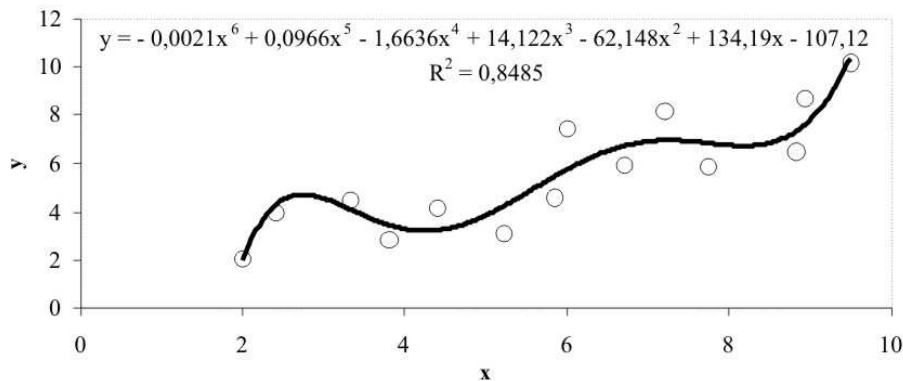
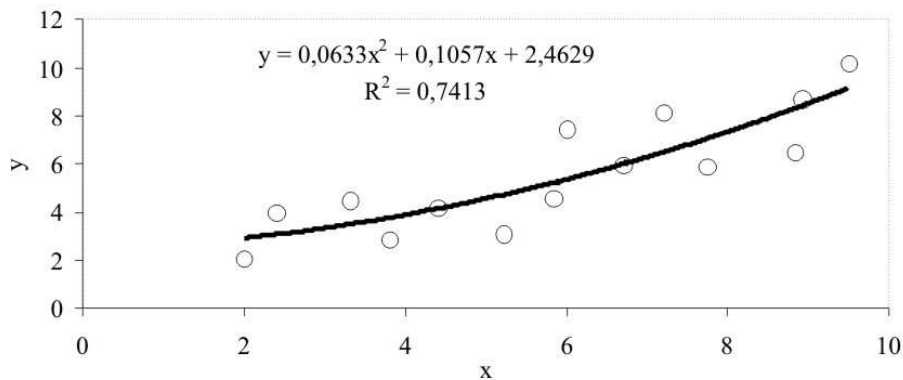
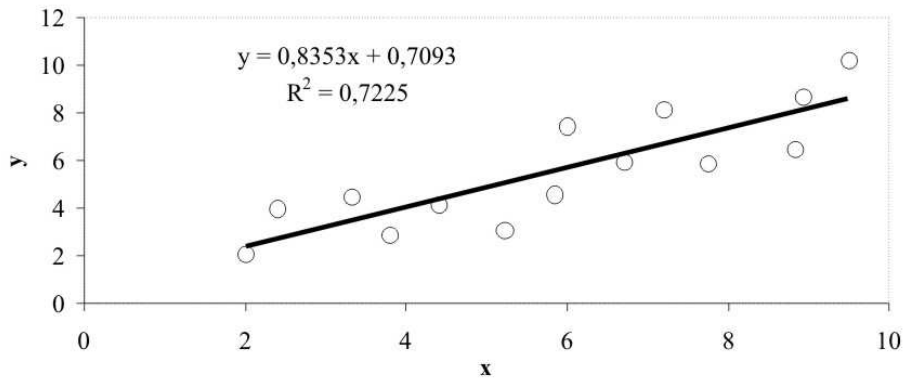


URČENÍ FUNKČNÍ ZÁVISLOSTI

REGRESE DAT RŮZNÝMI FUNKCEMI

Volba teoretické křivky: může mít různé tvary a být různých řádů (lineární a nelineární regrese)



Volba řádu polynomu:

Funkční závislost by měla zohlednit/popsat obecné trendy

Nemá smysl brát do úvahy náhodné fluktuace v hodnotách proměnných

Buď lineární závislost, nebo exponenciální, popř. polynomiální nízkého řádu (2).

PRINCIP REGRESE DAT

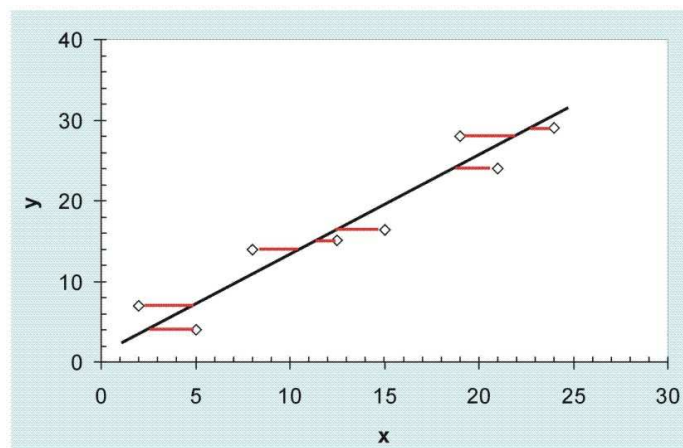
Metoda nejmenších čtverců

Data prokládáme teoretickou funkcí následovně:

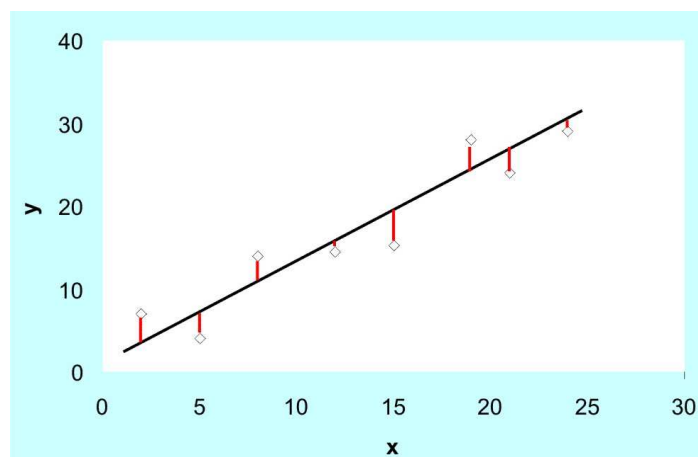
- v každém bodě x hledáme rozdíl (odchylku) mezi y -souřadnicí experimentálního bodu a y -souřadnicí bodu, ležícího na teoretické křivce.
- odchylky umocníme na druhou (aby předešli eliminaci stejných odchylek s opačným znaménkem) a „čtverce odchylek“ sečteme
- měníme (hledáme) parametry teoretické křivky (směrnice, koeficienty) tak, aby byl součet minimální

Odchylky od teoretické závislosti

– ve směru osy x :



– ve směru osy y



- ortogonální odchylky (kolmé na funkční závislost)

Vyjádření metody nejmenších čtverců v zápisu:

$$\sum_i [y(x_i) - y_i]^2 = \min$$

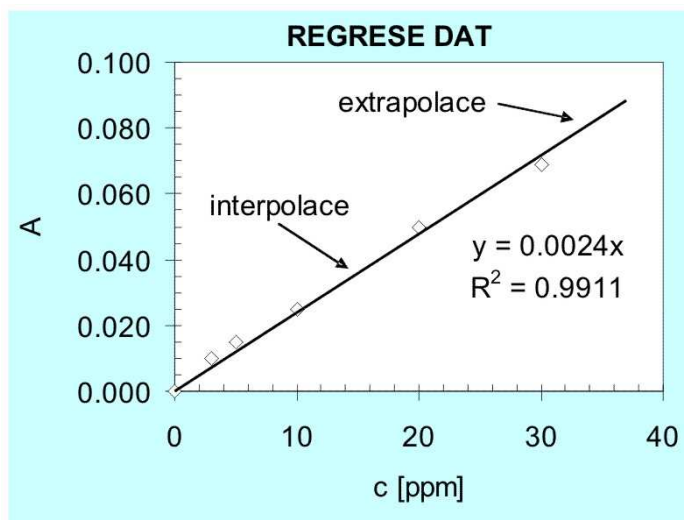
minimum lze hledat např. pomocí MS EXCEL. Funkce: **solver, řešitel**

PŘÍKLADY REGRESE DAT

Kalibrační křivka – lineární závislost

Standardy:

c [ppm]	A
0	0,000
3	0,010
5	0,015
10	0,025
20	0,050
30	0,069



Kalibrační křivka - lineární závislost, $y = 0,0024x$

Nalezení funkční závislosti: MS EXCEL: směrnice trendu (trendline)

Naměřená data:

výpočet c podle nalezené funkční závislosti:

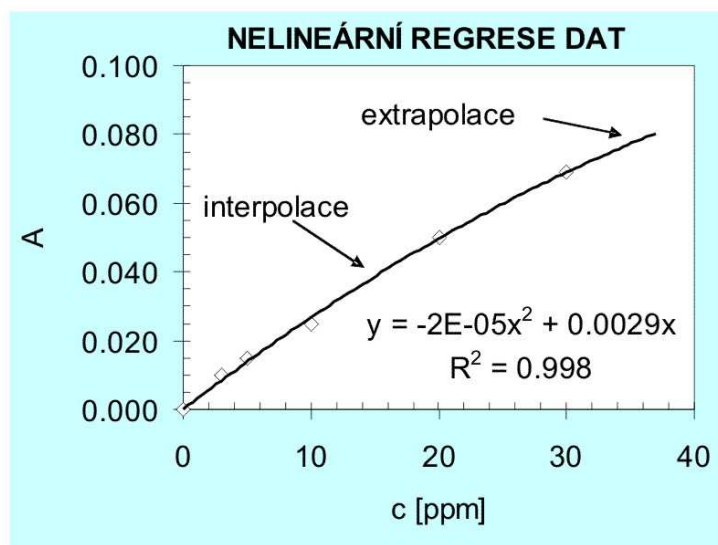
$$c = A / 0,0024$$

A	c [ppm]
0,038	15,8
0,042	17,5
0,054	22,5
0,019	7,9
0,022	9,2

Kalibrační křivka - nelineární regrese

Standardy:

c [ppm]	A
0	0,000
3	0,010
5	0,015
10	0,025
20	0,050
30	0,069



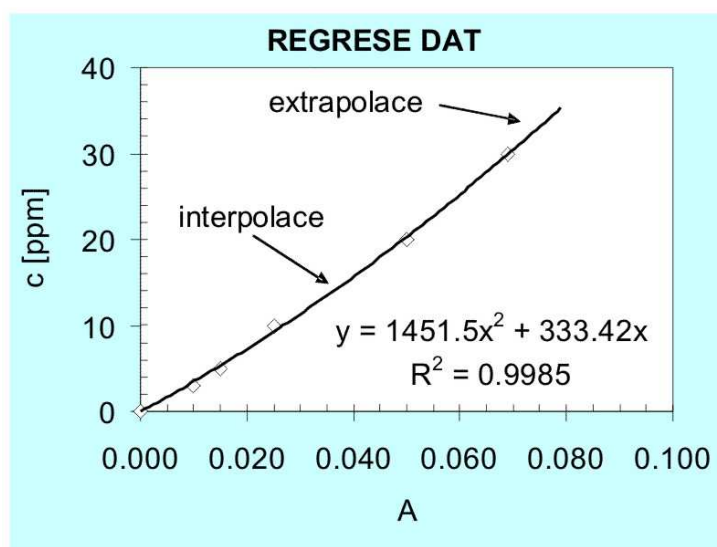
Nalezená závislost z regrese dat:

$$A = -2 \cdot 10^{-5} c^2 + 0,0029 c$$

Komplikace: z rovnice musíme vyjádřit c! U některých funkcí by to mohl být problém.

Z praktických důvodů pohodlnější postup při záměně proměnných:

c [ppm]	A
0	0,000
3	0,010
5	0,015
10	0,025
20	0,050
30	0,069



Nalezená závislost z regrese dat:

$$c = 1551,5 A^2 + 333,42 A$$

Jednoduchý výpočet:

A	c [ppm]
0,038	14,8
0,042	16,6
0,054	22,2
0,019	6,9
0,022	8,0

Kinetika rozpuštění minerálů: Regrese dat modelovou funkcí

Regresní funkce odvozená z teoretického modelu:

$$[B_T] = \frac{k_1}{k_2} \left(1 - e^{-\frac{k_2 A}{V} t} \right) + [B_0] e^{-\frac{k_2 A}{V} t}$$

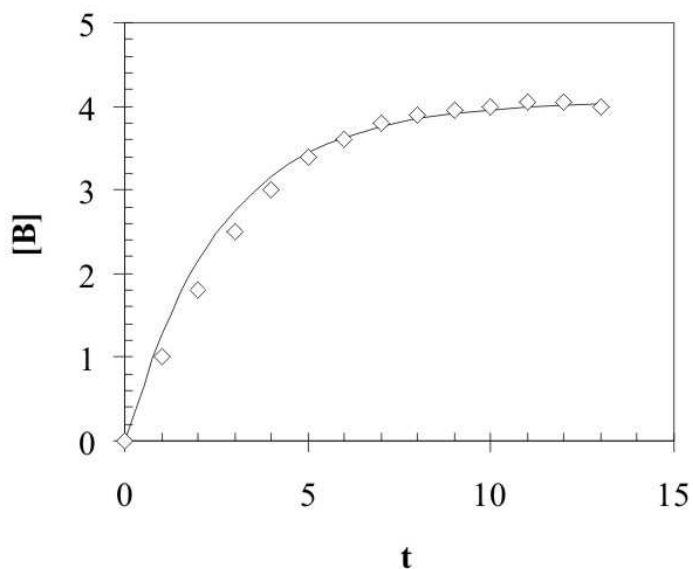
Hledané parametry:

$k_1 =$	0,1533
$k_2 =$	0,0378

konstanty:

$A =$	5
$V =$	0,5

t	[B]	[B _T]	Δ ²
0	0	0	0
1	1	1,276657	0,076539
2	1,8	2,151037	0,123227
3	2,5	2,749899	0,06245
4	3	3,160059	0,025619
5	3,4	3,440977	0,001679
6	3,6	3,633377	0,001114
7	3,8	3,765152	0,001214
8	3,9	3,855404	0,001989
9	3,95	3,917218	0,001075
10	4	3,959554	0,001636
11	4,05	3,98855	0,003776
12	4,05	4,008409	0,00173
13	4	4,022011	0,000484
SUMA 1:			0,302532



Vícenásobná regrese

$k_1 =$	0,153346
$k_2 =$	0,037848
$A =$	5
$V =$	0,5

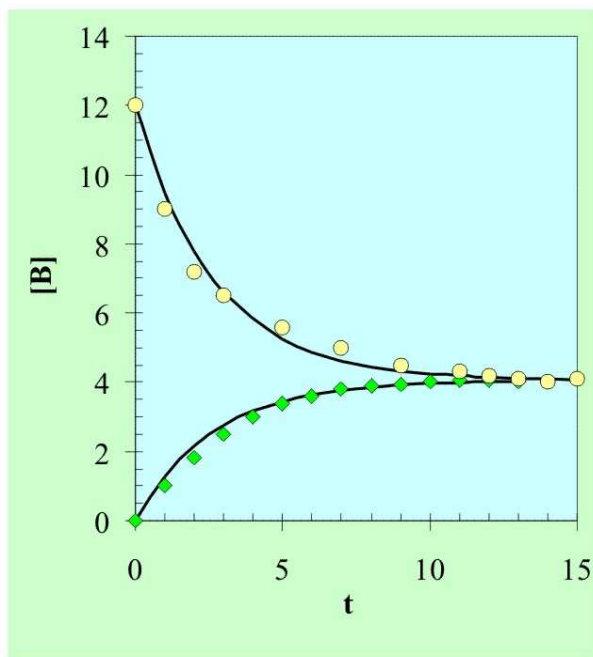
$$[B_T] = \frac{k_1}{k_2} \left(1 - e^{-\frac{k_2 A}{V} t} \right) + [B_0] e^{-\frac{k_2 A}{V} t}$$

Data a teoretické hodnoty - rozpouštění

t	[B]	[B _T]	Δ ²
0	0	0	0
1	1	1,276657	0,076539
2	1,8	2,151037	0,123227
3	2,5	2,749899	0,06245
4	3	3,160059	0,025619
5	3,4	3,440977	0,001679
6	3,6	3,633377	0,001114
7	3,8	3,765152	0,001214
8	3,9	3,855404	0,001989
9	3,95	3,917218	0,001075
10	4	3,959554	0,001636
11	4,05	3,98855	0,003776
12	4,05	4,008409	0,00173
13	4	4,022011	0,000484
SUMA 1:			0,302532

Data a teoretické hodnoty - krystal. růst

t	[B]	[B _T]	Δ ²
0	12	12	0
1	9	9,495441	0,245462
2	7,2	7,780072	0,336483
3	6,5	6,605217	0,011071
5	5,6	5,249454	0,122883
7	5	4,613483	0,149395
9	4,5	4,315159	0,034166
11	4,3	4,175219	0,01557
12	4,2	4,136258	0,004063
13	4,1	4,109575	9,17E-05
14	4	4,091299	0,008335
15	4,1	4,078782	0,00045
SUMA:			0,92797
SUMSUM:			1,230502



Proložení dat funkční závislostí