

Datenverarbeitung für Chemiker

Numerische Datenverarbeitung

Name: Bernd Hitzmann

Tel.: 762-2963



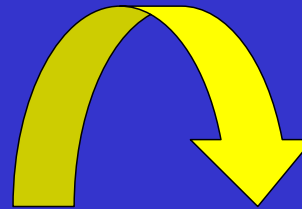
E-mail: Hitzmann@IFTC.Uni-Hannover.de

Adresse: Institut für Technische Chemie
Raum 260

Numerische Datenverarbeitung

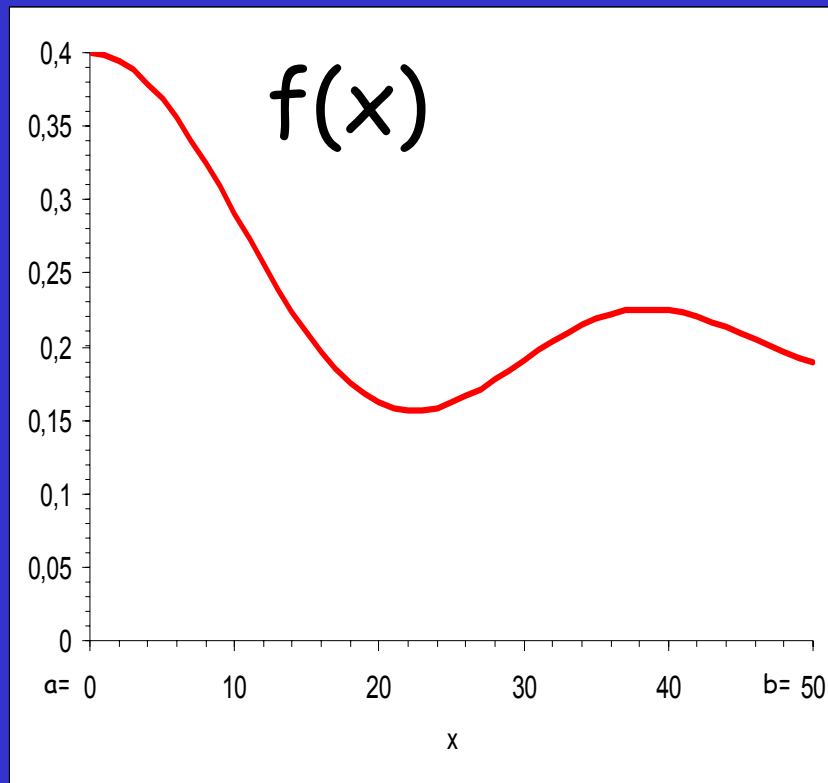
Zeitreihenanalyse

Zeit [min]	Messwerte
t_1	m_1
t_2	m_2
t_3	m_3
t_4	m_4
.	.
.	.
.	.
t_n	m_n



Information

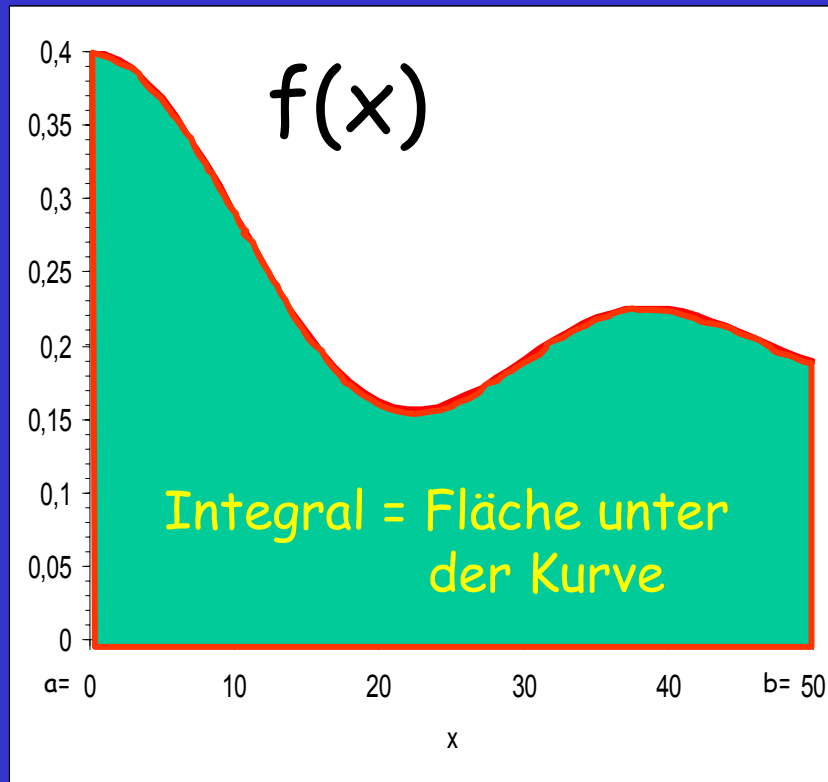
Gegeben sei eine Funktion $f(x)$
im Intervall $[a,b]$



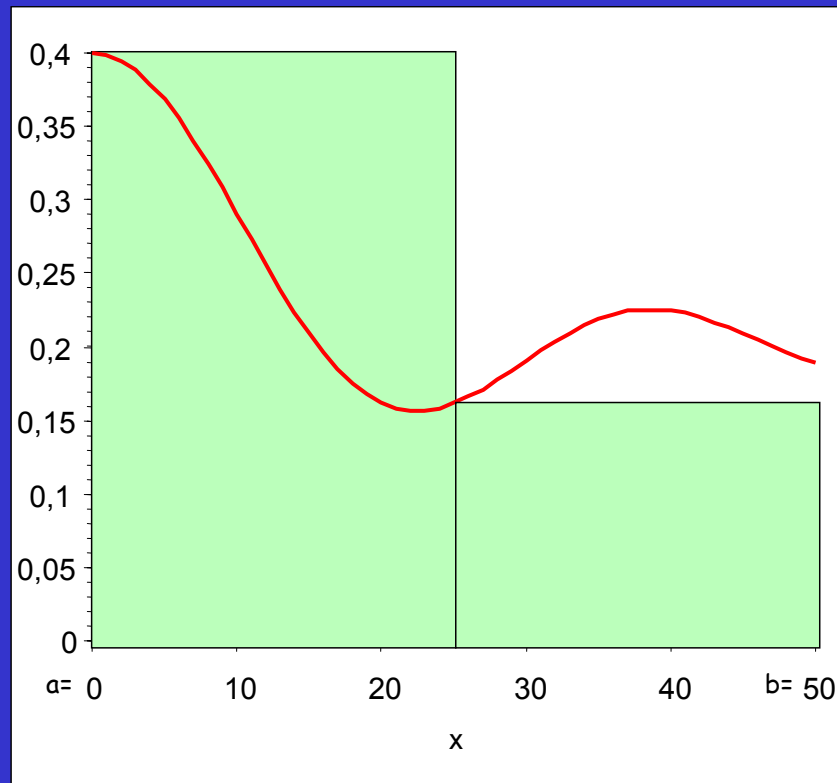
Gesucht ist das
Integral

$$\int_a^b f(x) dx =$$

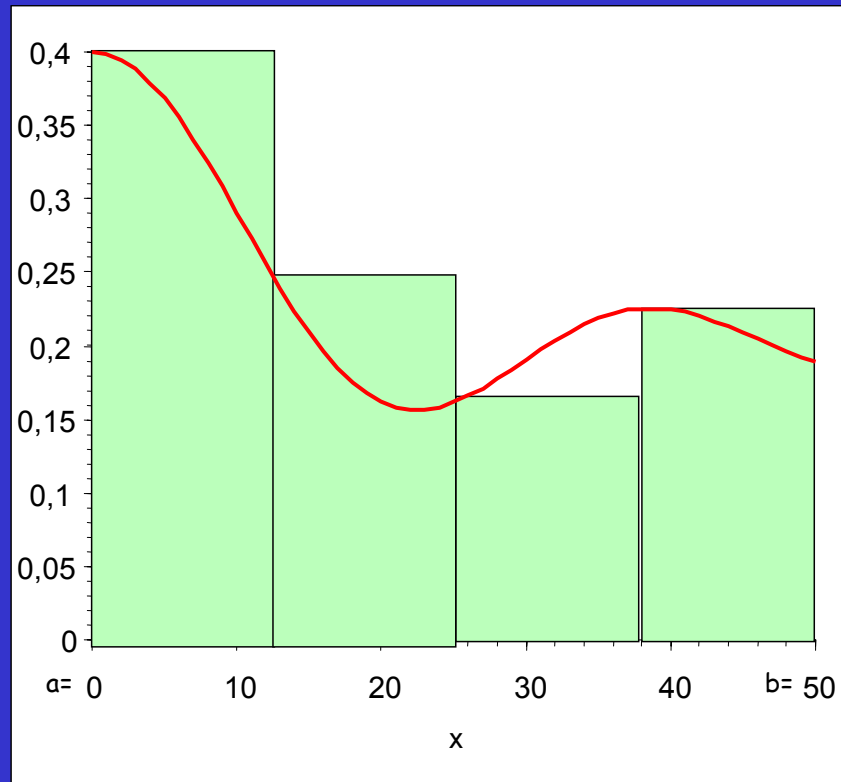
?



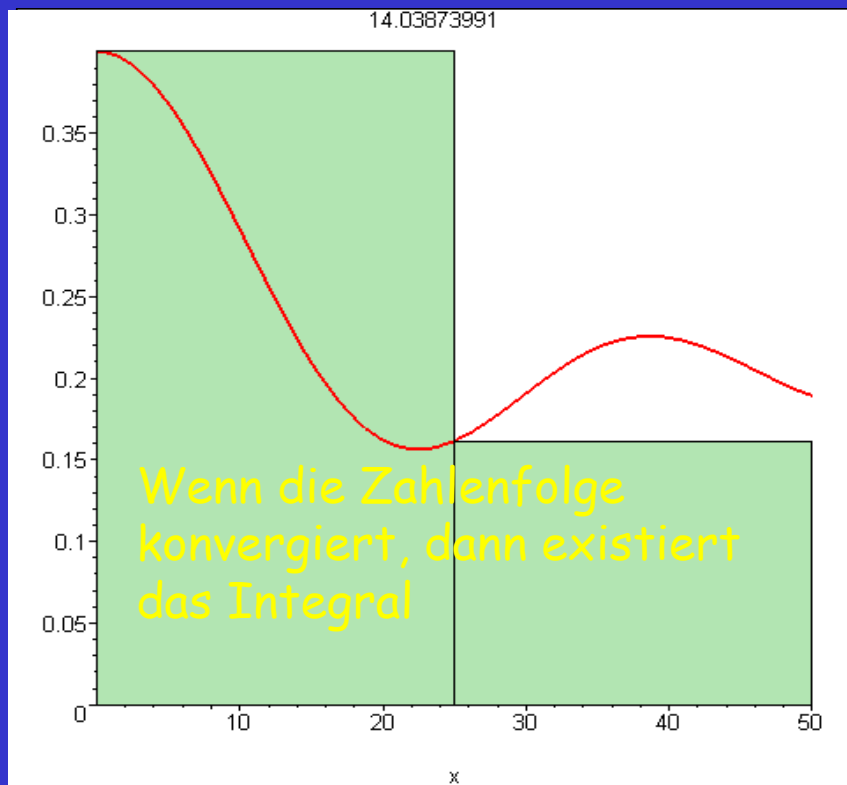
Sehr grobe Näherung



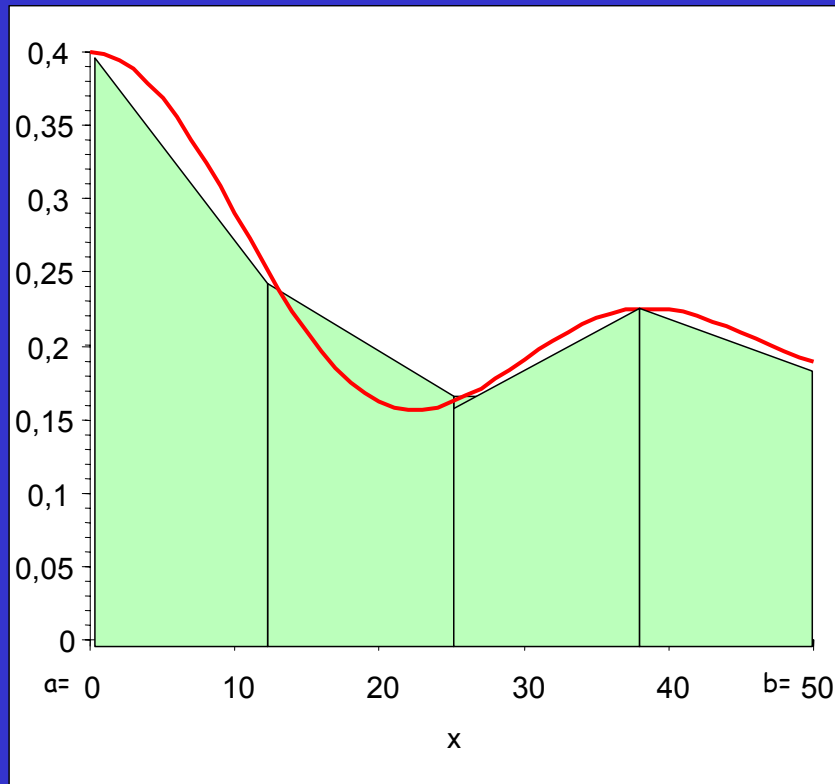
Grobe Näherung



Näherung verfeinern!

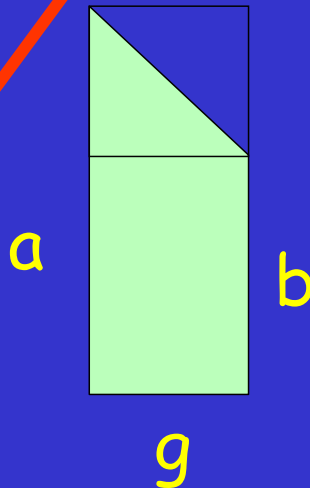
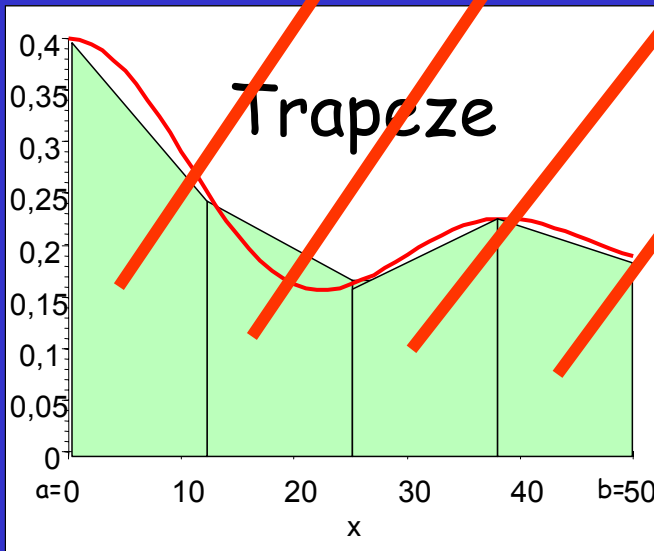


Näherung mit Trapezen



$$\int_a^b f(x) dx \approx$$

$$\begin{aligned}
 & [f(a) + f(a + (b-a)/4)] / 2 * (b-a)/4 \\
 & + [f(a + (b-a)/4) + f(a + 2(b-a)/4)] / 2 * (b-a)/4 \\
 & + [f(a + 2(b-a)/4) + f(a + 3(b-a)/4)] / 2 * (b-a)/4 \\
 & + [f(a + 3(b-a)/4) + f(a + 4(b-a)/4)] / 2 * (b-a)/4
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 F &= b * g + \\
 & (a-b) / 2 * g \\
 & = (a+b) / 2 * g
 \end{aligned}$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx$$

$$\begin{aligned}
 & [f(a) + f(a + (b-a)/4)]/2 * (b-a)/4 \\
 & + [f(a + (b-a)/4) + f(a + 2(b-a)/4)]/2 * (b-a)/4 \\
 & + [f(a + 2(b-a)/4) + f(a + 3(b-a)/4)]/2 * (b-a)/4 \\
 & + [f(a + 3(b-a)/4) + f(a + 4(b-a)/4)]/2 * (b-a)/4
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & [f(a)/2 \\
 & + f(a + (b-a)/4) \\
 & + f(a + 2(b-a)/4) \\
 & + f(a + 3(b-a)/4) \\
 & + f(b)/2 \\
 &] * (b-a)/4
 \end{aligned}$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx$$

$$\left[\begin{aligned} & f(a)/2 \\ & + f(a+(b-a)/4) \\ & + f(a+2(b-a)/4) \\ & + f(a+3(b-a)/4) \\ & + f(b)/2 \end{aligned} \right] * (b-a)/4$$

Vier Trapeze

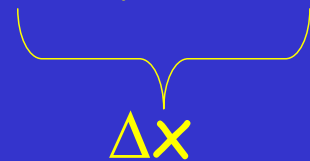
Für n Trapeze folgt:

$$\left[\begin{aligned} & f(a)/2 \\ & + f(a+(b-a)/n) \\ & \dots\dots\dots \\ & + f(a+(n-1)(b-a)/n) \\ & + f(b)/2 \end{aligned} \right] * (b-a)/n$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx$$

$$\begin{aligned} & [f(a)/2 \\ & + f(a+(b-a)/n) \\ & \dots\dots\dots \\ & + f(a+(n-1)(b-a)/n) \\ & + f(b)/2 \quad]^* (b-a)/n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} = & [f(a)/2 \\ & + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+k(b-a)/n) \\ & + f(b)/2 \quad]^* (b-a)/n \end{aligned}$$



n Trapeze

Messwerte (Zeitreihe)

Zeit [min]	Spannung [Volt]
t_1	m_1
t_2	m_2
t_3	m_3
t_4	m_4
.	.
.	.
.	.
t_n	m_n

Numerische Integration

Trapez-Regel:

$$\int_{t_1}^{t_n} m(t) dt \approx \Delta t \left[\frac{1}{2} m_1 + \frac{1}{2} m_n + \sum_{k=2}^{n-1} m_k \right]$$

Simpsons-Regel:

$$\int_{t_1}^{t_n} m(t) dt \approx \frac{\Delta t}{3} \left[m_1 + m_n + 2 \sum_{k=3}^{n-2} m_k + 4 \sum_{k=2}^{n-1} m_k \right]$$

ungerade

gerade

Numerische Ableitung

Zeit t	Messwert m
t_1	m_1
t_2	m_2
\vdots	\vdots
t_n	m_n

$$\frac{dm}{dt} = m' = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{m(t + \Delta t) - m(t)}{\Delta t}$$

Vorwärts Differenz

$$m'_k \approx \frac{m_{k+1} - m_k}{\Delta t}$$

Zentrale Differenz

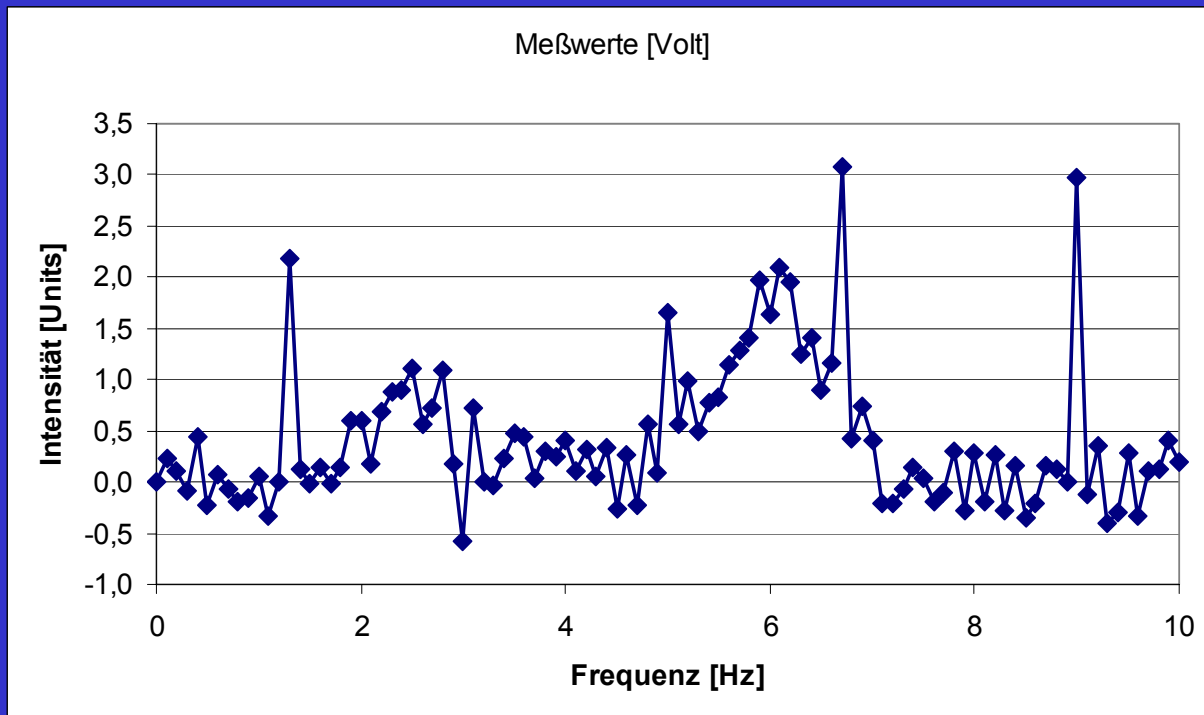
$$m'_k \approx \frac{m_{k+1} - m_{k-1}}{2\Delta t}$$

Zweite Ableitung

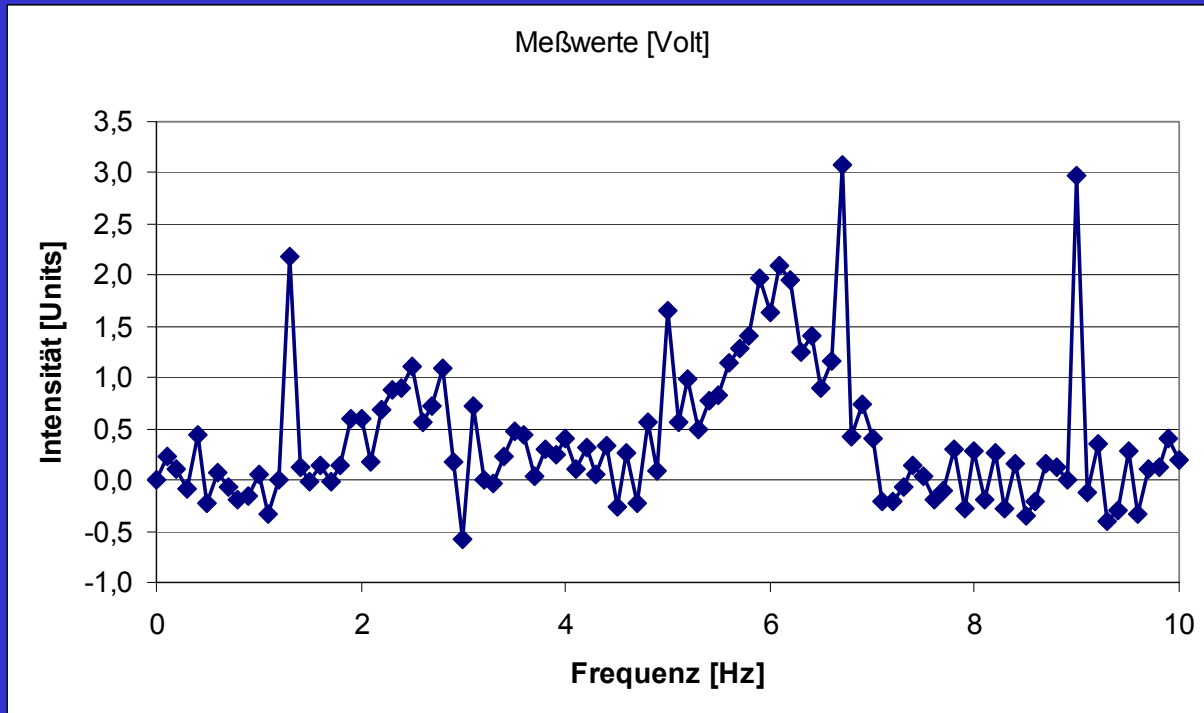
Bernd Hitzmann

$$m''_k \approx \frac{m_{k+1} - 2m_k + m_{k-1}}{\Delta t^2}$$

Wo liegen die beiden Maxima der Messdaten?



Um verrauschte Daten zu glätten werden Filter verwendet!

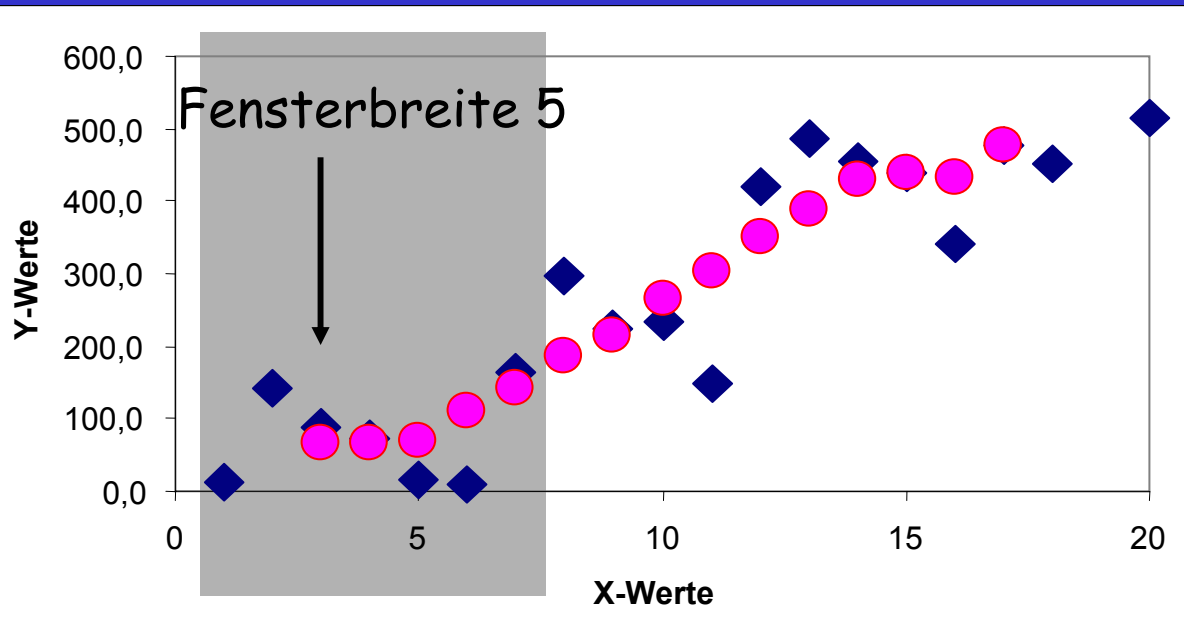


Mittelwertfilter (moving window averaging)

$$y_k^* = \frac{1}{2m+1} \sum_{j=-m}^m y_{k+j} = \frac{1}{2m+1} (y_{k-m} + y_{k-m+1} + \dots + y_{k+m-1} + y_{k+m})$$

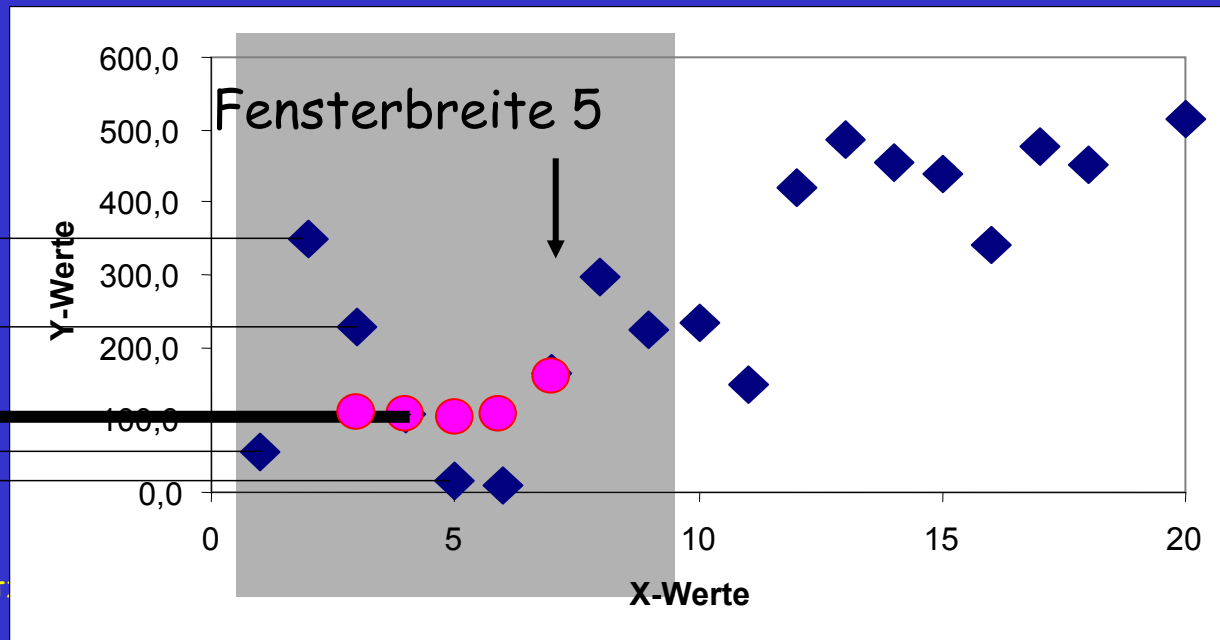
mit Fensterbreite $2m+1$

Beispiel



Median-Filter

Messwerte eines Intervalls (Fensters) der Größe nach sortiert. Der Median ist als Punkt in der Mitte definiert:
50 % der Werte liegen darüber und 50 % darunter.



Savitzky-Golay-Filter

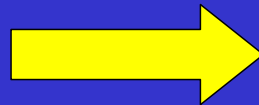
Basierend auf quadratischem Modell
mit 5 Werten Fensterbreite

$$y_k^* = \frac{1}{35}(-3y_{k-2} + 12y_{k-1} + 17y_k + 12y_{k+1} - 3y_{k+2})$$

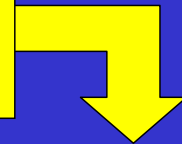
Auch Kombinationen von unterschiedlichen
Filter werden eingesetzt!

z.B. erst Median-Filter,
dann Savitzky-Golay-Filter

Zeit [min]	Messwert [Volt]
t_1	m_1
t_2	m_2
t_3	m_3
.	.
.	.
t_k	m_k
.	.
.	.
.	.
t_n	m_n



$$m'_k \approx \frac{m_{k+1} - m_k}{\Delta t}$$

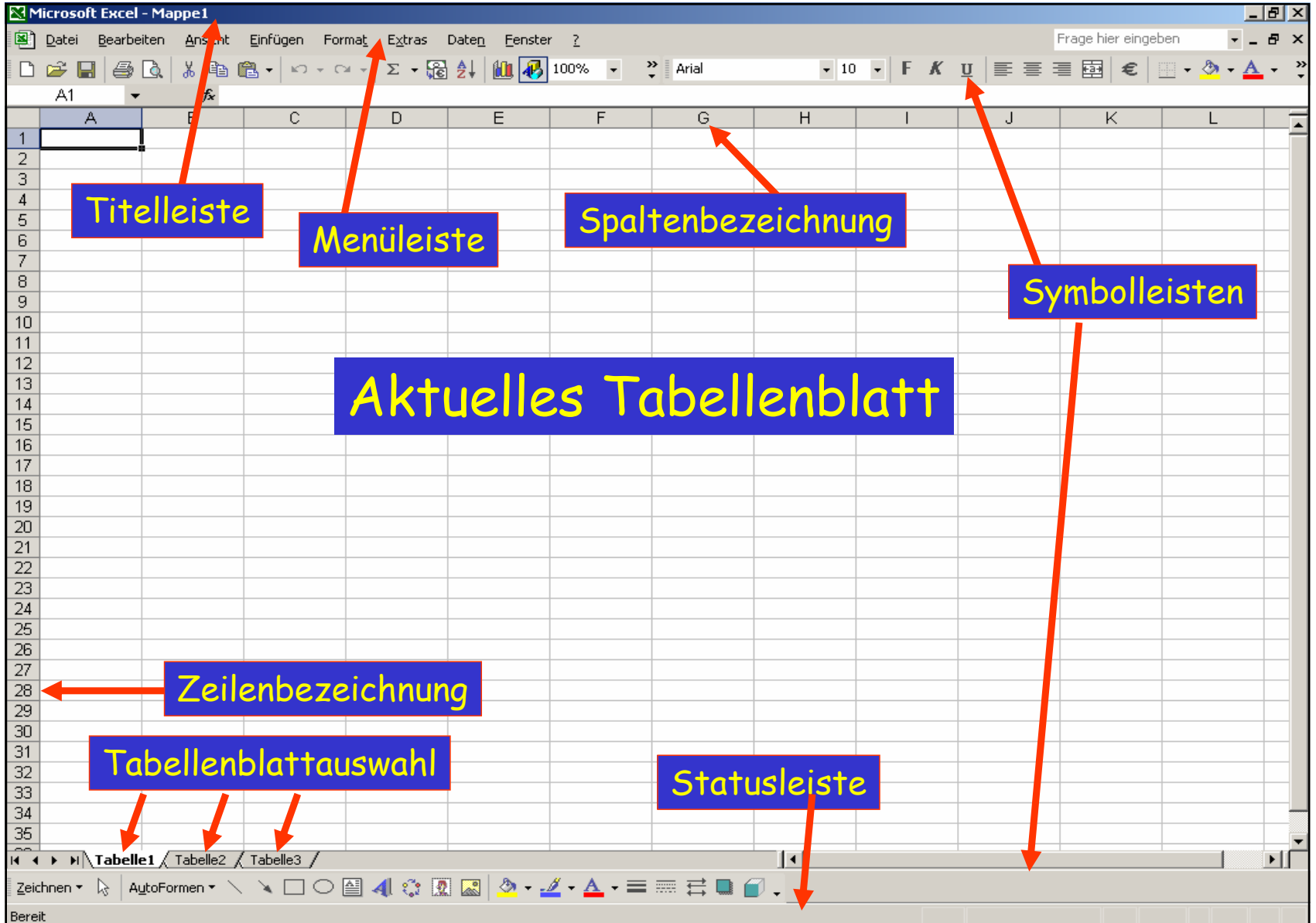


Zeit [min]	Messwert [Volt]	Ableitung m' [Volt/min]
t_1	m_1	
t_2	m_2	
t_3	m_3	.
.	.	.
t_k	m_k	
t_{k+1}	m_{k+1}	.
.	.	.
.	.	
t_n	m_n	

Numerische Datenverarbeitung mit

MS-Excel

Eine Excel-Tabelle ist ein „elektronisches“ Arbeitsblatt, das aus Zellen aufgebaut ist. Mit ihm können Berechnungen mit Formeln einfach durchgeführt werden!



The image shows a screenshot of the Microsoft Excel interface. The title bar reads "Microsoft Excel - Mappe1". The menu bar includes "Datei", "Bearbeiten", "Ansicht", "Einfügen", "Format", "Extras", "Daten", and "Fenster". The ribbon shows the "Einfügen" tab with the "Diagramm" group selected. The active cell is B6, with its address "B6" displayed in the name box. A small black box is drawn in cell B6, and a red arrow points from it to a blue box labeled "Funktion einfügen". Another red arrow points from the "Diagramm" icon in the ribbon to a blue box labeled "Diagrammassistent". A third red arrow points from the active cell B6 to a blue box labeled "Adresse der aktiven Zelle". A fourth red arrow points from the active cell B6 to a blue box labeled "Aktive Zelle". The status bar at the bottom shows "Bereit" and "AutoFormen".

Microsoft Excel - Mappe1

Frage hier eingeben

100%

Arial 10

B6

Diagrammassistent

Funktion einfügen

Aktive Zelle

Adresse der aktiven Zelle

Tabelle1 | Tabelle2 | Tabelle3

Zeichnen | AutoFormen

Bereit

Microsoft Excel - Mappe1

WENN \times \checkmark \neq =C10+\$C\$6

Formel der aktiven Zelle

$\Delta x=0,5$

x-Werte 0

In Formel verwendete Zellen

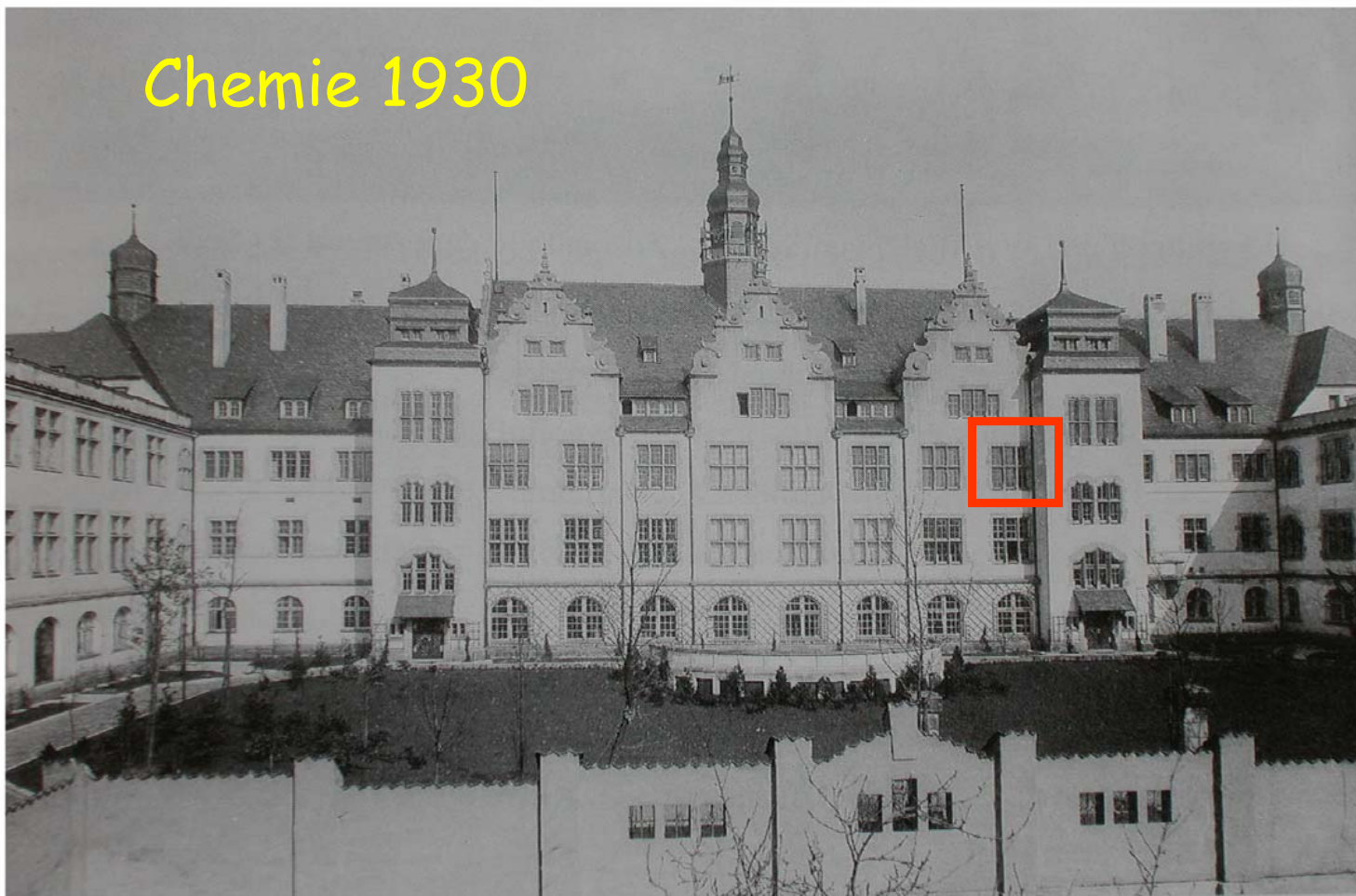
Aktive Zelle

Absolute Adresse (ändert sich nicht beim Kopieren; mit \$)

Relative Adresse (ändert sich beim Kopieren; ohne \$)

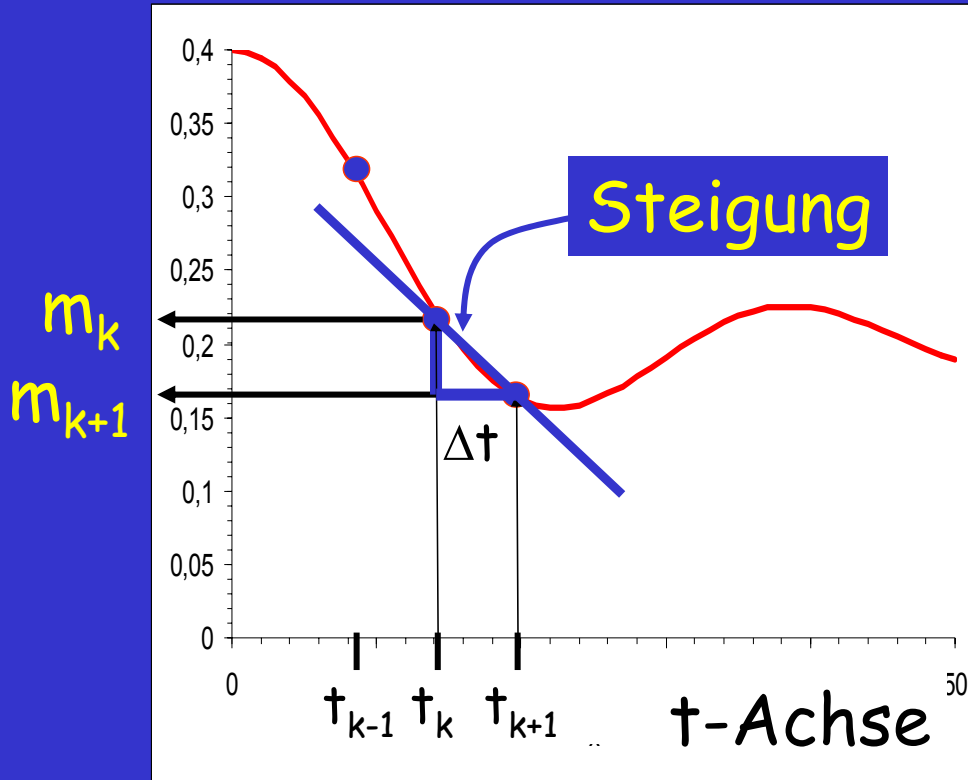
Zeichnen AutoFormen Zeigen

Chemie 1930



Bernd Hitzmann

Steigung berechnen: Vorwärts Differenz

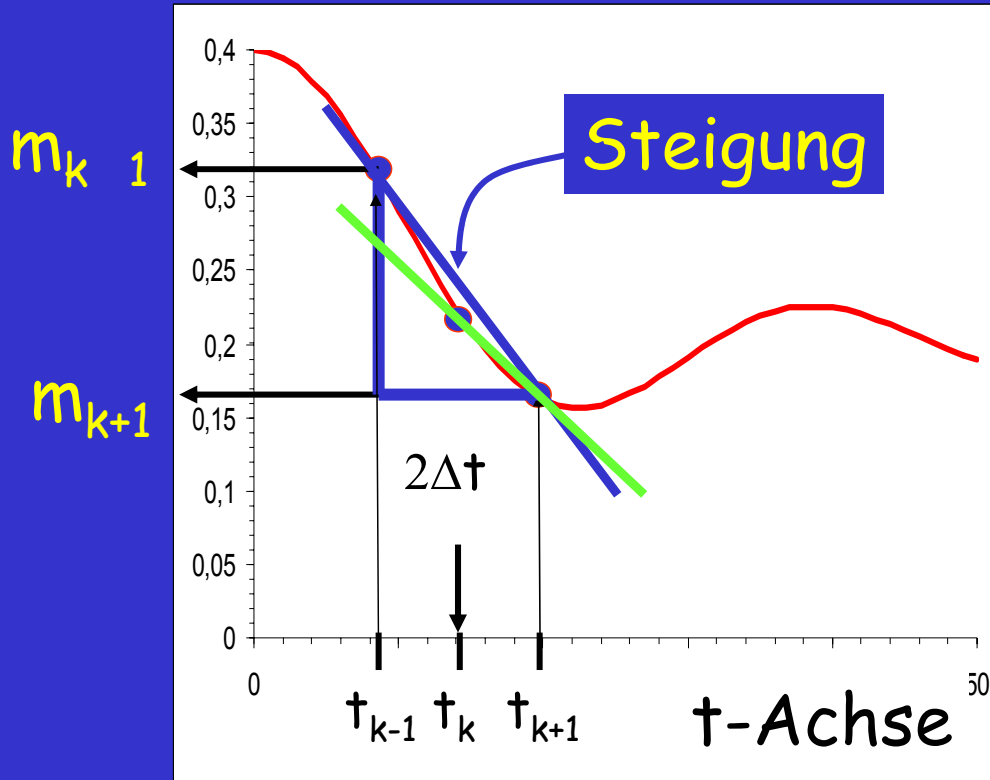


$$\text{Steigung}(t_k) = \frac{m_{k+1} - m_k}{\Delta t}$$

Bernd Fitzma



Steigung berechnen: Zentrale Differenz



$$\text{Steigung}(t_k) = \frac{m_{k+1} - m_{k-1}}{2\Delta t}$$

Bernd Fitzma

