



جمهوری اسلامی ایران
Islamic Republic of Iran

سازمان ملی استاندارد ایران

Iranian National Standardization Organization



استاندارد ملی ایران

۸۲۰۱-۳

چاپ اول

اردیبهشت ۱۳۹۲

INSO

8201-3

1st. Edition

May.2013

نمایش نتایج آنالیز اندازه ذره - قسمت ۳:
تطبیق منحنی تجربی با مدل مرجع

**Representation of results of particle size
analysis — Part 3: Adjustment of an
experimental curve to a reference model**

ICS:19.120

به نام خدا

آشنایی با سازمان ملی استاندارد ایران

مؤسسه استاندارد و تحقیقات صنعتی ایران به موجب بند یک ماده ۳ قانون اصلاح قوانین و مقررات مؤسسه استاندارد و تحقیقات صنعتی ایران، مصوب بهمن ماه ۱۳۷۱ تنها مرجع رسمی کشور است که وظیفه تعیین، تدوین و نشر استانداردهای ملی (رسمی) ایران را به عهده دارد.

نام موسسه استاندارد و تحقیقات صنعتی ایران به موجب یکصد و پنجاه و دومین جلسه شورای عالی اداری مورخ ۹۰/۶/۲۹ به سازمان ملی استاندارد ایران تغییر و طی نامه شماره ۲۰۶/۳۵۸۳۸ مورخ ۹۰/۷/۲۴ جهت اجرا ابلاغ شده است.

تدوین استاندارد در حوزه های مختلف در کمیسیون های فنی مرکب از کارشناسان سازمان، صاحب نظران مراکز و مؤسسات علمی، پژوهشی، تولیدی و اقتصادی آگاه و مرتبط انجام می شود و کوششی همگام با مصالح ملی و با توجه به شرایط تولیدی، فناوری و تجاری است که از مشارکت آگاهانه و منصفانه صاحبان حق و نفع، شامل تولیدکنندگان، مصرف کنندگان، صادرکنندگان و وارد کنندگان، مراکز علمی و تخصصی، نهادها، سازمان های دولتی و غیر دولتی حاصل می شود. پیش نویس استانداردهای ملی ایران برای نظرخواهی به مراجع ذی نفع و اعضای کمیسیون های فنی مربوط ارسال می شود و پس از دریافت نظرها و پیشنهادات در کمیته ملی مرتبط با آن رشته طرح و در صورت تصویب به عنوان استاندارد ملی (رسمی) ایران چاپ و منتشر می شود.

پیش نویس استانداردهایی که مؤسسات و سازمان های علاقه مند و ذی صلاح نیز با رعایت ضوابط تعیین شده تهیه می کنند در کمیته ملی طرح و بررسی و در صورت تصویب، به عنوان استاندارد ملی ایران چاپ و منتشر می شود. بدین ترتیب، استانداردهایی ملی تلقی می شوند که بر اساس مفاد نوشته شده در استاندارد ملی ایران شماره ۵ تدوین و در کمیته ملی استاندارد مربوط که سازمان ملی استاندارد ایران تشکیل می دهد به تصویب رسیده باشد.

سازمان ملی استاندارد ایران از اعضای اصلی سازمان بین المللی استاندارد (ISO)^۱، کمیسیون بین المللی الکتروتکنیک (IEC)^۲ و سازمان بین المللی اندازه شناسی قانونی (OIML)^۳ است و به عنوان تنها رابط^۴ کمیسیون کدکس غذایی (CAC)^۵ در کشور فعالیت می کند. در تدوین استانداردهای ملی ایران ضمن توجه به شرایط کلی و نیازمندی های خاص کشور، از آخرین پیشرفت های علمی، فنی و صنعتی جهان و استانداردهای بین المللی بهره گیری می شود.

سازمان ملی استاندارد ایران می تواند با رعایت موازین پیش بینی شده در قانون، برای حمایت از مصرف کنندگان، حفظ سلامت و ایمنی فردی و عمومی، حصول اطمینان از کیفیت محصولات و ملاحظات زیست محیطی و اقتصادی، اجرای بعضی از استانداردهای ملی ایران را برای محصولات تولیدی داخل کشور و/یا اقلام وارداتی، با تصویب شورای عالی استاندارد، اجباری نماید. سازمان می تواند به منظور حفظ بازارهای بین المللی برای محصولات کشور، اجرای استاندارد کالاهای صادراتی و درجه بندی آن را اجباری نماید. همچنین برای اطمینان بخشیدن به استفاده کنندگان از خدمات سازمان ها و مؤسسات فعال در زمینه مشاوره، آموزش، بازرسی، ممیزی و صدور گواهی سیستم های مدیریت کیفیت و مدیریت زیست محیطی، آزمایشگاه ها و مراکز کالیبراسیون (واسنجی) وسایل سنجش، سازمان ملی استاندارد ایران این گونه سازمان ها و مؤسسات را بر اساس ضوابط نظام تأیید صلاحیت ایران ارزیابی می کند و در صورت احراز شرایط لازم، گواهینامه تأیید صلاحیت به آن ها اعطا و بر عملکرد آن ها نظارت می کند. ترویج دستگاه بین المللی یکاها، کالیبراسیون (واسنجی) وسایل سنجش، تعیین عیار فلزات گرانبها و انجام تحقیقات کاربردی برای ارتقای سطح استانداردهای ملی ایران از دیگر وظایف این سازمان است.

1- International Organization for Standardization

2 - International Electrotechnical Commission

3- International Organization of Legal Metrology (Organisation Internationale de Metrologie Legale)

4 - Contact point

5 - Codex Alimentarius Commission

کمیسیون فنی تدوین استاندارد

" نمایش نتایج آنالیز اندازه ذره - قسمت ۳: تطبیق منحنی تجربی با مدل مرجع "

سمت و/ یا نمایندگی

رئیس:

سازمان معاونت برنامه ریزی استانداری بوشهر

سرخوش، احمد
(دکترای مهندسی کشاورزی)

دبیران:

معاون فنی اداره کل استاندارد و تحقیقات صنعتی استان بوشهر

بهره مند، محمد رحیم
(فوق لیسانس مهندسی خاک شناسی)

کارشناس اداره کل استاندارد و تحقیقات صنعتی استان بوشهر

خدری، صابر
(لیسانس مهندسی عمران)

اعضا: (اسامی به ترتیب حروف الفبا)

مدیر محترم کالیبراسیون نیروگاه اتمی بوشهر

اتحادی، کامبیز
(لیسانس مهندسی برق-الکترونیک)

کارشناس مسئول اداره کل استاندارد و تحقیقات
صنعتی استان بوشهر

برسان، حمیده
(لیسانس مهندسی شیمی)

کارشناس اداره کل استاندارد و تحقیقات صنعتی
استان بوشهر

برکت، محمد
(فوق لیسانس شیمی آلی)

کارشناس اداره کل منابع طبیعی و آبخیزداری
استان بوشهر

بوستانی، علی
(فوق لیسانس نباتات)

کارشناس اداره کل استاندارد و تحقیقات صنعتی
استان بوشهر

حاجیان، علی رضا
(لیسانس مهندسی برق)

کارشناس اداره کل استاندارد و تحقیقات صنعتی
استان بوشهر

دشتی، راضیه
(لیسانس شیمی)

کارشناس اداره استاندارد و تحقیقات صنعتی
شهرستان گناوه

سیفی، رضا
(لیسانس مهندسی شیمی)

کارشناس شرکت صنایع دریایی ایران صدرا

سیمی، علی
(لیسانس مهندسی عمران)

کارشناس اداره کل استاندارد و تحقیقات صنعتی
استان بوشهر

شاهین زاده، قدرت اله
(لیسانس مهندسی شیمی)

کارشناس ژئو تکنیک آزمایشگاه فنی و مکانیک
خاک

عاقبی، شهرام
(فوق لیسانس مهندسی عمران)

رئیس اداره امور آزمایشگاه های اداره کل
استاندارد و تحقیقات صنعتی استان بوشهر

عزیزی، علی
(لیسانس مهندسی کشاورزی- صنایع غذایی)

مدیرکل اداره استاندارد و تحقیقات صنعتی استان
بوشهر

محتشم، امیرحسین
(لیسانس مدیریت صنعتی)

رئیس اداره اجرای استاندارد اداره کل استاندارد و
تحقیقات صنعتی استان بوشهر

مواجی، فریده
(لیسانس مهندسی کشاورزی -آبیاری و آبادانی)

فهرست مندرجات

صفحه	عنوان
ب	آشنایی با سازمان ملی استاندارد
ج	کمیسیون فنی تدوین استاندارد
و	پیش گفتار
۱	۱ هدف و دامنه کاربرد
۱	۲ مراجع الزامی
۱	۳ نمادها، اختصارات
۲	۴ تطبیق منحنی تجربی با مدل مینا
۶	۵ مناسب بودن برازش، انحراف معیار باقی مانده‌ها و آنالیز داده‌های اکتشافی
۸	۶ نتیجه گیری‌ها
۹	پیوست الف (اطلاعاتی) تاثیر مدل روی مناسب بودن برازش رگرسیون
۱۱	پیوست ب (اطلاعاتی) تاثیر نوع کمیت توزیع بر نتیجه رگرسیون
۱۵	پیوست پ (اطلاعاتی) مثال‌هایی برای رگرسیون غیرخطی
۱۷	پیوست ت (اطلاعاتی) آزمون χ^2 توزیع‌های عددی نمونه با اندازه مشخص
۲۱	پیوست ث (اطلاعاتی) رگرسیون شبه خطی وزنی
۲۴	کتابشناسی

پیش گفتار

استاندارد " نمایش نتایج آنالیز اندازه ذره - قسمت ۳: تطبیق منحنی تجربی با مدل مرجع " که پیش نویس آن در کمیسیون های مربوط تهیه و تدوین شده و در یکصد و هشتاد و سومین اجلاس کمیته ملی استاندارد اوزان ها و مقیاس ها مورخ ۱۳۹۰/۱۲/۲۲ مورد تصویب قرار گرفته است، اینک به استناد بند یک ماده ۳ قانون اصلاح قوانین و مقررات مؤسسه استاندارد و تحقیقات صنعتی ایران، مصوب بهمن ماه ۱۳۷۱، به عنوان استاندارد ملی ایران منتشر می شود.

برای حفظ همگامی و هماهنگی با تحولات و پیشرفت های ملی و جهانی در زمینه صنایع، علوم و خدمات، استانداردهای ملی ایران در مواقع لزوم تجدید نظر خواهد شد و هر پیشنهادی که برای اصلاح و تکمیل این استانداردها ارائه شود، هنگام تجدید نظر در کمیسیون فنی مربوط مورد توجه قرار خواهد گرفت. بنابراین، باید همواره از آخرین تجدیدنظر استانداردهای ملی استفاده کرد.

منبع و مآخذی که برای تهیه این استاندارد مورد استفاده قرار گرفته به شرح زیر است:

ISO 9276-3:2008, Representation of results of particle size analysis — Part 3: Adjustment of an experimental curve to a reference model.

نمایش نتایج آنالیز اندازه ذره — قسمت ۳: تطبیق منحنی تجربی با مدل مرجع

۱ هدف و دامنه کاربرد

هدف از تدوین این استاندارد، تعیین روش‌های تطبیق یک منحنی تجربی با یک مدل مبنا با توجه به پیش زمینه‌های آماری است. علاوه بر این، ارزیابی انحراف معیار باقی مانده، بعد از تطبیق نیز تعیین شده است. مدل مبنا هم چنین می تواند، به عنوان یک توزیع اندازه هدف برای حفظ کیفیت محصول به کار رود. این استاندارد برای موارد زیر کاربرد دارد:

الف- توزیع نرمال (لاپلاس-گوس) : پودرهای حاصل از ته نشینی، محصولات طبیعی یا چگالشی (دانه های گرده)؛

ب- توزیع لگ- نرمال (گالتون مک الیستر): پودرهای حاصل از ساییدن یا خرد کردن؛

پ- توزیع گیتس-گودین- شومن: آنالیز حداکثر مقادیر توزیع ذرات ریز؛

ت- توزیع روزین-راملر: آنالیز حداکثر مقادیر توزیع ذرات درشت؛

ث- هر مدل دیگر و یا ترکیبی از مدل‌ها، در صورتی که از یک روش برازش غیر خطی استفاده شود. (به پیوست ج مثال دو مدلی مراجعه شود).

این استاندارد می تواند به طور قابل ملاحظه ای تضمین کیفیت محصول یا بهینه سازی فرآیند مربوط به آنالیز توزیع اندازه ذرات را پوشش دهد.

۲ مراجع الزامی

مدارک الزامی زیر حاوی مقرراتی است که در متن این استاندارد ملی ایران به آن‌ها ارجاع داده شده است. بدین ترتیب آن مقررات جزئی از این استاندارد ملی ایران محسوب می شود.

در صورتی که به مدرکی با ذکر تاریخ انتشار ارجاع داده شده باشد، اصلاحیه ها و تجدید نظرهای بعدی آن مورد نظر این استاندارد ملی ایران نیست. در مورد مدارکی که بدون ذکر تاریخ انتشار به آن‌ها ارجاع داده شده است، همواره آخرین تجدید نظر و اصلاحیه های بعدی آن‌ها مورد نظر است.

استفاده از مراجع زیر برای این استاندارد الزامی است:

۱-۲ استاندارد ملی ایران شماره ۵-۱۱۶۱۷، نمایش نتایج آنالیز اندازه ذره- قسمت ۵: روشهای محاسبه مربوط به آنالیزهای اندازه ذره که از توزیع احتمال نرمال لگاریتمی استفاده می کنند.

2-2 ISO 9276-2:2001 Representation of results of particle size analysis -- Part 2:
Calculation of average particle sizes/diameters and moments from particle size distributions.

۳ نمادها، اختصارات

a محل قطع خط راست (معادله خط راست) (عرض از مبدأ)

b شیب رگرسیون خطی (معادله خط راست) (عرض از مبدأ)

d'	محل قطع پارامتر توزیع RRSB
GGS	توزیع (گیت) - گودین - شومن
LND	توزیع احتمالی نرمال لگاریتمی مطابق با استاندارد ملی ایران شماره ۵-۱۱۶۱۷
n	تعداد رده های اندازه
n_F	درجات آزادی، که تعداد نقاط داده ها (n) منهای تعداد پارامتر های مدل برازش می باشد.
N	تعداد ذرات در نمونه اندازه گیری شده
P	مجموعه ای از پارامتر های مدل، بردار
q	چگالی توزیع اندازه ذرات
$Q(x)$	توزیع تجمعی مشاهده شده، مجموع ذرات کوچکتر از x ، بین ۰ و ۱
$Q^*(x;p)$	تخمین مدل، توزیع تجمعی نظری وابسته به مدل مبنا با پارامتر های، p
r	بعد پذیری (نوع کمیت) یک توزیع، تعداد: $r=0$ ، حجم یا جرم: $r=3$
$RRSB$	توزیع روزین - راملو (اسپرلینگ و بنت) (از توزیع ولبول بدست می آید)
s	انحراف معیار LND ، لگاریتم انحراف معیار هندسی (به استاندارد ملی ایران شماره ۵-۱۱۶۱۷، مراجعه شود)
S_{ql}	مجذور میانگین انحراف معیار رگرسیون شبه خطی در مقیاس تبدیل شده
S_{res}	انحراف معیار باقی مانده ها، ریشه دوم واریانس باقی مانده
x	اندازه ذره
$X_{EQ,r}$	میانه توزیع اندازه ذره با بعدپذیری (نوع کمیت) r ، پارامتر عرض از مبدا LND
$X_{MAX,r}$	پارامتر عرض از مبدا توزیع GGS با توجه به بعد پذیری (نوع کمیت) r
$X(x)$	تبدیل x رسم شده روی محور $X = x$ برای یک توزیع نرمال و $X = Ln x$ یا $log x$ برای توزیع لگ- نرمال، توزیع روزین-راملو یا توزیع دو لگاریتمی $(log-log)$ ، X معادل با ξ در استاندارد ملی ایران شماره ۱-۸۲۰۱، و استاندارد ملی ایران شماره ۵-۱۱۶۱۷، می باشد.
$Y(Q)$	تبدیل Q رسم شده روی محور $Y = Y$ = معکوس توزیع نرمال استاندارد برای یک توزیع نرمال، به جدول ۱ برای انواع دیگر مدل ها مراجعه شود)
$Y^* = a + bX$	بیان کلی معادله برای رگرسیون خطی یک مدل توزیع تجمعی اندازه ذرات
Z	متغیر نرمال کننده بدون بعد در LND (به استاندارد ملی ایران شماره، ۵-۱۱۶۱۷ مراجعه شود)
α	پارامتر شیب توزیع GGS
ζ	متغیر انتگرال با حدود Z ، در LND
ν	نمای توزیع در $RRSB$
ω	ضریب وزنی
۴	تطبیق منحنی تجربی با مدل مرجع
۱-۴	کلیات

تخمین پارامترهای مورد استفاده در معادله های رگرسیون بیان شده در این استاندارد، از مقادیر توزیع اندازه ذرات (Q) اجزا مقادیر اندازه این ذرات، dQ و یا مقادیر چگالی (q) محاسبه می شود. پارامترهای توزیع اندازه ذرات هم چنین ممکن است، به عنوان پارامترهایی برای دیگر معادلات رگرسیونی استفاده شود.

یک مدل توزیعی معین $Q^*(x; p) = Q^*(x; a, b, \dots)$

بهبتر است با داده های اندازه گیری شده منطبق شود: $[x_i, Q_i = Q(x_i)] \quad i = 1, \dots, n$

هدف و قابلیت معادله رگرسیون، یافتن پارامترهای بهینه $p = a, b, \dots$ می باشد به گونه ای که میانگین مجذور انحراف معیار بین مقادیر Q اندازه گیری شده ($Q(x)$) و مدل $Q^*(x; p)$ به کمینه برسد.

$$s^2(p) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Q^*(x_i; p) - Q(x_i)]^2 \xrightarrow{p} \min \quad (1)$$

۲-۴ روش رگرسیون شبه خطی

مسئله بهینه سازی غیرخطی (یا به طور نسبی غیرخطی) در معادله ۱ می تواند توسط Y به یک معادله خطی برای مدل های آماری مختلف در این استاندارد به کار رود. مقادیر x ، مقادیر تبدیل یافته اندازه ذره می باشند که از هر توزیع اندازه ذره بدست می آید.

$$Y^* = Y^*(Q^*) = a + bX \quad (2)$$

حل و بهینه سازی استفاده از یک رگرسیون خطی با معادله ۲ در حالت تبدیل یافته، یک مقدار تقریبی برای معادله ۱ را به ما می دهد، که می تواند جایگزینی برای معادله رگرسیون شبه خطی ۳ باشد.

$$s_{Y^*}^2(p) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [bx + a - Q(x_i)]^2 \xrightarrow{p} \min \quad (3)$$

حل معادله ۳ انحرافات مطلق را در شکل های تبدیل یافته کاهش می دهد (به شکل ۱ مراجعه شود). این رگرسیون شبه خطی هم چنین برای تمامی توزیع اندازه ذرات استاندارد شده با استفاده از معادلات مختلف فهرست شده در جدول ۱، کاربرد دارد.

عرض ها (Y معین) تغییرات مقادیر توزیع تجمعی $Q(x)$ می باشند که به وسیله فرمول مدل مبنای مربوطه بدست می آیند.

رگرسیون شبه خطی یک روش آنالیزی می باشد و به شروع تقریبی نیازی ندارد. اما تبدیل غیرخطی محور Y باعث تبدیل غیرخطی انحراف معیارهای Y می شود. درصد انحراف معیارها باید به تفکیک در ادامه توزیع نسبت به مرکزشان در نظر گرفته شود.

بسط این روش به رگرسیون شبه خطی وزنی، تطابق بهینه را به ما نمی دهد (به پیوست ۳ مراجعه شود).

۳-۴ روش رگرسیون غیر خطی

۱-۳-۴ کلیات

یافتن پارامترهای مدل بهینه کلی در مقیاس خطی مطابق با معادله ۱ با استفاده از معادلات آنالیزی امکان پذیر نمی‌باشد؛ یک روش عددی بهینه‌سازی به نام رگرسیون غیرخطی مورد نیاز است. رگرسیون غیرخطی به یک شروع تقریبی و یک دستورالعمل عددی ریاضی نیاز دارد. اگر، در هر صورت، این روش رگرسیون غیرخطی روش مورد استفاده قرار گیرد، ممکن است یک تطابق بهینه و یک انعطاف پذیری به آزمون‌های آماری تعداد توزیع‌ها و یا به تطبیق توزیع‌های چند مدلی ناقص یا هر مدل دلخواه دیگری، انتقال یابد.

تخمین پارامترها، برای استفاده با انواع مختلف توزیع‌های استاندارد مورد استفاده، به عنوان مدل مبنا (برای مثال نرمال، LND، RRSB یا GGS) بر اساس برد‌های مختلف، وقتی علاوه بر تعداد یا یک جرم (یا حجم) توزیع در نظر گرفته شده است. علامت ستاره در معادله ۴ و ۵ نشان دهنده تخمین مدل در زمانی که نماد p پررنگ شده، نشان دهنده پارامترهای مدل است که باید بهینه شوند.

جدول ۱ - معادلات مورد استفاده برای سه مدل آماری

مدل			کمیت
GGs	RRSB	(مطابق استاندارد ملی ایران شماره، ۵-۱۱۶۱۷) DLN	
$Q_r(x) = \begin{cases} \left(\frac{x}{x_{max}}\right)^{\alpha} & \text{برای } x \leq x_{max} \\ 1 & \text{برای } x > x_{max} \end{cases}$	$Q(x; d', n) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{x}{d'}\right)^n\right]$	$Q(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi$ $z = \frac{(x - \ln x_{20R})}{s}$	مدل توزیع
x_{max}	d'	$x_{50,R}$	محل قطع (عرض از مبدأ)، a ,
α	n	$1/s$	شیب , b
$Y = \ln Q$	$Y = \ln [-\ln(1 - Q)]$	$Q(Y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^Y \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi$ $Y = \varphi^{-1}(Q)$ با توزیع نرمال استاندارد و	Y(Q)
$\ln x$	$\ln x$	$\ln x$	X(x)
$Y = \alpha X - \alpha \ln x_{max}$	$Y = nX - n \ln d'$	$Y = \frac{1}{s} X - \frac{\ln x_{20R}}{s}$	مدل خطی

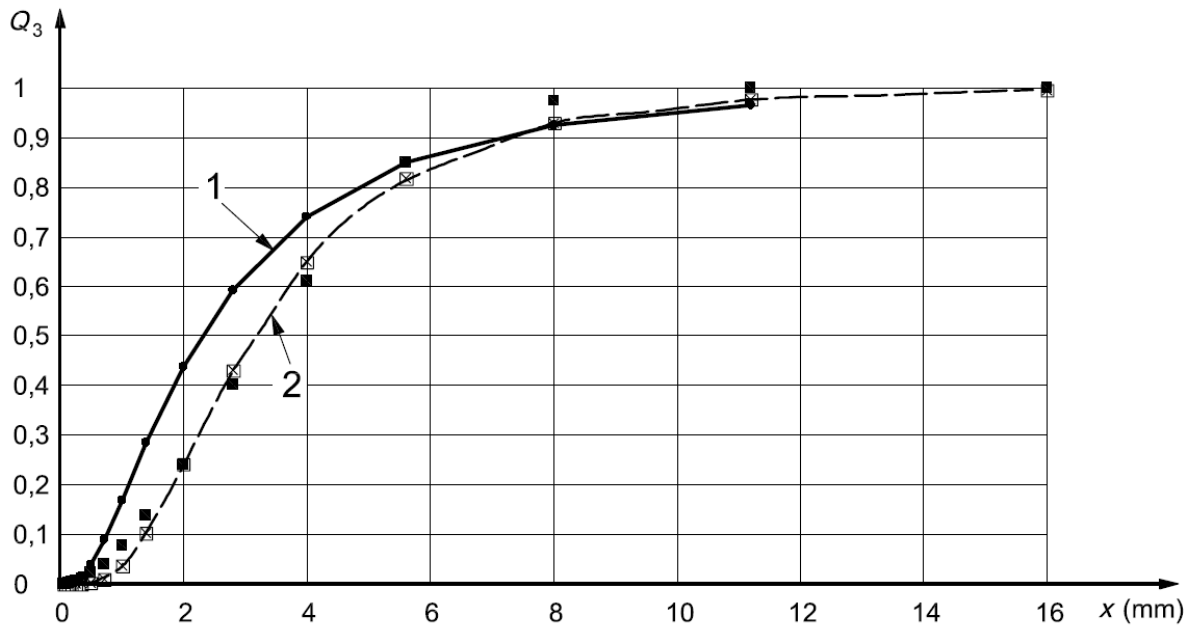
تمامی راهبردهای تخمین غیرخطی (عددی) نیاز به تخمین اولیه از پارامترهای تطبیقی، قبل از شروع روش اجرایی عددی دارند. ممکن است شروع تخمین از رگرسیون خطی با معادله ۳ بدست آمده باشد. روش اجرایی عددی ممکن است، مبنایی برای مثال روش لون برگ- مارکواردت باشد، که یک جایگزین مناسب برای روش گاوس-نیوتن است. بعضی از برنامه‌های صفحه گسترده شامل ابزار رگرسیون غیر خطی به منظور تسهیل در بهینه‌سازی عددی، برای مثال بر اساس یک کد از مرجع [۹] می‌باشند.

۴-۳-۲ معیار تخمین توزیع جرمی (یا حجمی) و توزیع عددی

کمینه مجموع مجذور انحراف معیارها (کمترین مجذورها) بین مقادیر Q اندازه‌گیری شده ($Q(x)$) و مدل ($Q(p,x)$) برای مثال یک توزیع جرمی نسبی به صورت معادله ۴ نوشته شده است.

$$S^2(p) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Q_{3,i}^*(x_i; p) - Q_3(x_i)]^2 \xrightarrow{min} p \quad (4)$$

شکل ۲ خط رگرسیون شبه خطی را از شکل ۱ به عنوان یک منحنی در مقیاس‌های خطی و رگرسیون غیر خطی از کمترین مجذورهای داده‌های مشابه نشان می‌دهد، که به وضوح تطابق بهتری از داده‌های تجربی را نشان می‌دهد. میزات مناسب بودن برازش در بند ۵ آمده است.



راهنما:

Q_3	توزیع تجمعی حجمی یا جرمی
x	اندازه ذره
۱	خط کامل رگرسیون شبه خطی
۲	رگرسیون غیر خطی - حداقل مربعات
•	نقطه برازش شبه خطی
⊠	نقطه برازش حداقل مربعات
■	$Q_{3,i}$ اندازه‌گیری شده

شکل ۱- توزیع لگ-نرمال: رگرسیون شبه خطی از شکل ۱ در مقیاس خطی و رگرسیون غیر خطی از کمترین

مجذورهای داده‌های مشابه، ($Q_3 - Q_{3,i}^*$)

مثال‌هایی از چگونگی داده‌های تجربی آنالیز غربال، بدست آمده از استاندارد ملی ایران شماره ۱-۸۲۰۱، [مطابق با پیوست الف این استاندارد]، که می‌تواند به وسیله مدل‌های حالت RRSB یا GGS که در پیوست الف نشان داده شده تقریب زده و تبدیل شوند.

تاثیر نوع کمیت توزیع بر روی تناسب برازش در پیوست ب نشان داده شده است. انواع مختلف کمیت مکانی بر روی تطابق گسترده‌های مختلف اندازه‌ها تاکید دارند.

پیوست پ مثالی از محاسبات صفحه گسترده برای روش عددی برازش غیر خطی در شکل ۲ را نشان می‌دهد. علاوه بر آن مثالی از توزیع دو مدلی با پنج پارامتر مدل برای بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم یکسان نشان داده شده است.

۳-۳-۴ معیار تخمین تعداد توزیع‌ها به تنهایی و اندازه نمونه مشخص تحت عنوان تعداد ذرات، N معیار تخمین دیگری برای برازش غیر خطی، که می‌تواند فقط برای تعداد توزیع‌ها و اندازه نمونه مشخص (N) استفاده شود، معیار حداقل χ^2 می‌باشد.

$$\chi^2 = N \sum_{i=1}^N \frac{[Q_0(x_i) - Q_0(x_{i-1})] - [Q_0^*(x_i, p) - Q_0^*(x_{i-1}, p)]^2}{Q_0^*(x_i, p) - Q_0^*(x_{i-1}, p)} \xrightarrow{p} \min \quad (5)$$

این معیار می‌تواند بهبود صحت را از طریق اندازه‌گیری تعداد ذرات بزرگ‌تر، کمی کند. این معیار واریانس تعداد ذرات مشاهده شده در صورت کسر معادله ۵ را با مقدار پیش بینی شده به وسیله آمارهای پواسون در مخرج هر طبقه اندازه، مقایسه می‌کند.

پیوست ت نشان دهنده کاربرد آزمون χ^2 توزیع‌های عددی اندازه نمونه مشخص می‌باشد که اهمیت اندازه‌های نمونه بزرگ برای تفسیر آنالیز داده‌ها را نشان می‌دهد.

۵ مناسب بودن برازش، انحراف معیار باقی مانده‌ها و آنالیز داده‌های بدست آمده

رگرسیون پایه (معادله ۱) برای بدست آوردن پارامترهای بهینه $p = a, b, \dots$ به گونه‌ای که مجذور میانگین انحراف معیار میان مقادیر Q اندازه گیری شده و مدل Q^* حداقل، استفاده می‌شود.

بنابراین، مجموع خطا (مجذور اختلاف بین مدل و مقادیر اندازه گیری شده) که هم‌چنین به عنوان واریانس باقی مانده میانگین شناخته می‌شود، یک پارامتر کیفی مناسب برای تطابق می‌باشد. مجذور ریشه، انحراف معیار باقی مانده‌ها (S_{res})، به وسیله معادله ۶ بیان می‌گردد.

$$S_{res}(p) = \sqrt{\frac{1}{n_F} \sum_{i=1}^n (Q^*(x_i, p) - Q(x_i))^2} \quad (6)$$

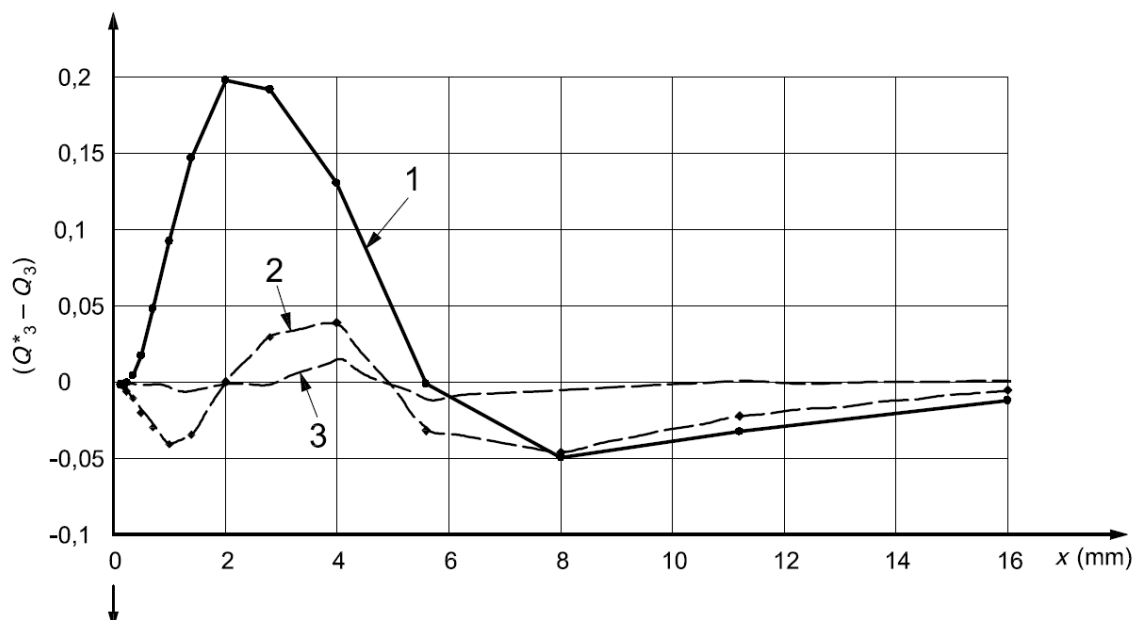
که در این معادله n_F بیان گر تعداد درجات آزادی، که برابر با تعداد نقاط داده (n) منهای تعداد پارامترهای برازش (دو پارامتر a و b در مدل‌های جدول ۱) می‌باشد.

معادله ۶ معادله‌ای برای محاسبه انحراف معیار یک توزیع می‌باشد. معادله ۶ ممکن است برای انتخاب بهترین مدل توزیع و هم‌چنین برای کمی کردن کیفیت برازش چندین روش رگرسیون در یک مدل توزیع به کار رود.

تفسیر نظری آماری انحراف معیار باقی مانده‌ها به اندازه گیری‌های مستقل بین طبقه‌های اندازه‌ای مختلف نیاز دارد. این مسئله به طور دقیق در مورد آنالیز الک به وسیله الک کردن مستقل (موازی) هر الک به تنهایی با نمونه ورودی مجزا، قابل دست یافتن است.

مرتب کردن الکها در حالت عمودی به ایجاد خطا می‌انجامد. ولی حتی برای نقاط داده‌ایی در طبقه بندی اندازه‌ای مختلف که به طور کامل مستقل نیستند، معادله ۶ بهترین روش را برای مقایسه نسبی نتایج رگرسیون نشان می‌دهد.

برای مثال رگرسیون غیرخطی به توزیع لگ-نرمال در شکل ۲ انحراف معیار Q_3 باقی مانده ها (S_{res}) را از ۰٫۰۹۹۶ برای رگرسیون شبه خطی به ۰٫۰۲۶۲ کاهش می‌دهد. مدل RRSB کمترین انحراف معیار ۰٫۰۰۵۴ را بعد از کاربرد روش رگرسیون غیر خطی می‌دهد. باقی مانده‌های متناظر آن‌ها در شکل ۳ رسم شده است. برای آنالیز داده‌های اکتشافی، تمرکز روی داده - ساختار، برون هسته و مدل‌های بدست آمده به وسیله داده‌ها، می‌باشد. روش‌های آنالیز داده‌های اکتشافی عموماً گرافیکی می‌باشند. نمایش گرافیکی انحراف‌های باقی مانده بین مقادیر اندازه گیری شده (Q_3) و مقادیر مدل (Q_3^*) برای بررسی روندهای سامانه‌ای و تصادفی بودن توزیع‌ها، توصیه می‌شود. (به شکل ۳ مراجعه گردد).



راهنما:

$Q_3^* - Q_3$	
x	اندازه ذره
۱	باقی مانده‌های LND، برازش شبه خطی
۲	باقی مانده‌های LND، برازش غیر خطی
۳	باقی مانده‌های RRSB، برازش خط خمیده
•	نقطه برازش شبه خطی
◆	نقطه برازش غیر خطی
■	نقطه برازش خط خمیده

شکل ۲ - انحرافات باقی مانده مقادیر تجربی $Q_3(x)$ ، به رگرسیون شبه خطی و مقادیر رگرسیون غیر خطی (توزیع لگ-نرمال) ($Q_3(x)$) از شکل ۲؛ به علاوه انحراف معیار باقی مانده رگرسیون غیر خطی (RRSB) رسم شده است. (به پیوست الف مراجعه گردد).

۶ نتیجه گیری

تاثیر نوع مدل توزیع برای توزیع لگ-نرمال (RRSB) و مدل‌های حالت GGS، در پیوست الف قابل مشاهده است. علاوه بر آن، مقایسه در پیوست الف، نشان می‌دهد که انتخاب مدل توزیع صحیح مهم‌تر از روش‌های مختلف رگرسیون می‌باشد.

به طور خلاصه، برازش داده‌های اندازه ذرات به یک مدل توزیع به موارد زیر بستگی دارد:

(۱) روش بهینه سازی (برای مثال، خطی، شبه خطی، غیر خطی)؛

(۲) معیار بهینه سازی؛

(۳) نوع داده - چگالی (q)، توزیع تجمعی (Q) یا تفاضلی (dQ)؛

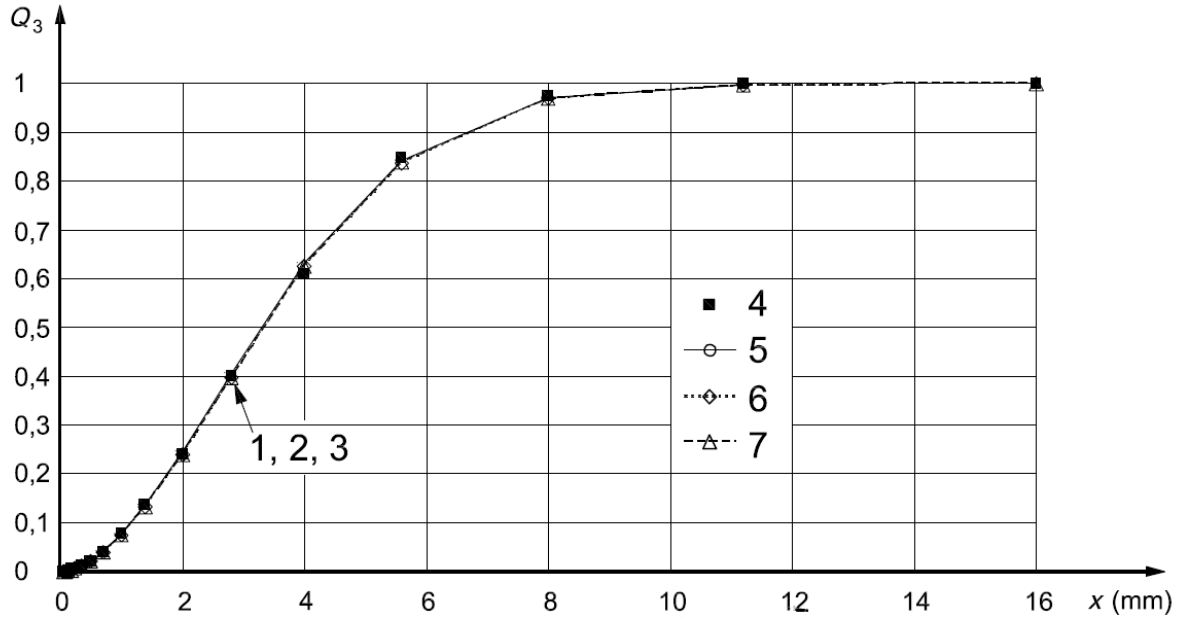
(۴) نوع کمیت، توزیع عددی یا توزیع جرمی/حجمی؛

(۸) کوچکترین و بزرگترین اندازه‌های ذرات در توزیع؛

توصیه می‌شود که نمایش گرافیکی کاربرد هر تبدیل داده و نتایج محاسبات در دستور کار قرار گیرد. مطلوبیت برازش نباید به تنهایی بررسی شود بلکه با مدل مبنای متناظر مقایسه گردد. برای مثال روش درون‌یابی لبه‌ای مکعب، منتج به برازش بهتر می‌شود اما پارامترهای مدل از لحاظ فیزیکی معنی دار نمی‌باشد.

پیوست الف
(اطلاعاتی)

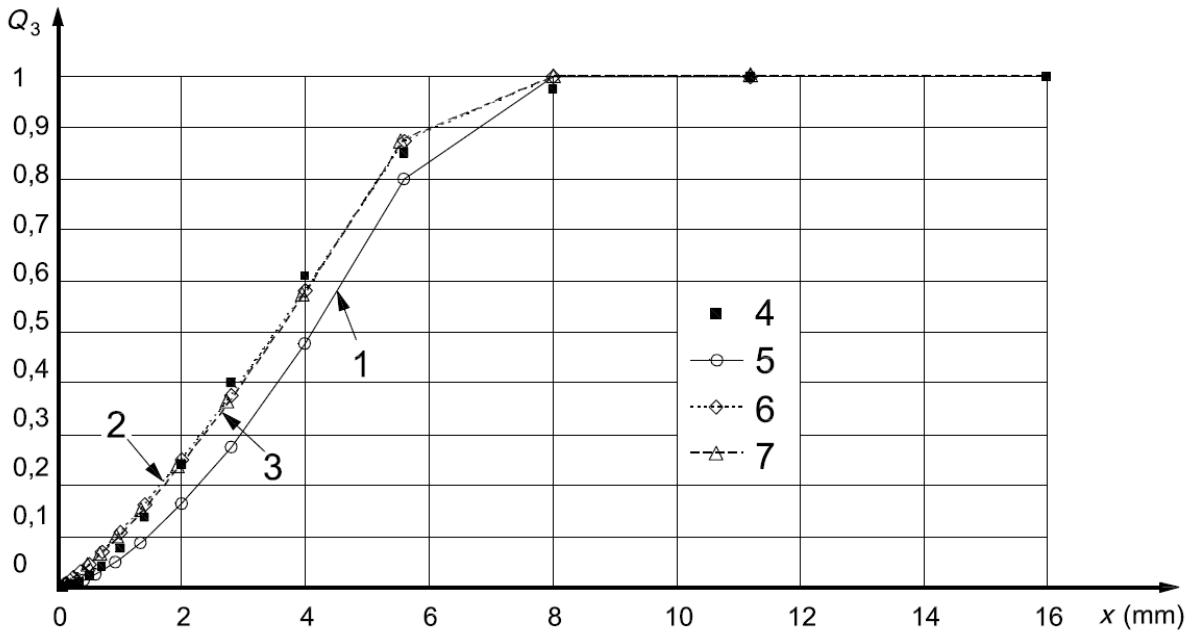
تأثیر مدل روی مناسب بودن برازش رگرسیون



راهنما:

توزیع تجمعی حجمی یا جرمی	Q_3
اندازه ذره	x
رگرسیون شبه خطی	۱
رگرسیون شبه خطی وزنی	۲
رگرسیون غیر خطی - حداقل مربعات	۳
اندازه گیری شده	$Q_{3,i}$
نقطه برازش شبه خطی	۵
نقطه برازش شبه خطی وزنی	۶
نقطه برازش حداقل مربعات	۷

شکل الف-۱ - مثالی از تخمین RRSB برای داده های آنالیز الک مطابق استاندارد ملی ایران شماره، ۸۲۰۱-۱، پیوست الف: یک رگرسیون شبه خطی (کاملاً خطی) (انحراف معیار Q_3 - باقی مانده ها ۰/۰۰۶۹۶)؛ یک رگرسیون شبه خطی وزنی (۰/۰۰۵۳۶)؛ و یک رگرسیون غیر خطی (۰/۰۰۵۳۵)



راهنما:

توزیع تجمعی حجمی یا جرمی	Q_3
اندازه ذره	x
رگرسیون شبه خطی	۱
رگرسیون شبه خطی وزنی	۲
رگرسیون غیر خطی - حداقل مربعات	۳
اندازه گیری شده $Q_{3,i}$	۴
نقطه برازش شبه خطی	۵
نقطه برازش شبه خطی وزنی	۶
نقطه برازش حداقل مربعات	۷

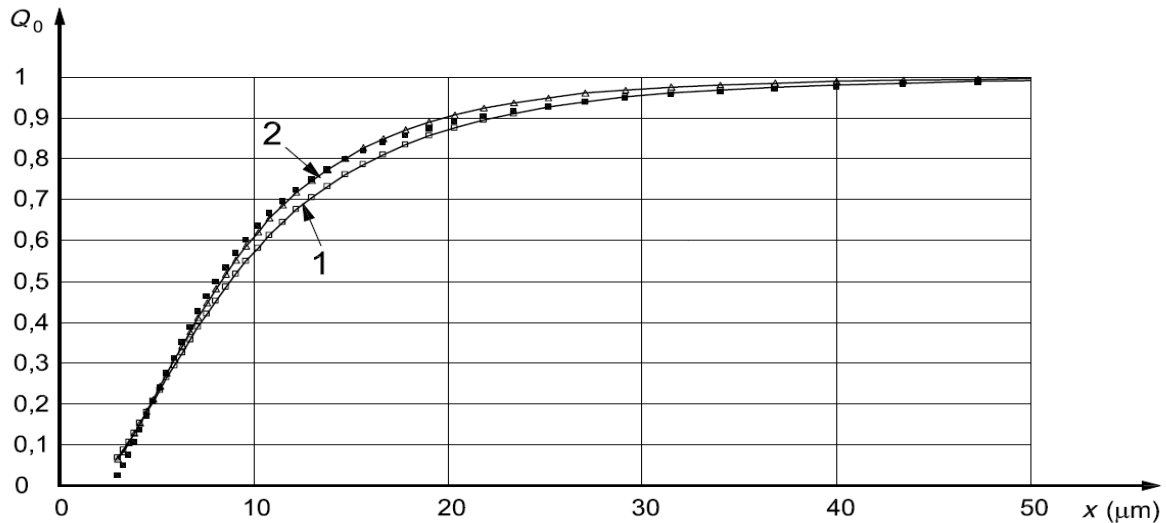
شکل الف ۲ - مثالی از تخمین GGS برای داده های آنالیز الک مطابق استاندارد ملی ایران شماره، ۸۲۰۱-۱، پیوست الف: یک رگرسیون شبه خطی (کاملاً خطی) (انحراف معیار Q_3 - باقی مانده ها ۰/۰۵۴)؛ یک رگرسیون شبه خطی وزنی (۰/۰۲)؛ و یک رگرسیون غیر خطی (۰/۰۵۳۵)

پیوست ب (اطلاعاتی)

تأثیر نوع کمیت توزیع بر نتیجه رگرسیون

این مثال اندازه گیری ۱۲۳ ۸۰۷ ذره لاکتوز آسیاب شده را با استفاده از شمارش گر کاهنده نشان می دهد. نتیجه اولیه (Q_0) در یک LND قرار گرفته (شکل ب-۱) و همچنین به یک توزیع حجمی $Q_{3,2}$ با استفاده از معادلات لحظه عددی مطابق با، استاندارد ISO 9276-2:2001، تبدیل می شود. (حجم طبقه اندازه ذرات محاسبه شده از طریق تعداد ذرات ضربدر توان سوم اندازه ذرات). بعد از تبدیل عددی مدل آزاد، رگرسیون LND ($Q_{3,2}$) (به شکل ب-۲ مراجعه گردد) به یک انحراف معیار کمی متفاوت منجر می شود.

شکل ب-۳ رابطه بین یک LND حجم و عدد را مطابق استاندارد ملی ایران شماره، ۵-۱۱۶۱۷، به عنوان یک جابجایی موازی افقی در مقیاس های تبدیل یافته نشان می دهد. تنظیمات متفاوتی از روش های برازش با یک اندازه ذره ایی در مقیاس لگاریتمی در شکل ب-۴ قابل مشاهده است. در این مثال، برازش توزیع عددی، اندازه های کوچکتر از $20 \mu m$ را ترجیح می دهد. در حالی که برازش توزیع حجمی، اندازه های بزرگتر از $20 \mu m$ را ترجیح می دهد که مربوط به بزرگترین عدد نقاط داده می باشد. جابجایی موازی بر اساس ویژگی LND خاص، باعث نتایج متفاوتی در میانه (میانگین اندازه های $8,3 \mu m$ و $51 \mu m$) یا در آخر توزیع می شود.

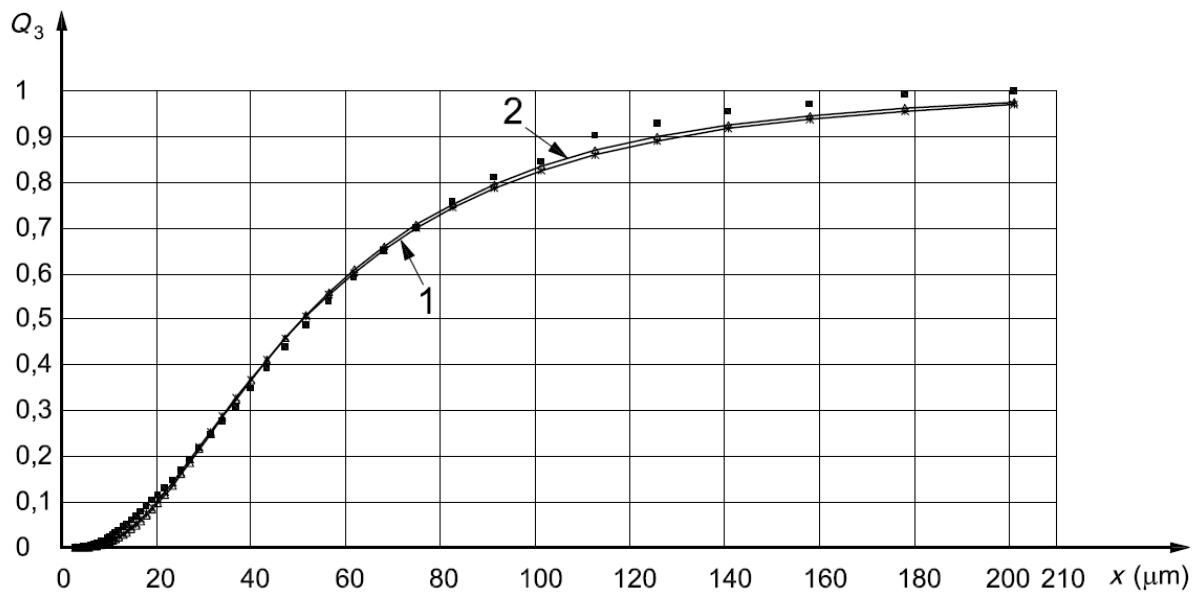


راهنما:

Q_0	تعداد توزیع تجمعی
x	اندازه ذره
۱	رگرسیون شبه خطی
۲	رگرسیون غیر خطی
■	اندازه گیری شده $Q_{3,2}$
□	نقطه برازش شبه خطی
△	نقطه برازش غیر خطی

شکل ب-۱- توزیع لگ-نرمال: روش های توزیع عددی مطابق شکل ۲، یک رگرسیون غیر خطی، یک انحراف

معیار $s = 0,68$ و یک اندازه میانگین $x_{3,0,0} = 20 \mu m$ را می دهد.

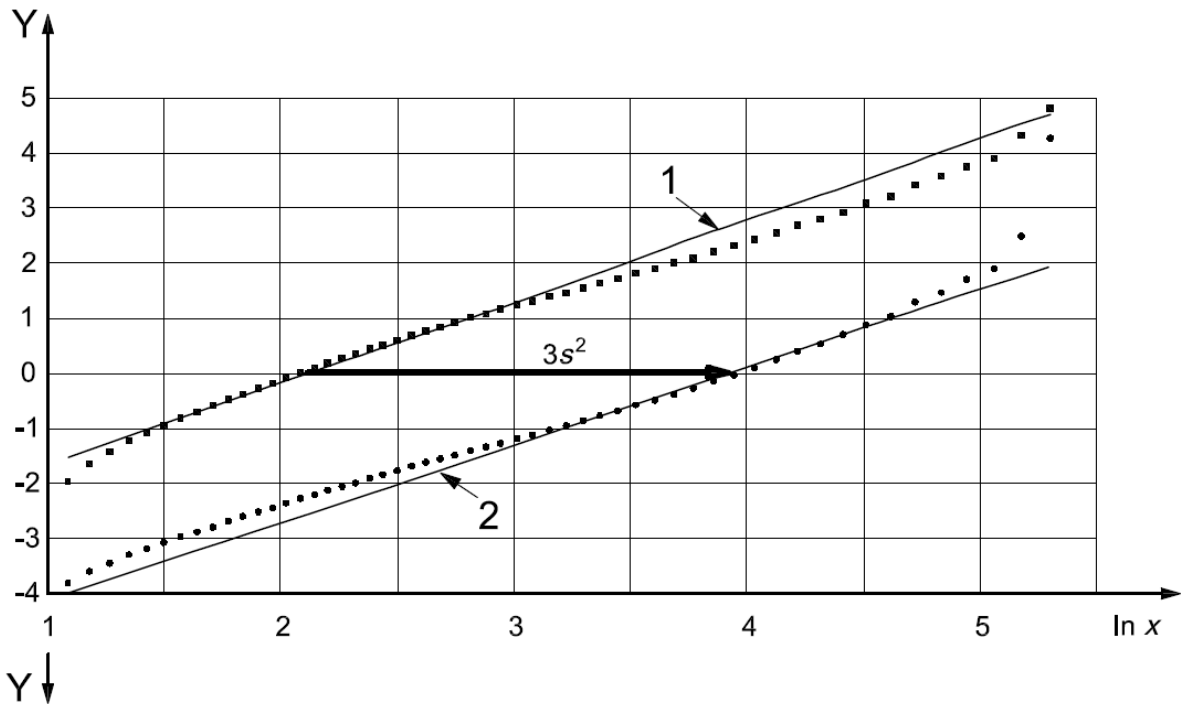


راهنما:

توزیع تجمعی حجمی یا جرمی	Q_3
اندازه ذره	x
رگرسیون شبه خطی وزن شده	۱
رگرسیون غیر خطی	۲
محاسبه شده از $Q_{0.1}$ اندازه گیری شده	■
نقطه برازش شبه خطی وزن شده	★
نقطه برازش غیر خطی	△

شکل ب-۲- توزیع لگ-نرمال: روش های توزیع عددی مطابق شکل ۲، یک رگرسیون غیر خطی، یک انحراف

معیار $s = 0.71$ و یک اندازه میانگین $x_{50.5} = 51 \mu m$ را می دهد.

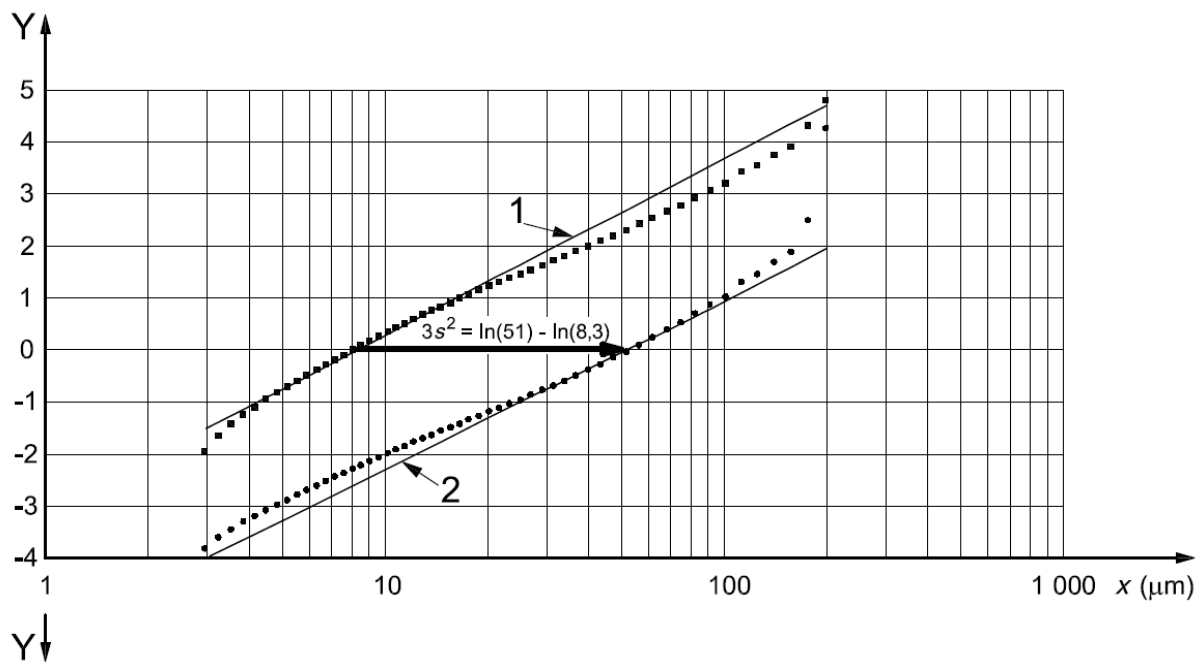


راهنما:

x	اندازه ذره
Y	کمیت توزیع نرمال استاندارد
۱	رگرسیون غیر خطی - Q_1
۲	رگرسیون غیر خطی - Q_2
■	اندازه گیری شده $Q_{n,i}$
●	محاسبه شده $Q_{t,i}$

شکل ب-۳- توزیع لگ-نرمال: توزیع عددی اندازه گیری شده و برای هر طبقه به صورت عددی محاسبه شده،
توزیع حجمی

شکل ب-۳ هیچ جابجایی به طور کامل دقیقی را از خطوط رگرسیون که از یک تبدیل آنالیزی مطابق با استاندارد ملی ایران شماره ۵-۱۱۶۱۷، حاصل می شود را نشان نمی دهد. این خطوط نتیجه رگرسیون های غیر خطی در مقیاس اصلی x در مقابل Q داده های عددی و به طور مجزا برای داده های حجمی، می باشند. مدل توزیع لگ-نرمال یک جابجایی $3s^2$ برای تبدیل کمیت از عدد به حجم مطابق با استاندارد ملی ایران شماره ۵-۱۱۶۱۷، را به همراه دارد. این جا یک جابجایی $1/81$ قابل مشاهده است که به معنی $s = 0.77$ می باشد. (در مقایسه با 0.68 در شکل ب-۱ و 0.71 در شکل ب-۲).



راهنما:

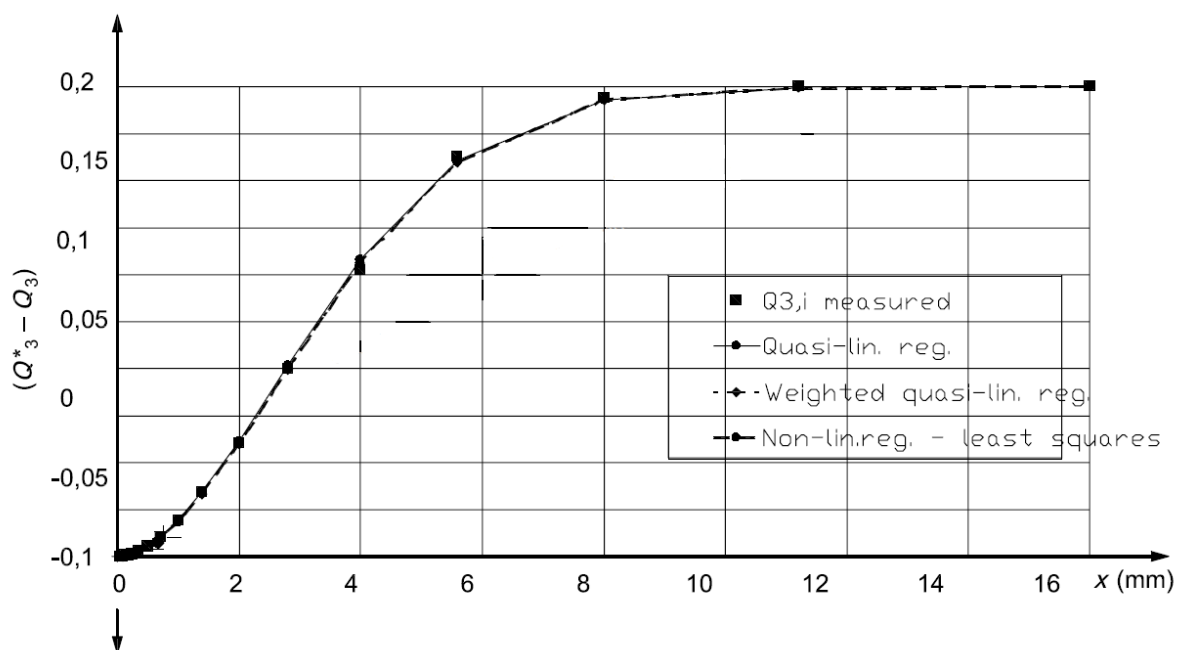
اندازه ذره	x
کمیت توزیع نرمال استاندارد	Y
رگرسیون غیر خطی - $Q_{0.2}$	۱
رگرسیون غیر خطی - $Q_{0.5}$	۲
اندازه گیری شده $Q_{0.1}$	■
محاسبه شده $Q_{0.1}$	●

شکل ب-۴- توزیع لگ-نرمال از شکل ب-۳ با اندازه طول ذره ایی در مقیاس لگاریتمی

پیوست پ (اطلاعاتی)

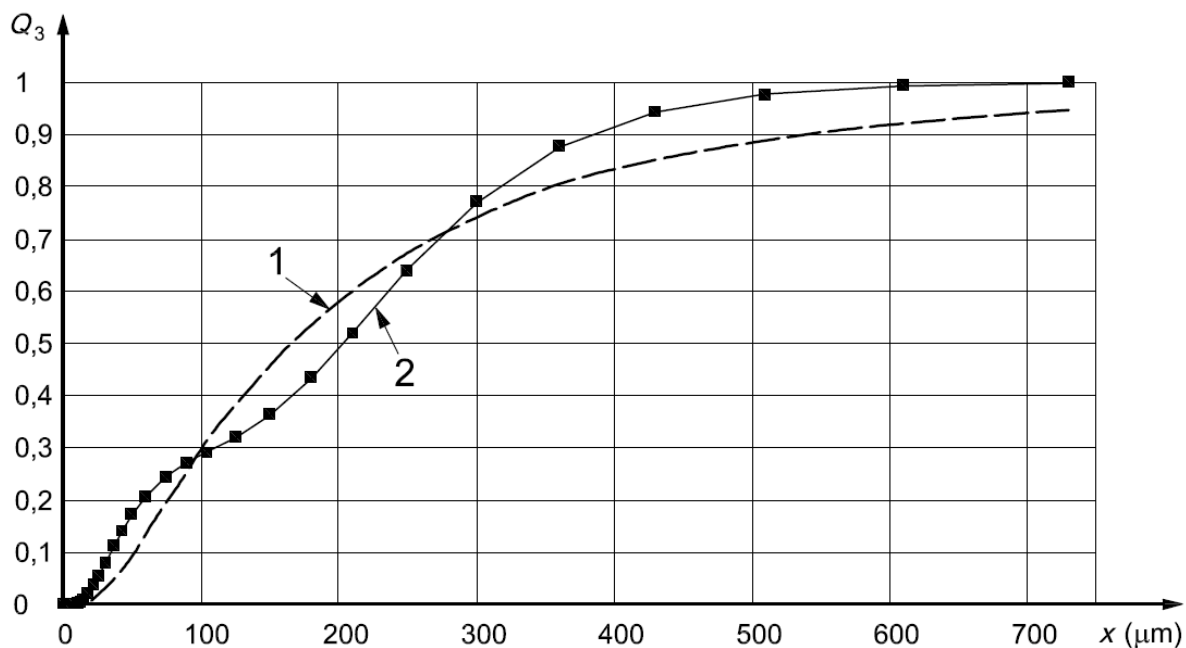
مثال هایی برای رگرسیون غیر خطی

پ-۱ مثال صفحه گسترده برای رگرسیون غیر خطی به توزیع لگ-نرمال
تمام راهبرد های تخمین عددی به یک تخمین اولیه پارامترهای تطبیقی قبل از شروع روش عددی نیاز دارند. رگرسیون شبه خطی در معادله ۳ به عنوان تخمین اولیه استفاده شده است. روش عددی برای مثال روش لون برگ - مارکارت، که جایگزینی مناسب برای روش گاوس-نیوتن است، مطابق می باشد. برای این مثال از یک برنامه صفحه گسترده که دارای یک ابزار رگرسیون غیر خطی بر اساس یک کد از مرجع می باشد، استفاده شده است. پارامترهای شروع در شکل ۱ به وسیله معادله ۳ به یک میانگین $2,29 \text{ mm}$ و انحراف معیار $0,865$ ، محاسبه شده است. صفحه گسترده پ-۱ پارامتر های حل کننده بهینه شده $3,13 \text{ mm}$ و انحراف معیار $0,638$ را نشان می دهد که در شکل ۲ ترسیم شده است.

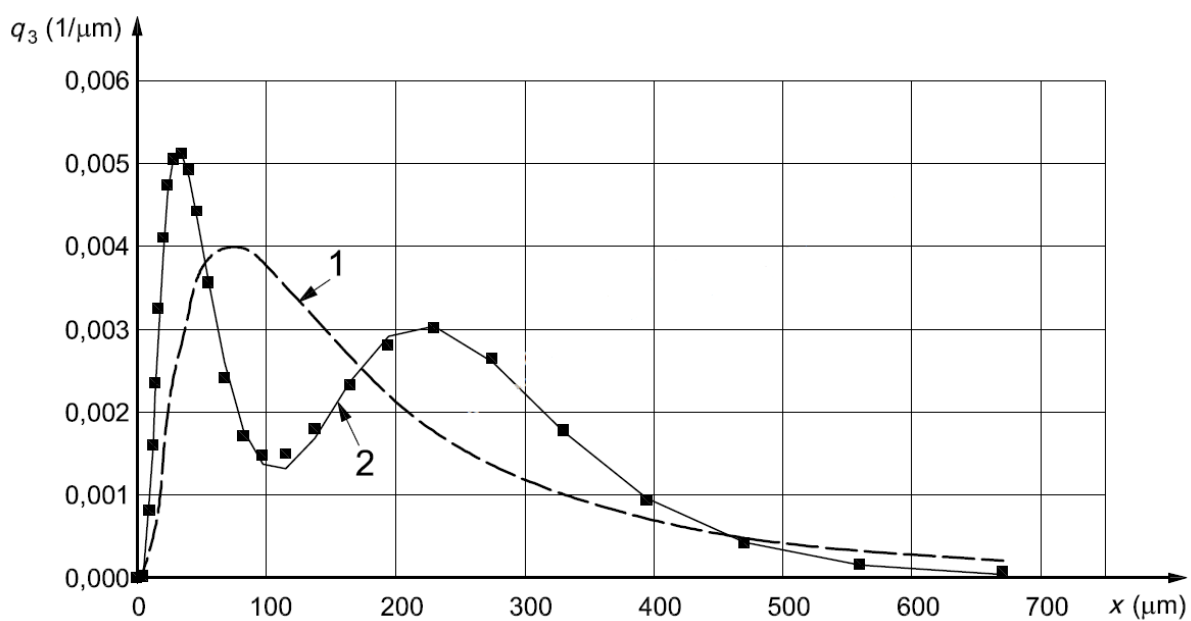


شکل پ-۱-۱ صفحه گسترده

پ-۲ مثالی از توزیع دو مدلی با پنج پارامتر
در مثال نتیجه اندازه گیری شکست نور لیزر در گرده های قهوه، صفحه گسترده در بند پ-۱ به یک توزیع لگ-نرمال ثانویه و یک نسبت اختلاط بسط داده شد. برای تخمین پارامترهای اولیه، رگرسیون شبه خطی به همراه معادله ۳ میانگینی از $134 \mu\text{m}$ و یک انحراف معیار $0,874$ را می دهد. از این پارامترها برای شروع استفاده شده است: هر دو انحراف معیار، $0,874$ ، کمیت های x_{90} و x_{10} با $35 \mu\text{m}$ و $370 \mu\text{m}$ به عنوان مقادیر میانگین و $0,5$ به عنوان نسبت اختلاط می باشند.



شکل پ ۱-۲ الف



شکل پ ۱-۲ ب

راهنما:

- Q_3 توزیع تجمعی حجمی یا جرمی
- x اندازه ذره
- q_3 چگالی توزیع جرمی یا حجمی
- ۱ LND all:s $s_{res} = 0.0591$
- ۲ LND1 + LND2: $s_{res} = 0.017$
- اندازه گیری شده

شکل پ-۱- صفحه گسترده بسط داده شده برای قهوه نتایج زیر را محاسبه کرد: انحراف معیار لگاریتمی 0.625 و 0.377 ، مقادیر متوسط $47.9 \mu m$ و $256.3 \mu m$ و یک کسر حجمی درشت 0.675 .

پیوست ت (اطلاعاتی)

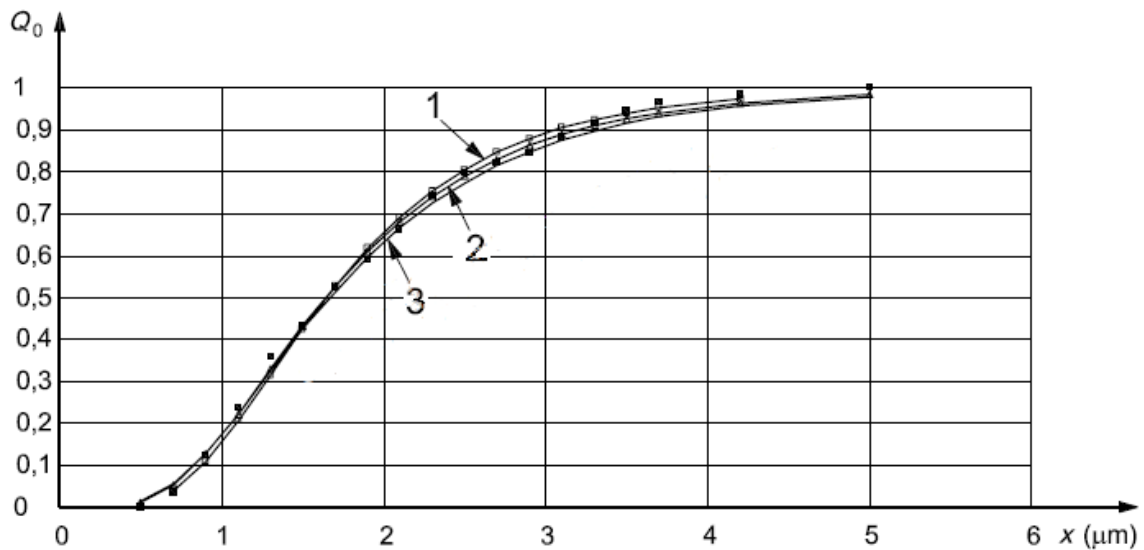
آزمون x^2 توزیع های عددی نمونه با اندازه مشخص

نتیجه اندازه گیری شمارش دستی میکروسکوپی ۴۲۱ کره شیشه ای به همراه رگرسیون غیر خطی حداقل مربع های مقادیر Q_0 در شکل ت-۱ با یک اهمیت برازش منطقی ۰٫۰۱۶۵، قرار گرفته است.

معیار تخمین دیگری برای برازش غیر خطی، که تنها برای توزیع های عددی و اندازه نمونه مشخص N کاربرد دارد، معیار مینیمم x^2 معادله ۵ می باشد.

شکل ت-۲ و ت-۳ نمونه هایی را برای آزمون آماری بر اساس معیار x^2 نمایش می دهند. و می تواند افزایش دقت زمان آنالیز تعداد ذرات بزرگتر را تعیین کند. این معیار، واریانس تعداد ذرات را در سمت راست صورت کسر معادله ۵ با مورد پیش بینی شده توسط آمار پواسون در مخرج هر طبقه اندازه، مقایسه می کند.

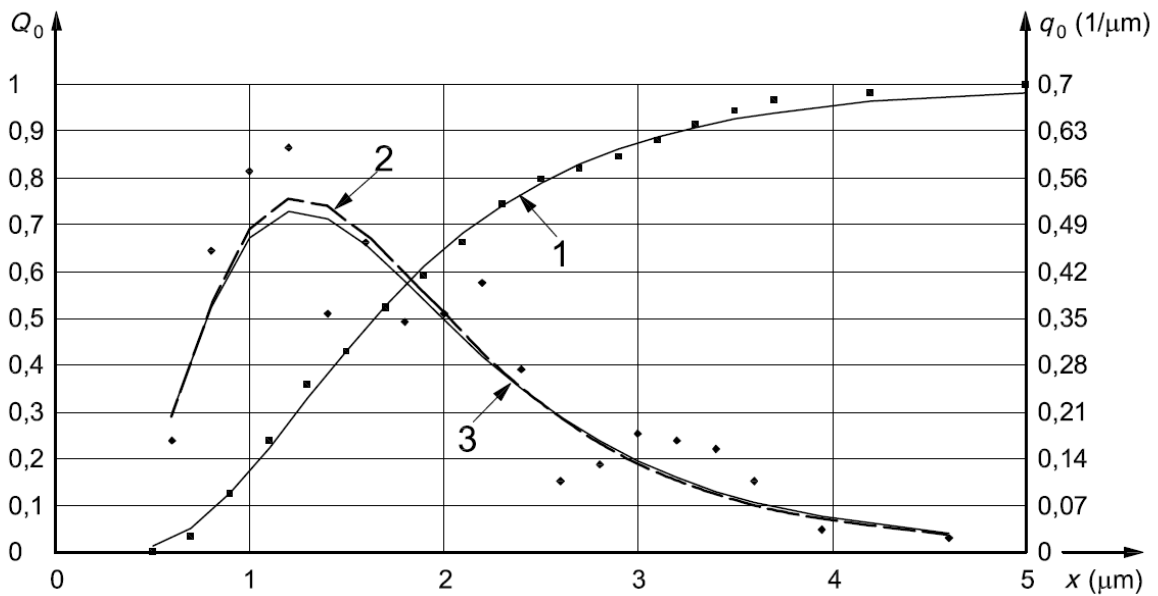
معیار کمینه x^2 از طریق کاهش اختلاف بین تعداد مطلق شمارش شده و تخمین زده شده در رده ها، که از اختلاف بین مقادیر Q_0 در معادله ۵ ناشی می شود، ارائه می گردد. بنابراین بهتر است برازش در شکل ت-۲ و ت-۳ برای مقادیر چگالی نشان داده شود.



راهنما:

Q_n	تعداد توزیع تجمعی
x	اندازه ذره
۱	رگرسیون شبه خطی - Q_0
۲	رگرسیون غیر خطی - حداقل مربعات - Q_0
۳	رگرسیون غیر خطی - x^2 - Q_0
□	نقطه برازش شبه خطی
△	نقطه برازش حداقل مربعات

شکل ت-۱- توزیع لگ-نرمال: روش های استفاده شده شبیه به آن هایی که در شکل ۲ نشان داده شده است، می باشند، انحراف معیار باقی مانده ($Q_0 - Q_0$) برابر ۵ ۰٫۰۱۶ می باشد.

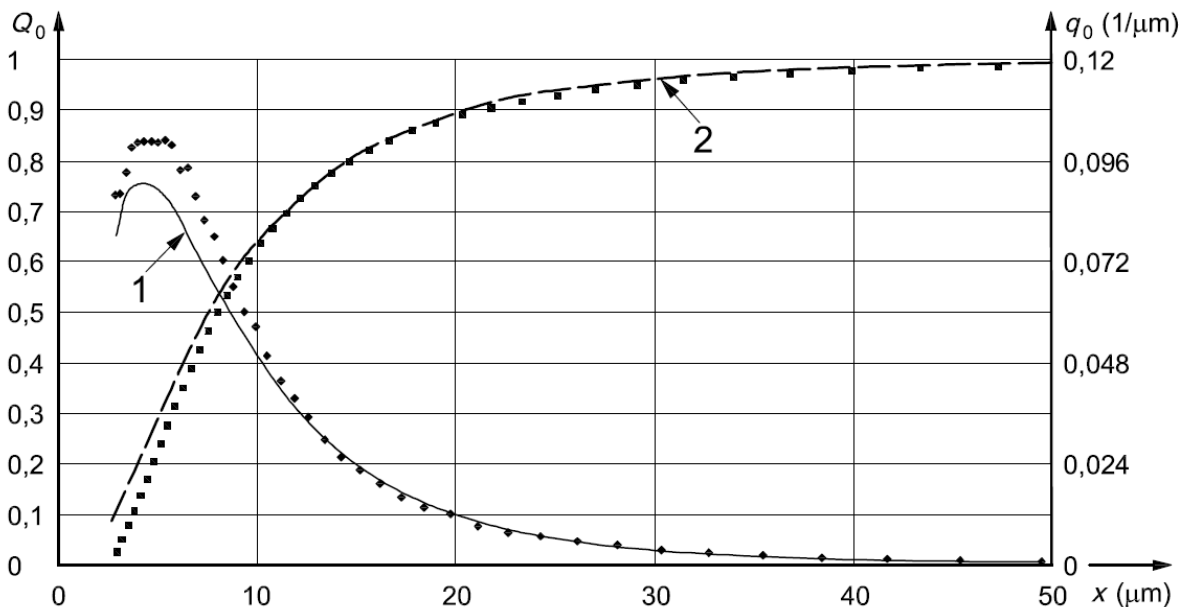


راهنما

Q_0	تعداد توزیع تجمعی
x	اندازه ذره
q_0	تعداد چگالی توزیع
۱	رگرسیون غیر خطی - حداقل مربعات - Q_0
۲	q_0 محاسبه شده از dQ_0
۳	رگرسیون غیر خطی - $q_0 - x^2$
■	$Q_{0,i}$ اندازه گیری شده
●	$q_{0,i}$ اندازه گیری شده

شکل ت-۲ توزیع لگاریتمی نرمال $Q_0(x)$ از شکل ت-۱ و توزیع چگالی محاسبه شده (خط نقطه چین) در مقایسه با رگرسیون x^2 تعداد ذرات از $q_0(x)$

رگرسیون غیر خطی - حداقل مربع ها - Q_0 که در شکل ت-۱ و ت-۲ ترسیم شده است از کاهش اختلاف مقادیر شمارش شده و تخمین زده شده ناشی شده است. اختلاف مقادیر Q_0 مدل تخمینی LND به وسیله عرض طبقه برای بدست آمدن مقادیر q_0 ترسیم شده در شکل ت-۲، خط ۲، تقسیم می شود. و قابل مقایسه با رگرسیون x^2 (خط ۳) نقاط داده ای q_0 اندازه گیری شده به صورت مستقیم می باشند.



راهنما:

- Q_0 تعداد توزیع تجمعی
- x اندازه ذره
- q_0 تعداد چگالی توزیع
- ۱ رگرسیون غیر خطی - $Q_0 - x^2$
- ۲ محاسبه شده از $Q_0 - x^2$
- $Q_{0,i}$ اندازه گیری شده
- $q_{0,i}$ اندازه گیری شده

شکل ت-۳- مثال دیگری برای توزیع لگ-نرمال: معیار x^2 مربع اختلاف عددی را به وسیله عدد تخمین زده شده، تقسیم می کند، بنابراین اعداد بزرگ مجوز برای انحراف بیشتر را دارا می باشند.

آزمون آماری - χ^2 مشاهده شده (که برابر با ۲۸٫۶ در مثال شکل ت-۲ که برای مجموع ۱۸ رده محاسبه شده است، می باشد. برای مثال ۱۵ درجه آزادی) را با یک مقدار χ^2 نظری ۲۵ با ۵٪ خطا یا ۳۰٫۶ با ۱٪ خطا مقایسه می کند. این خطاها بیان کننده ریسک رد کردن ناصحیح یک فرضیه صحیح می باشند. (توزیع لگ-نرمال). با یک درصد ریسک برای یک مردود کردن ناصحیح، نمی توان توزیع لگ-نرمال را در مثال شکل ت-۲ قرار داد. این ارزیابی نشان دهنده کیفیت بالاتر اطلاعات نسبت به برازش بهتر از حداقل برازش مربعات Q_0 که ۰٫۱۶۵ است، می باشد.

با قاطعیت می توان تعداد زیادی ذرات اندازه گیری شده (به مثال شکل ت-۳ مراجعه شود) توزیع لگ-نرمال را بیرون نگه داشت. معیار x^2 مربع اختلاف تعداد را به وسیله عدد تخمین زده شده تقسیم می کند. بنابراین اعداد بزرگ مجوز انحراف معیار بیشتر را دارند. اما برای مثال $\chi^2 = ۲۰۹$ به عنوان مجموع ۵۶ طبقه محاسبه شده، ۵۳ درجه آزادی باید با یک مقدار χ^2 نظری ۷۱ برای ۵ درصد خطا یا ۸۰ برای یک درصد خطا مقایسه گردد.

آزمون χ^2 یک افزایش را در قطعیت مورد انتظار مدل توزیع یا یک توزیع هدف که از افزایش اندازه نمونه حاصل می شود مشخص می کند. از این آزمون باید به دقت استفاده شود زیرا چنین آزمونی می تواند تفسیر داده های اطلاعاتی را انجام دهد ولی نمی تواند به صورت خودکار آن را جایگزین کند. دیگر آزمون های آماری به پیش شرایطی نیاز دارند که به وسیله داده های آنالیز اندازه برآورد نمی شود. آزمون F، آزمونی است که ممکن است برای بررسی این که دو نتیجه از یک منبع می آید، استفاده شوند. این آزمون به انحراف معیارها از توزیع نرمال خطاها بسیار حساس می باشد. مطابق ISO/TR 13425، برای گزینش و یک مرور کلی تمام استانداردهای مرجع، راهنمایی، گزارشات فنی و DIS که مطابق ISO/TC 69 از دید کاربر تدوین شده است، راهنمایی هایی ارائه می کند. مطابق استاندارد ISO 11453، روش هایی را برای آزمون ها و فواصل اطمینان مربوط به نسبت ها شامل می - شود. برای مثال مقادیر Q تکی به جای توزیعی.

پیوست ث
(اطلاعاتی)
رگرسیون شبه خطی وزنی

ث-۱ رگرسیون شبه خطی وزنی

رگرسیون خطی داده های تجربی تبدیل یافته اجازه ارائه مناسبی از انحراف معیار را نمی دهد. بنابراین انحراف معیار ها بین داده ها و نقاط متناظر مدل باید وزن شوند. فاکتورهای وزنی (ω) بیان کننده جبران ریاضیاتی تبدیل غیر خطی می باشد. آن ها می توانند به وسیله معکوس تبدیل یافته $Y(Q)$ محاسبه گردند. زمانی که داده های مشابه، همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده، به همراه خط رگرسیون شبه خطی شکل ۱ در یک شکل تبدیل نیافته ترسیم شود، داده های اصلی یک عدم برازش را بین انحراف معیارهایی که در میانه و در آخر عمل توزیع اتفاق می افتد را آشکار می کنند.

مربع میانگین انحراف معیارهای عمودی بین مقادیر مدل و مقادیر اندازه گیری شده در شکل ث-۱ در مقیاس اصلی، با معرفی فاکتورهای شکل ث-۱ وزنی در رگرسیون، به وضوح کاهش یافته است. این نتیجه روند رگرسیون آنالیزی، دارای باقی مانده های Q_3 با انحراف معیار استاندارد، ۱ ۰۳۲ می باشد. اما روش عددی رگرسیون غیرخطی در شکل ۲ نتیجه بهتر ۲ ۰۲۶ را می دهد. با این وجود رگرسیون شبه خطی وزن شده به دلیل روند آنالیزی اش بسیار مورد استفاده می باشد و در صورت استفاده، این مسئله باید مشخص شود.

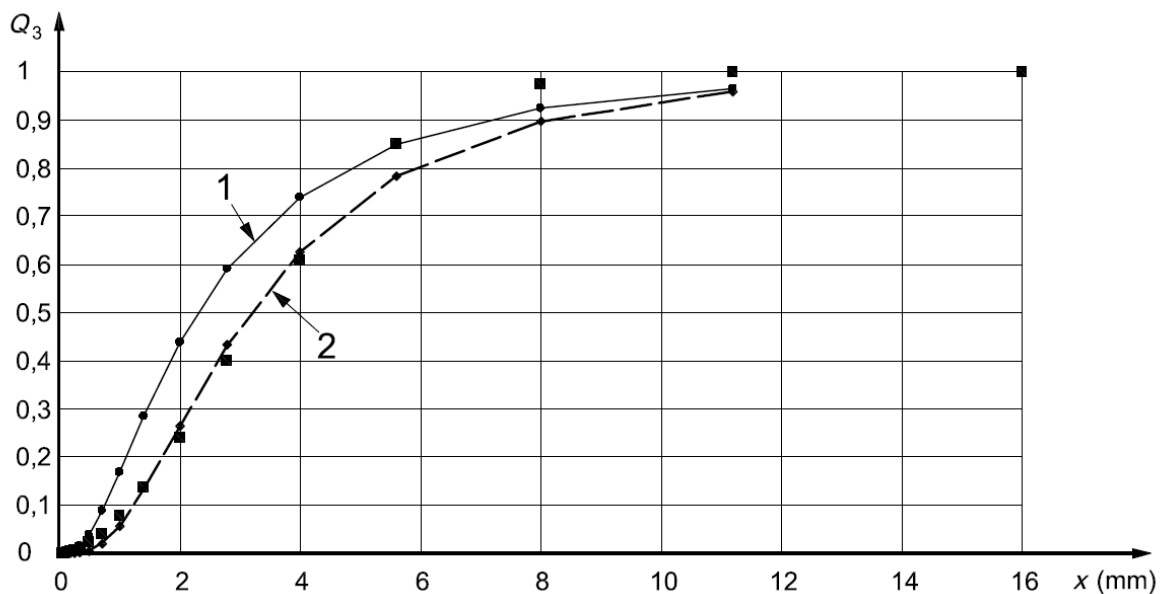
فاکتورهای وزنی (ω) برای رگرسیون شبه خطی برای جبران تبدیل غیر خطی اختلاف های Y (که بدون قصد به دلیل استفاده از سیستم های مختصاتی صورت می گیرد) مورد نیاز می باشند. که این نتیجه تبدیل غیر خطی مقادیر Y می باشد.

معادله ث-۱ یک تقریب تطابق یافته با بی تناسبی ها که به دلیل تبدیل اتفاق می افتد را نشان می دهد. این تطابق وزنی یا ضریب وزنی با نماد ω نشان داده می شود.

$$S_{Q_1}^2(p) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{\omega_i bx + a - Q(x_i)\}^2 \xrightarrow{p} \min \quad (\text{ث-۱})$$

معادله ث-۲ قابل استفاده با تمام مدل های توزیع استاندارد شده می باشد. معادله های متغیر مختلفی در جدول ث-۱ آورده شده است.

$$\omega \propto \left[\frac{\partial Y(Q)}{\partial Q} \right]^{-1} = \left[\frac{\partial Q(Y)}{\partial Y} \right] \quad (\text{ث-۲})$$



راهنما:

Q_3	توزیع تجمعی حجمی یا جرمی
x	اندازه ذره
۱	رگرسیون شبه خطی
۲	رگرسیون شبه خطی وزن شده
■	اندازه گیری شده $Q_{3,i}$
•	نقطه برازش شبه خطی
◆	نقطه برازش شبه خطی وزن شده

شکل ت-۱- توزیع لگ-نرمال در محور های خطی: مقادیر تجربی $Q_3(x)$ از شکل ۱ به همراه رگرسیون شبه خطی (کاملاً خطی)، هر دو روی شبکه مختصات تبدیل نیافته x در مقابل Q رسم شده اند. به علاوه، رگرسیون شبه خطی وزنی به شکل خط نقطه چین نشان داده شده است.

جدول ت-۱- فاکتور های وزنی برای سه مدل آماری در جدول ۱

مدل		کمیت
GGs	RRSB	
$Y = \text{Ln}Q$	$Y = \text{Ln} [-\text{Ln}(1 - Q)]$	$f(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\xi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi$ $Y = \varphi^{-1}(Q)$ با توزیع نرمال استاندارد و
Q	$\text{Ln}(1-Q) \times (1-Q)$	ضریب وزنی $\exp\left(-\frac{Y^2}{2}\right)$

ت-۲ فرمول های پارامتر های a و b در رگرسیون شبه خطی وزنی

پارامتر های a و b در معادله های ت-۳ و ت-۴ به ترتیب از مقادیر مشاهده شده x و Y از تمام نقاط تجربی در یک توزیع اندازه ذرات به همراه ضریب وزنی ω که برای هر نقطه محاسبه می شود، بدست می آیند.

$$a = \frac{\sum wY - b \sum wX}{\sum w} \quad \text{(ث-۳)}$$

$$b = \frac{\sum wXY - (\sum wX \times \sum wY) / \sum w}{\sum wX^2 - (\sum wX \times \sum wX) / \sum w} \quad \text{(ث-۴)}$$

ث-۳ مثال صفحه گسترده برای معادله های ث-۳ و ث-۴

x mm	Q3,i	X	Y		w =	wX	wX ²	wY	wY ²	wXY
Measured values	ln x	Transf. Q	Weights	Weights ²						
0,063	0			exp(-Y ² /2)						
0,09	0,001	-2,41E+00	-3,09E+00	8,44E-03	7,12E-05	-1,72E-04	4,13E-04	-2,20E-04	6,80E-04	5,30E-04
0,125	0,0019	-2,08E+00	-2,89E+00	1,52E-02	2,30E-04	-4,78E-04	9,95E-04	-6,66E-04	1,93E-03	1,38E-03
0,18	0,0035	-1,71E+00	-2,70E+00	2,63E-02	6,94E-04	-1,19E-03	2,04E-03	-1,87E-03	5,05E-03	3,21E-03
0,25	0,006	-1,39E+00	-2,51E+00	4,26E-02	1,82E-03	-2,52E-03	3,49E-03	-4,56E-03	1,15E-02	6,33E-03
0,355	0,011	-1,04E+00	-2,29E+00	7,26E-02	5,27E-03	-5,46E-03	5,65E-03	-1,21E-02	2,76E-02	1,25E-02
0,5	0,022	-6,93E-01	-2,01E+00	1,32E-01	1,73E-02	-1,20E-02	8,32E-03	-3,49E-02	7,02E-02	2,42E-02
0,71	0,04	-3,42E-01	-1,75E+00	2,16E-01	4,67E-02	-1,60E-02	5,47E-03	-6,17E-02	1,43E-01	2,80E-02
1	0,077	0,00E+00	-1,43E+00	3,62E-01	1,31E-01	0,00E+00	0,00E+00	-1,87E-01	2,66E-01	0,00E+00
1,4	0,138	3,36E-01	-1,09E+00	5,52E-01	3,05E-01	1,03E-01	3,46E-02	-3,33E-01	3,62E-01	-1,12E-01
2	0,24	6,93E-01	-7,06E-01	7,79E-01	6,07E-01	4,21E-01	2,92E-01	-4,29E-01	3,03E-01	-2,97E-01
2,8	0,4	1,03E+00	-2,53E-01	9,68E-01	9,38E-01	9,66E-01	9,94E-01	-2,38E-01	6,02E-02	-2,45E-01
4	0,61	1,39E+00	2,79E-01	9,62E-01	9,25E-01	1,28E+00	1,78E+00	2,58E-01	7,22E-02	3,58E-01
5,6	0,85	1,72E+00	1,04E+00	5,84E-01	3,42E-01	5,88E-01	1,01E+00	3,54E-01	3,67E-01	6,10E-01
8	0,975	2,08E+00	1,96E+00	1,47E-01	2,15E-02	4,46E-02	9,28E-02	4,21E-02	8,24E-02	8,75E-02
11,2	0,999	2,42E+00	3,09E+00	8,44E-03	7,12E-05	1,72E-04	4,16E-04	2,20E-04	6,80E-04	5,32E-04
16	1		Y=STANDNORMINV(Q3,i)							
			Sum:		3,34E+00	3,37E+00	4,23E+00	-6,67E-01	1,77E+00	4,78E-01

کتاب شناسی

- [1] ISO 9276-1:1998, Representation of results of particle size analysis — Part 1: Graphical representation
- [2] ISO 11453, Statistical interpretation of data — Tests and confidence intervals relating to proportions
- [3] ISO/TR 13425, Guidelines for the selection of statistical methods in standardization and specification
- [4] STINTZ, M., REINSCH, V. Comments on ISO/CD 9276-3. Short communication in ISO/TC 24/SC 4/WG 1, 2004-03-14
- [5] NIST/SEMATECH. e-Handbook of statistical methods. Available (2008-01-25) at: <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/>
- [6] HEIDENREICH, E., KLÖDEN, W. Zur Auswertung granulometrischer Analysen auf EDV-Anlagen [On the evaluation of granulometric analyses on electronic data-processing systems]. Chem. Techn. 1981, 33, pp. 130-134
- [7] BATES, D.M., WATTS, D.G. Nonlinear regression analysis and its applications. Wiley, New York, 1988. 365 p
- [8] GILL, P.E., MURRAY, W., WRIGHT, M.H. The Levenberg-Marquardt method. In: Practical optimization, pp. 136-137. Academic Press, London, 1981
- [9] LASDON, L.S., WARREN, A.D., JAIN, A., RATNER, M. Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming. ACM Trans. Math. Softw. 1978, 4, pp. 34-50
- [10] LAFAYE, A., BESANÇON, P. Interprétation mathématique des résultats d'analyses granulométriques. Ajustage d'une courbe cumulative expérimentale à une distribution de référence [Mathematical interpretation of granulometric results. Fitting of an experimental cumulative curve to a reference distribution]. Sci. Techn. Pharm. 1984, **13** (3), pp. 159-167