

К. Л. ГЛАДИЛИН, А. Ф. ОРЛОВСКИЙ

МЕТОД ПОДБОРА АППРОКСИМИРУЮЩИХ ФУНКЦИЙ

(Представлено академиком А. И. Опариным 10 I 1973)

При анализе результатов биологических и биохимических исследований целый ряд экспериментаторов стремится для большей определенности и законченности выводов представить рассматриваемую закономерность в виде эмпирических формул, а не только таблиц или графиков. Аппроксимирующие функции позволяют также привести заданную таблицей зависимость к виду, наиболее удобному для дальнейших математических расчетов, особенно если они проводятся на ЭВМ.

В работах К. А. Семендяева ⁽¹⁾ и А. К. Успенского ⁽²⁾ намечен удачный подход к выбору вида аппроксимирующих функций.

Целью данной работы является разработка указанного подхода и использование его для упрощения расчетов при обработке экспериментальных данных для определения средних размеров и числа капель в коацерватных системах спектрофотометрическим методом.

Выбор вида аппроксимирующей функции. Аппроксимирующая функция представляет собой уравнение

$$y = f(x), \quad (1)$$

позволяющее представить в аналитическом виде зависимость, заданную в виде таблицы упорядоченных пар отношений $\langle x_i, y_i \rangle_{i \in I = \{1, 2, 3, \dots, n\}}$:

$$x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n, \quad (2)$$

$$y_1, y_2, y_3, \dots, y_{n-1}, y_n.$$

Для решения задачи в общем виде заменим уравнение (1) его линейным вариантом:

$$u = av + b, \quad (3)$$

где $u = u(y)$, а $v = v(x)$. Тогда среднее арифметическое из крайних значений u должно быть линейной функцией от среднего арифметического из крайних значений v :

$$\bar{u} = a\bar{v} + b. \quad (4)$$

Теперь задача сводится к отысканию вида зависимости u от y и v от x , удовлетворяющей требованию линейности (4). Для ее решения используем три типа средних величин: среднее арифметическое $\bar{z}_1 = (z_1 + z_n) / 2$; среднее геометрическое $\bar{z}_2 = \sqrt{z_1 z_n}$ и среднее гармоническое $\bar{z}_3 = 2z_1 z_n / (z_1 + z_n)$ или $(1/\bar{z}_3) = [(1/z_1) + (1/z_n)] / 2$, где вместо z могут быть подставлены соответствующие значения y или x . Порядок действий при отыскании вида зависимости следующий.

1. Вычисляют все три типа средних величин ($\bar{z}_1, \bar{z}_2, \bar{z}_3$) для заданных в таблице пар (2) крайних значений x (x_1 и x_n) и y (y_1 и y_n).

2. По данным таблицы пар (2) методом линейной интерполяции или по графику зависимости y от x , построенному на основании данных таблицы пар (2), находят заданные таблицей пар значения y для трех средних значений x $y(\bar{x}_1)$; $y(\bar{x}_2)$; $y(\bar{x}_3)$.

3. Сравнивают значения каждого из трех типов $\bar{y}$ (см. пункт 1) с каждым из трех $y(\bar{x})$ (см. пункт 2). В результате получают 9 возможных пар

$\bar{y}_j \leq y(\bar{x}_j)$. Тип среднего y и x в паре $\bar{y} \approx y(\bar{x})$, где равенство выполняется наиболее точно, определяет вид зависимости по правилу: среднее арифметическое дает замену u на y , а v на x ; среднее геометрическое — на $\lg y$ и $\lg x$, а среднее гармоническое — на $1/y$ и $1/x$ соответственно, так как только при этом выполняется требование линейности уравнения (4). Так, например, если оказалось, что $\bar{y}_3 = y(\bar{x}_2)$, то уравнение (3) принимает вид $1/y = a \lg x + b$. Тогда $1/\bar{y}_3 = [(1/y_1) + (1/y_n)]/2 = (a \lg x_1 + b + a \lg x_n + b)/2 = a \lg \sqrt{x_1 x_n} + b = a \lg \bar{x}_2 + b = y(\bar{x}_2)$, что и требовалось получить. Сущность метода может быть продемонстрирована графически (рис. 1). На рис. 1А представлены 9 точек возможных пар соответствий

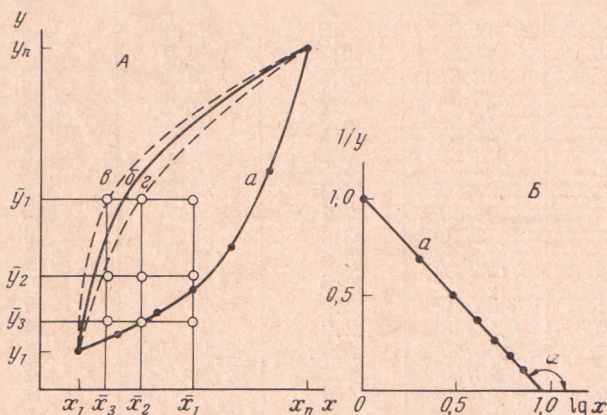


Рис. 1. Графическая иллюстрация сущности метода совпадения средних для выбора вида аппроксимирующей функции (пояснения в тексте)

средних величин для двух крайних: $y_1(x_1)$ и $y_n(x_n)$. Приведенному выше примеру зависимости соответствует график типа кривой a (рис. 1А), линейный вид которой представлен на рис. 1Б ($a = \lg \alpha$).

В тех случаях, когда значение $\bar{y}$ лежит между двумя значениями $y(\bar{x})$ (рис. 1А, кривая б), аппроксимирующую функцию выбираем в виде линейной комбинации двух функций, соответствующих примыкающим типам $y(\bar{x})$. Например, если $\bar{y}_1$ лежит между значениями $y(\bar{x}_2)$ и $y(\bar{x}_3)$, то левому типу зависимости (см. рис. 1А, кривая в) соответствует формула $y = a/x + d$, а правому (кривая г) $y = b \lg x + e$. В результате линейной комбинации этих двух формул получаем $y = a/x + b \lg x + c$, где $c = d + e$.

Параметры данного уравнения, записанного в общем виде ($u = c + av + bw$) могут быть найдены методом наименьших квадратов через детерминанты «расширенной» (вырожденной) матрицы:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} n & \Sigma v & \Sigma w & \Sigma u \\ \Sigma v & \Sigma v^2 & \Sigma vw & \Sigma uv \\ \Sigma w & \Sigma vw & \Sigma w^2 & \Sigma uw \end{array} \right),$$

миноры которой являются матрицами для соответствующих уравнений, получаемых из указанного вычеркиванием тех или иных членов.

Использование аппроксимирующих функций для интерполирования табулированных зависимостей. Аппроксимирующие функции удобны в тех случаях, когда аналитический вид зависимости сложен, что бывает существенно даже при машинной обработке экспериментальных данных. Так, разработанный выше метод был использован нами для упрощения расчетов средних размеров и числа капель в различных коацерватных системах в зависимости от концентрации

Средние размеры и число капель

D_1/D_2	$\lambda_1 = 1,0, \lambda_2 = 1,3 \mu$		$\lambda_1 = 0,7, \lambda_2 = 1,0 \mu$		$\lambda_1 = 0,4, \lambda_2 = 0,6 \mu$	
	диаметр кап- пель, 10^{-4} см	число капель в 1 мл, $10^6/(D_1 + D_2)$	диаметр ка- пель, 10^{-4} мл	число капель в 1 мл, $10^6/(D_1 + D_2)$	диаметр ка- пель, 10^{-4} см	число капель в 1 мл, $10^6/(D_1 + D_2)$
1,10	11,5	3,11	—	—	—	—
1,15	10,0	4,36	8,2	6,15	—	—
1,20	8,9	5,78	7,4	7,78	4,57	20,2
1,25	8,1	7,44	6,9	9,55	4,23	24,4
1,30	7,5	9,43	6,4	11,5	3,96	28,9
1,35	7,0	11,9	6,0	13,6	3,73	33,7
1,40	6,5	14,9	5,7	16,0	3,54	39,0
1,45	6,2	18,6	5,4	18,7	3,37	44,7
1,50	5,5	28,3	5,1	21,8	3,23	51,1
1,55	4,8	46,9	4,9	25,3	3,10	58,1
1,60	3,9	96,8	4,7	29,4	2,98	65,9
1,65	3,0	263	4,5	33,9	2,87	74,5
1,70	2,0	$1,30 \cdot 10^3$	4,3	42,5	2,78	84,4
1,75	1,5	$4,98 \cdot 10^3$	3,9	57,5	2,69	95,0
1,80	1,1	$1,72 \cdot 10^4$	3,6	79,1	2,60	106
1,85	0,84	$5,45 \cdot 10^4$	3,2	113	2,42	138
1,90	0,65	$1,59 \cdot 10^5$	2,8	192	2,26	177
1,95	0,51	$4,34 \cdot 10^5$	2,4	349	2,10	230
2,00	0,40	$1,11 \cdot 10^6$	2,0	703	1,96	298
2,05	0,33	$2,69 \cdot 10^6$	1,5	$2,14 \cdot 10^3$	1,75	450
2,10	0,27	$6,20 \cdot 10^6$	1,25	$4,92 \cdot 10^3$	1,54	707
2,15	0,23	$1,37 \cdot 10^7$	1,04	$1,08 \cdot 10^4$	1,34	$1,17 \cdot 10^3$
2,20	0,19	$2,89 \cdot 10^7$	0,87	$2,29 \cdot 10^4$	1,14	$2,07 \cdot 10^3$

П р и м е ч а н и е. Выделены величины, погрешность округления которых не превышает 5% для диаметра капель и 10% для числа капель. Относительный коэффициент преломления капель 1,05. Толщина кюветы по ходу луча 0,106 см.

исходных растворов и протекания ферментативных реакций ⁽³⁾. Исходными для расчетов величинами служили данные об оптических плотностях коацерватных систем, обусловленных светорассеянием при двух различных длинах волн; тех, при которых отсутствует поглощение света компонентами системы. Величина p , характеризующая степень светорассеяния в зависимости от длины волны света, определяется непосредственно из данных эксперимента по формуле $p = \lg(D_1/D_2)/\lg(\lambda_2/\lambda_1)$, где D_1 — оптическая плотность при длине волны λ_1 ; D_2 — при λ_2 . Величина p дает далее возможность определить относительную величину диаметра капель и длины волны падающего света $\alpha = \pi d / \lambda$ по соответствующим таблицам ⁽⁴⁾; тогда $d = \alpha \lambda / \pi$, где d — диаметр капель.

Указанные таблицы ⁽⁴⁾ позволяют определять α до величины, равной 25, что для наших целей оказалось недостаточным. В связи с этим, по данным таблицы зависимости суммарного светорассеяния (по всем направлениям) для одной частицы $\Sigma(\alpha)$ ⁽⁵⁾, нами были подобраны аппроксимирующие функции, которые позволили при помощи ЦВМ «МИР-2» по соответствующей расчетной формуле ⁽⁴⁾ продолжить таблицу зависимости $\alpha(p)$ до значения, равного 41, что расширило возможности определения максимального среднего диаметра капель от 6,8 до 11,5 μ .

Результатом проведенной работы является табл. 1, позволяющая сократить время расчета в десятки раз, что как раз представляло собой основное препятствие для использования метода светорассеяния при определениях размеров и количества коацерватных капель, или бактерий в культуральной жидкости, или субклеточных структур (а также их фрагментов) в соответствующих суспензиях.

Данные, приведенные в табл. 1, показывают также влияние точности определения оптической плотности на точность конечных результатов. Эту

переменную величину приходилось особо учитывать, когда коацерватные системы образовывались из растворов с концентрацией выше оптимальной, так как при этом запись оптической плотности системы имеет ярко выраженный волнистый характер, что обусловлено пересечением луча света крупными агрегатами капель и отдельными флоккулятами ⁽³⁾. Этот стохастический фон может быть «отделен» от величины оптической плотности остальной системы при помощи математического метода, предложенного нами ранее ⁽⁶⁾, для чего на графике записи оптической плотности следует провести кривые, аппроксимирующие минимумы оптической плотности отдельно для каждой из двух длин волн: $\min D_1$ и $\min D_2$ соответственно ⁽³⁾. Величины, рассчитанные по этим минимальным значениям оптической плотности соответствуют системе с «удаленными» из нее (хотя бы частично) крупными агрегатами и флоккулятами.

Полученные нами результаты ⁽³⁾ хорошо согласуются с данными, найденными при помощи анализатора биочастиц ⁽⁷⁾, что экспериментально подтверждает применимость предложенных нами методов, особенности и преимущества которых описаны нами ранее ⁽³⁾.

Авторы сердечно благодарят акад. А. И. Опарина за постоянное внимание и Т. Н. Евреинову за повседневную помощь в работе.

Институт биохимии им. А. Н. Баха
Академии наук СССР
Москва

Поступило
15 XII 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ К. А. Семендяев, Эмпирические формулы, М., 1933. ² А. К. Успенский, Выбор вида и нахождение параметров эмпирической формулы, М., 1960.
³ К. Л. Гладилин, А. Ф. Орловский и др., ДАН, 206, № 4, 223 (1972).
⁴ W. Heller, H. L. Bhatnagar, M. Nakagaki, J. Chem. Phys., 36, 5, 1163 (1960). ⁵ W. J. Pangonis, W. Heller, A. Jacobson, Tables of Light Scattering Function for Spherical Particles, Detroit, 1957, pp. 113, 114, 117. ⁶ К. Л. Гладилин, ДАН, 203, № 1, 226 (1972). ⁷ Т. Н. Евреинова, Л. М. Галимова, В сборн. Машинный анализ микроскопических объектов, «Наука», 1968, стр. 82.