

Uitwerkingen

In de uitgewerkte voorbeelden worden vanwege de leesbaarheid afgeronde tussenresultaten gepresenteerd. De eindresultaten zijn echter altijd berekend zonder tussentijds afronden.

Hoofdstuk 3

Opgave 3.1

x	y	i	SG 2e en 3e grd		SG 2e grd		SG 2e en 3e grd	
			0e afgel	Berekening	1e afgel	Berekening	2e afgel	Berekening
306	143	-2	-3	-429	-2	-286	2	286
307	189	-1	12	2268	-1	-189	-1	-189
308	195	0	17	3315	0	0	-2	-390
309	180	1	12	2160	1	180	-1	-180
310	147	2	-3	-441	2	294	2	294
	Norm		35		10		7	
	Som			6873		-1		-179
			$= b_{20} = b_{30}$	196,371	$= b_{21}$	-0,100	$= 2 \cdot b_{22} = 2 \cdot b_{32}$	-25,571

De gefilterde waarde voor het middelste punt met $x = 308$ en $i = 0$ wordt met behulp van (3.2) als volgt berekend:

$$y_{308}^* = \frac{-3 \cdot 143 + 12 \cdot 189 + 17 \cdot 195 + 12 \cdot 180 - 3 \cdot 147}{35} = 196,371$$

Elk van de coëfficiënten van de tweedegraads polynoom kan met een SG-filter worden berekend zoals in bovenstaande tabel is aangegeven. Daarvoor moeten 5-punts SG-filters worden gebruikt uit tabel 6 (nulde afgeleide), tabel 7 (eerste afgeleide) en tabel 8 (tweede afgeleide) in bijlage 1 van een tweedegraads polynoom. Dit levert de gefitte waarden voor het middelste punt met $i = 0$ voor de nulde, eerste en tweede afgeleide. Deze gefitte waarden zijn gelijk aan respectievelijk de b_0 , b_1 en $2b_2$. De parameter b_2 is gelijk aan de helft van de waarde van de tweede afgeleide. De vergelijking van de tweedegraads polynoom is dus: $y = 196,371 - 0,100 \cdot i - 12,786 \cdot i^2$

Ter controle: De regressie voor het tweedegraads model, uitgevoerd met i en y in Excel, levert het volgende resultaat:

Gegevens voor de regressie	
Meervoudige	
correlatiecoëfficiënt R	0,9888
R-kwadraat	0,9778
Aangepaste kleinste	
kwadraat	0,9555
Standaardfout	5,1018
Waarnemingen	5

Variantieanalyse

	Vrijheidsgraden	Kwadratensom	Gemiddelde kwadraten	F	Significantie F
Regressie	2	2288,7429	1144,3714	43,9660	0,0222
Storing	2	52,0571	26,0286		
Totaal	4	2340,8000			

	Coëfficiënten	Standaardfout	T-statistische gegevens	P-waarde	Laagste 95%	Hoogste 95%
Snijpunt	196,3714	3,5556	55,2284	0,0003	181,0728	211,6700
x	-0,1000	1,6133	-0,0620	0,9562	-7,0416	6,8416
x ²	-12,7857	1,3635	-9,3770	0,0112	-18,6525	-6,9190

Berekeningen piekoppervlak

nr	y	optellen	trapeziumregel	Simpsonregel
1	11	11	5,5	11
2	28	28	28	112
3	55	55	55	110
4	96	96	96	384
5	143	143	143	286
6	189	189	189	756
7	195	195	195	390
8	180	180	180	720
9	147	147	147	294
10	95	95	95	380
11	54	54	54	108
12	26	26	26	104
13	11	11	5,5	11
som		1230	1219	1222
n of n-1		n=13	n-1=12	n-1=12
yb		8	8	8
correctie yb		104	96	96
piekoppervlak		1126	1123	1126

In de laatste drie kolommen zijn de juiste vermenigvuldigingsfactoren voor de signalen uit de vergelijkingen (3.8), (3.13) en (3.18) al verwerkt.

Berekening van het piekoppervlak met signalen optellen

Met vergelijking (3.8)

$$O = \sum_{i=1}^{i=n} y_i - n y_b = 1230 - 13 \cdot 8 = 1126$$

Berekening van het piekoppervlak met de trapeziumregel

Met vergelijking (3.13)

$$O = \frac{1}{2}(y_1 + y_n) + \sum_{i=2}^{i=n-1} y_i - (n-1)y_b$$

$$O = \frac{1}{2} \cdot (11 + 11) + 28 + 55 + 96 + 143 + 189 + 195 + 180 + 147 + 95 + 54 + 26 - 12 \cdot 8 = 1123$$

Berekening van het piekoppervlak met de Simpsonregel

Met vergelijking (3.18)

$$O = \frac{1}{3} \left(y_1 + y_n + 4 \sum_{i=2}^{i=n-1} y_{i=even} + 2 \sum_{i=3}^{i=n-1} y_{i=oneven} \right) - (n-1)y_b$$

$$O = \frac{1}{3} \{ 11 + 11 + 4(28 + 96 + 189 + 180 + 95 + 26) + 2(55 + 143 + 195 + 147 + 54) \} - 12 \cdot 8 = 1126$$

Antwoord 3.2

De SG coëfficiënten voor de eerste afgeleide van een tweedegraadspolynoom kunnen worden berekend met de volgende formule uit tabel 3.3:

$$c_i = \frac{3i}{(2m+1)(m+1)m}$$

Voor een 5-punts SG filter is $m = 2$ en $i = -2, -1, 0, +1, +2$.

$$c_i = \frac{3i}{(2 \cdot 2 + 1)(2 + 1) \cdot 2} = \frac{3i}{5 \cdot 3 \cdot 2} = \frac{3i}{30} = \frac{i}{10}$$

De normeringsconstante is gelijk aan de noemer: Norm = 10.

De coëfficiënten zijn -2, -1, 0, +1, +2.

Zie ook de gegevens voor het SG-filter in tabel 7 van bijlage 1.

Antwoord 3.3

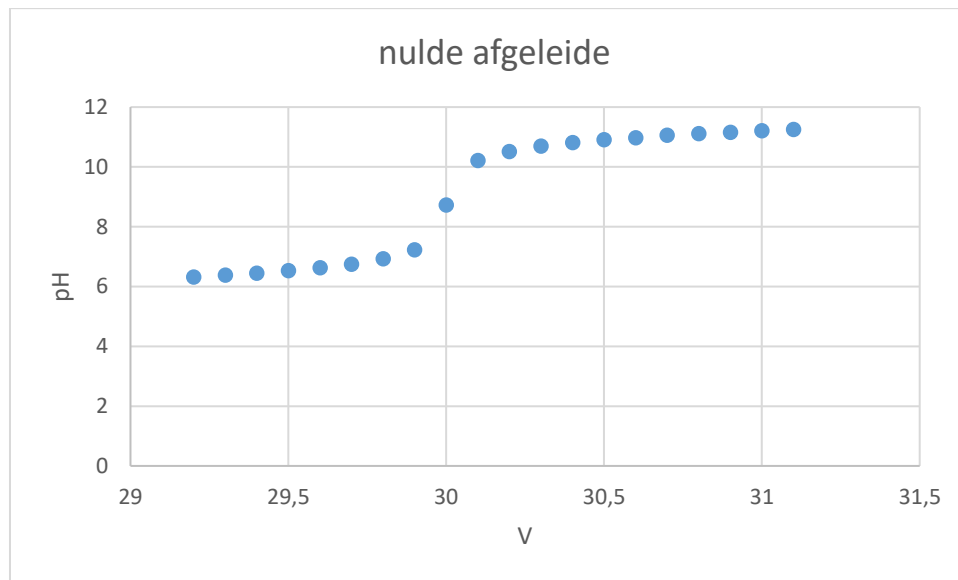
Berekening van de eerste en tweede afgeleide met een 5-punts SG-filter voor een tweedegraadspolynoom. Gebruik hiervoor de gegevens uit de tabellen 7 en 8 uit bijlage 1. Bij een 5-punts SG-filter kunnen de eerste en laatste 2 punten in de dataset niet worden gefit.

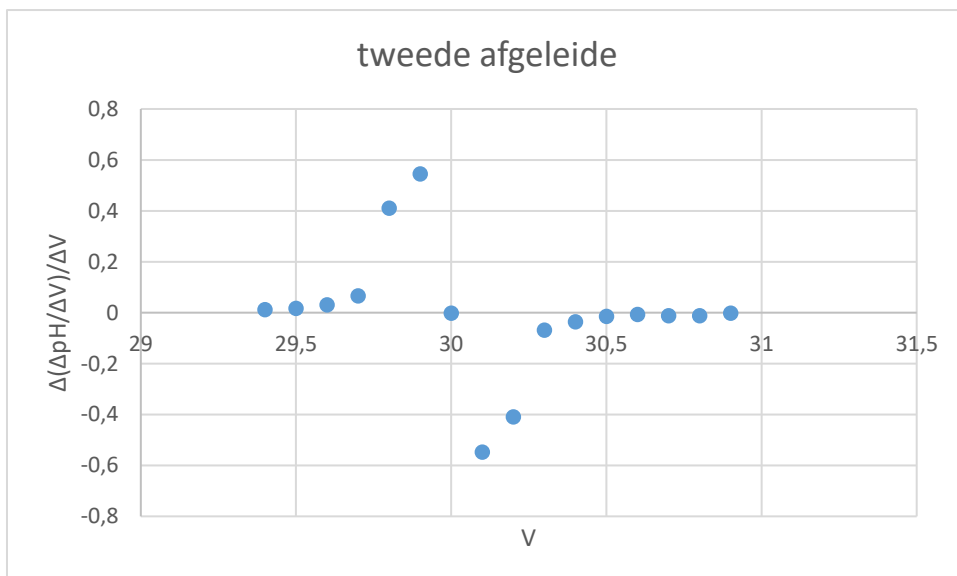
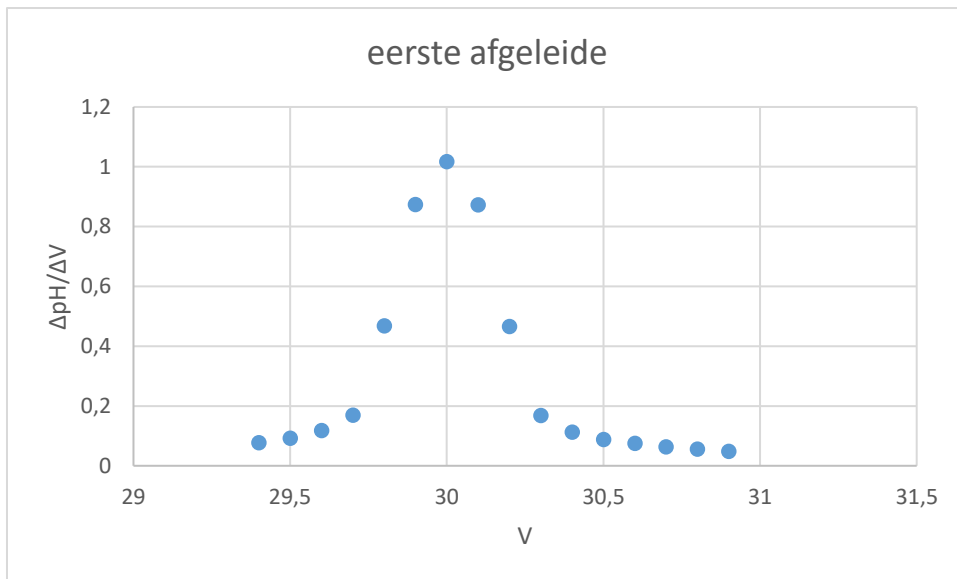
		SG 1e afgel 2egr	SG 2e afgel 2e gr
		-2	2
		-1	-1
		0	-2
		1	-1
		2	2
norm		10	7
V (mL)	pH		
29,2	6,32		
29,3	6,38		
29,4	6,45	0,077	0,013
29,5	6,53	0,092	0,017
29,6	6,63	0,118	0,031
29,7	6,75	0,170	0,066
29,8	6,93	0,468	0,411
29,9	7,23	0,874	0,546
30,0	8,73	1,017	-0,001
30,1	10,22	0,873	-0,547
30,2	10,52	0,466	-0,409
30,3	10,70	0,168	-0,069
30,4	10,82	0,113	-0,036
30,5	10,91	0,088	-0,014
30,6	10,98	0,075	-0,007
30,7	11,06	0,064	-0,011
30,8	11,12	0,056	-0,011
30,9	11,16	0,049	-0,001
31,0	11,21		
31,1	11,26		

Het equivalentiepunt komt overeen met het maximum van de eerste afgeleide: $V = 30,0 \text{ mL}$.

De berekeningen voor SG-filtering kunnen in Excel eenvoudig met celformules worden uitgevoerd zoals hierna is afgebeeld.

	A	B	C	D	E	F
1	J.P.M. Andries, Chen					
2						
3	Opgave 3.3					
4						
5				SG 1e afgel 2e grd		SG 2e afgel 2e grd
6						
7				-2		2
8				-1		-1
9				0		-2
10				1		-1
11				2		2
12						
13			norm	10		7
14						
15	V (mL)	pH				
16	29,2	6,32				
17	29,3	6,38				
18	29,4	6,45		$=\frac{(+D\$7*B16+D\$8*B17+D\$9*B18+D\$10*B19+D\$11*B20)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B16+F\$8*B17+F\$9*B18+F\$10*B19+F\$11*B20)}{\$F\$13}$
19	29,5	6,53		$=\frac{(+D\$7*B17+D\$8*B18+D\$9*B19+D\$10*B20+D\$11*B21)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B17+F\$8*B18+F\$9*B19+F\$10*B20+F\$11*B21)}{\$F\$13}$
20	29,6	6,63		$=\frac{(+D\$7*B18+D\$8*B19+D\$9*B20+D\$10*B21+D\$11*B22)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B18+F\$8*B19+F\$9*B20+F\$10*B21+F\$11*B22)}{\$F\$13}$
21	29,7	6,75		$=\frac{(+D\$7*B19+D\$8*B20+D\$9*B21+D\$10*B22+D\$11*B23)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B19+F\$8*B20+F\$9*B21+F\$10*B22+F\$11*B23)}{\$F\$13}$
22	29,8	6,93		$=\frac{(+D\$7*B20+D\$8*B21+D\$9*B22+D\$10*B23+D\$11*B24)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B20+F\$8*B21+F\$9*B22+F\$10*B23+F\$11*B24)}{\$F\$13}$
23	29,9	7,23		$=\frac{(+D\$7*B21+D\$8*B22+D\$9*B23+D\$10*B24+D\$11*B25)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B21+F\$8*B22+F\$9*B23+F\$10*B24+F\$11*B25)}{\$F\$13}$
24	30	8,73		$=\frac{(+D\$7*B22+D\$8*B23+D\$9*B24+D\$10*B25+D\$11*B26)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B22+F\$8*B23+F\$9*B24+F\$10*B25+F\$11*B26)}{\$F\$13}$
25	30,1	10,22		$=\frac{(+D\$7*B23+D\$8*B24+D\$9*B25+D\$10*B26+D\$11*B27)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B23+F\$8*B24+F\$9*B25+F\$10*B26+F\$11*B27)}{\$F\$13}$
26	30,2	10,52		$=\frac{(+D\$7*B24+D\$8*B25+D\$9*B26+D\$10*B27+D\$11*B28)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B24+F\$8*B25+F\$9*B26+F\$10*B27+F\$11*B28)}{\$F\$13}$
27	30,3	10,7		$=\frac{(+D\$7*B25+D\$8*B26+D\$9*B27+D\$10*B28+D\$11*B29)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B25+F\$8*B26+F\$9*B27+F\$10*B28+F\$11*B29)}{\$F\$13}$
28	30,4	10,82		$=\frac{(+D\$7*B26+D\$8*B27+D\$9*B28+D\$10*B29+D\$11*B30)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B26+F\$8*B27+F\$9*B28+F\$10*B29+F\$11*B30)}{\$F\$13}$
29	30,5	10,91		$=\frac{(+D\$7*B27+D\$8*B28+D\$9*B29+D\$10*B30+D\$11*B31)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B27+F\$8*B28+F\$9*B29+F\$10*B30+F\$11*B31)}{\$F\$13}$
30	30,6	10,98		$=\frac{(+D\$7*B28+D\$8*B29+D\$9*B30+D\$10*B31+D\$11*B32)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B28+F\$8*B29+F\$9*B30+F\$10*B31+F\$11*B32)}{\$F\$13}$
31	30,7	11,06		$=\frac{(+D\$7*B29+D\$8*B30+D\$9*B31+D\$10*B32+D\$11*B33)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B29+F\$8*B30+F\$9*B31+F\$10*B32+F\$11*B33)}{\$F\$13}$
32	30,8	11,12		$=\frac{(+D\$7*B30+D\$8*B31+D\$9*B32+D\$10*B33+D\$11*B34)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B30+F\$8*B31+F\$9*B32+F\$10*B33+F\$11*B34)}{\$F\$13}$
33	30,9	11,16		$=\frac{(+D\$7*B31+D\$8*B32+D\$9*B33+D\$10*B34+D\$11*B35)}{\$D\$13}$		$=\frac{(+F\$7*B31+F\$8*B32+F\$9*B33+F\$10*B34+F\$11*B35)}{\$F\$13}$
34	31	11,21				
35	31,1	11,26				





Antwoord 3.4

Correctie op antwoorden:

'A₅₃' moet zijn 'A₅₂'

Savitzky-Golay-filters zijn identiek als geldt $A_{n,a} = A_{(n+1),a}$ én bovendien geldt dat n én a beide even of oneven zijn. Ook volgt hier uit dat als (i) n even is en a oneven, of als (ii) n oneven en a even is, dat geval geldt $A_{n,a} = A_{(n-1),a}$.

A₃₃: n en a beide oneven, daarom is $A_{33} = A_{(3+1)3} = A_{43}$.

Dat betekent dat SG-filters voor de derde afgeleide van een derde- en vierdegraads polynoom identiek zijn.

A₄₂: n en a beide even, daarom is $A_{42} = A_{(4+1)2} = A_{52}$.

Dat betekent dat SG-filters voor de tweede afgeleide van een vierde- en vijfdegraads polynoom identiek zijn.

A_{32} : n oneven en a even. In dat geval geldt $A_{n,a} = A_{(n-1),a}$ en is $A_{32} = A_{(3-1)2} = A_{22}$.
Dat betekent dat SG-filters voor de tweede afgeleide van een tweede- en derdegraads polynoom identiek zijn, zie ook tabel 3.3 en tabel 8 in bijlage 1.

A_{41} : n even en a oneven. In dat geval geldt $A_{n,a} = A_{(n-1),a}$ en is $A_{41} = A_{(4-1)1} = A_{31}$.
Dat betekent dat SG-filters voor de eerste afgeleide van een derde- en vierdegraads polynoom identiek zijn, zie ook tabel 3.3.