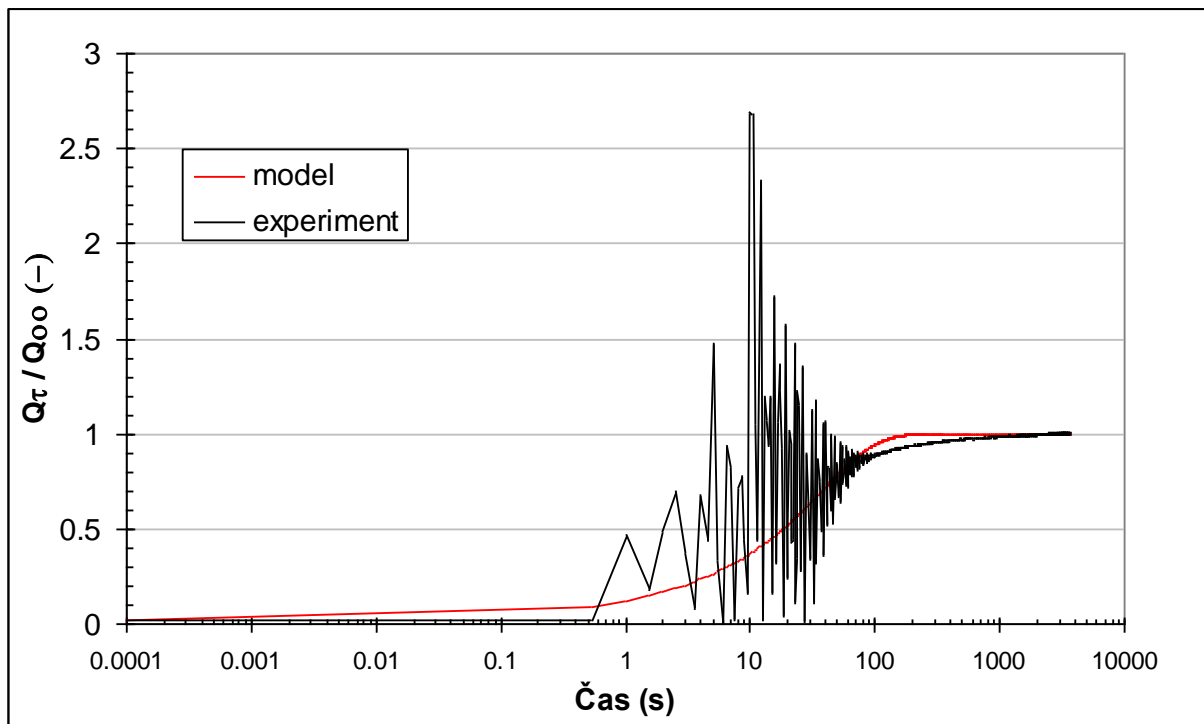


Program Sorpce1.m psaný v prostředí Matlabu slouží k vyhlazování naměřených sorpčních křivek a výpočtu difuzních koeficientů. Kromě standardního Matlabu vyžaduje ještě Matlab Signal Processing Toolbox a Matlab Optimization Toolbox. Výsledky se zapisují do sešitu tabulkového procesoru MS Excel, který v případě potřeby Matlab spouští jako proces

Při sorpčním experimentu (sorpce par při určitém tlaku a teplotě do polymerního materiálu) se zaznamenává změna polohy kalibračních bodů v čase. Kromě šumu způsobeného náhodnými ději je na počátku měření vytvořeno nežádoucí kmitání způsobené napouštěním měřeného plynu/páry do prostoru s membránou.



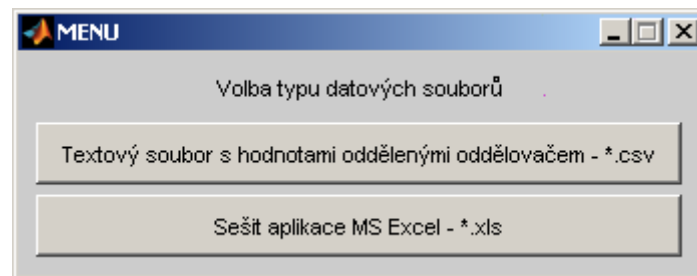
Model časového průběhu sorpce vyplývá z 2. Fickova zákona a je popsán následující rovnicí

$$\frac{Q_t}{Q_\infty} = 1 - \frac{8}{\pi^2} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{(2i+1)^2} \exp\left[-\frac{(2i+1)^2 \pi^2 \mathbf{D} t}{L^2}\right]$$

Naměřená sorpční křivka po interaktivním odstranění a rekonstrukci hrubých chyb a nežádoucího rozkmitu vyhlazena pomocí Butterworthova FIR filtru a poté se potřebné parametry počítají vícerozměrnou optimalizací použitím Nelder-Meadovy metody pružného mnohostěnu.

Postup při použití programu:

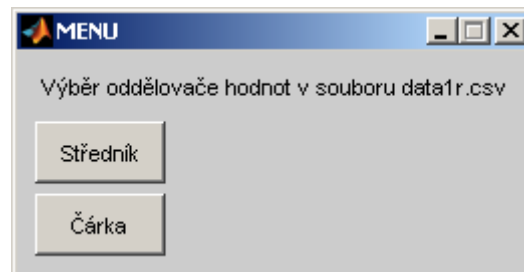
Nejprve se provede výběr typu datového souboru. Pro každý časový okamžik jsou zaznamenány tři údaje: čas měření [s], tlak v měřicí komůrce [Pa] a poloha kalibračních bodů [mm].



Poté se na základě výzvy vloží jméno datového souboru

```
Zadejte jméno datového souboru:
```

Pokud vstupní soubor je textový soubor typu CSV (comma separated values), musí se ještě vybrat oddělovač hodnot v tomto souboru



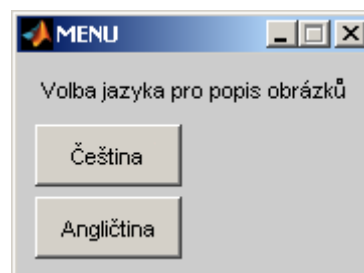
Po přečtení dat

```
Probíhá čtení dat ze vstupního textového souboru!!!  
Přečteno 4033 řádků!
```

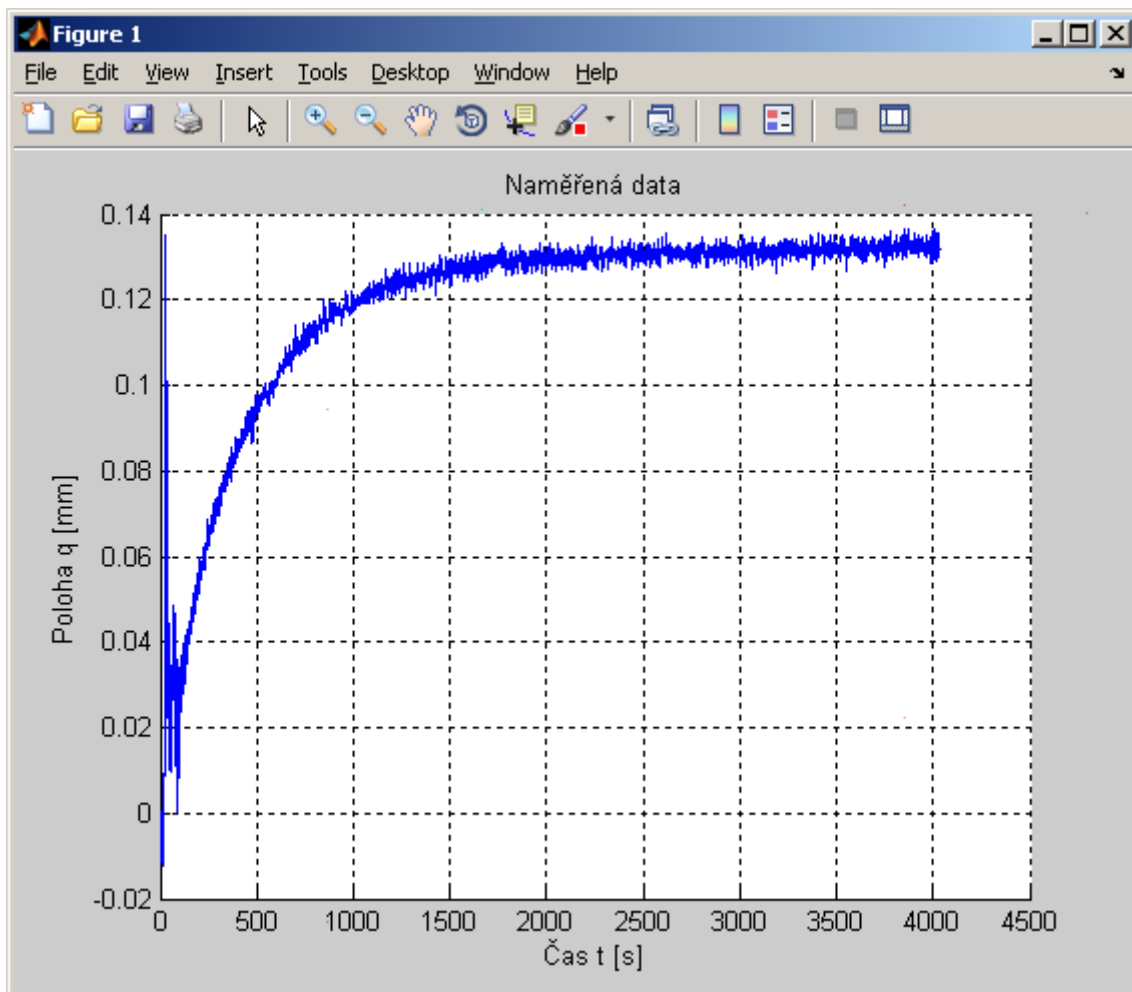
si program vyžádá hodnotu tloušťky polymerního materiálu a provede pomocí poločasové metody výpočet odhadu difuzního koeficientu

```
Zadejte hodnotu tloušťku membrány L [m] = 16e-6  
Odhad difuzního koeficientu : 5.1569e-014 [m2/s]
```

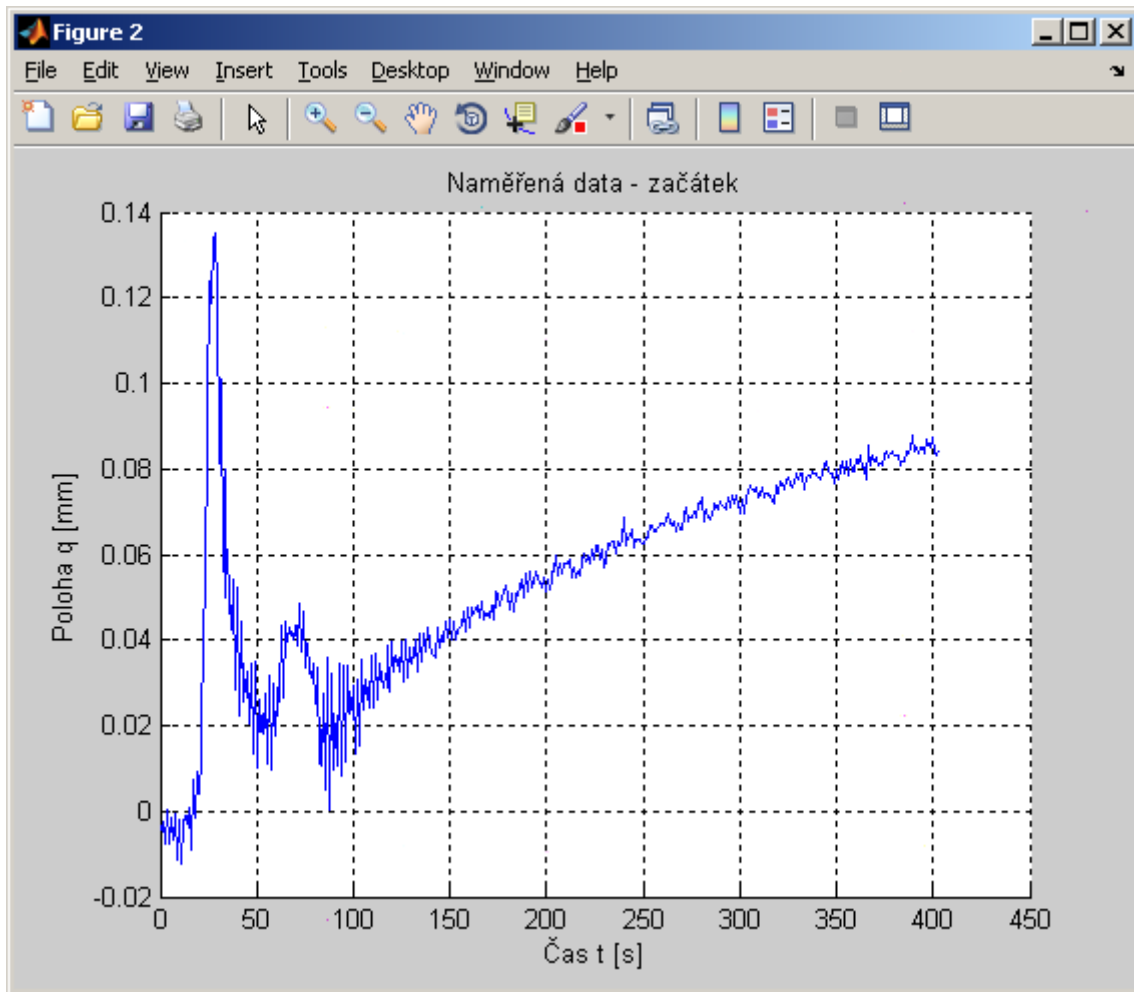
Následuje výběr jazyka pro popis obrázků



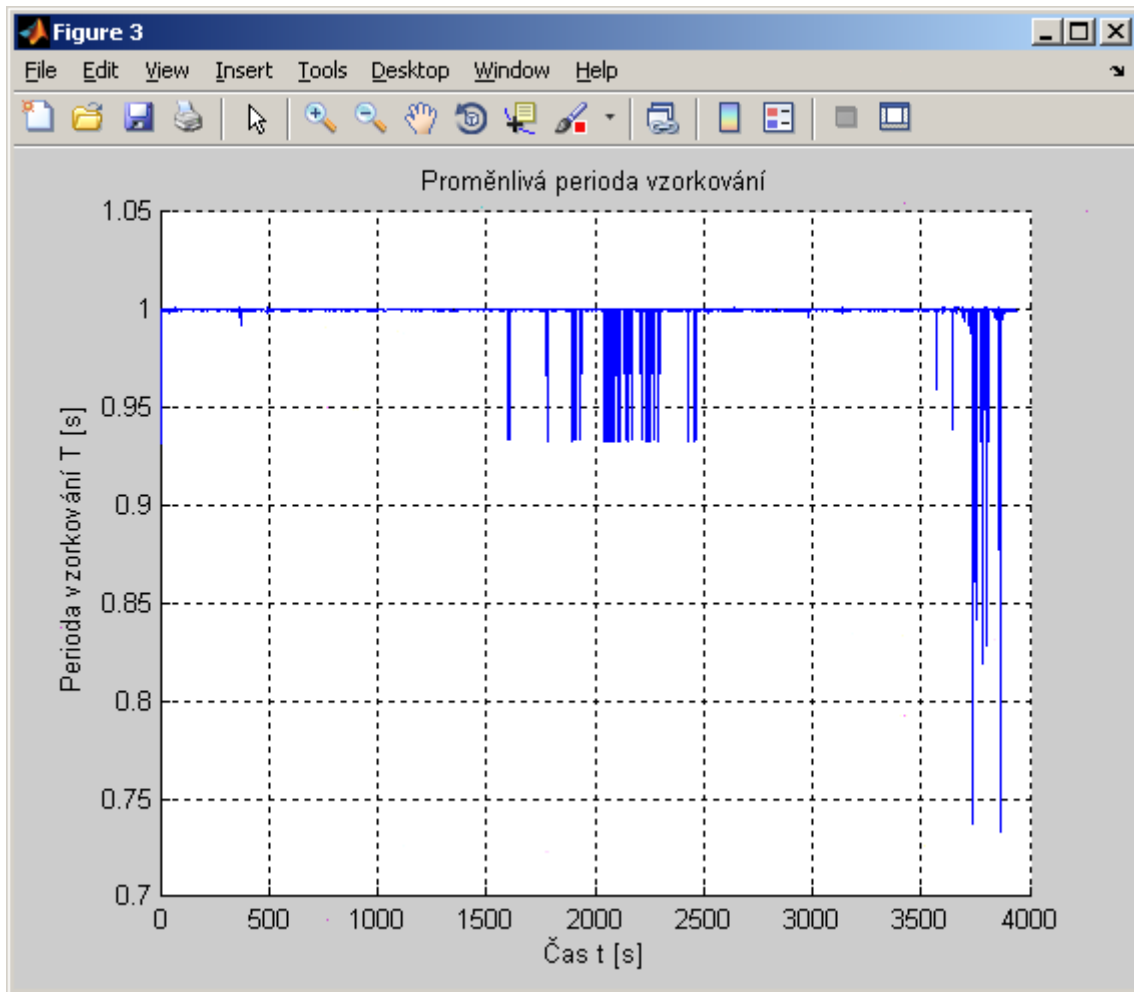
a zobrazí se naměřená sorpční křivka v celém rozsahu měření



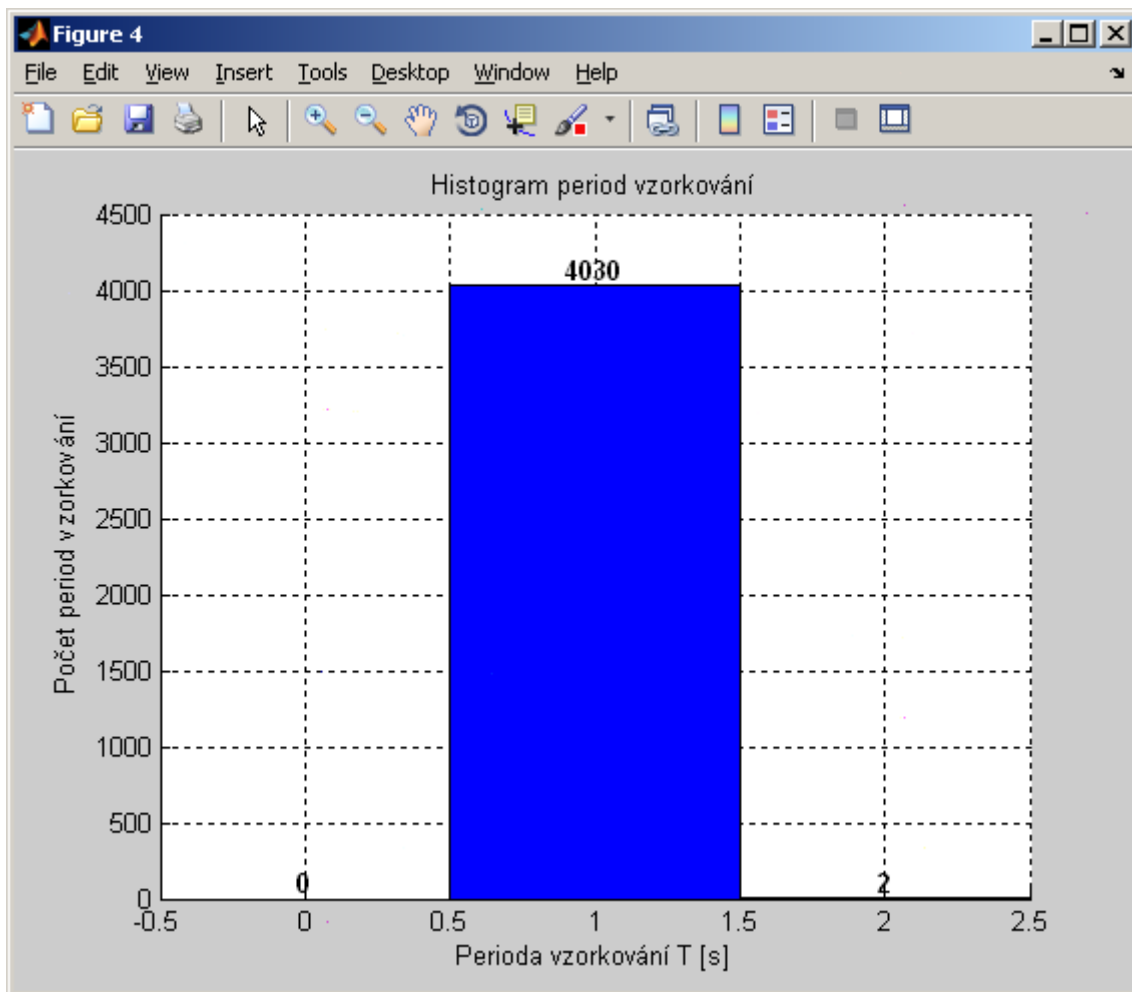
a na začátku měření



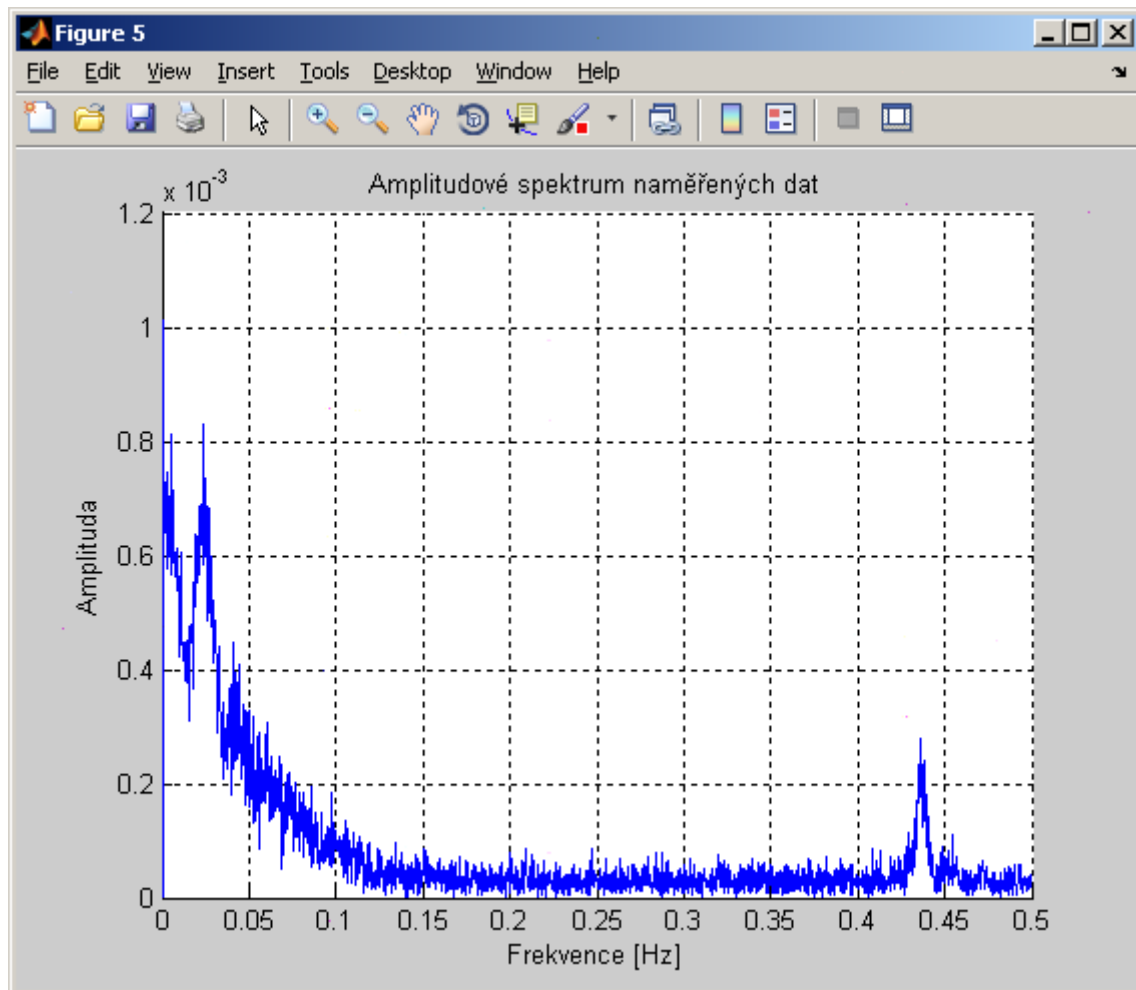
Zjistí se variabilita periody vzorkování

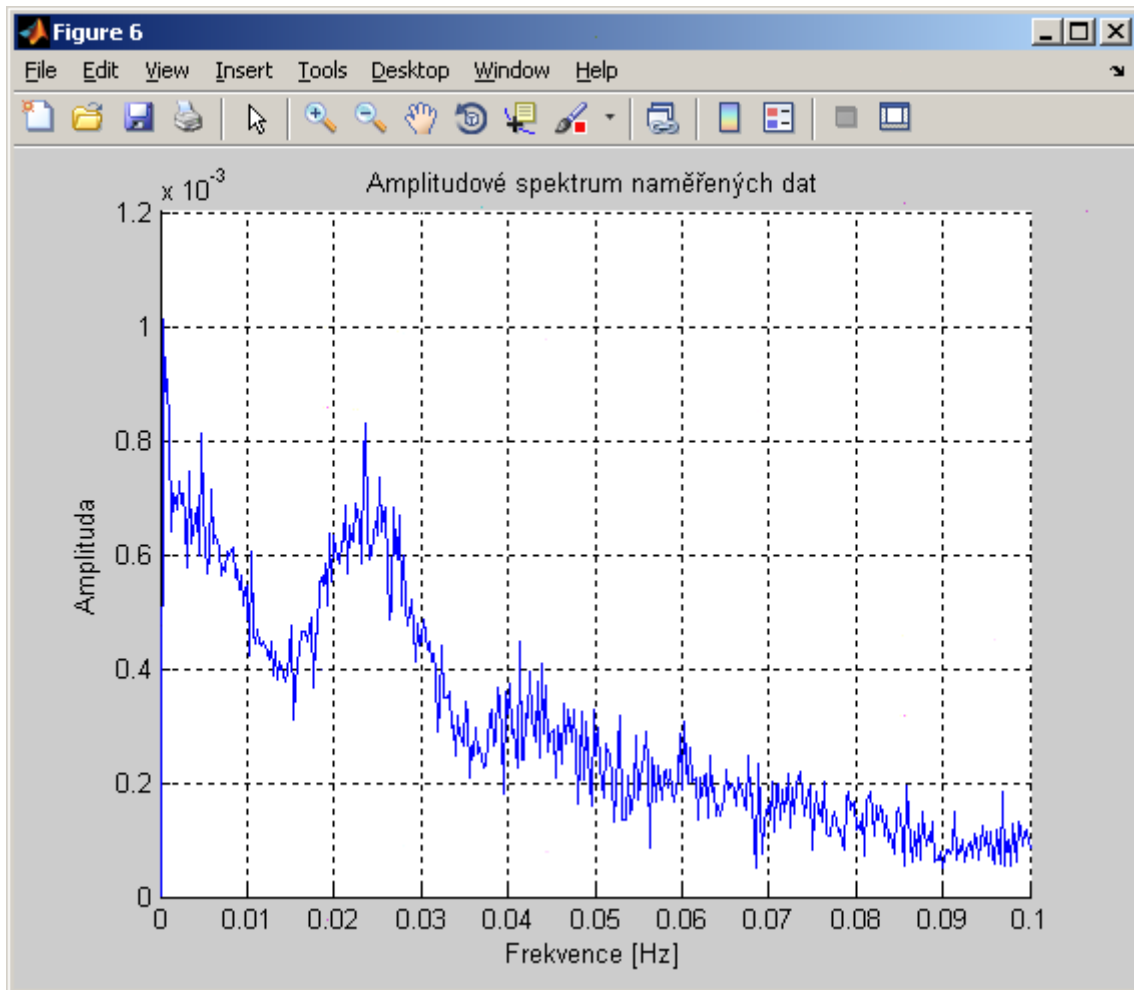


a histogram rozložení naměřených hodnot

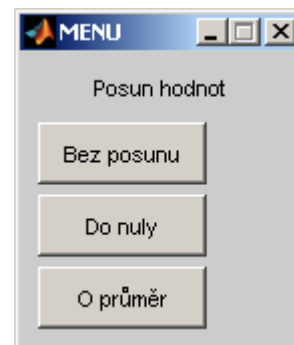
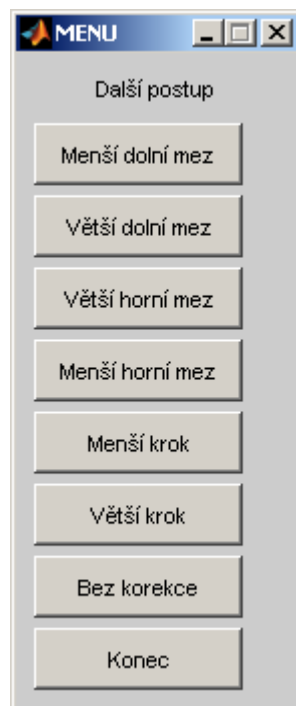


Po odstranění trendu se pomocí rychlé Fourierovy transformace vypočte a zobrazí amplitudové spektrum naměřených dat

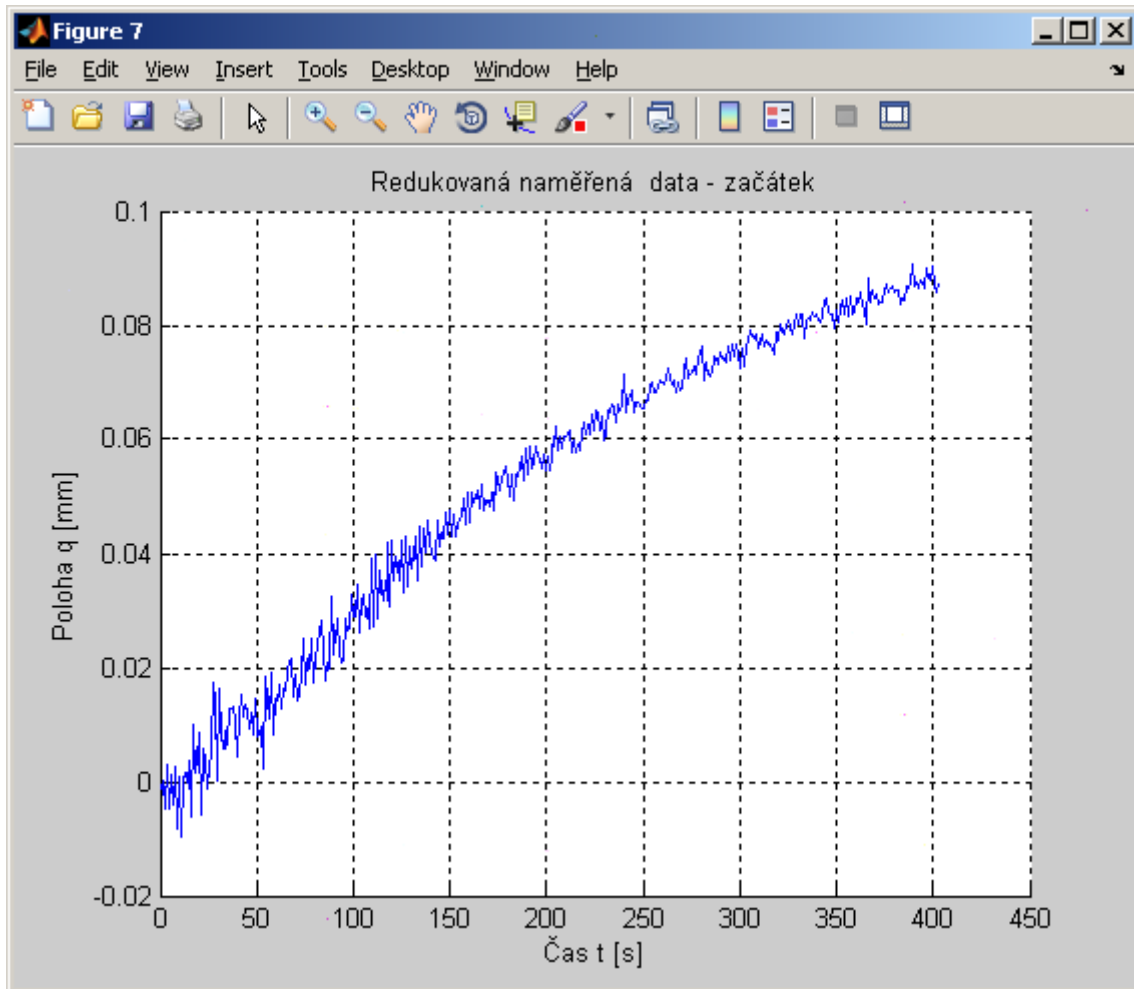




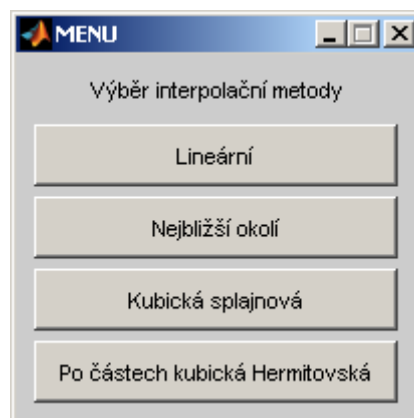
Konverzačním způsobem se eliminuje rozkmitání membrány a opraví se kalibrace sorpční křivky



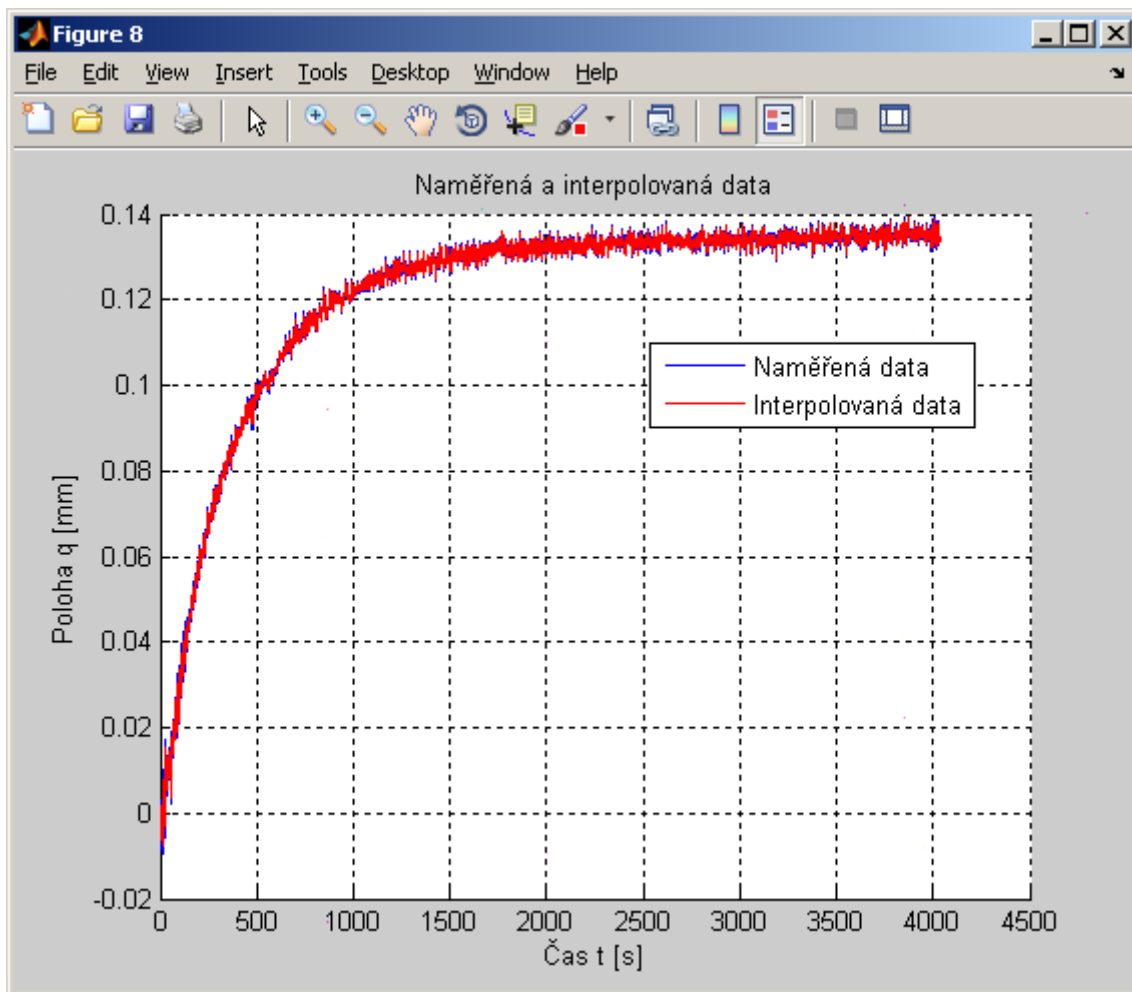
Výsledek této činnosti jsou rekonstruovaná naměřená data, ve kterých byly eliminovány hrubé chyby způsobené dočasnou nefunkčností měřicího zařízení a rozkmit membrány způsobeny nástřikem plynu/par organické látky, jejíž difuzní koeficient se měří.



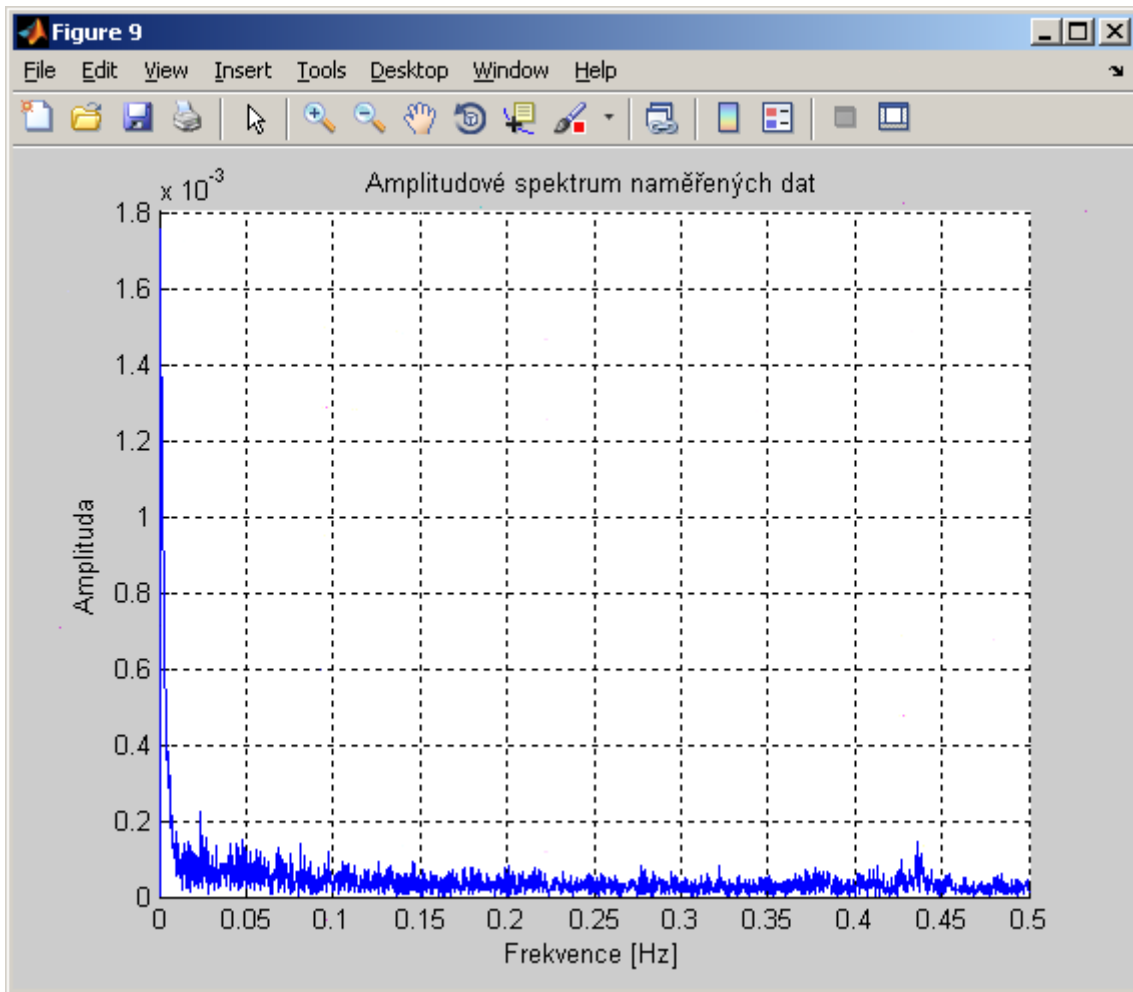
Následuje výběr interpolační metody pro převod neekvidistantních dat na ekvidistantní

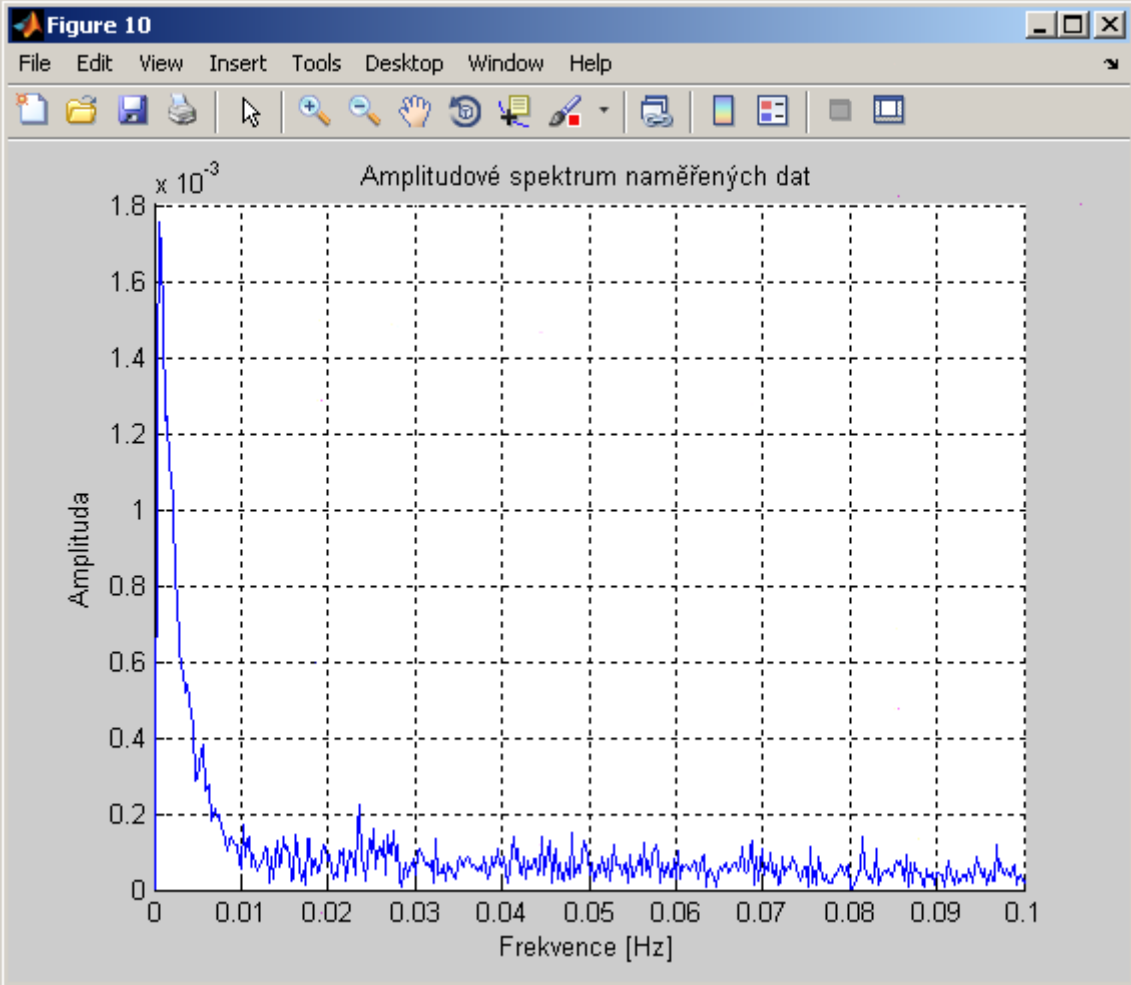


Interpolovaná data jsou zobrazena na pozadí naměřených dat

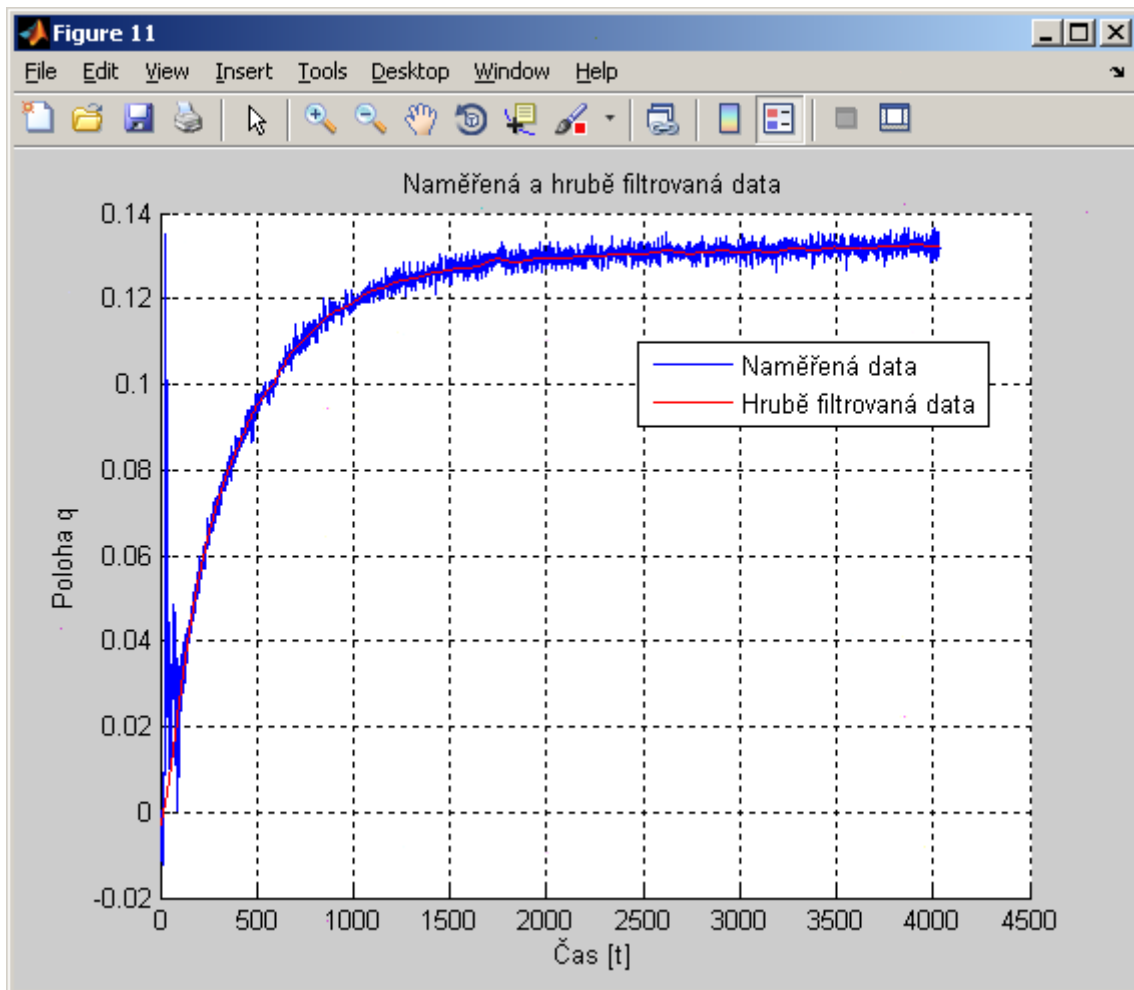


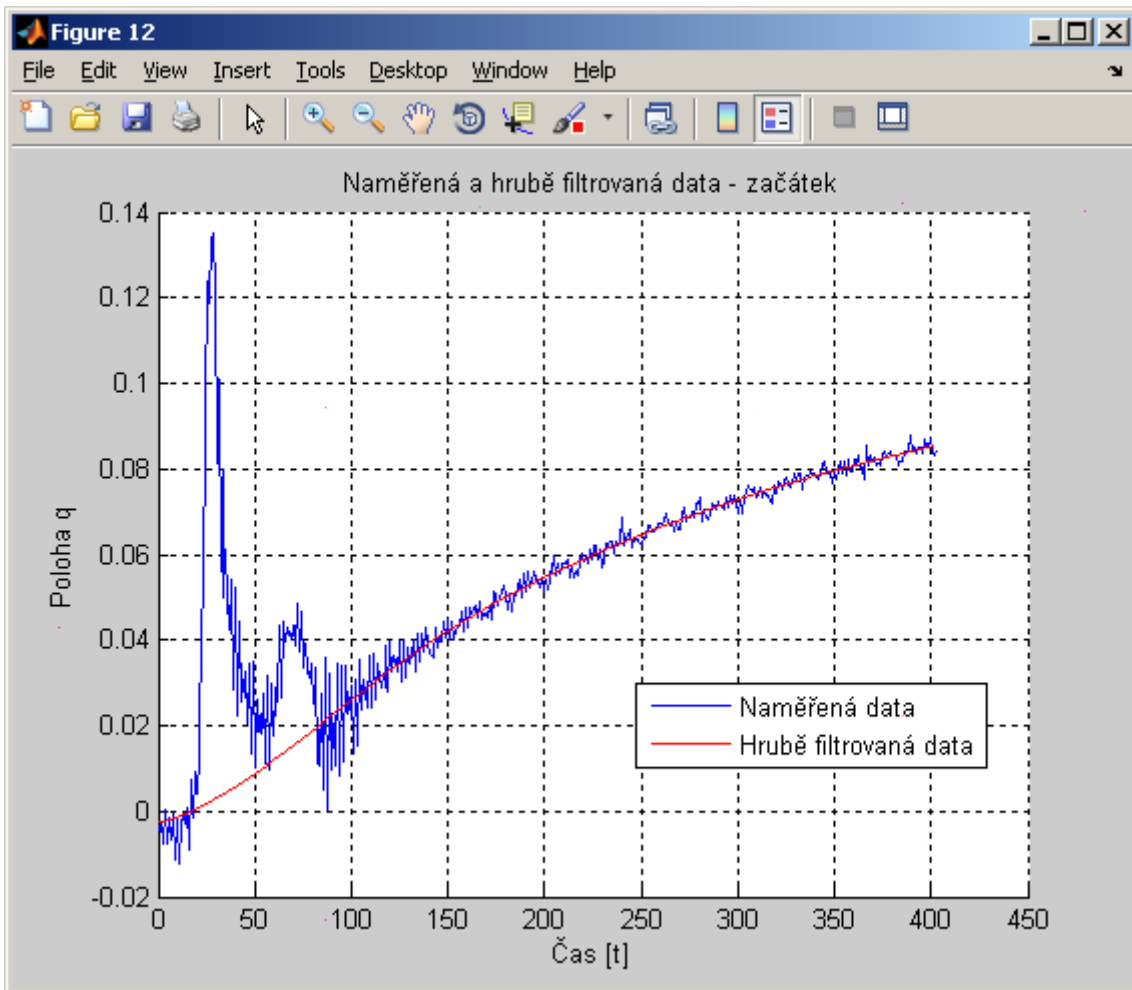
Je spočteno amplitudové spektrum interpolovaných dat



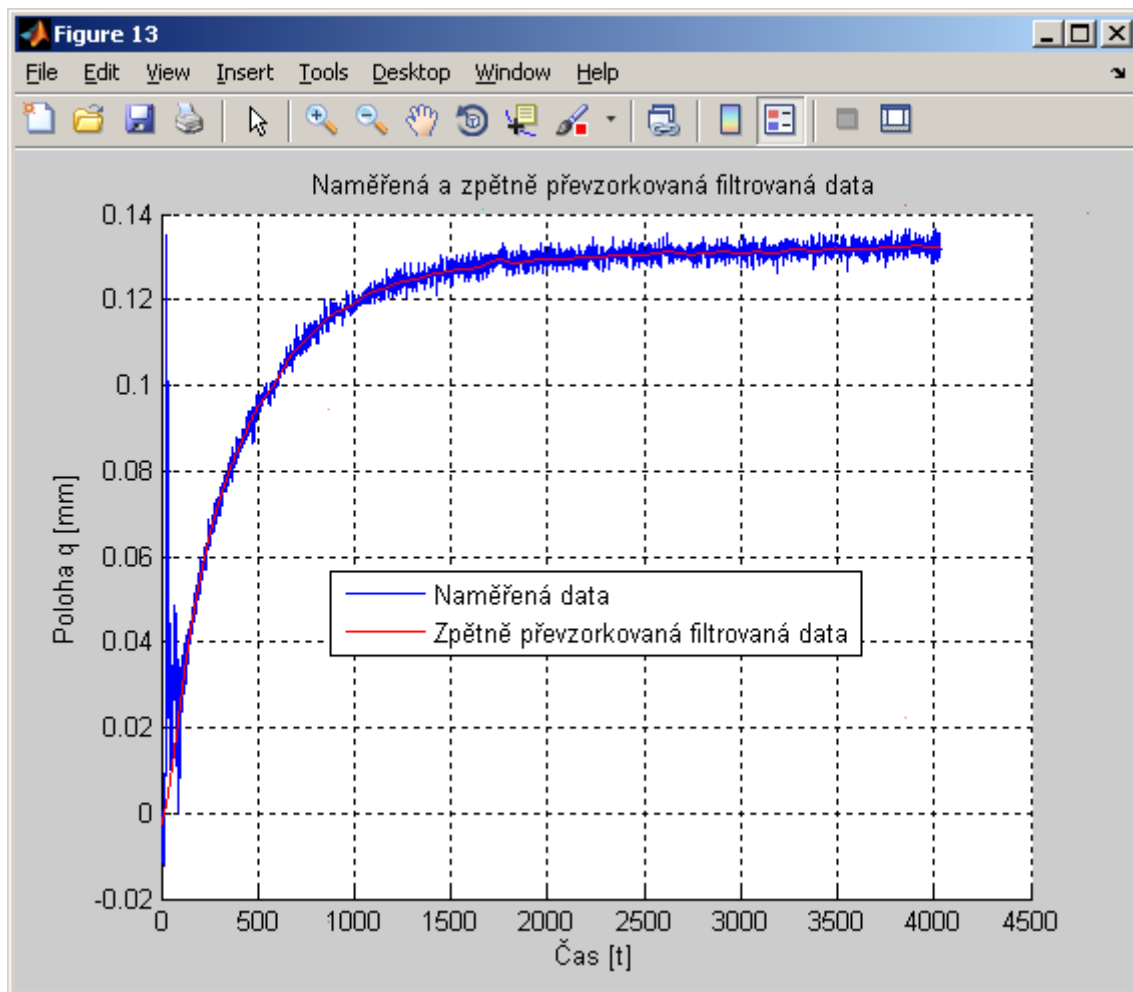


Dále je provedena hrubá filtrace dat pomocí Butterworthova FIR filtru pro nastřelenou hodnotu mezní frekvence

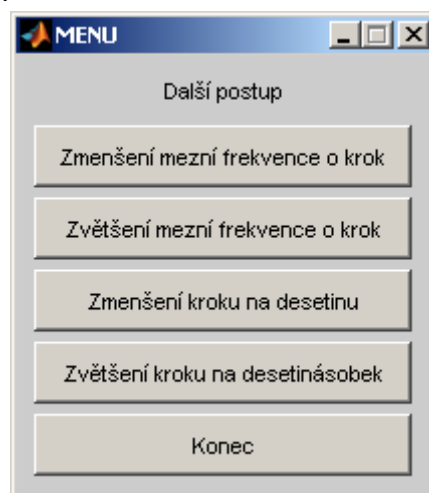




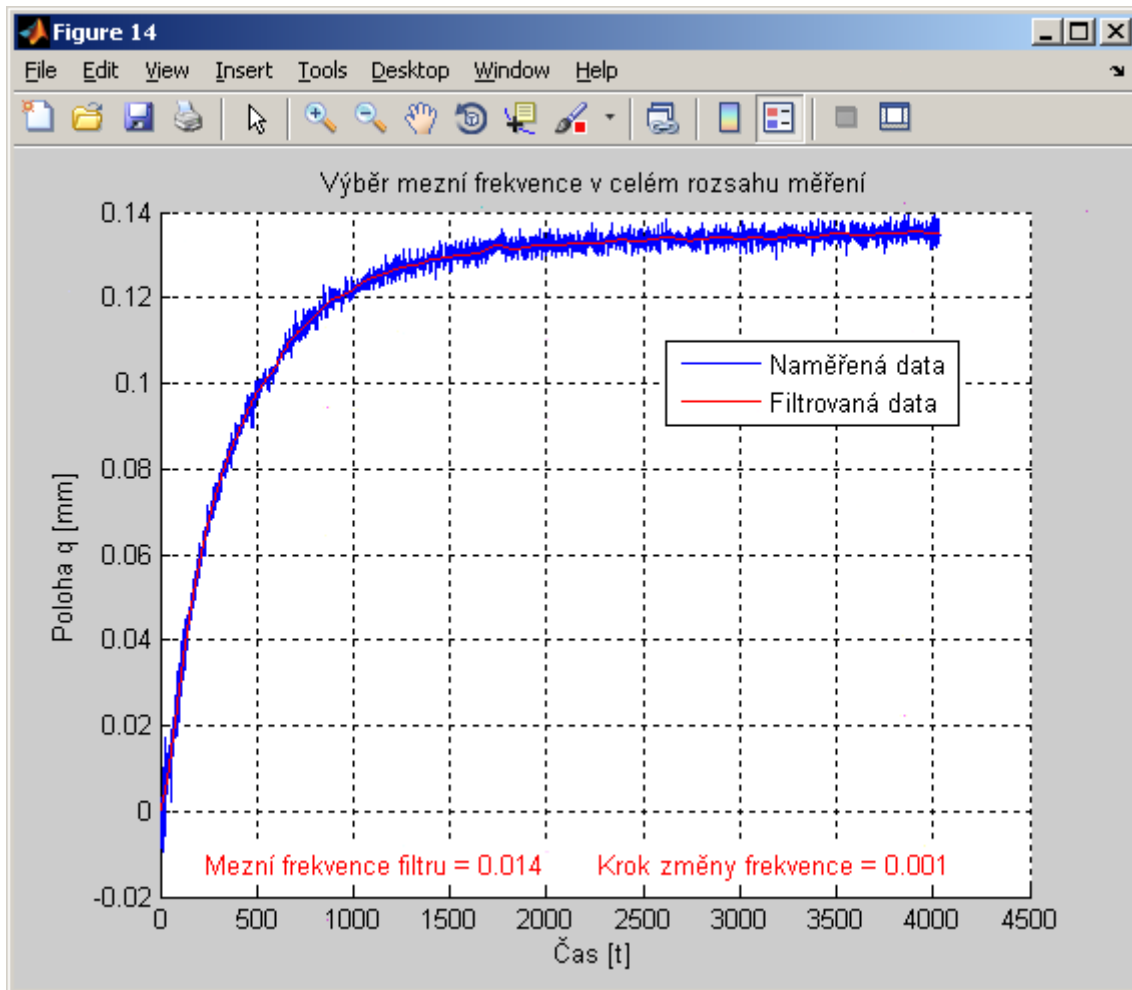
Pro srovnání je provedeno i zpětné nevizorkování dat na neekvidistantní



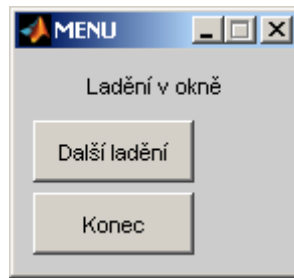
Konverzačním způsobem se vybírá vhodná mezní frekvence dolnoproústového FIR filtru



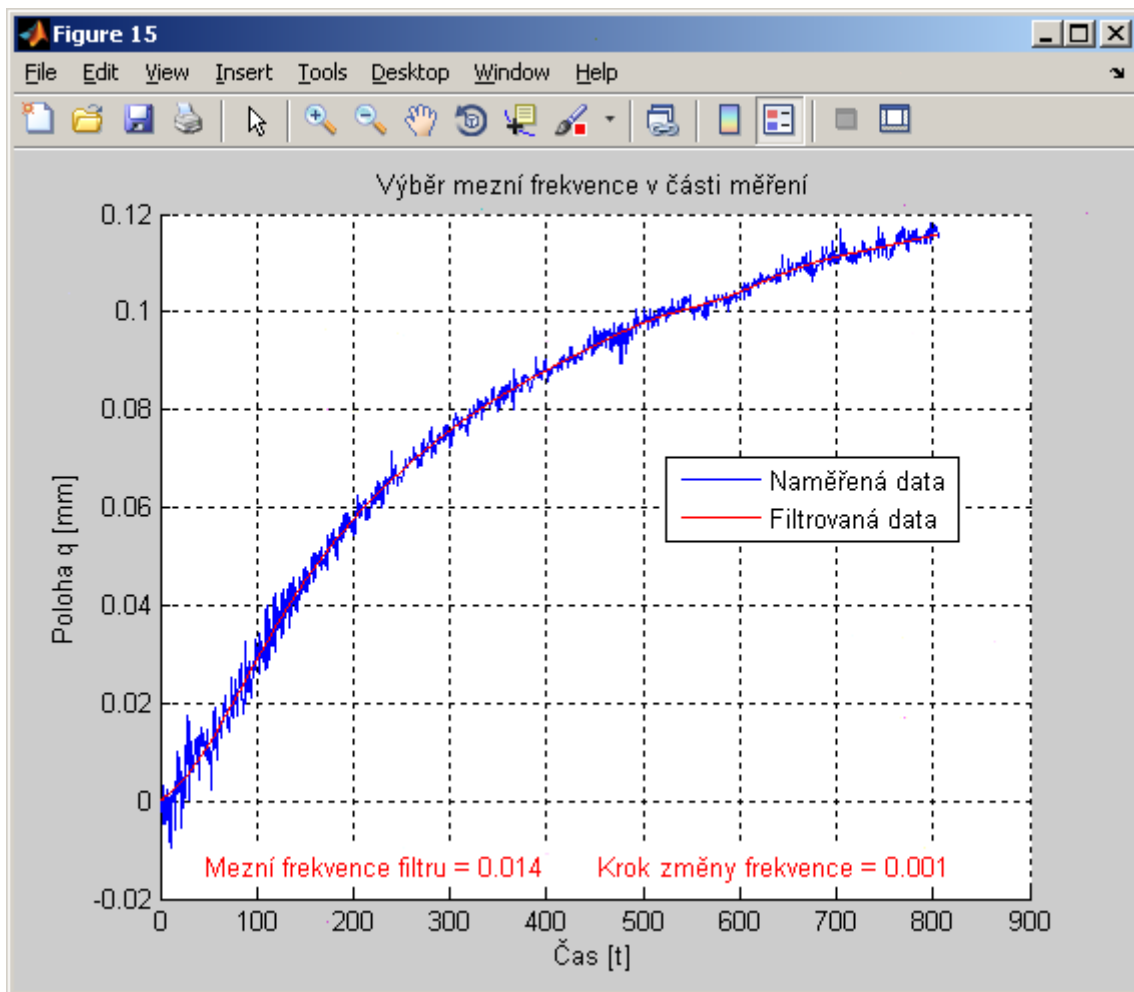
Shoda dat se prověřuje subjektivním porovnáním filtrovaných a naměřených dat



Je možné provádět i detailnější nastavení kritických částí sorpční křivky v menším okně.

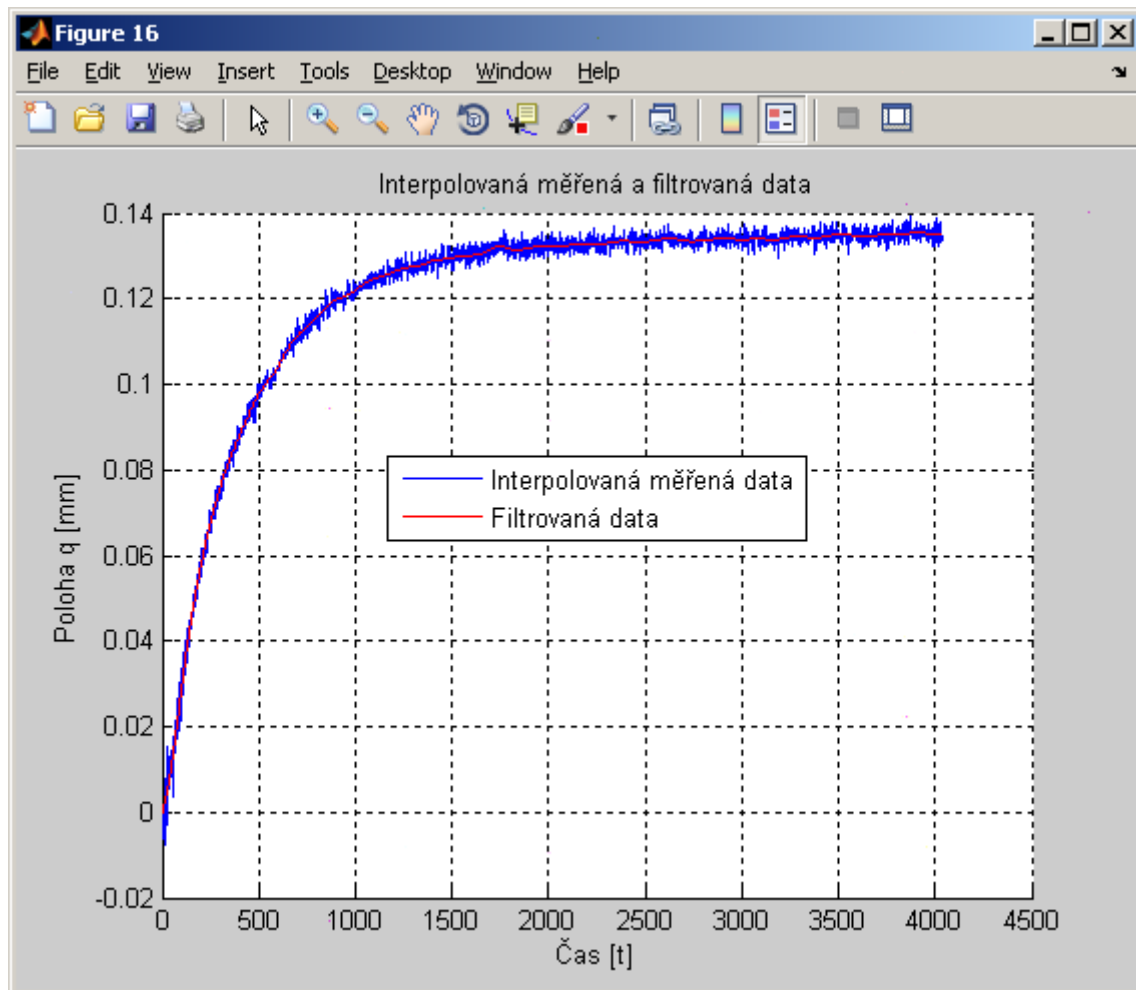


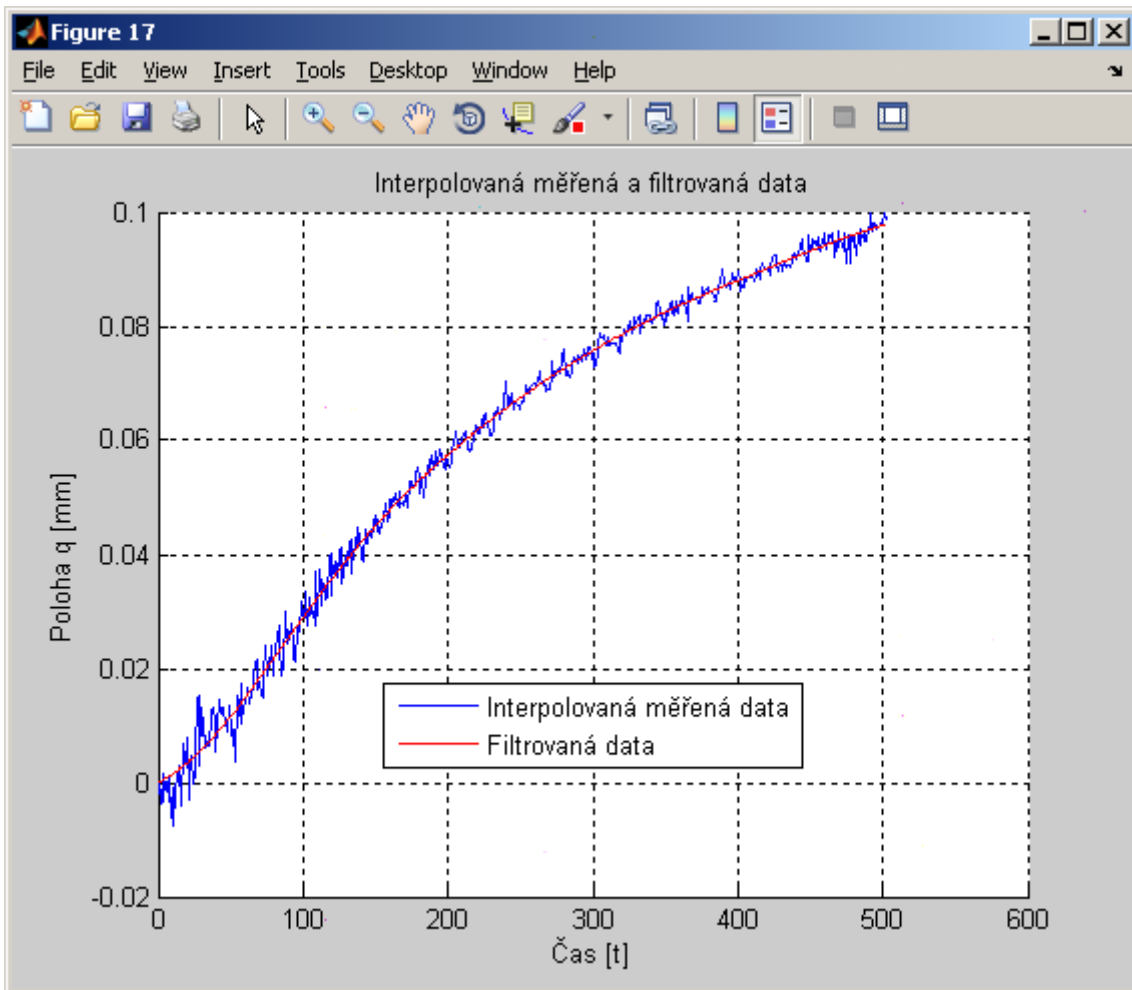
Začátek okna (0-1) : 0
Konec okna (0-1) : 0.2



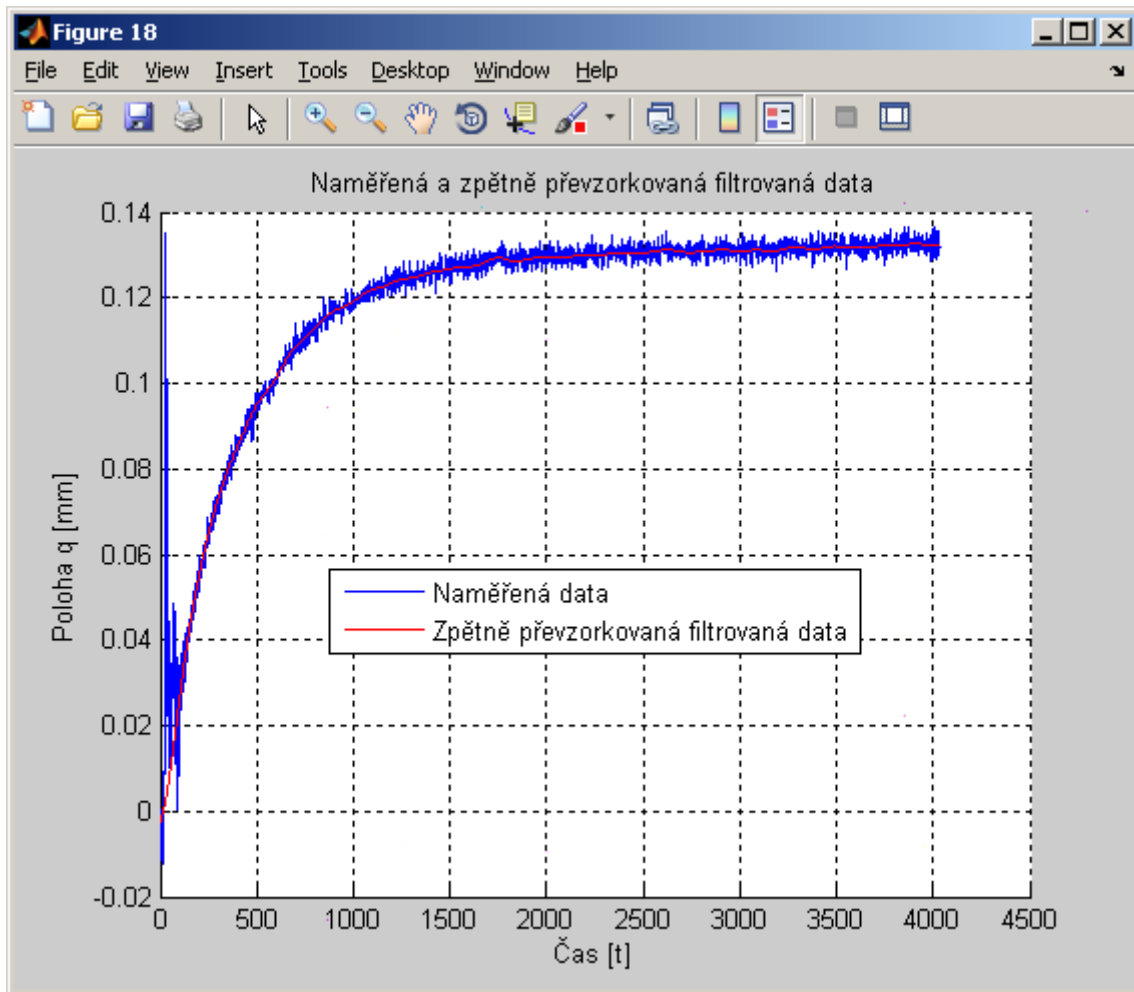
Při zjišťování vhodné hodnoty mezní frekvence filtru je možné s výhodou využívat standardních vlastností obrázků generovaných v prostředí MATLABu (zvětšování, zmenšování a posun).

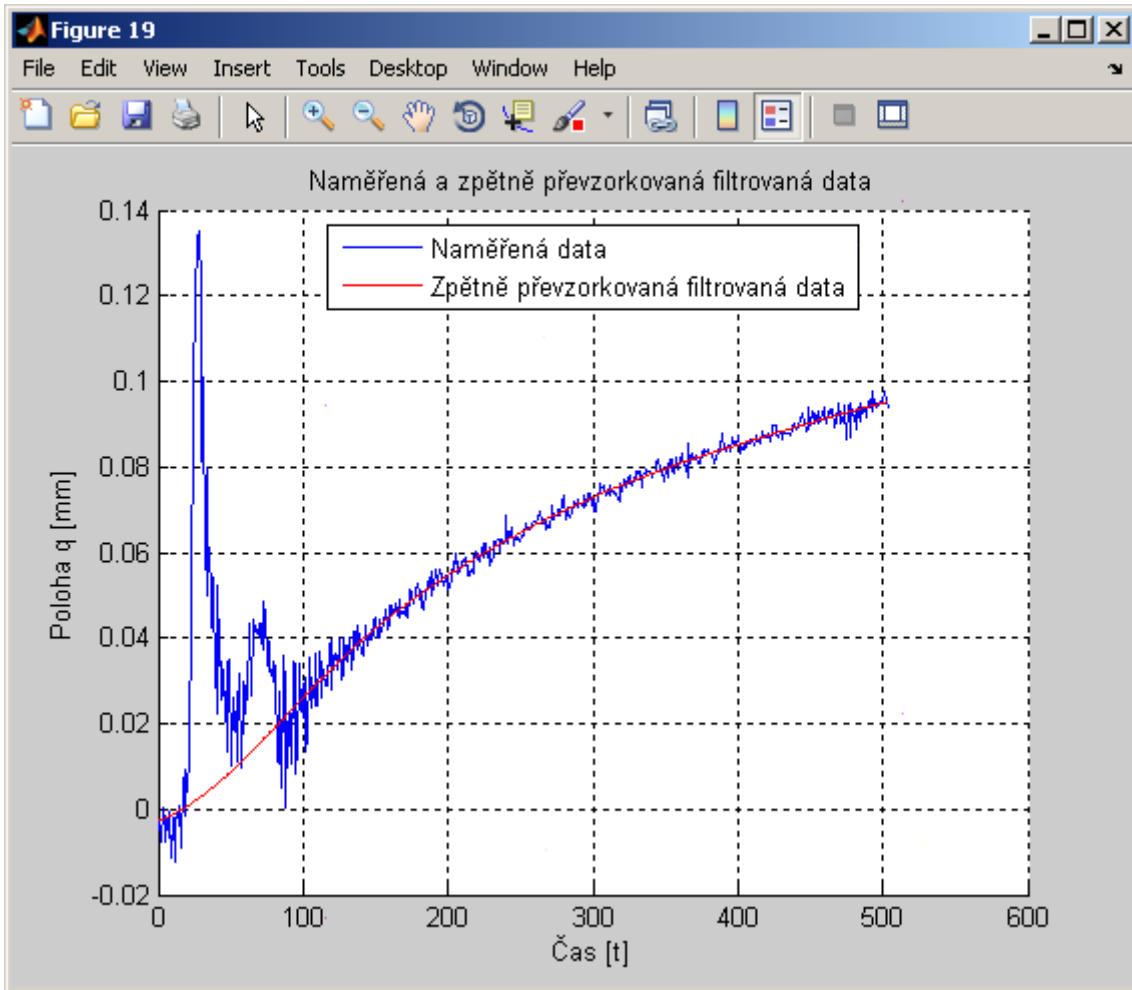
Po nalezení vhodné mezní frekvence filtru se vyhlazená sorpční křivka opět zobrazí na pozadí interpolovaných měřených dat.





Stejně tak se zobrazí zpětně nevezorkovaná data na pozadí původních naměřených dat

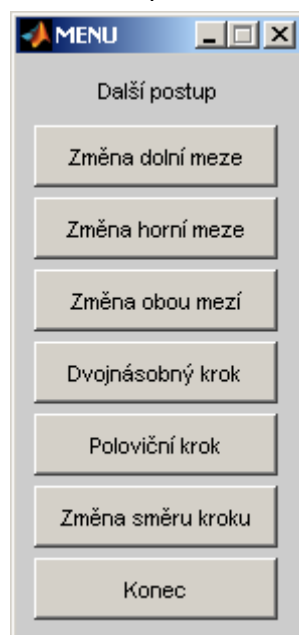




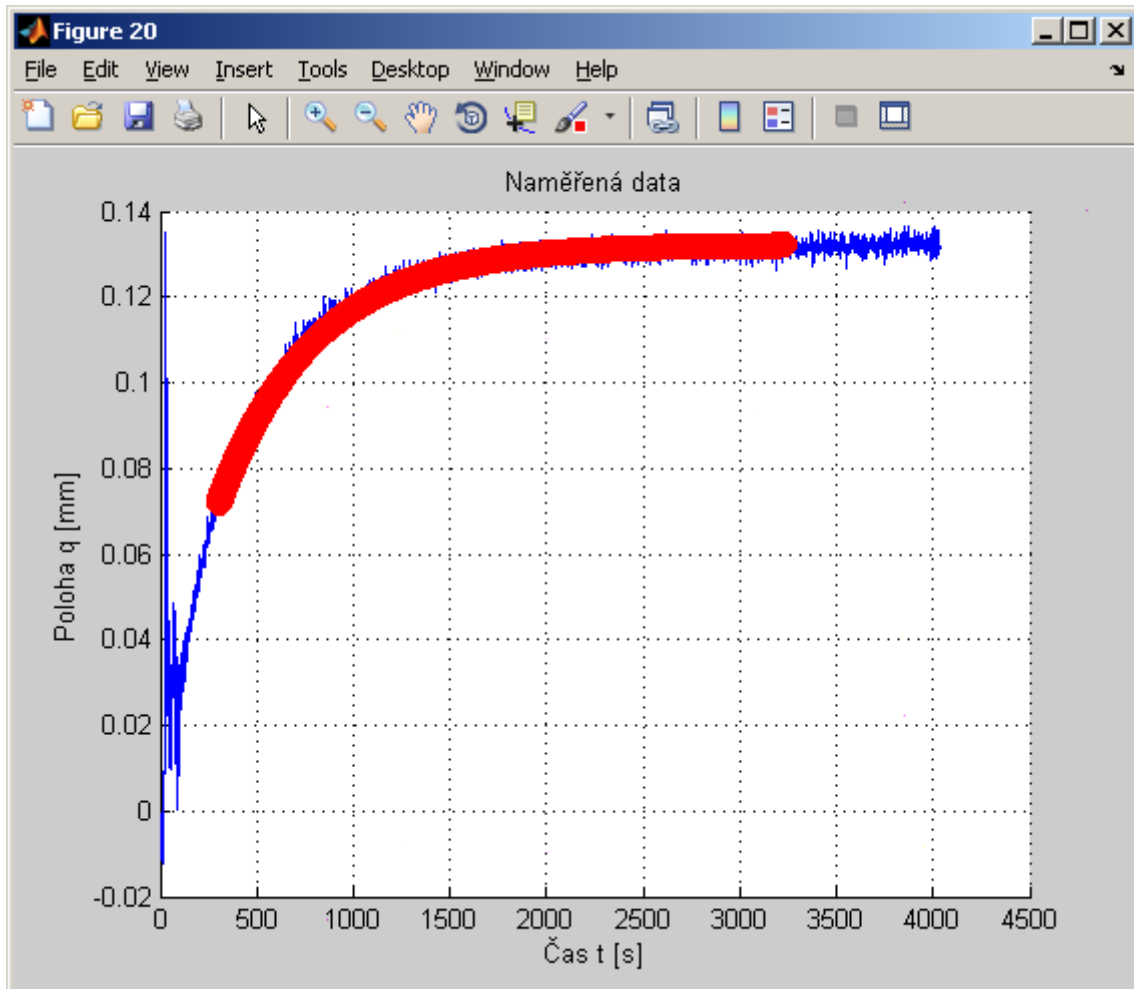
Následuje zobrazení parametrů optimalizace:

```
Parametry optimalizace
Maximální počet iterací      :      1000
Maximální počet výpočtu funkce :      1000
Koncové kritérium změny proměnných : 1.1451e-029
Koncové kritérium změny funkce   : 2.2737e-013
```

a konverzační výběr rozsahu, na kterém bude prováděna optimalizace



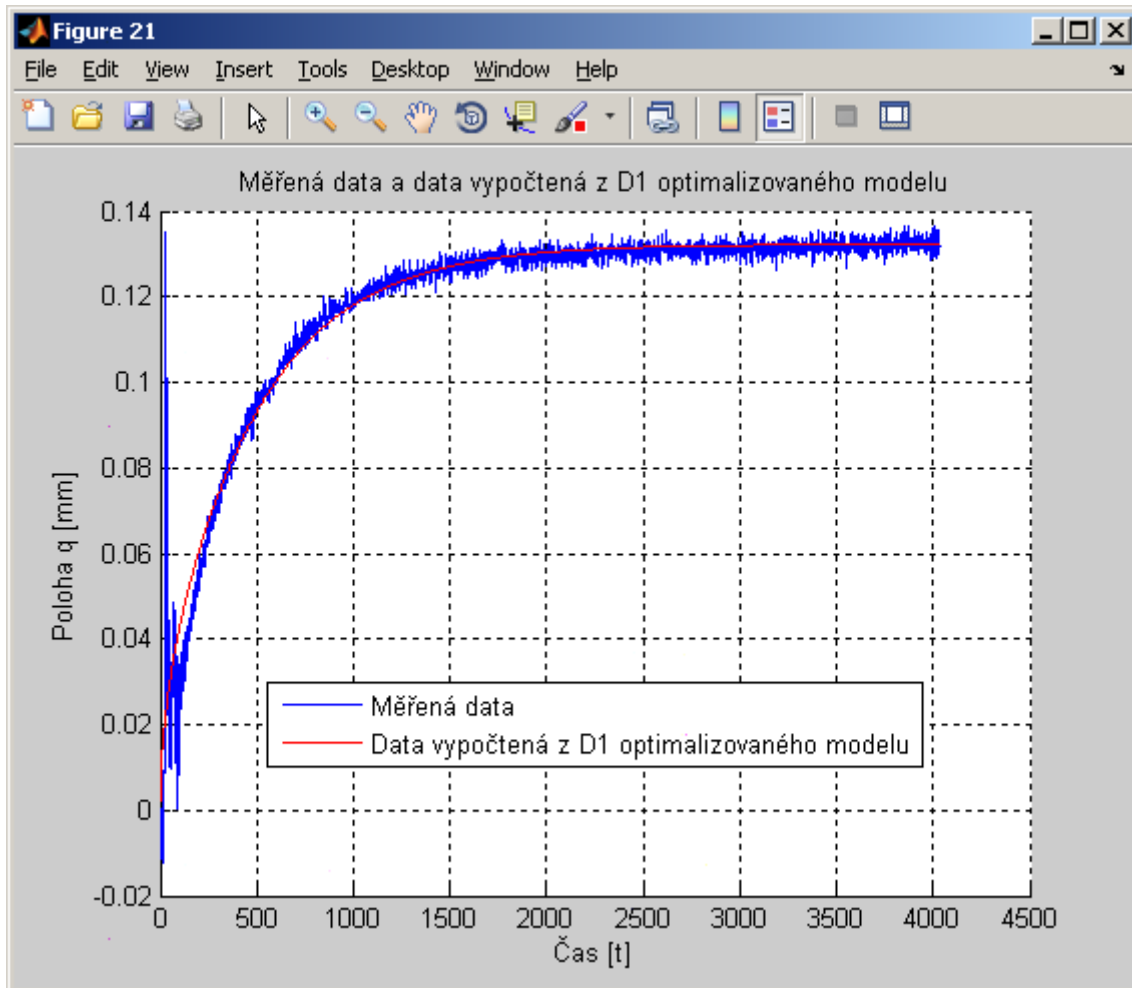
Optimalizace se provádí volitelně jen ve vybraném rozsahu ve smyslu nejmenšího součtu čtverců odchylek naměřených a vypočtených hodnot, mimo tento rozsah samozřejmě může dojít k větším odchylkám. Optimalizaci je možné provádět také pro celý rozsah měření.

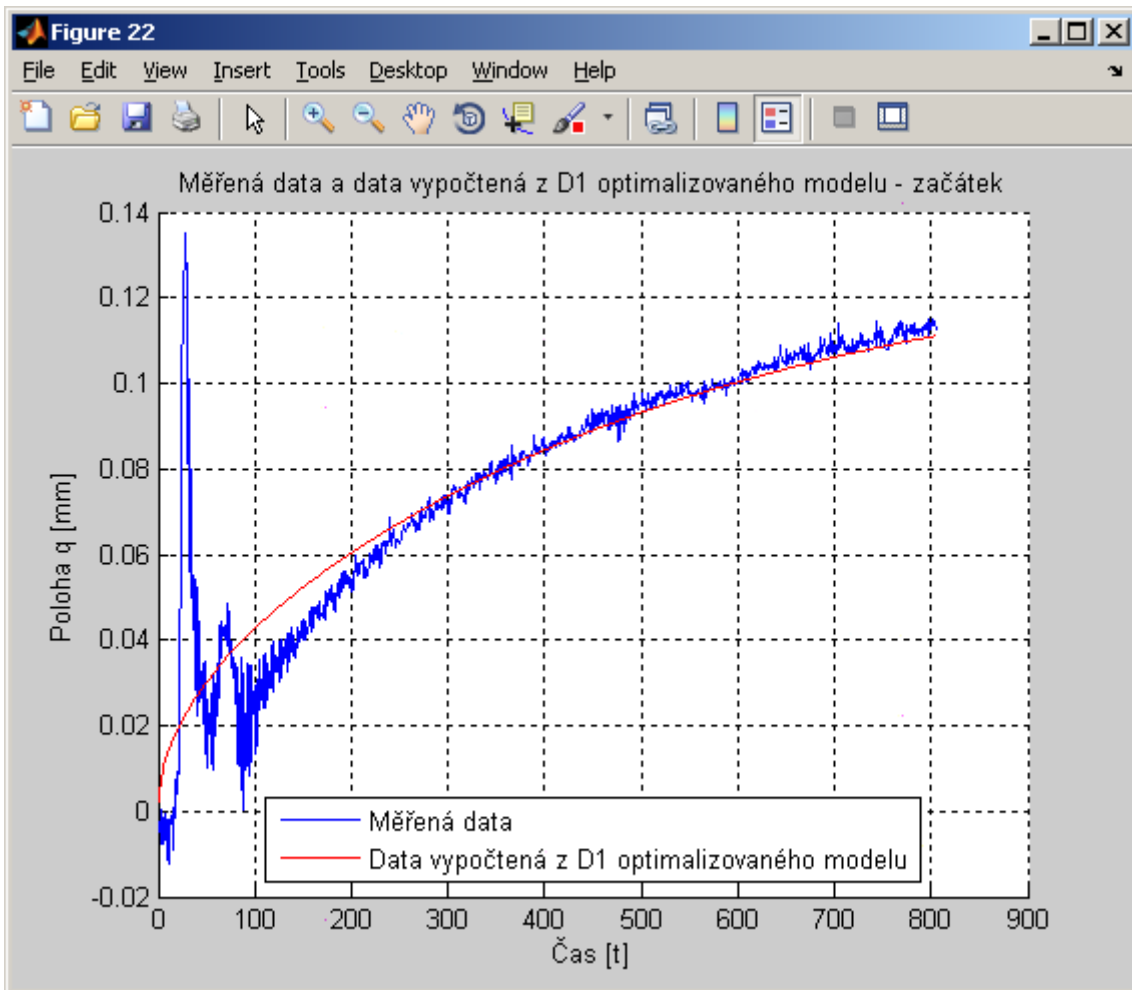


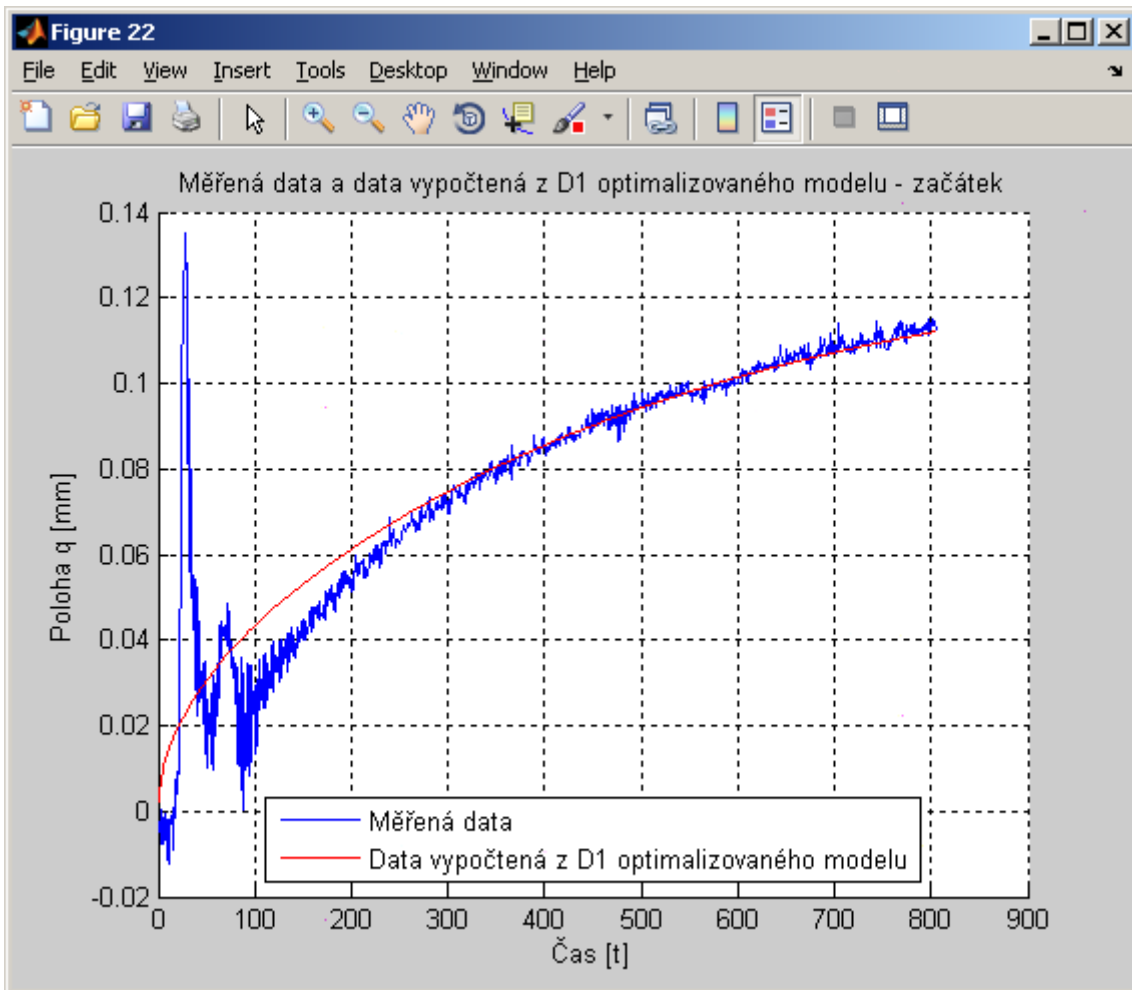
Poté proběhne jednorozměrná optimalizace dat vzhledem k naměřeným datům

```
Probíhá optimalizace!!!  
  
Výsledky D1-optimalizace měřených dat  
|  
Difuzní koeficient : 5.2284e-014 [m2/s]  
  
Optimum nalezeno úspěšně za      4.6190 s!!!
```

a zobrazí se sorpční křivka pro optimalizovanou hodnotu difuzního koeficientu



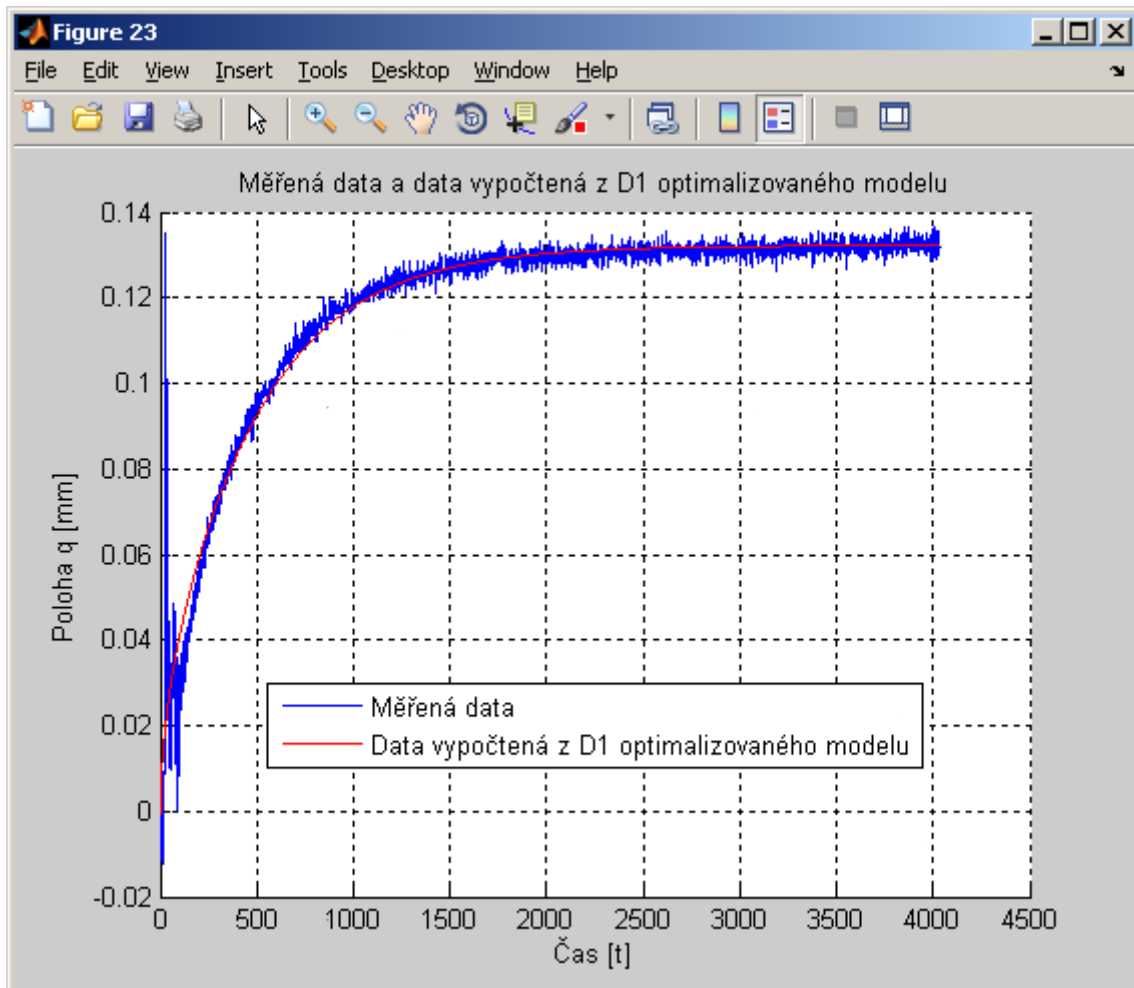


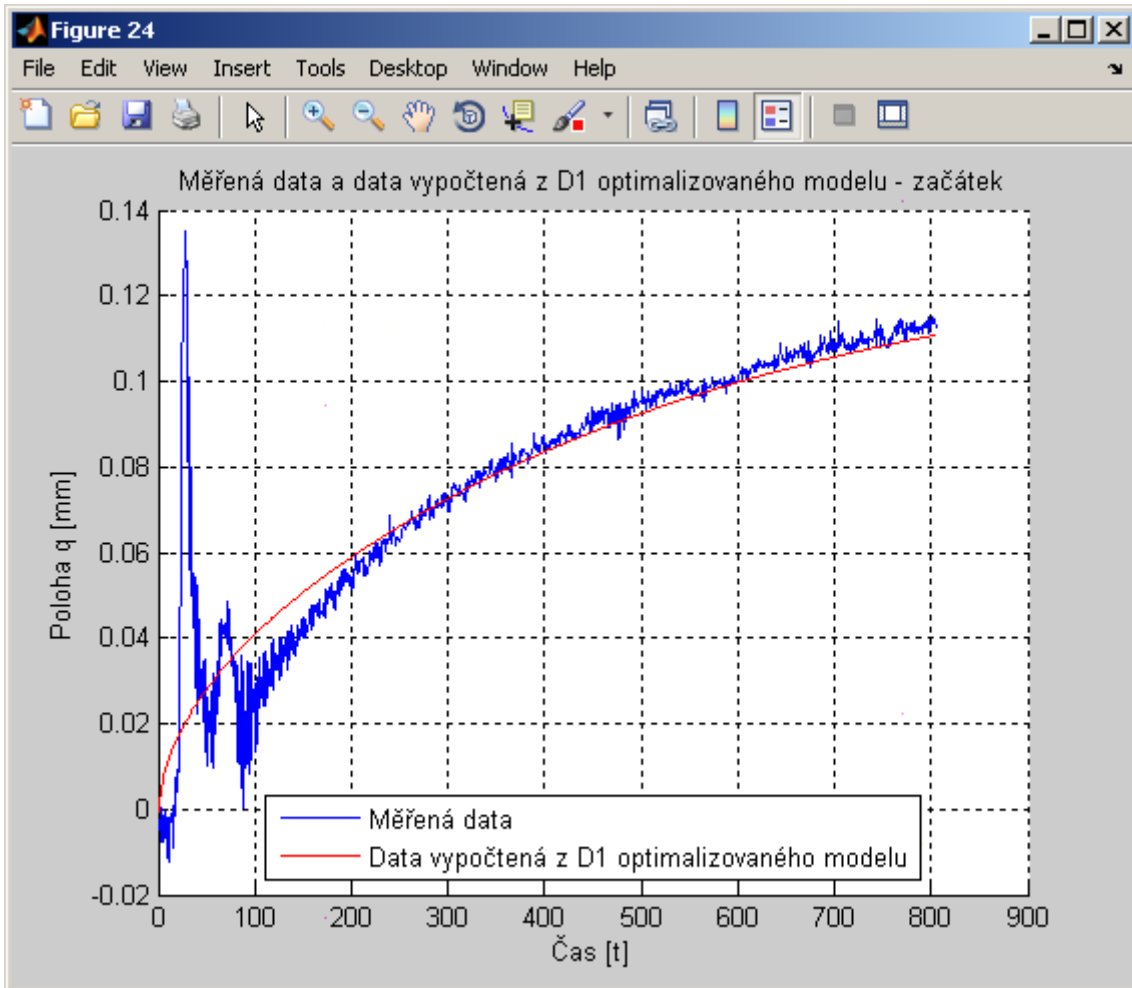


Následuje jednorozměrná optimalizace vzhledem k filtrovaným datům

```
Probíhá optimalizace!!!  
  
Výsledky D1-optimalizace filtrovaných dat  
  
Difuzní koeficient : 5.2521e-014 [m2/s] |  
  
Optimum nalezeno úspěšně za      3.3310 s!!!
```

a opět se zobrazí sorpční křivka v celém rozsahu měření a na začátku měření



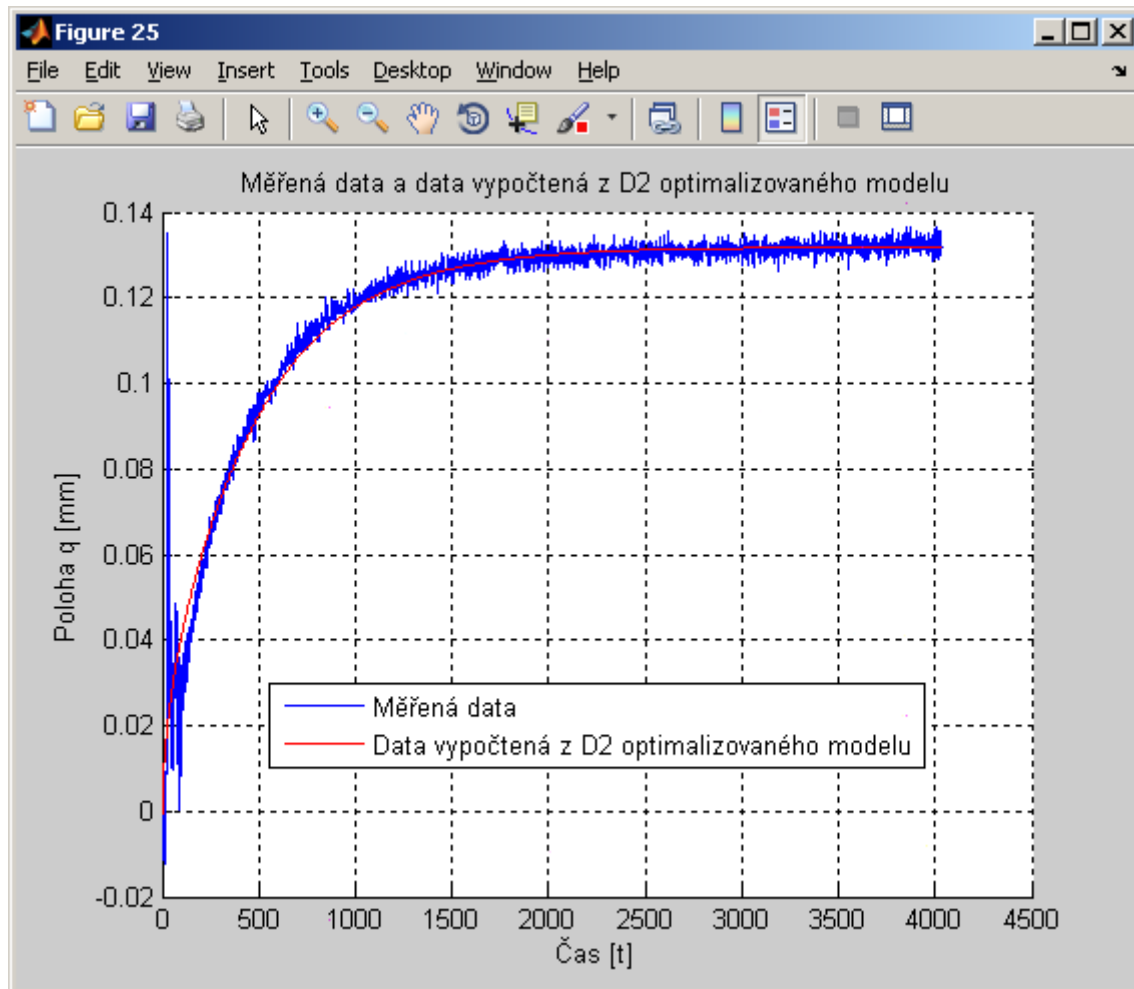


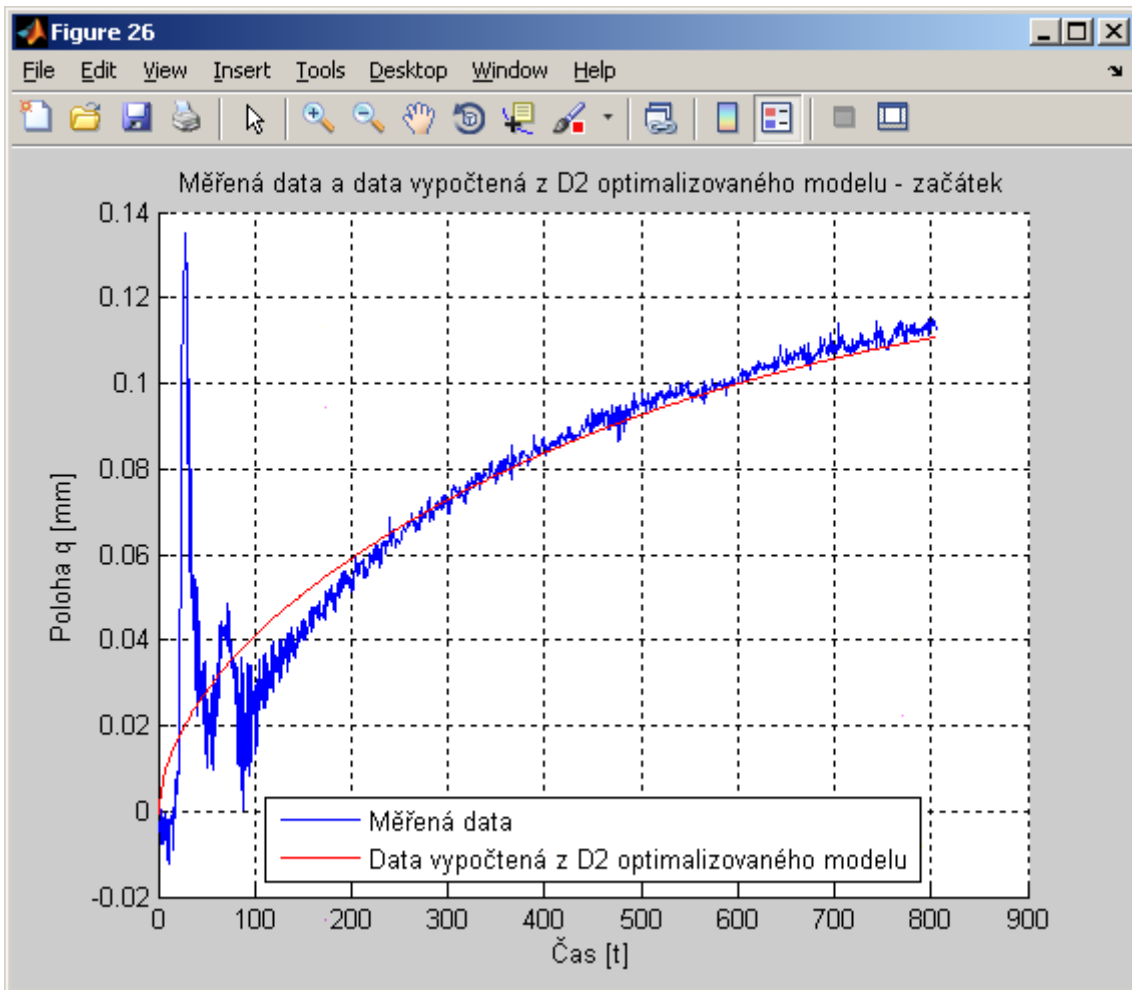
Při další dvourozměrné optimalizaci se hledají optimální hodnoty difuzního koeficientu a ustálené hodnoty polohy kalibračních bodů v sorpční rovnováze

```
Výsledky D2-optimalizace filtrovaných dat
|
Difuzní koeficient : 5.3115e-014 [m2/s]
Ustálená hodnota   : 1.3466e-001 [mm]

Optimum nalezeno úspěšně za      5.7436 s!!!
```

a opět se zobrazí sorpční křivka v celém rozsahu měření a na začátku měření

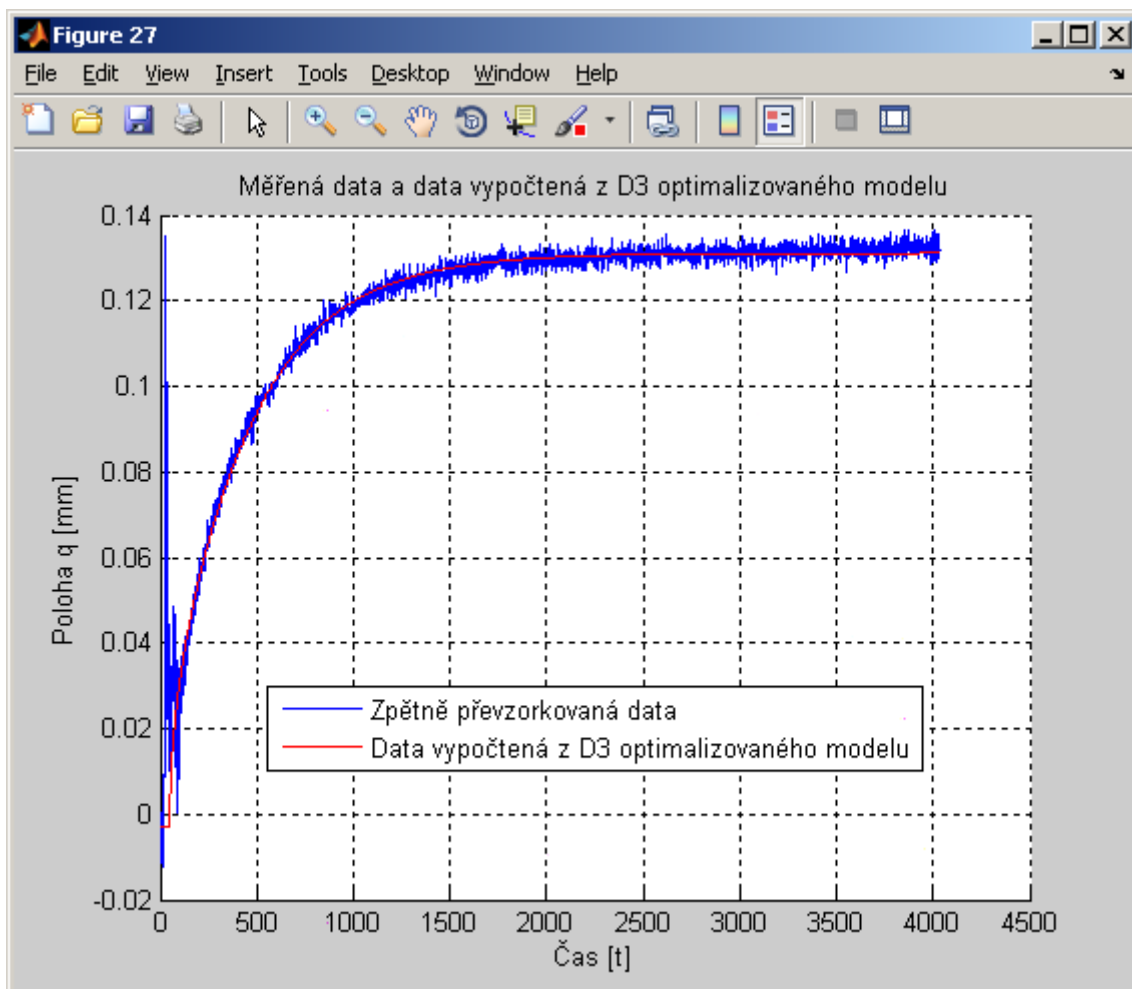


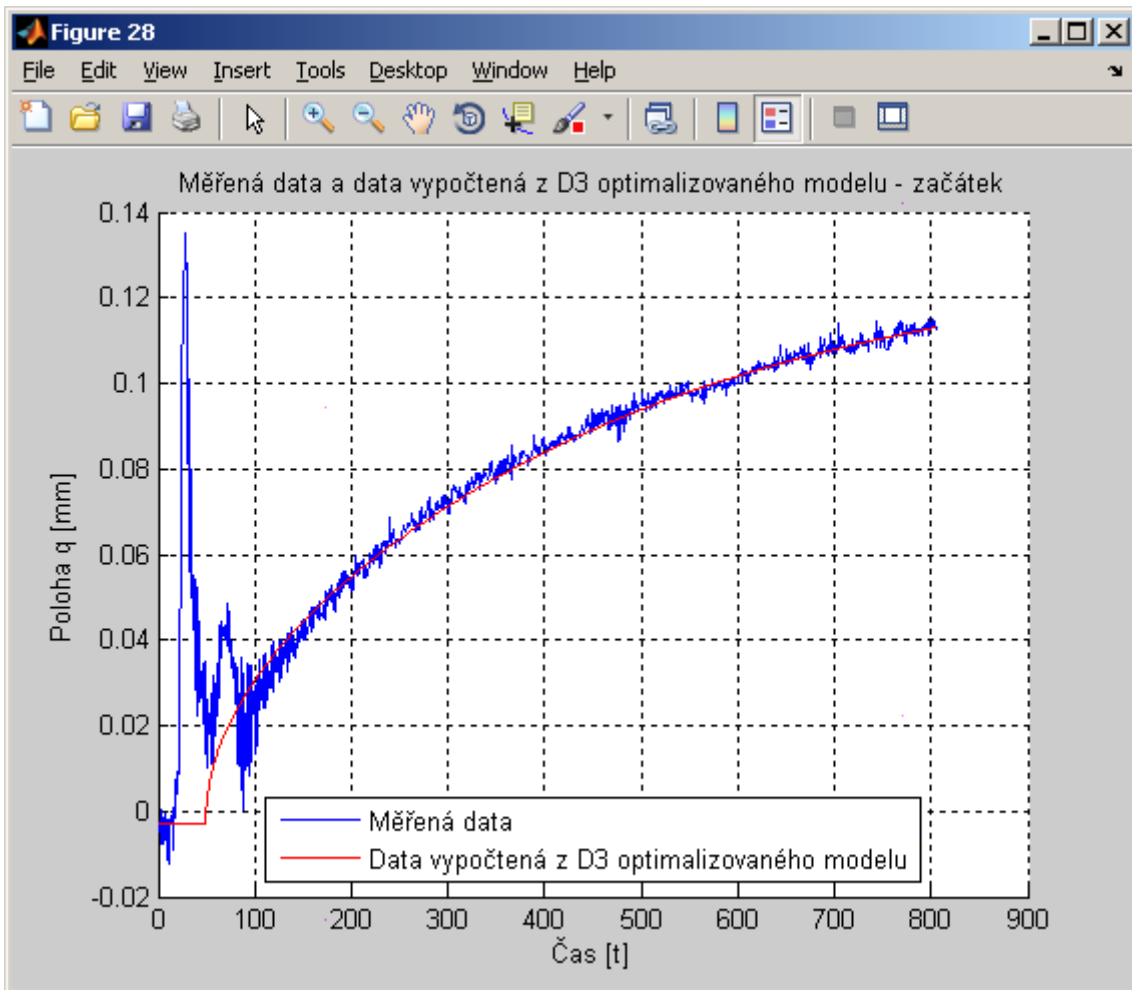


Následující třírozměrné optimalizace vyhledá optimální hodnoty difuzního koeficientu, ustálené hodnoty polohy kalibračních bodů v sorpční rovnováze a časového zpoždění nástřiku par/plynu do měřicí komůrky

```
Probíhá optimalizace!!!  
Čekejte, výpočet může trvat až několik minut!!!  
Probíhá optimalizace!!!  
  
Výsledky D3-optimalizace filtrovaných dat  
  
Difuzní koeficient : 6.1448e-014 [m2/s]  
Ustálená hodnota : 1.3398e-001 [mm]  
Zpoždění signálu : 4.8966e+001 [s]  
  
Optimum nalezeno úspěšně za 10.3427 s!!!
```

a opět se zobrazí sorpční křivka v celém rozsahu měření a na začátku měření

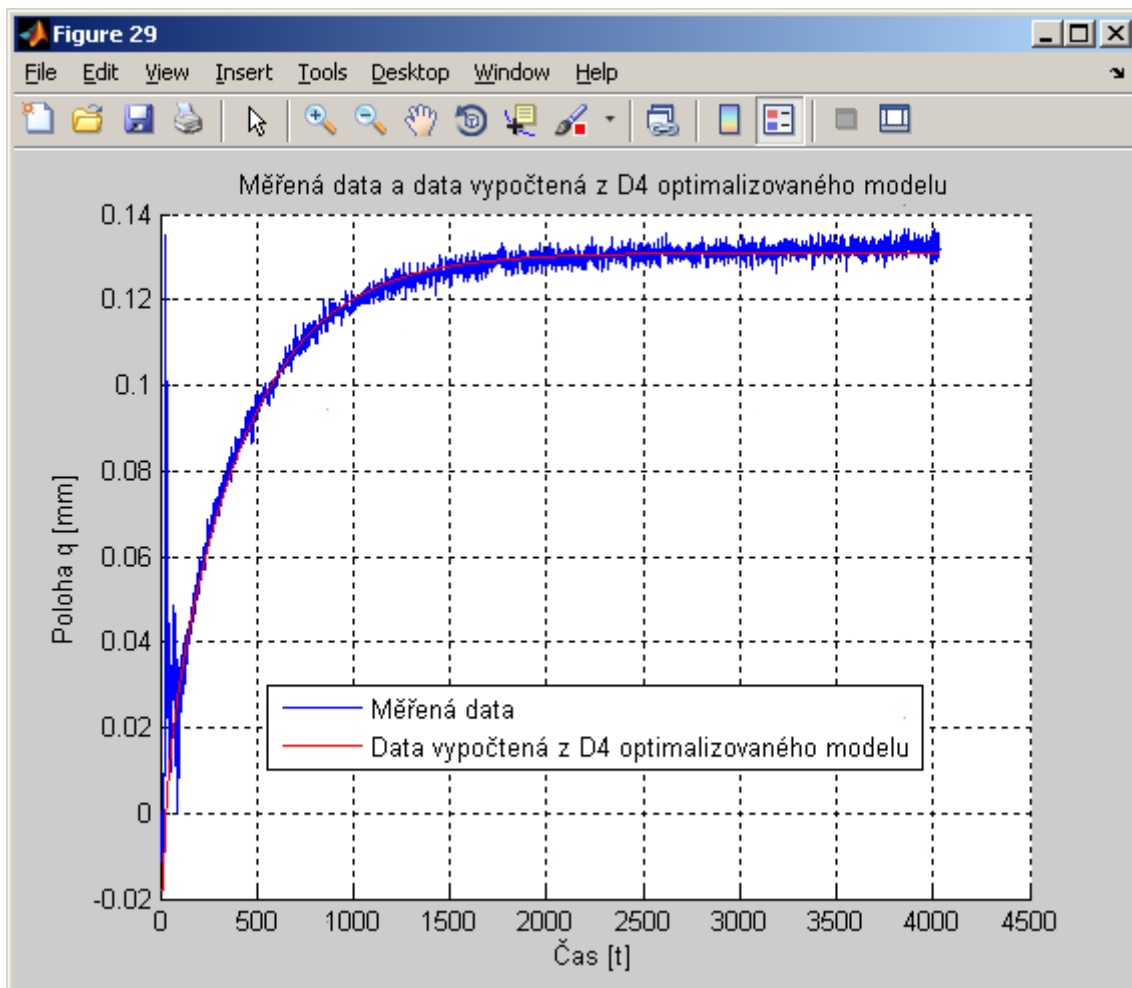


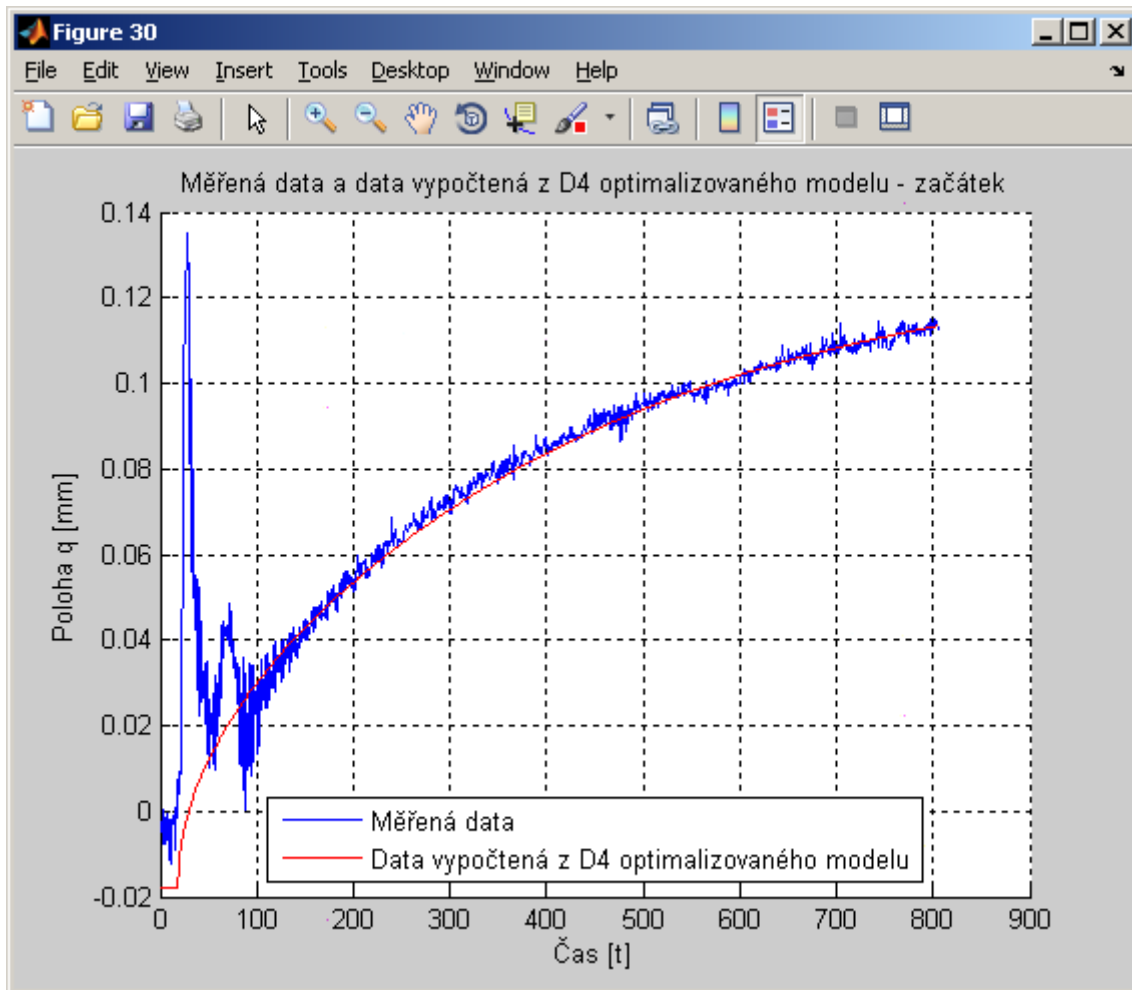


Při poslední čtyřrozměrné optimalizaci se vyhledají optimální hodnoty difuzního koeficientu, ustálené hodnoty polohy kalibračních bodů v sorpční rovnováze, časového zpoždění nástřiku par/plynu do měřicí komůrky a počáteční hodnoty měřeného údaje:

```
Probíhá optimalizace!!!  
Čekejte, výpočet může trvat až několik minut!!!  
Probíhá optimalizace!!!  
  
Výsledky D4-optimalizace filtrovaných dat  
  
Difuzní koeficient : 6.3526e-014 [m2/s]  
Ustálená hodnota : 1.4893e-001 [mm]  
Zpoždění signálu : 1.8197e+001 [s]  
Počáteční údaj : -1.5079e-002 [s]  
  
Optimum nalezeno úspěšně za 57.3112 s!!!
```

a opět se zobrazí sorpční křivka v celém rozsahu měření a na začátku měření





Touto poslední optimalizací je zpracování naměřené sorpční křivky ukončeno

Výpočty ukončeny!!!

Všechny výsledky se zapisují také do tabulek tabulkového kalkulátoru MS Excel. Soubor s výsledky má stejné jméno jako textový soubor se vstupními daty.