

Tadeusz PAWLUK*
Grzegorz CZACHOR*
Włodzimierz PAPROTNY*

DOBÓR STRUKTURY MODELU CECHOWANIA W DYFRAKCYJNEJ METODZIE POMIARU SKŁADU ZIARNOWEGO

Jednym z ważniejszych problemów występujących w dyfrakcyjnej metodzie pomiaru składu ziarnowego jest dobór struktury modelu umożliwiającego obliczanie składu ziarnowego na podstawie natężenia światła w widmie dyfrakcyjnym. W modelu może wystąpić wiele zmiennych niezależnych. W pracy przedstawiono kryteria i algorytmy umożliwiające dobór optymalnej struktury modelu przy ograniczonych nakładach obliczeniowych. Podano przykłady doboru struktury modelu w oparciu o rzeczywiste dane z przyrządu pomiarowego.

1. Wprowadzenie

W dyfrakcyjnej metodzie pomiaru składu ziarnowego występuje problem cechowania przyrządu pomiarowego, sprowadzający się do wyboru struktury modelu i estymacji jego parametrów. Poszukuje się modeli w klasie:

$$K_i = a_0 + \sum_{j=1}^n a_j I_j + \sum_{j=1}^n \sum_{k=j}^n a_{jk} I_j I_k \quad (1)$$

gdzie: K_i - udział procentowy i -tej frakcji, a_0, a_j, a_{jk} - parametry modelu, a I_j, I_k - zmierzone natężenia światła.

Zagadnienie doboru struktury eksperymentalnego modelu rozwiązuje się zwykle w następujących etapach:

- wybór struktury modelu,
- estymacja parametrów modelu,
- ocena jakości modelu, jeśli jest negatywna, to powrót do etapu a).

Nieodpowiedni dobór struktury modelu, np. model z małą ilością parametrów może ukryć pewne istotne własności zjawiska, natomiast model ze zbyt dużą ilością parametrów daje dobrą dokładność dla konkretnej realizacji danych pomiarowych, ale gorszą dla innych realizacji. Ponadto model o dużej liczbie parametrów jest nieodporny numerycznie.

* Instytut Mineralnych Materiałów Budowlanych w Opolu

W przypadku cechowania analizatora uziarnienia występuje problem wyboru struktury modelu dla wielu zmiennych niezależnych (kilkadziesiąt sygnałów z detektorów natężenia światła). Przy tej ilości zmiennych konieczne jest zastosowanie algorytmów umożliwiających automatyczny wybór struktury modelu.

2. Kryteria doboru struktury modelu

Do badania algorytmów doboru struktury modelu wybrano następujące kryteria: test F, test końcowego błędu prognozy wg Akaike (ang. Final Prediction Error, FPE) oraz kryterium informacyjne Akaike (ang. Akaike Information Criterion, AIC) [1, 2].

Test F ocenia, czy nastąpiło znaczne zmniejszenie wariancji błędów modelu σ_n^2 z powodu zwiększenia ilości estymowanych parametrów (wielkość σ_n^2 jest obliczana tutaj bez uwzględnienia liczby stopni swobody). Bada się statystykę

$$F = N \frac{\sigma_{n1}^2 - \sigma_{n2}^2}{\sigma_{n2}^2} \quad (2)$$

gdzie N - długość realizacji, σ_{n1}^2 i σ_{n2}^2 wariancje dla modeli o odpowiednio n_1 i n_2 parametrach ($n_1 < n_2$). Statystyka F ma rozkład $[1] \chi_{\alpha}^2(n_2 - n_1)$ na poziomie ufności $1 - \alpha$ (np. $\alpha = 0,95$) wybiera się model o mniejszej liczbie parametrów, jeśli $F < \chi_{\alpha}^2(n_2 - n_1) = F_{\alpha}$ (F_{α} jest parametrem projektowym w dyspozycji badacza).

Test FPE wykorzystuje zależność:

$$FPE = \sigma_n^2 \frac{N+n}{N-n} \quad (3)$$

gdzie n - ilość parametrów modelu. Test ten nakłada karę na modele o dużej liczbie parametrów, zwłaszcza dla krótkiej realizacji danych pomiarowych. Optymalna jest taka wartość n, dla której kryterium osiąga minimum.

Kryterium informacyjne Akaike jest następujące:

$$AIC = N \log \sigma_n^2 + 2p \quad (4)$$

gdzie p jest liczbą parametrów modelu. Pierwszy składnik w (4) określa dopasowanie do danych pomiarowych, natomiast drugi stanowi karę za zbyt dużą ilość parametrów. Należy zauważyć, że oba kryteria FPE i AIC nie wymagają niezależnego zestawu danych do weryfikacji modelu.

3. Dobór struktury modelu

Zastosowanie omówionych wyżej kryteriów doboru struktury modelu przedstawimy na przykładzie danych pomiarowych z przyrządu wyposażonego w 16 detektorów natężenia światła. Do badania wybrano zestaw danych pomiarowych dla 17 próbek o znanym składzie ziarnowym (określonym jedną z klasycznych metod pomiarowych). Jako potencjalne zmienne niezależne

wybrano detektory $I_1, I_2, \dots, I_{13}$, a jako zmienna zależna K_2 (zawartość frakcji od 5 do 10 μm).

Struktura modelu jest poszukiwana metodą regresji krokowej. W metodzie tej ustala się korelację poszczególnych zmiennych niezależnych względem zmiennej zależnej i szereguje zmienne wg malejącej korelacji. W kolejnym kroku jest wprowadzana do modelu ta zmienna, która ma największy współczynnik korelacji. Dla aktualnej struktury testowana jest istotność każdej zmiennej niezależnej w modelu (1); jeśli po wprowadzeniu do modelu nowej zmiennej inna zmienna straci istotność, to jest usuwana z modelu i ilość parametrów w danym kroku zmniejsza się.

Kolejne kroki algorytmu regresji krokowej były następujące (rys. 1):

nr kroku	zmienne w modelu	ilość param.	σ_n^2	FPE	AIC
1	9.	2	11,28	14,29	21,89
2	1,9	3	9,78	13,97	22,83
3	1,6,9	4	5,68	9,19	20,83
4	1,6,9,13	5	3,38	6,21	19,00
5	6,9,13	4	3,41	5,50	17,05
6	6,9,12,13	5	0,21	0,40	-1,24
7	9,12,13	4	0,22	0,36	-2,96
8	9,10,12,13	5	0,12	0,22	-5,52
9	3,9,10,12,13	6	0,08	0,16	-6,62

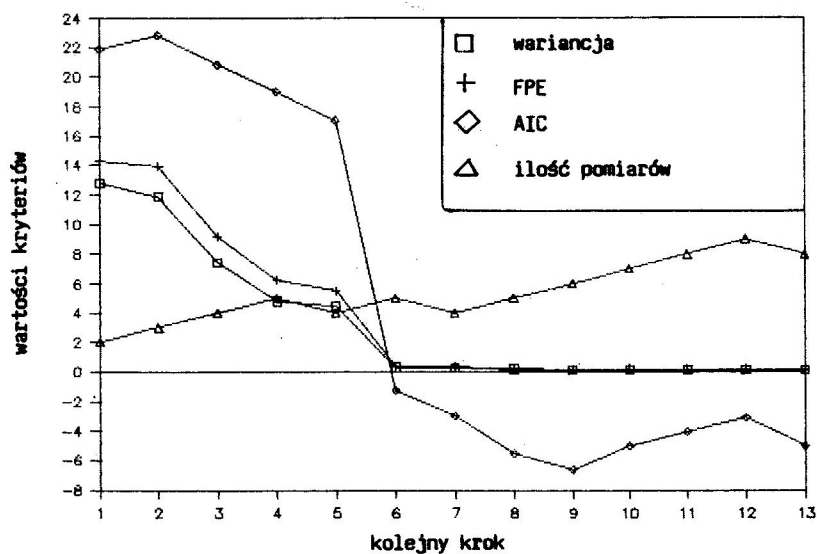


Fig. 1. Values of σ_n^2 , FPE i AIC versus number of parameters

Rys. 1. Wartości σ_n^2 , FPE i AIC w funkcji ilości parametrów.

Badania doboru struktury modelu wskazują, że wykorzystywane kryteria mają tendencję do proponowania zbyt dużej liczby parametrów. Ilość parametrów ustala się przy pomocy algorytmu ekspertowego, wykrywającego moment wystąpienia "kolana" (ang. elbow) na wykresach zmian kryteriów. W klasycznej regresji krokowej wprowadza się kolejne zmienne do modelu, zwiększając ilość parametrów. Dla niektórych zestawów danych bardziej niezawodnym sposobem doboru zmiennych jest postępowanie odwrotne, poszukiwanie rozpoczyna się od modelu zawierającego wszystkie zmienne i w kolejnych krokach eliminuje mało istotne zmienne. Aktualnie opracowywany przyrząd zawiera kilkadziesiąt detektorów (zmiennych I). W związku z tym rozwijany jest ekspertowy system doboru struktury modelu, który umożliwi znaczne zmniejszenie ilości badanych struktur modelu.

4. Wnioski

Dzięki zastosowaniu odpowiednich testów, zautomatyzowano zagadnienie optymalnego doboru modelu cechowania analizatora uziarnienia. Rozwiązanie tego zagadnienia jest szczególnie istotne w związku z opracowywaniem nowej wersji analizatora, zawierającej kilkadziesiąt detektorów.

Literatura

1. Astrom, K.J., Maximum likelihood and prediction error methods. Automatica, 16, 551-574, 1980.
2. Akaike, H., A new look at the statistical model identification. IEEE Trans. Aut. Control, AC-19, 716-722, 1974.

Badania zrealizowano w ramach projektu Nr 7 7153 91 02, finansowanego w roku 1992 przez Komitet Badań Naukowych.

Pawluk T., Czachor G., Paprotny Wł., 1992. Choice of Calibration Model Structure for the Diffraction Method of Measurement of Particle Size Distribution. Physicochemical Problems of Mineral Processing, 26, 67-72 (polish text)

Selection of calibration model structure for the particle size analyzer is an iterative procedure which includes parameter estimation and model validation. An "exhaustive search" approach could lead to horrendous number of models. Provided with data measurements, the expert system organizes an intelligent search through the set of candidate structures and stops with the "best" model according to statistical tests. Tests on real measurements have shown that the expert system behaves as well as human expert, with considerable savings in time.