



**Fakulta chemicko technologická
Katedra analytické chemie
licenční studium Management systému jakosti**

Aproximace a vyhlazování křivek

Autor: Ing. Radek Růčka

Přednášející: Prof. Ing. Jiří Militký, Csc

1. SLEDOVÁNÍ ZÁVISLOSTI HODNOTY SFM2 NA BARVIVOSTI ANATASOVÉHO KALCINÁTU (Aproximace)

1.1 ZADÁNÍ

Při zkušební výrobě vývojového druhu TB byla sledována závislost hodnoty SFM2 na barvivosti v rozsahu 1260-1320 bodů. Cílem úlohy je určení vhodného typu spline a zdůvodnění vhodného počtu uzlů

1.2 DATA

Tabulka 1.1: Naměřená data - Závislost SFM2 na barvivosti

Měření	SFM2	Barvivost	Měření	SFM2	Barvivost
1	110	1317	21	150	1293
2	112	1318	22	152	1290
3	114	1319	23	154	1288
4	116	1319	24	156	1285
5	118	1320	25	158	1283
6	120	1320	26	160	1281
7	122	1319	27	162	1278
8	124	1319	28	164	1276
9	126	1318	29	166	1274
10	128	1316	30	168	1273
11	130	1315	31	170	1271
12	132	1313	32	172	1270
13	134	1311	33	174	1269
14	136	1309	34	176	1268
15	138	1307	35	178	1268
16	140	1305	36	180	1268
17	142	1303	37	182	1268
18	144	1300	38	184	1268
19	146	1298	-	-	-
20	148	1295	-	-	-

Program: Adstat 1.25 modul Kalibrace

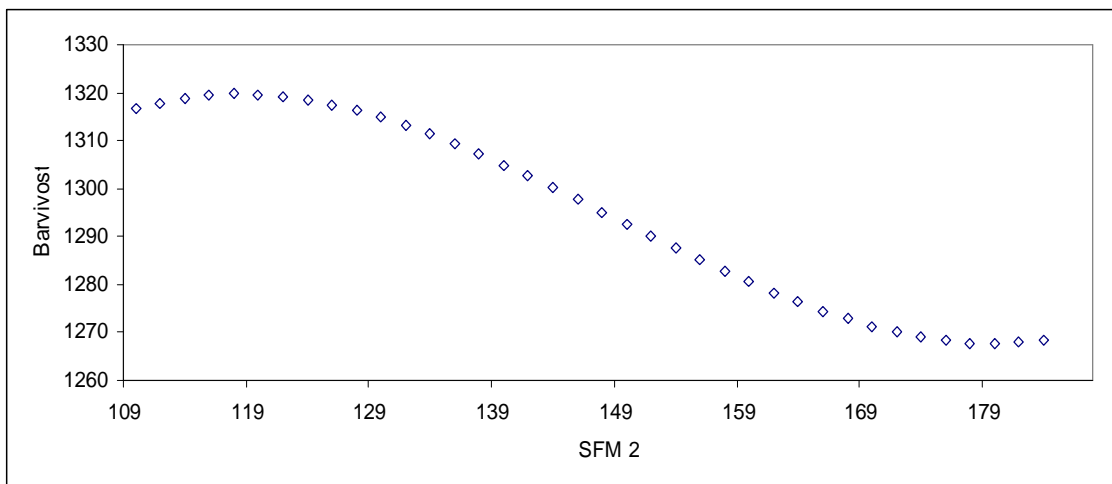
Název souboru s daty: *data_aproximace.txt*

1.3 VYHODNOCENÍ

Řešení vychází z navržení o věření vhodného regresního modelu, lineárního (přímka) nebo nelineárního (křivka). Prvním krokem je rozhodnutí, o který model se jedná, druhým krokem určení uzlových bodů. Kvalita proložení je hodnocena posouzením grafických výstupů i statistickou analýzou reziduí.

Pro řešení jsou používány lineární spline, kvadratický a kubický spline s různými alternativami zadávání uzlových bodů.

Vyhodnocení neobsahuje grafické výstupy, nepodařilo se provést zkopírování grafů z Astatu do jiného prostředí.



Graf 1.1: Závislost SFM2 na barvivosti (MS Excel)

1.3.1 Aproximace pomocí lineární spline funkce

Byla použita lineární funkce spline postupně s jedním až čtyřmi uzlovými body (konstantní uzlové intervaly). K hodnocení kvality proložení byla použita hodnota odhadu směrodatné odchylky reziduí $s(e)$ a reziduálního součtu čtverců RSC.

Tabulka 1.2: Hodnoty RSC a $s(e)$ pro lineární spline funkci

Počet uzlových bodů	1	2	3	4
$s(e)$	3.83550E+00	1.73150E+00	9.26430E-01	5.56230E-01
RSC	5.14900E+02	1.01940E+02	2.83230E+01	9.90000E+00

Nejlépeších výsledků bylo dosaženo při použití 4 a 5 uzlových bodů. Vzhledem k nevýrazným rozdílům u parametrů $s(e)$ u obou případů je výhodnější brát za výsledek s použitím menšího počtu uzlů, tedy tří. Grafický průběh ukazuje na problematické oblasti obou konců křivek, lineární spline funkce není vhodná pro tuto závislost.

1.3.2 Aproximace pomocí kvadratické spline funkce

Byla použita lineární funkce spline postupně s jedním až čtyřmi uzlovými body (konstantní uzlové intervaly). K hodnocení kvality proložení byla použita hodnota odhadu směrodatné odchylky reziduí $s(e)$ a reziduálního součtu čtverců RSC.

Tabulka 1.3: Hodnoty RSC a $s(e)$ pro kvadratickou spline funkci

Počet uzlových bodů	1	2	3	4
$s(e)$	7.55680E-01	3.26600E-01	3.03980E-01	3.26770E-01
RSC	1.94160E+01	3.52010E+00	2.95690E+00	3.31020E+00

Nejlepších výsledků bylo dosaženo při použití 3 uzlových bodů.

1.3.3 Aproximace pomocí kubické spline funkce

Byla použita lineární funkce spline postupně s jedním až čtyřmi uzlovými body (konstantní uzlové intervaly). K hodnocení kvality proložení byla použita hodnota odhadu směrodatné odchylky reziduí $s(e)$ a reziduálního součtu čtverců RSC.

Tabulka 1.4: Hodnoty RSC a $s(e)$ pro kubickou spline funkci

Počet uzlových bodů	1	2	3	4
$s(e)$	3.19570E-01	3.23640E-01	3.32355E-01	3.31020E-01
RSC	3.37000E+00	3.35170E+00	3.24530E+00	2.72480E+00

Nejlepších výsledků bylo dosaženo při použití 4 uzlových bodů, vzhledem k tomu, že nedošlo k výraznému zlepšení těsnosti proložení jeví se jako výhodnější použití 3 uzlových bodů.

1.4 SOUHRN A ZÁVĚR

K dobrému proložení došlo při použití kvadratické a kubické spline funkce pro 3 a 4 uzlové body. Na základě porovnání dosažených hodnot $s(e)$, RSC a po posouzení grafického zobrazení proložení byla jako nejlepší určena kubická spline funkce se 3 uzlovými body.

2. STANOVENÍ OBSAHU OXIDU HLINITÉHO V SÍRANU HLINITÉM PRO POVRCHOVOU ÚPRAVU TB (Interpolace)

2.1 ZADÁNÍ

Při povrchové úpravě titanové běloby se jako jedna surovin používá kapalný síran hlinitý. Proměřením byla zjištěna řada hustot a jim odpovídajících koncentrací Al_2O_3 . Pomocí interpolace odhadněte koncentraci Al_2O_3 pro roztok o hustotě 1230 g/l.

2.2 DATA

Tabulka 2.1: Naměřená data

Měření	Hustota [g/l]	Obsah Al_2O_3 [g/l]	Měření	Hustota [g/l]	Obsah Al_2O_3 [g/l]
1	1150	50,0	3	1250	83,9
2	1180	60,6	4	1280	95,1
3	1200	71,4	5	1320	110,9

Program: QC Expert 2.9 modul Kalibrace
MS Excel

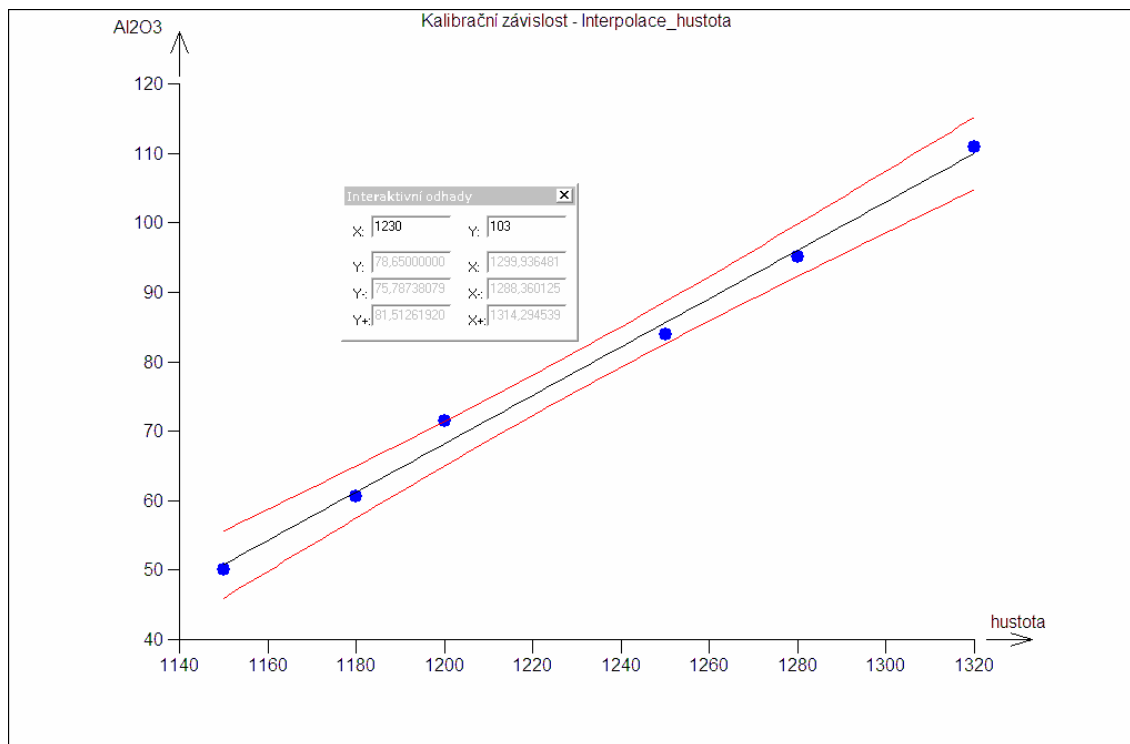
Název souboru s daty: *data_interpolace.txt*

2.3 VYHODNOCENÍ

2.3.1 Řešení pomocí programu QC Expert

Řešení úlohy je možné provést kalibrací v programu QC Expert. Jako vyhovující byl vyhodnocen lineární model.

Pomocí interaktivního odhadu byl pro hustotu 1230 g/l stanoven obsah Al_2O_3 78,65 g/l.



Graf 2.1: Kalibrační závislost obsahu Al_2O_3 a hustoty

2.3.2 Řešení pomocí tabulkového editoru

U menšího počtu dat je možné provést výpočet pomocí Newtonova interpolačního polynomu vytvářením postupných diferencí.

1150	50,0						
1180	60,6	0,35					
1200	71,4	0,54	0,02				
1250	83,9	0,25	-0,02	-0,000407			
1280	95,1	0,37	0,01	0,000344	5,78218E-06		
1320	110,9	0,40	0,00	-7,96E-05	-3,02687E-06	-5,18179E-08	
1230,0	78,6						

1150	50						
1180	60,6	$=(B3-B2)/(A3-A2)$					
1200	71,44	$=(B4-B3)/(A4-A3)$	$=(C4-C3)/(B4-B3)$				
1250	83,9	$=(B5-B4)/(A5-A4)$	$=(C5-C4)/(B5-B4)$	$=(D5-D4)/(A5-A2)$			
1280	95	$=(B6-B5)/(A6-A5)$	$=(C6-C5)/(B6-B5)$	$=(D6-D5)/(A6-A3)$	$=(E6-E5)/(A6-A2)$		
1320	110,9	$=(B7-B6)/(A7-A6)$	$=(C7-C6)/(B7-B6)$	$=(D7-D6)/(A7-A4)$	$=(E7-E6)/(A7-A3)$	$=(F7-F6)/(A7-A2)$	
1230,0	$=B2+C3*(A9-A2)+D4*(A9-A2)*(A9-A3)+E5*(A9-A2)*(A9-A3)*(A9-A4)+F6*(A9-A2)*(A9-A3)*(A9-A4)*(A9-A5)+G7*(A9-A2)*(A9-A3)*(A9-A4)*(A9-A5)*(A9-A6)$						

2.4 SOUHRN A ZÁVĚR

Oba způsoby výpočtu vedly ke stejnému výsledku. Pro hustotu síranu hlinitého 1230 g/l byl stanoven obsah Al_2O_3 78,65 g/l.

3. SLEDOVÁNÍ REŽIMU KALCINAČNÍ PECE (Numerické vyhlazování)

3.1 ZADÁNÍ

Jedním z rozhodujících parametrů charakterizující titanovou bělobu rutilového typu je obsah rutilu. Ten je jedním z rozhodujících parametrů při řízení kalcinační pece. Vzhlede k tomu, že je ovlivňován řadou faktorů, dochází k jeho výraznějšímu kolísání v čase.

Následující data představují obsah rutilu změřený ve vzorcích odebraných z kalcinační pece (2. otvor) v průběhu relativně rovnoměrného kalcinačního režimu. Přesto došlo k výraznějšímu kolísání tohoto parametru.

Cílem úlohy je nalezení vhodného vyhlazení naměřených hodnot obsahu rutilu.

3.2 DATA

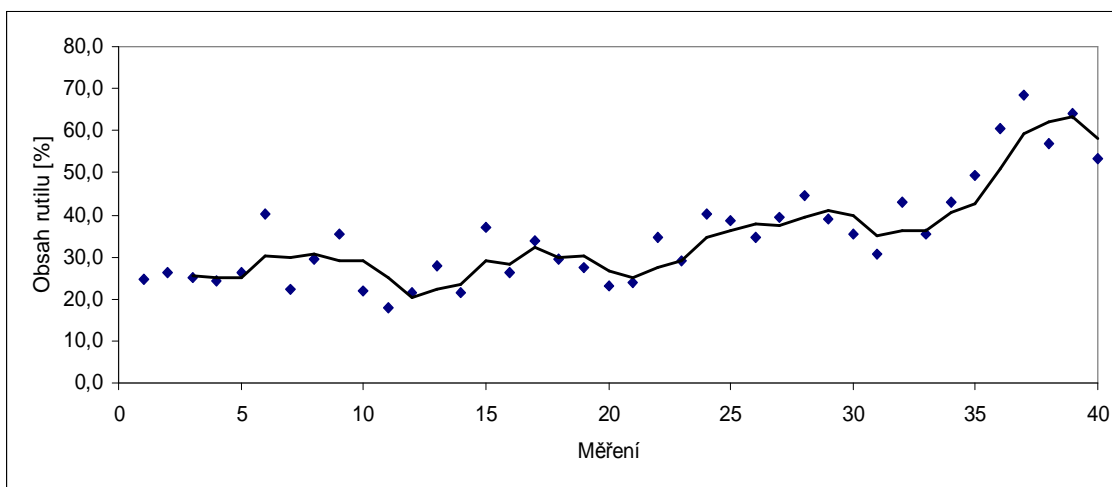
Tabulka 3.1: Naměřená data-Obsah rutilu na 2. otvoru KP

Měření	Obsah rutilu [%]	Měření	Obsah rutilu [%]	Měření	Obsah rutilu [%]	Měření	Obsah rutilu [%]
1	24,70	11	18,10	21	24,00	31	30,50
2	26,40	12	21,30	22	34,60	32	43,10
3	25,10	13	28,00	23	29,10	33	35,50
4	24,30	14	21,60	24	40,20	34	43,10
5	26,30	15	37,10	25	38,80	35	49,40
6	40,30	16	26,20	26	34,50	36	60,50
7	22,40	17	33,90	27	39,40	37	68,40
8	29,40	18	29,60	28	44,70	38	56,90
9	35,50	19	27,60	29	39,00	39	64,10
10	22,00	20	23,20	30	35,60	40	53,40

Program: Astat 1.25 modul Vyhlazování

Název souboru s daty: *data_vyhlazeni.txt*

3.3. VYHODNOCENÍ



Graf 3.1: Průběh obsahu rutilu (MS Excel)(klouzavý průměr-3 periody)

Vyhodnocení neobsahuje grafické výstupy, nepodařilo se provést zkopírování grafů z Adstatu do jiného prostředí.

K řešení této úlohy byl použit spline vyhlazování algoritmem Reinsch. Nejlepšího poměru mezi vyhlazením křivky a jejím přiblížením experimentálními body je dosaženo při volbě vhodného parametru „S“.

Při vysoké hodnotě „S“ dochází k přiblížení vyhlazující funkce $g(x)$ k regresní přímce.

Pro nalezení vhodného parametru „S“ je výhodné použít reziduální rozptyly, průměr absolutních reziduí.

Důležitým je rovněž posouzení grafických výstupů, zejména v souvislosti váhy proložení a propojení experimentálních bodů.

Tabulka 3.2: Určení optimálního stupně vyhlazení

S	Průměr reziduí	Průměr absolutních reziduí	Reziduální rozptyl	Vizuální hodnocení křivky
10	-1,78E-16	4,02E-01	2,50E-01	přílišné kopírování bodů
35	-3,55E-16	7,43E-01	9,35E-01	lepší proložení
41	1,78E-16	8,02E-01	1,01E+00	dobré proložení
50	0,00E+00	8,83E-01	1,12E+00	dobré proložení

3.4 SOUHRN A ZÁVĚR

U provozně technologických dat z kalcinace titanové běloby bylo provedeno vyhlazení pomocí Reinschova algoritmu. Jako optimální a vyhovující bylo zvoleno vyhlazení s parametrem $S=41,0E+00$.