

Univerzita Pardubice

Fakulta chemicko-technologická

Katedra analytické chemie

Semestrální práce

Předmět:

4.4 Aproximace křivek a vyhlazování křivek

Přednášející:

prof. Ing.. Jiří Militký, CSc.

Ing. Jaroslav Dostál

2012

1. Úloha:

Napište matici pro případ lineárního regresního spline vyjádřeného přes useknuté polynomy pro případ dvou uzlových bodů $k_1 = 1$ a $k_2 = 4$. Experimentální body jsou $x = [0.2 \ 0.4 \ 0.6 \ 1.5 \ 2.0 \ 3.0 \ 3.5 \ 6.0 \ 8.0 \ 10.0]$, $y = [1 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 6 \ 6 \ 4 \ 2 \ 2]$.

Program ADSTAT 1.25

Modul kalibrace - zadání dat (soubor 44) - lineární spline - zadání uzlových bodů (1, 4),
Hottellingovy pásy - výpočet - výsledky - graf (zvětšen rozsah $Y_{max} = 7$)

U Ě S L E D K Y

KALIBRACE

Lineární spline

Název: Calibration module - demo data

U S T U P

(1) PODMĚNKY

Počet bodů, n : 10
Počet uzlů, m : 2
Strategie výběru uzlů : Zadávaní uzlů
Jméno výstupního souboru : RESULTS.TXT

(2) HODNOTY UZL^a:

a : 2.0000E-01 k[1] : 1.0000E+00 k[2] : 4.0000E+00
b : 1.0000E+01

(3) USTUPNÍ DATA:

	1	2	3	4	5
x	2.0000E-01	4.0000E-01	6.0000E-01	1.5000E+00	2.0000E+00
y	1.0000E+00	1.0000E+00	2.0000E+00	3.0000E+00	4.0000E+00
	6	7	8	9	10
x	3.0000E+00	3.5000E+00	6.0000E+00	8.0000E+00	1.0000E+01
y	6.0000E+00	6.0000E+00	4.0000E+00	2.0000E+00	2.0000E+00

U Ź S T U P

(1) PARAMETRY KALIBRACE:

Koeficienty rovnice : $g[i]*x+h[i]$ pro $k[i-1] < x \leq k[i]$

k[i]	g[i]	h[i]
1.0000E+00	2.4745E+00	3.4240E-01
4.0000E+00	1.1706E+00	1.6463E+00
1.0000E+01	-8.5614E-01	9.7532E+00

(2) ANALÝZA REZIDUÍ:

Bod	Měřená hodnota	Predikovaná hodnota	Absolutní reziduum	Relativní reziduum
i	yexp[i]	ypyp[i]	e[i]	er[i]
1	1.0000E+00	8.3730E-01	-1.6270E-01	-1.9431E+01
2	1.0000E+00	1.3322E+00	3.3220E-01	2.4936E+01
3	2.0000E+00	1.8271E+00	-1.7290E-01	-9.4632E+00
4	3.0000E+00	3.4022E+00	4.0219E-01	1.1822E+01
5	4.0000E+00	3.9875E+00	-1.2515E-02	-3.1386E-01
6	6.0000E+00	5.1581E+00	-8.4193E-01	-1.6322E+01
7	6.0000E+00	5.7434E+00	-2.5663E-01	-4.4683E+00
8	4.0000E+00	4.6164E+00	6.1638E-01	1.3352E+01
9	2.0000E+00	2.9041E+00	9.0409E-01	3.1132E+01
10	2.0000E+00	1.1918E+00	-8.0819E-01	-6.7812E+01

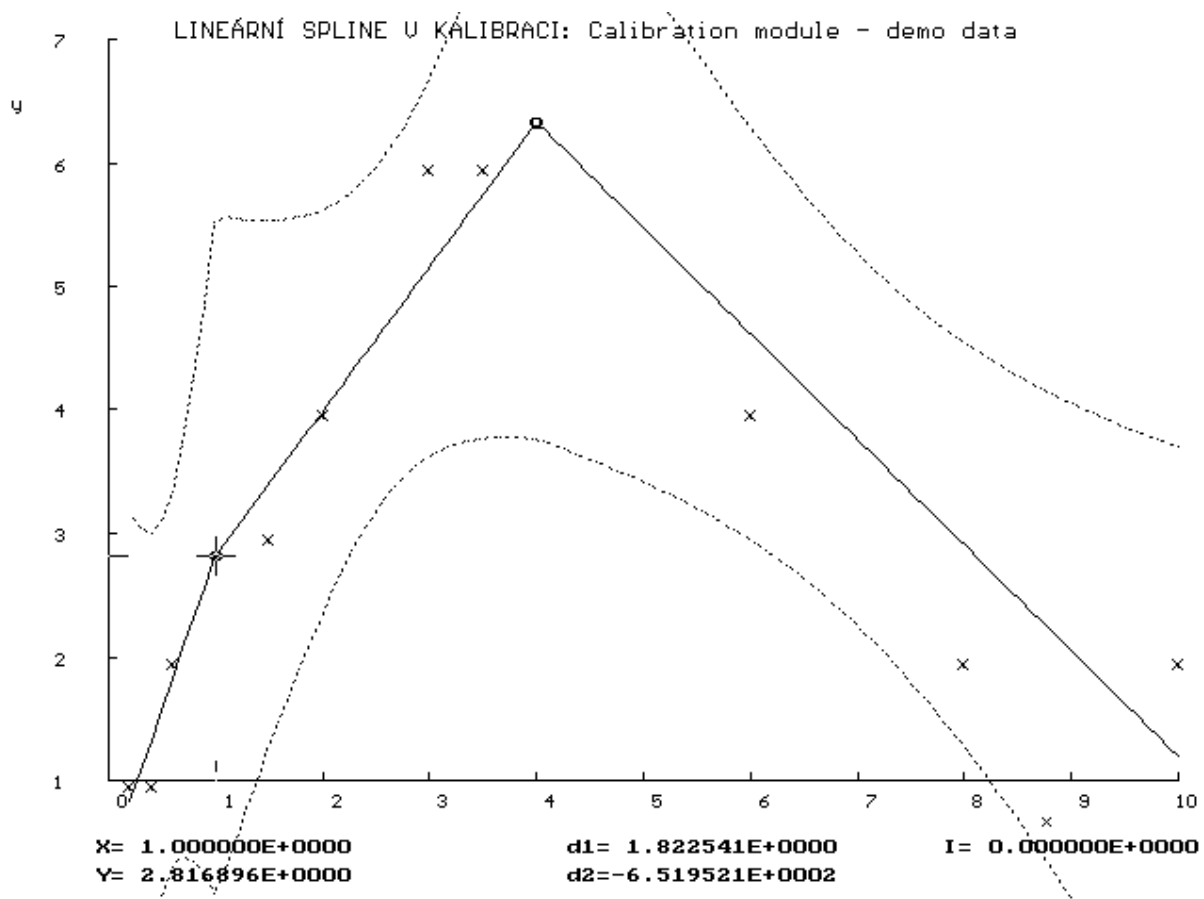
Reziduální součet čtverců, RSC : 2.9538E+00
 Průměr absolutních hodnot reziduí, Me : 4.5097E-01
 Průměr relativních reziduí, Mer[%] : 19.905
 Odhad reziduálního rozptylu, $s^2(e)$: 4.9230E-01
 Odhad směrodatné odchylky reziduí, s(e) : 7.0164E-01

(3) ANALÝZA DERIVACÍ A INTEGRÁL²:

Bod	Predikovaná hodnota	První derivace	Druhá derivace	Integrál
i	Yyp[i]	der1[i]	der2[i]	int[i]
1	8.3730E-01	2.4745E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
2	1.3322E+00	2.4745E+00	0.0000E+00	2.1695E-01
3	1.8271E+00	2.4745E+00	0.0000E+00	5.3288E-01
4	3.4022E+00	1.1706E+00	0.0000E+00	3.0165E+00
5	3.9875E+00	1.1706E+00	0.0000E+00	4.8639E+00
6	5.1581E+00	1.1706E+00	0.0000E+00	9.4366E+00
7	5.7434E+00	1.1706E+00	0.0000E+00	1.2162E+01
8	4.6164E+00	-8.5614E-01	0.0000E+00	2.6125E+01
9	2.9041E+00	-8.5614E-01	0.0000E+00	3.3646E+01
10	1.1918E+00	-8.5614E-01	0.0000E+00	3.7741E+01

(4) KALIBRAČNÍ MEZE:

Kritická úroveň, yc : 2.159562E+00 xc : 8.869637E+00
 Limita detekce, yd : 3.391457E+00 xd : 1.490831E+00



2. Úloha: Spočítejte integrál funkce $1/(1+x^2)$ pro interval $[0, 0.8]$ pomocí programu Spaeth.

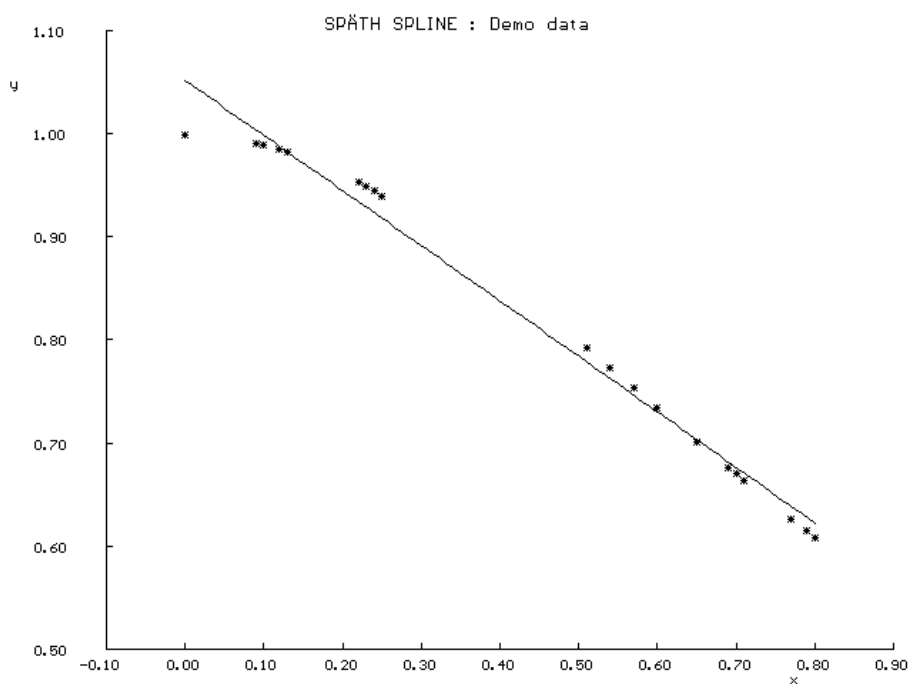
Pomocí programu excel bylo vytvořeno 20 náhodných čísel (x) v intervalu $[0, 0.8]$ a k nim byly pomocí zadané rovnice spočteny hodnoty y:

X	Y
0,00	1,0000
0,09	0,9920
0,10	0,9901
0,12	0,9858
0,13	0,9834
0,22	0,9538
0,23	0,9498
0,24	0,9455
0,25	0,9412
0,51	0,7936
0,51	0,7936
0,54	0,7742
0,57	0,7548
0,60	0,7353
0,65	0,7030
0,69	0,6775
0,70	0,6711
0,71	0,6648
0,77	0,6278
0,79	0,6157
0,80	0,6098

Vytvořen soubor spaeth.prn, resp. spaeth pro program **Adstat 1.25 - postup:**

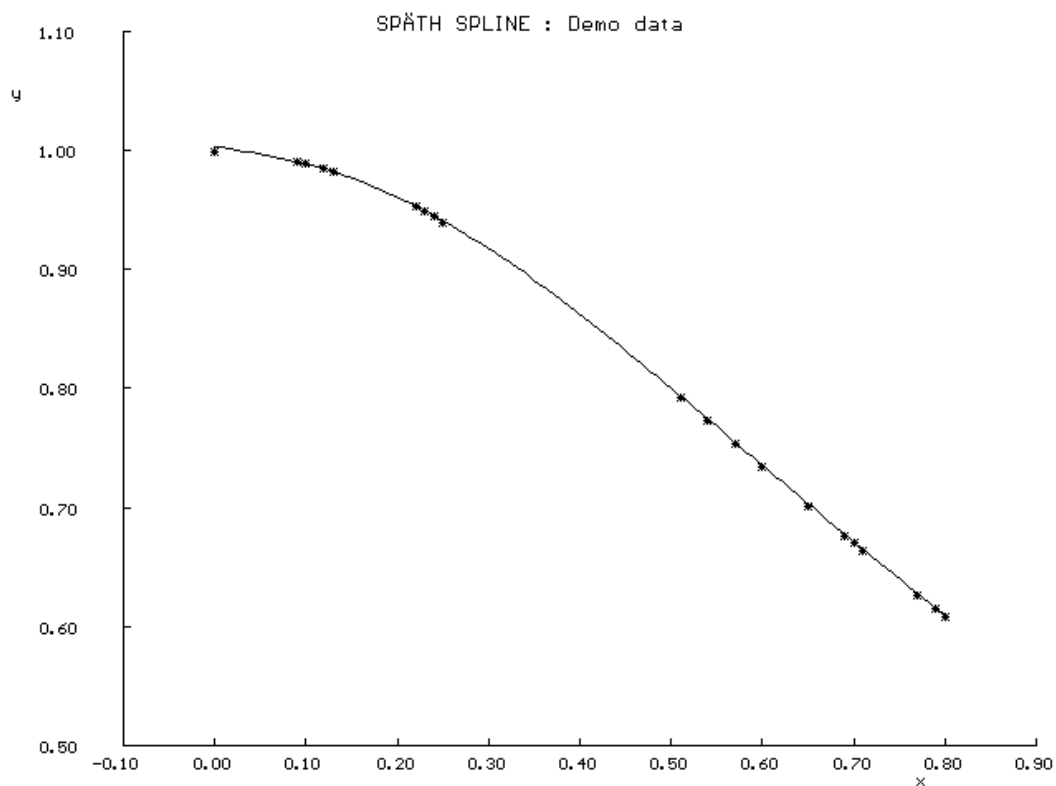
modul vyhlazování – algoritmus späth – nejprve P (lokální parametr vyhlazení) rovno jedné – výpočet – vytvořen graf

P=1



Dále bylo zvyšováno P až na 5000, kdy bylo proložení křivky body nejlepší viz graf a výsledky.

P=5000



U Ě S L E D K Y
INTERPOLACE A UYHLAZOVÁNÍ DAT

Späth Spline

Název: Demo data

U S T U P

(1) PODMINKY:

Počet bodů, n : 20
Parametr vyhlazení, P : 5.0000E+03
Jméno výstupního souboru : RESULTS.TXT

(1) Tabulka výsledků

Bod	Nezávisle proměnná x[i]	Závisle proměnná yexp[i]	Uhlazená hodnota ycall[i]	Residuum e[i]	Relativní residuum er[i]
1	0.0000E+00	1.0000E+00	1.0033E+00	3.2673E-03	3.2567E-01
2	9.0000E-02	9.9197E-01	9.9100E-01	-9.6487E-04	-9.7363E-02
3	1.0000E-01	9.9010E-01	9.8912E-01	-9.7823E-04	-9.8899E-02
4	1.2000E-01	9.8580E-01	9.8488E-01	-9.2327E-04	-9.3745E-02
5	1.3000E-01	9.8338E-01	9.8251E-01	-8.7330E-04	-8.8885E-02
6	2.2000E-01	9.5383E-01	9.5362E-01	-2.1826E-04	-2.2887E-02
7	2.3000E-01	9.4976E-01	9.4961E-01	-1.4581E-04	-1.5355E-02
8	2.4000E-01	9.4554E-01	9.4546E-01	-7.8074E-05	-8.2577E-03
9	2.5000E-01	9.4118E-01	9.4116E-01	-1.5643E-05	-1.6621E-03
10	5.1000E-01	7.9359E-01	7.9376E-01	1.7499E-04	2.2045E-02
11	5.4000E-01	7.7423E-01	7.7436E-01	1.2244E-04	1.5812E-02
12	5.7000E-01	7.5477E-01	7.5487E-01	9.9681E-05	1.3205E-02
13	6.0000E-01	7.3529E-01	7.3540E-01	1.0761E-04	1.4633E-02
14	6.5000E-01	7.0299E-01	7.0316E-01	1.7322E-04	2.4634E-02
15	6.9000E-01	6.7746E-01	6.7771E-01	2.4592E-04	3.6288E-02
16	7.0000E-01	6.7114E-01	6.7140E-01	2.6164E-04	3.8969E-02
17	7.1000E-01	6.6485E-01	6.6512E-01	2.7400E-04	4.1195E-02
18	7.7000E-01	6.2779E-01	6.2785E-01	6.8425E-05	1.0898E-02
19	7.9000E-01	6.1573E-01	6.1552E-01	-2.0304E-04	-3.2986E-02
20	8.0000E-01	6.0976E-01	6.0936E-01	-3.9477E-04	-6.4785E-02

(2) Tabulka derivací a integrálů

Bod	Nezávisle proměnná x[i]	Závisle proměnná yexp[i]	První derivace der1[i]	Druhá derivace der2[i]	Integrál intl[i]
1	0.0000E+00	1.0000E+00	-1.1425E-01	0.0000E+00	0.0000E+00
2	9.0000E-02	9.9197E-01	-1.8041E-01	-1.4703E+00	8.9787E-02
3	1.0000E-01	9.9010E-01	-1.9569E-01	-1.5854E+00	9.9687E-02
4	1.2000E-01	9.8580E-01	-2.2872E-01	-1.7179E+00	1.1943E-01
5	1.3000E-01	9.8338E-01	-2.4600E-01	-1.7379E+00	1.2927E-01
6	2.2000E-01	9.5383E-01	-3.9285E-01	-1.5253E+00	2.1649E-01
7	2.3000E-01	9.4976E-01	-4.0793E-01	-1.4908E+00	2.2601E-01
8	2.4000E-01	9.4554E-01	-4.2263E-01	-1.4490E+00	2.3548E-01
9	2.5000E-01	9.4118E-01	-4.3689E-01	-1.4033E+00	2.4492E-01
10	5.1000E-01	7.9359E-01	-6.4455E-01	-1.9412E-01	4.7163E-01
11	5.4000E-01	7.7423E-01	-6.4867E-01	-8.0848E-02	4.9515E-01
12	5.7000E-01	7.5477E-01	-6.4967E-01	1.4056E-02	5.1809E-01
13	6.0000E-01	7.3529E-01	-6.4805E-01	9.4008E-02	5.4044E-01
14	6.5000E-01	7.0299E-01	-6.4069E-01	2.0036E-01	5.7640E-01
15	6.9000E-01	6.7746E-01	-6.3167E-01	2.5079E-01	6.0402E-01
16	7.0000E-01	6.7114E-01	-6.2916E-01	2.5111E-01	6.1076E-01
17	7.1000E-01	6.6485E-01	-6.2671E-01	2.3834E-01	6.1745E-01
18	7.7000E-01	6.2779E-01	-6.1718E-01	7.9520E-02	6.5623E-01
19	7.9000E-01	6.1573E-01	-6.1619E-01	1.9739E-02	6.6867E-01
20	8.0000E-01	6.0976E-01	-6.1609E-01	1.1520E-18	6.7479E-01

(3) ANALÝZA REZIDUÍ:

Průměr residuí	: -1.1102E-17
Průměr absolutních hodnot residuí	: 4.7953E-04
Reziduální směrodatná odchylka	: 8.5897E-04
Reziduální rozptyl	: 7.3783E-07
Čikmost residuí	: 2.4912E+00
Čiřatost residuí	: 1.0755E+01

Výpočet integrálu:

$$\int_0^{0,8} \frac{1}{1+x^2} = 0,67458 - 0 = 0,67458$$

Ověřeno výpočtem plochy pod křivkou z grafu (hodnoty přibližné):

integrál = $0,8 * 0,6 + 0,5 * 0,8 / 2 = 0,68$

Závěr

Integrál funkce $1/(1+x^2)$ pro interval $[0;0,8]$ se rovná 0,6746.

3. Úloha: Uveďte základní rozdíly mezi spline vyhlazováním a spline regresí.

Spline vyhlazování splňuje podmínku nejmenších čtverců a druhé derivace, je součástí numerického vyhlazování, funkce na sebe plynule navazují v uzlových bodech, které jsou totožné s x-ovými souřadnicemi dat. Spliny tedy nemusí přímo procházet uzlovými body.

Spline regrese je pro komplikovanější formy funkčních závislostí dat s více extrémy, splňuje podmínku nejmenších čtverců. Uzlové body se zadávají a tvoří hranice intervalů, ve kterých jsou definovány samostatné funkce. Čím větší počet úseků tím lepší průchod křivek body. Ve spojích křivek ale není hladký průběh.

4. Úloha: Co můžeme říci o funkci 53H.

Funkce 53H je robustní a rekurzivní (nepočítá s predikovanými hodnotami dat) filtr, je necitlivý k hrubým chybám, využívá se k vyhlazování průběhů datových řad. Filtr 53H je pracuje s mediánem pátého stupně a má tři členy.

$$Z_i = \frac{S(5,i-2)}{4} + \frac{S(5,i-1)}{2} + \frac{S(5,i)}{4}$$