + C_4 xy + C_5 x^2 + C_6 x^2 y + C_7 x^3 + C_8 x^3 y + C_9 x^4 + C_{10} x^4 y = 0. \quad (10)$$

Коэффициенты $C_1 - C_{10}$ в уравнениях (7) — (10), выраженные через начальные (a_1, b_1) и конечные (a_2, b_2) значения исходных переменных величин x и y , приведены в табл. 2.

Сравнивая уравнения (3) — (6) и соответствующие им уравнения (7) — (10), видим, что в уравнениях

Таблица 2

Члены уравнения	Значения постоянных коэффициентов С		
	уравнение (7)	уравнение (8)	уравнение (9)
C_1	$ma_1b_2 - a_2b_1$	$ma_1^2b_2 + a_2^2b_1$	$ma_1^3b_2 - a_2^3b_1$
C_2y	$a_2 - ma_1$	$-(a_2^2 + ma_1^2)$	$a_2^3 - ma_1^3$
C_3x	$b_1 - mb_2$	$-2(a_2b_1 + ma_1b_2)$	$3(a_2^2b_1 - ma_1^2b_2)$
C_4xy	$m - 1$	$2(ma_1 + a_2)$	$3(ma_1^2 - a_2^2)$
C_5x^2	—	$mb_2 + b_1$	$3(ma_1b_2 - a_2b_1)$
C_6x^2y	—	$-(m+1)$	$3(a_2 - ma_1)$
C_7x^3	—	—	$b_1 - mb_2$
C_8x^3y	—	—	$m - 1$
C_9x^4	—	—	—
$C_{10}x^4y$	—	—	—

степенной функциональной зависимости содержатся дополнительные члены с постоянными коэффициентами, равными $m-1$ в уравнениях (7) и (9) и $-(m+1)$ в уравнениях (8) и (10). В том случае, когда в уравнениях (7) и (9) $m=1$, а в уравнениях (8) и (10) $m=-1$, они преобразуются в общие уравнения (3) — (6). Кроме того, в уравнении (8) постоянный коэффициент при y^2 равен нулю.

Таким образом, рассмотренные выше уравнения линий 1- и 4-й степени являются частным случаем соответствующих уравнений степенной функции, когда $m=1$ (для уравнений нечетного порядка) и $m=-1$ (для уравнений четного порядка).

Из вышеуказанного явствует, что принятые в математике общие уравнения линий n -го порядка не всегда могут отражать закономерность многих физико-химических явлений и процессов.

Разработанный нами новый метод математического анализа экспериментальных данных, основанный на преобразовании исходных переменных величин x и y таким образом, чтобы между преобразованными величинами $X=f(x)$ и $Y=f(y)$ соблюдалось бы соответствие по граничным условиям, т.е. $0 \leq (X, Y) \leq \infty$, позволяет выражать закономерности многих явлений природы в виде степенной функциональной зависимости $Y=mX^n$ с достаточно высокой точностью.

Как показали результаты анализа по взаимосвязи между напряжением и деформацией резин (см. с. 137 настоящего сборника) отклонения между теоретическими и экспериментальными значениями незначительны (до $\pm 3\%$).

Л и т е р а т у р а

1. Будак Б.М., Самарский А.А., Тихонов А.Н. Сборник задач по математической физике. М., 1956.
2. Яговдик Н.К. Изучение методом подобия роли жидкой фазы в шамотных огнеупорах при их эксплуатации. Дисс. Минск, 1948.
3. Конопелько И. А., 10 Зак. 6050

Крюк Л.В. Влияние вязкости жидкой фазы на деформацию керамики. — В сб.: Вопросы технологии и товароведения изделий легкой промышленности. Вып.2. Минск, 1973. 4. Соломин Н.В. Жаростойкость материалов и деталей под нагрузкой. М., 1969. 5. Химическая технология керамики и огнеупоров. Под ред. П.П. Будникова и Д.Н. Полубояринова. М., 1972. 6. Белянкин Д.С., Лапин В.В., Торопов Н.А. Физико-химические системы силикатной технологии. М., 1954. 7. Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. К.П. Мищенко и А.А. Равделя. М.—Л., 1965. 8. Товароведение промышленных и продовольственных товаров. Т. 1. Под ред. М.Е. Сергеева и И.М. Лебедева. М., 1955. 9. Краткий справочник химика. Под ред. Б.В. Некрасова. М., 1954. 10. Теплофизические свойства веществ. Справочник. Под ред. Н.Б. Варгафтика. М.—Л., 1956.