

Semestrální práce

Vyhlazování (spline)

Přednášející: Prof. Ing. Jiří Militký, CSc.

Spline

V1:

Využití spline v modulu vyhlazování nebo modulu kalibrace

Zadání:

Použijte spline k proložení experimentálních dat závislosti absorpance na koncentraci fosforečnanů v kalibračních roztocích.

Pomocí programu ADSTAT - v grafu, ne ve výstupech výpočtů ! - zjistěte 1. a 2. derivaci ve dvou bodech křivky a integrál na určitém úseku křivky. Popište postup při tomto zjišťování.

Data:

x - koncentrace fosforečnanů v kalibračních roztocích v mg/l

y - absorpance

x	0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,40	0,50	0,60
y	0,048	0,089	0,128	0,173	0,199	0,228	0,271	0,325	0,348	0,367

Program:

ADSTAT: Kalibrace: Spline

Output z PC:

v1.dat, v1a.txt, v1b.txt, v1c.txt, v1.doc

Řešení:

a) Použití spline

Lineární spline

Lineární spline umožňuje konstrukci modelu složeného z přímkových úseků spojených v místech vzájemného styku (uzlech) ve funkčních hodnotách.

Počet přímkových úseků závisí od zadání počtu uzlů, délka přímkových úseků a poloha uzlů závisí od zvolené strategie zadání uzlů. ADSTAT poskytuje pro tuto strategii tři možnosti:

1. Konstantní uzlové intervaly - podle počtu uzlů se vzdálenost $X = x_{\max} - x_{\min}$ rozdělí na určitý počet stejných úseků. V našem případě, kdy počet uzlů = 1 a $X = 0,6$ (podle zadání) bude uzel umístěn v bodě s x-ovou souřadnicí $x = 0,3$.
2. Zadávání uzlů - x-ová souřadnice uzlu se zadává
3. Konstantní počet bodů - uzly jsou pravidelně rozloženy mezi body. V našem případě (pokud je počet uzlů = 1) se uzel umístí mezi body 5 a 6.

Tyto 3 možnosti strategie zadávání uzlů jsou u všech spline stejné.

Výstup z počítače ozn. v1a.txt představuje použití lineárního spline v příkladu v1.

Z analýzy derivací a integrálů (bod 3) vyplývá, že lineární spline je spojitý ve funkčních hodnotách.

Pro odhad parametrů modelu byla použita metoda nejmenších čtverců (MNC).

Kvadratický spline

Kvadratický spline umožňuje konstrukci modelu složeného z parabolických úseků, navazujících v místech vzájemného styku - uzlech.

Model je spojitý ve funkčních hodnotách a v hodnotách 1. derivace.

Výstup v1b.txt představuje použití kvadratického spline v úloze v1.

Pro odhad parametrů tohoto regresního modelu ve tvaru kvadratického spline byla rovněž použita MNČ, počet zadaných uzlů = 1 a konstantní uzlové intervaly.

Kubický spline

Umožňuje konstrukci modelu složeného z kubických úseků navazujících v místech vzájemného styku (uzlech) a spojitý ve funkčních hodnotách a hodnotách prvních dvou derivací.

Potvrzuje to výstup v1c.txt (bod3).

Kvalita a vhodnost použitého spline se posuzuje v závislosti na tom, kde a k jakému účelu byl spline použit. V případě kalibrace, jako to bylo v úloze v1 se považuje za nejvhodnější ten spline, který poskytuje nejlepší parametry kalibrace, čímž je koncentrace kritické úrovně x_c a koncentrace odpovídající limitě detekce, označovaná i jako „ještě stanovitelná koncentrace“ x_D . Model se zároveň posuzuje podle analýzy reziduí.

V úloze v1, kdy byla použita MNČ, se spline posuzují podle RSC - reziduálního součtu čtverců, odhadu směrodatné odchylky $s(e)$ a odhadu reziduálního rozptylu $(s(e))^2$.

Následující tabulka přináší porovnání jednotlivých použitých spline podle některých výše jmenovaných statistických ukazatelů:

Spline	x_D	RSC	$s(e)$
lineární	0,0360	$5,951 \cdot 10^{-4}$	$9,221 \cdot 10^{-3}$
kvadratický	0,0238	$1,731 \cdot 10^{-4}$	$5,371 \cdot 10^{-3}$
kubický	0,0312	$2,045 \cdot 10^{-4}$	$3,571 \cdot 10^{-3}$

Z tabulky vyplývá, že pro úlohu v1 je nejvhodnější kvadratický spline.

b) Zjištění derivací a integrálu

Zjišťování derivací v grafu spline (v programu ADSTAT: Kalibrace) se provádí následovně:

Pomocí šipek vpravo a vlevo lze po křivce pohybovat grafickým kurzorem ve tvaru +. Jemný posun kurzoru se docílí společným zmáčknutím kláves ctrl a šipky.

Zároveň s pohybem kurzoru se pod grafem objevují souřadnice bodu, kde právě kurzor leží, a první a druhá derivace funkce v daném bodě - označeny jako d1 a d2.

V následující tabulce jsou uvedeny hodnoty derivací pro zvolené body o souřadnicích x, y.

souřadnice		derivace	
x	y	d1	d2
0,1000	0,1286	0,7645	-0,6891
0,4002	0,3204	0,4255	-2,0077

Zjišťování integrálu v grafu spline pro určitý jeho úsek se provádí následovně:

Zvolený začátek integrálu, který se nalezne šipkami vpravo a vlevo, se označí tlačítkem *enter* v *numerické klávesnici*. Pohybem kurzoru po křivce (zase šipkami vpravo vlevo) se nalezne zvolený konec integrálu. Po zmáčknutí klávesy + v *numerické klávesnici* se pod grafem vedle souřadnic a první a druhé derivace objeví hodnota integrálu na předem ohraničeném úseku. Podle uvedeného návodu byl pro interval $x = 0,2002$ až $x = 0,5002$ zjištěn integrál $I = 8,6947 \cdot 10^{-2}$.

Uvedenou skutečnost dokládá i přiložený graf.

Závěr:

Řešením bylo zjištěno, že pro úlohu v1 je nejvhodnější kvadratický spline. Programem ADSTAT byly spočítány tyto koeficienty f, g a h rovnice kvadratického spline:

$$y = f[i]x^2 + g[i]x + h[i] \quad \text{pro } k[i-1] < x \leq k[i]$$

k[i]	f[i]	g[i]	h[i]
0,300	-0,34457	0,83343	0,04868
0,600	-1,00380	1,22900	-0,01066

Název souboru:	V1
Adresář:	E:\Pom\approx
Šablona:	D:\Program Files\Microsoft Office\Sablony\Normal.dot
Název:	Semestrální práce
Předmět:	
Autor:	Ing. Hosnedlová
Klíčová slova:	
Komentáře:	
Datum vytvoření:	29.09.96 17:00
Číslo revize:	7
Poslední uložení:	30.09.96 10:52
Uložil:	Ing. Hosnedlová
Celková doba úprav:	304 min.
Poslední tisk:	15.09.00 08:29
Jako poslední úplný tisk	
Počet stránek:	4
Počet slov:	728 (přibližně)
Počet znaků:	4 153 (přibližně)