О.В.Копаєв, Б.М.Копаєва
Р.В.Ільницький, М.О.Бакума

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ФІЛЬТРАЦІЇ ПРИ ОБРОБЦІ ДАНИХ ФІЗИЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

Метод медіанної фільтрації застосований при згладжуванні залежності фізичних властивостей матеріалу від складу. Відображена ефективність методу і адекватність його результатів.

При проведенні фізичних експериментів часто виникає необхідність згладжування залежності значень функціоналу $Y(t)$ від t за умови, що аргумент t змінюється монотонно, а результат спостереження піддається явним відхиленням від визначеного статистично існуючого базового рівня. При цьому вид функціонального зв'язку невідомий, однак точно відомо, що такий зв'язок існує.

При значних відхиленнях експериментальних даних від базового рівня застосування регресивного аналізу не можна вважати ефективним, що пов'язано із піднесенням до квадрату відхилення величини від статистично середньої. Тому при великих одиничних відхиленнях (викидах) результуюча помилка методу різко зростає.

Відома процедура фільтрації часових рядів методом медіани ковзання. При цьому задається ряд даних y_i, отриманих через рівні проміжки часу, серед яких вибирається так зване «вікно», що складається з членів $y_{k-l}...y_{k+l}$, і потім знаходиться їх середнє чи медіана

$$^m y_l = m\{y_{l-k} \cdots y_l \cdots y_{l+k}\} \tag{1}$$

Множина отриманих значень медіан $\{^m y_i\}$ є функціоналом, що залежить від аргументу, тобто часу. Доведено, що даний функціонал зберігає в певній мірі властивості вихідної послідовності, при тому, що вплив грубих похибок вимірювання при їх загальному випадковому розподілі помітно знижується [1].

Основна властивість членів даного ряду (аргументів) полягає у збереженні їхньої постійної густини при зростанні. При цьому безліч рефлексів (значень функціоналу), за визначенням, повинна змінюватися безперервно.

Такі властивості, на нашу думку, характерні не тільки для часових рядів, але і для тих послідовностей, в яких аргумент змінюється з невеликим кроком, а рефлекс на всій послідовності завідомо не має ніяких аномалій. Тому викиди значень, що виникають, можуть бути тільки результатом грубих помилок чи несправності вимірювальної апаратури.

Виходячи з викладеного, аналогічний підхід був застосований нами для аналізу зміни відносної інтенсивності рефлексів рентгенівської дифракції полікристалів оксидної шпінелі при монотонному зростанні вмісту одного з катіонів – алюмінію, що характеризується сильно вираженою відмінністю в розсіювальній здатності, від металевих катіонів матриці – нікелю і заліза, а тому помітно впливає на інтенсивність.

На рентгенівському дифрактометрі були отримані два рентгенівські рефлекси, що відповідають кристалографічним площинам з індексами (hkl) (220) і (400) в кубічній гранецентрованій решітці. Експериментальне відношення інтенсивностей даних рефлексів,

$$y = \frac{I_{400}}{I_{220}}, \tag{2}$$

відповідно до методики розрахунку розподілу катіонів у вузлах кристалічних решіток, з високою точністю може бути зіставлене з обчисленим відношенням [2]. Для підвищення точності визначення катіонного розподілу необхідно знизити вплив на кінцевий результат похибок вимірювань відношення інтенсивностей рефлексів. Оскільки катіонний розподіл залежить від концентрації катіонів у досліджуваній хімічній сполуці, для згладжування кривої залежності $y(t)$, де $t = 0...0{,}1$ – мольна концентрація вмісту алюмінію, що змінюється з постійним кроком $\delta = 0{,}1$ ми використали метод медіанної фільтрації (рис. 1).

Задача сформульована нами так. Нехай отриманий ряд значень відносної інтенсивності $\{y_i\}$, що при збільшенні аргументу t_i містить два компоненти – тренд $\{f_i\}$ і похибку вимірювання $\{e_i\}$:

$$y_i = f_i + e_i. \tag{3}$$

Необхідно знайти ширину вікна медіанної фільтрації, щоб отримана послідовність оцінок $\{^m y_i\}$ була б якнайближчою до послідовності $\{f_i\}$.

На рис. 1 показана крива, побудована за точками після медіанної фільтрації при ширині вікна $2k+1=3$. Як видно з графіка, точки, отримані в результаті медіанної фільтрації, добре лягають на

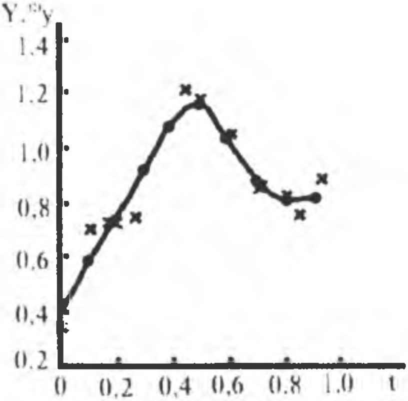

Рис. 1. *Залежність експериментальних (×) і відфільтрованих (•) значень відносних інтенсивностей від аргументу*

монотонну криву. Це узгоджується із загальними уявленнями про фізику процесу зміни катіонного розподілу [3].

Для оцінки адекватності нового функціоналу, що складається з ряду $\{^m y\}$, скористаємося методом кореляційного аналізу [4].

Допустимо, що між показником J (в нашому випадку відфільтрована величина $\{^m y\}$) і фактором Y (в нашому випадку потокова інтенсивність y) існує лінійний стохастичний зв'язок. Необхідно в декартовій системі координат знайти згладжуючу пряму, яка б найкращим чином проходила через задану безліч точок. Цей зв'язок запишемо у вигляді

$$Y = \alpha + \beta J + e, \tag{3}$$

де α і β – невідомі константи, e – випадкова змінна.
При великому числі значень показника і фактора величина

$$\mathfrak{Z} = \alpha + \beta J, \tag{4}$$

буде істинною. А оскільки кількість значень у нас обмежена, то можна знайти оцінки значень α і β. Обчислення методом регресивного аналізу [4] показали, що: $\alpha = 0.18; \beta = 0.782$, коефіцієнт

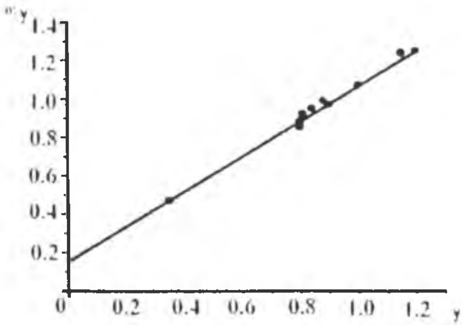

***Рис. 2.** Кореляційний зв'язок між значеннями показника та фактора і лінія регресії*

лінійної регресії кореляції $r = 0.92$. Чим більший коефіцієнт кореляції, тим сильніший зв'язок між фактором і показником. Кореляційний зв'язок між значенням показника $\{^m y\}$ і фактора $\{y\}$ графічно зображена на рис. 2.

Важливим питанням є оцінка помилки при проведенні фільтрації. Для вимірювання цього скористаємося F - критерієм чи критерієм Фішера, що передбачає виконання наступних етапів:

На першому етапі розрахуємо величину F-відношення:

$$F(1, n-2) = r^2 \cdot (n-2) = 0{,}92^2 \cdot (11-2) = 7{,}62. \tag{5}$$

На другому етапі задаємо рівень значимості. Вибираємо рівень значимості 97,5%. Це означає, що ми можемо помилитися не більш, ніж на 2,5%, а в 97,5% наші висновки будуть правильними.

На третьому етапі за відповідними таблицями F - розподілу Фішера з (1, n - 2) ступенями вільності обчислимо критичне значення критерію F^*. Якщо розраховане нами значення більше табличного, то побудована модель адекватна реальній дійсності з ризиком помилитися не більше, ніж на 2,5%. У конкретному нашому випадку $F^* = 7{,}32$. Оскільки $F > F^*$, то похибка, яку вносить фільтрація, не перевищує 2,5%.

Перевірка показала, що виконання операцій фільтрації на відношеннях інших інтенсивностей рентгенівської дифракції дало можливість визначити катіонний розподіл в еталонному зразку - чистому нікелевому фериті. Відповідно до обчислень, концентрація катіонів у тетраедричних позиціях кристалічних ґраток виявилася рівною 0,00 +0,01, що з точністю 1% відповідає дійсному катіонному розподілу[3].

В даній роботі був розроблений алгоритм розв'язання поставленої задачі. Зокрема показано, що інваріантна послідовність при оптимальному "вікні" може бути отримана досить швидко. Адекватність розробленого опису показана на порівнянні відносної інтенсивності, обчисленої з теорії розсіювання рентгенівських променів, з модифікованою описаним способом експериментальною інтенсивністю, отриманої на еталонному зразку.

The method of a median filtering is applied at flattening dependence of physical properties of a material from a composition. The method efficiency and adequacy of its results are shown.

[1]. Кендэл М. Временные ряды. Пер. с англ. – М.: Финансы и статистика, 1981. – 199 с.

[2]. Ерастова А.П., Саксонов Ю.Г. Определение катионного распределения и кислородного параметра в системе $MgFe_{2-y}Cr_yO_4$ // Ферриты и бесконтактные элементы. – Минск: Изд. АН БССР, 1963. – С. 163-175.

[3]. Бляссе Ж. Кристаллохимия ферошпинелей. – М.: Металлургия, 1968. – 184 с.

[4]. Лукьяненко І., Красникова Л. Економетрика. – К.: Знання, 1998. – 494 с.