Univerzita Pardubice

Fakulta chemicko-technologická

Katedra analytické chemie

Studentská 95, 532 10 Pardubice 2

13. licenční studium ARCHIMEDES

ANALÝZA DAT

Semestrální práce

Vedoucí studia a odborný garant:

Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.

4.4 Aproximace a vyhlazování křivek

Ing. Lubomír Pavliska

11. února 2012

Obsah

Kapitola 1

Aproximace

1.1 Úloha 1

1.1.1 Zadání

Napište matici pro případ lineárního regresního spline vyjádřeného přes useknuté polynomy pro případ dvou uzlových bodů $\xi_1 = 1, \xi_2 = 4$. 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].

1.1.2 Řešení

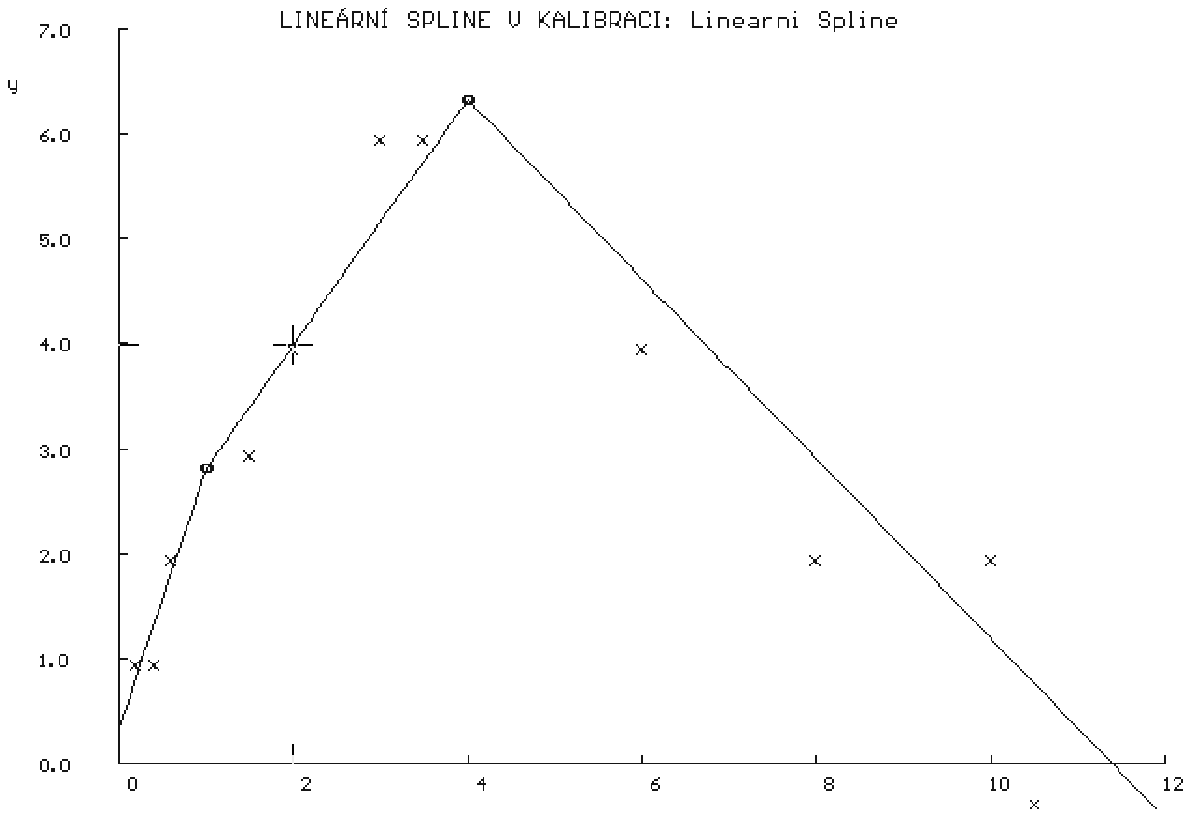
Programem ADSTAT v části Kalibrace spočítáme funkcí lineární spline aproximaci vstupních bodů pro případ dvou uzlových bodů ξ_1, ξ_2. V případě metody Lineární Spline rozdělí úsečkami zadanou množinu bodů na úseky podle uzlových bodů. Soubor dat(../Data/LinSpline.dat). Výsledky programu jsou v souboru (../Data/LINSPLIN.TXT)

```
(1) PARAMETRY KALIBRACE:
    Koeficienty rovnice : g[i]*x+h[i] pro k[i-1] < x <= 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

(3) ANALYZA DERIVACI A INTEGRALU:
       Bod      Predikovana         Prvni            Druha            Integral
                  hodnota          derivace         derivace
        i         Yvyp[i]          der1[i]          der2[i]          int[i]
        1       8.3730E-01       2.4745E+00       2.2337E-08       2.2337E-08
        2       1.3322E+00       2.4745E+00       2.2337E-08       2.1695E-01
```

3	1.8271E+00	2.4745E+00	2.2337E-08	5.3288E-01
4	3.4022E+00	1.1706E+00	2.2337E-08	3.0165E+00
5	3.9875E+00	1.1706E+00	2.2337E-08	4.8639E+00
6	5.1581E+00	1.1706E+00	2.2337E-08	9.4366E+00
7	5.7434E+00	1.1706E+00	2.2337E-08	1.2162E+01
8	4.6164E+00	-8.5614E-01	2.2337E-08	2.6125E+01
9	2.9041E+00	-8.5614E-01	2.2337E-08	3.3646E+01
10	1.1918E+00	-8.5614E-01	2.2337E-08	3.7741E+01



Obrázek 1.1: Tří úseková aproximace

Výsledkem je spojité proložení třemi navazujícími úseky metodou lineární regrese. Kvalita proložení je dána parametry regrese. Výsledky všech podobných aproximací je možné brát jen na daném intervalu dat.

```
Rezidualni souceet ctvercu, RSC                   : 2.9538E+00
Prumer absolutnich hodnot rezidui, Me             : 4.5097E-01
Prumer relativnich rezidui, Mer[%]                : 19.905
Odhad rezidualniho rozptylu, s^2(e)               : 4.9230E-01
Odhad smerodatne odchylky rezidui, s(e)           : 7.0164E-01
```

1.2 Úloha 2

1.2.1 Zadání

Spočítejte integrál funkce $1/(1+x^2)$ pro interval [0,0.8] programem Spaeth

1.2.2 Řešení

Data

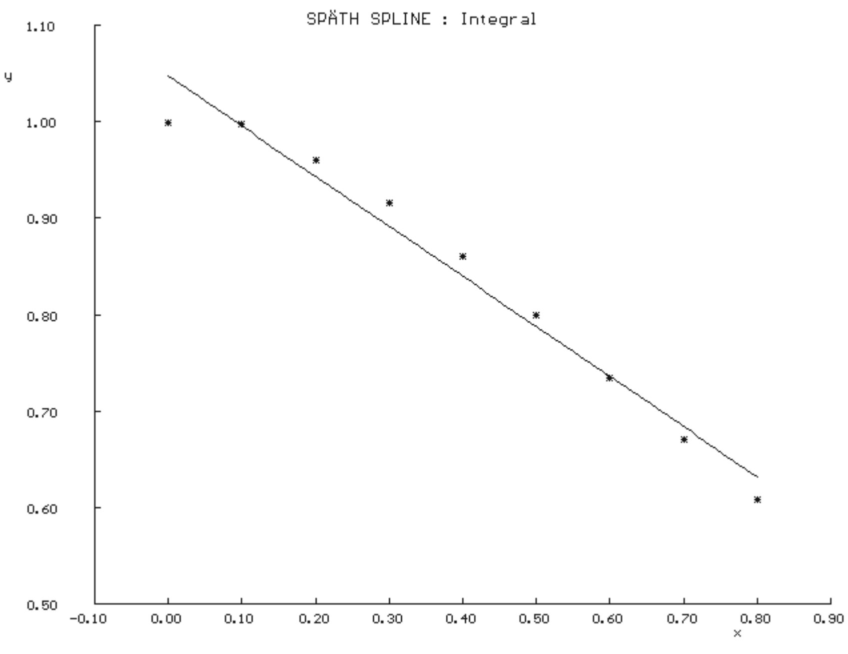
Dosazením do funkce $1/(1 + x^2)$ dostaneme y hodnoty. Soubor dat(../Data/Integral.dat).

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
y	1	0.990099	0.9615385	0.9174312	0.862069	0.8	0.7352941	0.6711409	0.6097561

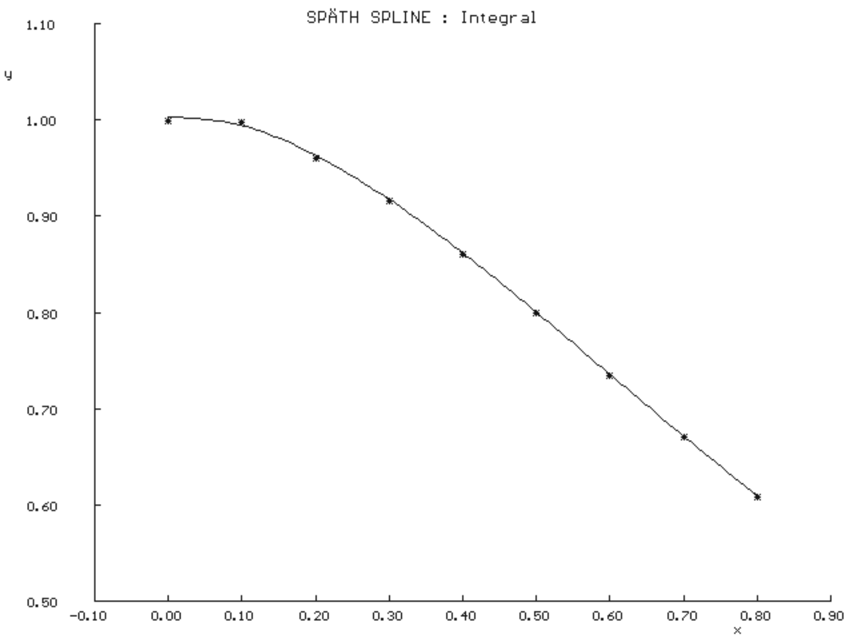
Tabulka 1.1: Vstupní data

Výsledky

Pro funkci použijeme metodu vyhlazení dle Späetha v software *ADSTAT*, modul Vyhlazování. Hodnoty parametru vyhlazení zvolíme: $P_1 = 0.05$, $P_2 = 10000$



Obrázek 1.2: Parameter P je 0.05



Obrázek 1.3: Parameter P je 10000

Pro parametr vyhlazení $P_2 = 10000$ vychází výrazně lepší aproximace.

(2) TABULKA DERIVACI A INTEGRALU:

Bod i	Nezavisle promenna x[i]	Zavisle promenn yexp[i]	Prvni derivace der1[i]	Druha derivace der2[i]	Integral int[i]
1	0.0000E+00	1.0000E+00	-3.8162E-02	0.0000E+00	0.0000E+00
2	1.0000E-01	9.9901E-01	-1.8945E-01	-3.0257E+00	9.9986E-02
3	2.0000E-01	9.6154E-01	-4.0113E-01	-1.2081E+00	1.9803E-01
4	3.0000E-01	9.1743E-01	-5.1029E-01	-9.7511E-01	2.9214E-01
5	4.0000E-01	8.6207E-01	-5.9248E-01	-6.6866E-01	3.8118E-01
6	5.0000E-01	8.0000E-01	-6.3876E-01	-2.5687E-01	4.6432E-01
7	6.0000E-01	7.3529E-01	-6.4678E-01	9.6370E-02	5.4110E-01
8	7.0000E-01	6.7114E-01	-6.2913E-01	2.5659E-01	6.1144E-01
9	8.0000E-01	6.0976E-01	-6.1631E-01	0.0000E+00	6.7548E-01

Hodnota integrálu je plocha pod křivkou v daném intervalu. V tabulce výsledků programu *Adstat* jsou hodnot integrálů. Odtud

$$y(x) = \int_0^{0.8} (\frac{1}{1+x^2})dx = 0.6754$$

je hodnota integrálu zadané funkce.

1.3 Úloha 3

1.3.1 Zadání

Uveďte základní rozdíly mezi spline vyhlazováním a spline regresí.

1.3.2 Řešení

Spline vyhlazování patří do metod numerického vyhlazování pro které je charakteristické, že uzlové body ξ_i jsou totožné se souřadnicemi x vstupních dat $(x_i y_i, i = 1, \ldots, n)$. U tohoto typu splinů se vychází z požadavku přiblížení vyhlazující funkce $g(x)$ co nejvíce k experimentálním datům. Dalším požadavkem je aby vyhlazující funkce byla dostatečně hladká a spojitá při současně co nejmenších hodnotách čtverců odchylek.

Spline regrese se snažíme využít co nejmenšího počtu uzlových bodů. Uzlové body ξ_i leží mimo experimentální body. Výsledná funkce je lineární kombinací úsekových polynomů vymezených uzlovými body. Jde vlastně o regresní úlohu, kdy parametry lokálních funkcí jsou zjišťovány metodou nejmenších čtverců. Hladkost aproximující funkce závisí na třídě funkcí C^m. Podmínku spojitosti ve funkčních hodnotách splňují polynomy třídy m+1. Pro třídu C^0-regrese s modelem lineárního spline, pro třídu C^1 o kvadratický spline a v případě třídy C^2 kubický spline.

1.4 Úloha 4

1.4.1 Zadání

Co můžeme říct o filtru $53H$.

1.4.2 Řešení

Číslicová filtrace umožňuje průběžnou eliminaci šumové složky ve zpracovávaných signálech. Pro použití případů s hrubými chybami v datech se používá filtr $53H$. Kombinuje liché mediány s pohyblivými aritmetickými průměry. J dán výrazem

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

a využívá mediánu pátého stupně.

Literatura

[1] Meloun M., Militký J.: Kompendium statistického zpracování dat, Academia, Praha, 2006

[2] Meloun M., Militký J.: Statistická analýza experimentálních dat, Academia, Praha, 2004