

# **SPRACOVANIE A VIZUALIZÁCIA EXPERIMENTÁLNYCH DÁT**

**Ladislav Ševčovič**



Vydané v rámci projektu RVEDOK „Rozšírenie vzdelávania doktorandov v zmysle kritérií systému kvality na Technickej univerzite v Košiciach“. Tento projekt je spolufinancovaný Európskou Úniou.

V práci sú použité názvy programových produktov, firiem a pod., ktoré môžu byť ochrannými známkami alebo registrovanými ochrannými známkami príslušných vlastníkov.

---

Sadzba programom pdfTEX

Copyright © 2008 Ladislav Ševčovič

Ktokoľvek má dovolenie vyhotoviť alebo distribuovať doslovný opis tohto dokumentu alebo jeho časti akýmkolvek médiom za predpokladu, že bude zachované oznamenie o copyrighte a oznamenie o povolení, a že distribútor príjemcovi poskytne povolenie na ďalšie šírenie, a to v rovnakej podobe, akú má toto oznamenie.

# **Obsah**

<b>Úvod</b>	<b>7</b>
<b>1 Základné pojmy a definície z oblasti neistôt meraní</b>	<b>10</b>
<b>2 Numerické metódy spracovania výsledkov meraní</b>	<b>21</b>
2.1 Lineárna závislosť . . . . .	24
2.2 Polynomiálna závislosť . . . . .	26
2.3 Exponenciálna závislosť . . . . .	27
2.4 Nelineárna aproximácia MNŠ . . . . .	29
2.5 $\chi^2$ test kvality fitovania . . . . .	32
2.6 Výber modelu . . . . .	35
2.7 Interpolácia a extrapolácia . . . . .	37
<b>3 Program QtiPlot</b>	<b>40</b>
3.1 Ovládacie možnosti programu QtiPlot . . . . .	40
3.1.1 Menu tabuľkového okna . . . . .	40
3.1.2 Menu grafického okna . . . . .	44
3.2 Príklady použitia programu . . . . .	47
3.2.1 Zadávanie a import dát do tabuľky . . . . .	47
3.2.2 Vytvorenie a úprava grafu . . . . .	48
3.2.3 Nelineárna regresia pre súbor boxbod.dat . . . . .	50
3.2.4 Lineárna regresia funkciou $y = ax$ . . . . .	53
3.3 Spôsoby zobrazenia viacerých grafov . . . . .	56
3.3.1 Zobrazenie dvoch priebehov v jednom grafu . . . . .	58
3.3.2 Zobrazenie dvoch grafov v jednom okne . . . . .	58
<b>4 Program Kpl</b>	<b>63</b>
4.1 Ovládacie možnosti programu Kpl . . . . .	64
4.2 Príklady použitia programu . . . . .	66
4.2.1 Importovanie dát, ich zobrazenie a úprava grafu . . . . .	66
4.2.2 Nelineárna regresia pre súbor boxbod.dat . . . . .	68
4.2.3 Lineárna regresia funkciou $y = ax$ . . . . .	72
<b>5 Niekol'ko pravidiel na tvorbu grafov</b>	<b>74</b>
<b>Záver</b>	<b>77</b>

<b>Chyby elektrických meracích prístrojov</b>	<b>79</b>
<b>Použitá literatúra</b>	<b>83</b>

*Venujem mojej dcére  
Alexandre*



*Primárnym cieľom výskumu  
nesmie byť viac faktorov, ale viac  
faktov so strategickou hodnotou.*

---

PAUL WEISS

## Úvod

*Pri spracovaní výsledkov meraní a pozorovaní sa široko používajú metódy grafického zobrazenia. Číselné údaje, ako výsledky meraní a pozorovaní prezentované v tabuľkovej forme neumožňujú dosťatočne názorne charakterizovať zákonitosti študovaných procesov, preto je vhodné tabuľku doplniť grafom (graf je vlastne vizuálna podoba údajov v tabuľke). Grafické znázornenie poskytuje názornejšiu predstavu o výsledkoch experimentu, umožňuje lepšie pochopiť fyzikálny zmysel študovaného procesu, zistíť (odhaliť) všeobecný charakter funkčnej závislosti premenných veličín a napokon stanoviť prítomnosť (existenciu) maxim alebo minim funkčnej závislosti.*

*Grafy taktiež umožňujú veľmi názorne porovnávať experimentálne hodnoty s teoretickou križkou (závislosťou). Z precízne vyhotoveného grafu nameranej závislosti dvoch veličín sa dajú s dosťatočnou presnosťou určiť napr. charakteristiky funkcie. Môžeme určiť polohu už spomínaných extrémov, inflexných bodov, pri lineárnej závislosti odčítať z grafu smernicu križky a pod. Na okraj spomienieme, že sú známe metódy na grafické derivovanie a kvadratúru (integrovanie). Výhoda grafických metód sa uplatní predovšetkým pri meraniach s neekvidištančnými hodnotami nezávisle premennej veličiny, pretože číselné spracovanie výsledkov je pri takýchto meraniach zložitejšie (ťažšie), ako pre ekvidištančné merania, napriek tomu, grafické riešenie je vo všeobecnosti nepresnejšie. Spomínané postupy a metódy však stratili na význame v súvislosti s rozvojom výpočtovej techniky a jej aplikácií v experimentálnej praxi.*

*Na kreslenie grafov a ilustrácií existujú komerčné programy, ktoré sú bohato vybavené podprogramami na interpoláciu aj extrapoláciu, na fitovanie (nájdenie najlepšej aproximácie) nameranej závislosti zvolenou triedou funkcií, na optimalizáciu, obsahujú štatistické spracovanie výsledkov, vyhľadenie*

*závislostí, rôzne filtre a pod. V prostredí operačného systému GNU/Linux je bohatý výber programov na spracovanie a analýzu dát, ktoré sú na rozdiel od komerčného OS Windows šírené pod licenciou GPL (GNU General Public License)<sup>1</sup>. Vymenujme niektoré matematicko-grafické programy:*

- *GNUPLOT,*
- *Gnumeric a Calc z kancelárskeho balíka OpenOffice sú plnohodnotnou náhradou za komerčný program Excel z MS Office, ďalej sú to*
- *Veusz,*
- *LabPlot,*
- *Grace (xmGrace),*
- *Scigraphica,*
- *Octave,*
- *PyLab,*
- *QtPlot a napokon*
- *Kpl.*

*V tejto príručke stručne opíšeme používanie posledných dvoch programov. Základom programovania v prostredí programu PyLab a jeho použitiu na podobné účely je venovaná príručka M. Kaukiča (2006) a programu Octave príručka J. Bušu (2006). Dôvody, ktoré viedli k tomuto výberu sú nasledujúce:*

1. *Proces inštalácie a konfigurácie je veľmi jednoduchý a zvládne ho aj bežný používateľ výpočtovej techniky.*
2. *Oba programy majú prívetivé grafické prostredie, pod ktorým sa skrýva softvér profesionálnej kvality.*
3. *Program QtPlot je vydareným klonom populárneho komerčného programu OriginLab<sup>TM</sup>, ktorým môžete vykonať profesionálnu analýzu experimentálnych dát, nakresliť do grafu zložité funkcie. Grafický výstup je vysokej kvality vhodný na ďalšie spracovanie, napr. programom TEX.*
4. *Program Kpl je z pohľadu pomeru jednoduchosti ovládania k výkonnosti ojedinelý vo svojej kategórii. Môžeme ho doplniť vlastnými knižnicami na fitovanie dát a programovými skriptmi<sup>2</sup> na vykreslovanie všakovakých funkcií, ktoré sa napišu a skompilujú v programovacom jazyku C.*

---

<sup>1</sup>Projekt GNU bol založený na vybudovanie kompletného operačného systému, ktorého výsledky budú voľne dostupné počítačovej verejnosti. Programy dostupné v rámci GNU sú chránené tzv. GNU General Public License (GPL), ktorá na rozdiel od všetkých ostatných licencí garantuje každému právo programy slobodne používať a šíriť ďalej.

<sup>2</sup>Skripty sú ASCII (textové) súbory obsahujúce príkazy. Sú tiež známe pod názvom zdrojové súbory (source files) alebo dávkové súbory (batch files). Keď skript spustíte, príkazy sa vykonajú (interpretujú) jeden za druhým počnúc od začiatku tak, akoby ste ich písali samostatne priamo v príkazovom riadku jeden za druhým. Ide o akúsi obdobu dávkových príkazov v OS MS DOS.

*Vytvorené grafy môžeme exportovať do rôznych formátov, okrem iného do Encapsulated Postscript (EPS).*

5. *Parametre fitovacích (aproximačných) funkcií, ktoré sme získali po spracovaní referenčných dát na testovanie matematických knižníc a algoritmov týmito programami sú v dobrej zhode s hodnotami uverejnenými na internetovej stránke Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006).*

Tématický materiál spracovaný v príručke je usporiadaný do piatich kapitol, pričom každá sa sústredí na jednu tému.

V prvej kapitole uvádzame krátky súpis hlavných pojmov z oblasti neistôt merania. Druhá kapitola, ktorá je spoločná pre tretiu a štvrtú, je venovaná základným numerickým metódam na spracovanie experimentálnych dát. Čitateľ by v každom prípade mal vedieť, čo a ako počítačovým programom analyzuje a aká je podstata metódy, ktorú používa. Pri prvom čítaní príručky je možné túto kapitolu preskočiť.

Tretia a štvrtá kapitola sú tiažiskom príručky, čitateľ sa z nich dozvie, aké možnosti jednotlivé programy poskytujú a ako ich rýchlo použiť na spracovanie a vizualizáciu nameraných dát, prípadne zobrazenie funkcií.

V záverečnej piatej kapitole sa kratúčko venujeme základným pravidlám na tvorbu úhladného grafu.

Príručka je určená všetkým, ktorí potrebujú rýchle zvládnutie prácu s programom na spoľahlivé numerické spracovanie nameraných dát a ich kvalitnú grafickú prezentáciu do publikácií, vysokoškolských kvalifikačných prác, konferenčných zborníkov, posterov a pod.

Ďakujem Jaroslavovi Skřivánkovi a Jánovi Bušovi za starostlivé prečítanie rukopisu a cenné prípony, ktoré prispeli k spresneniu niektorých formulácií a ku skvalitneniu tejto príručky.<sup>3</sup>

Košice 2008

L. Ševčovič

---

<sup>3</sup>Elektronická verzia príručky, doplnky a opravy sú prístupné na URL adrese <http://people.tuke.sk/ladislav.sevcovic/rvedok>. Prípony, ktoré pomôžu vylepšiť ďalšie vydanie príručky, zasielajte na adresu: RNDr. Ladislav Ševčovič (Ladislav.Sevcovic@tuke.sk), Katedra fyziky, FEI, Technická univerzita v Košiciach, Park Komenského 2, 041 20 Košice.

## 1 Základné pojmy a definície z oblasti neistôt meraní

V súčasnosti sa v metrológii, pri fyzikálnych a technických meraniach postupne prechádza na nové metódy vyjadrovania odchýlok. Doterajšie *chyby meraní* sú v súlade s medzinárodnými predpismi ISO a IEC nahradzované *neistotami meraní*. Za hlavný dokument je možné považovať predovšetkým smernicu, ktorá bola vydaná pod názvom *Guide to Expression of the Uncertainty of Measurement (GUM)* (ISO, Switzerland 1995) medzinárodnými metrologickými orgánmi v roku 1993, korigovaná a doplnená v roku 1995. Pre prírodovedcov bude iste zaujímavé navštíviť WWW stránku Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006) <http://physics.nist.gov/cuu/Uncertainty/basic.html>, ktorá prináša základné informácie o neistotách a ich vyjadrovaní.

Uvádzame zoznam niektorých významných medzinárodných organizácií, ktoré tento projekt podporujú:

- BIPM Bureau International des Poids et Mesures
- IEC International Electrotechnical Commission
- IFCC International Federation of Clinical Chemistry
- ISO International Organization for Standardization
- IUPAC International Union of Pure and Applied Chemistry
- IUPAP International Union of Pure and Applied Physics
- OIML International Organization of Legal Metrology

Aplikovanie a zavádzanie nových experimentálnych metód, prístrojov a pracovných postupov, práve tak, ako používanie starších a osvedčených metód, by malo byť podložené štúdiom ich vlastností, aby ich neskôr používanie nenarážalo na nejasnosti pri interpretácii výsledkov získaných použitými postupmi a metódami.

Medzi základné problémy nepochybne patria otázky presnosti a správnosti, alebo skôr nepresnosti a nesprávnosti meraní. Definícia týchto dvoch pojmov je dosť tŕžká, avšak ich obsah je intuitívne celkom jasný. *Správnosť* súvisí s tým, ako sa meranie (namerané hodnoty) zhodujú so skutočnou meranou hodnotou, zatiaľ čo *presnosť* súvisí s tým, ako sa opakovane merania (namerané hodnoty) zhodujú medzi sebou. Môžeme teda hovoriť o *systematických chybách*, ktoré sa prejavujú ako stály rozdiel medzi nameranými hodnotami (alebo ich strednou hodnotou) a skutočnou (správnou)<sup>4</sup> hodnotou a o *náhodných chybách*, ktoré sa prejavujú vo variabilite nameraných hodnôt okolo ich strednej hodnoty. Uvádzajú sa ešte *hrubé chyby*, ktoré vznikajú napr. poruchou prístrojov, nepozornosťou pracovníka, krátkodobou zmenou experimentálnych podmienok a pod.

Variabilita nameraných hodnôt má dve základné príčiny, ktoré väčšinou pôsobia súčasne:

<sup>4</sup>Niektoři autori používajú aj pomenovanie „pravá“ vo význame hodnoty získanej naprostoto presným meraním (PALENČÁR A KOL., 2000).

- vlastnosti vyšetrovaného javu (napr. neodstraniteľná nehomogenita vyšetrovaného materiálu, fluktuácie vyvolané fyzikálnymi procesmi a pod.)
- a technické nedostatky meracej metódy (nepresnosť meracieho zariadenia, nepresnosť pri príprave vzoriek, zmeny prostredia, v ktorom meranie prebieha, t. j. teplota, vlhkosť vzduchu a pod. a tiež vplyv osôb, ktorí sa experimentu, merania zúčastňujú).

Je potrebné teda pamätať na oba zdroje neistôt a snažiť sa o udržanie čo najstabilnejších podmienok na prevádzanie meraní. V ďalšom nás budú zaujímať otázky súvisiace s presnosťou (opakovateľnosťou), budeme pritom predpokladať, že metóda merania je správna, t. j. že sa správna hodnota rovná strednej hodnote rozdelenia nameraných hodnôt. O náhodných chybách sa spravidla predpokladá, že sú rozdelené normálne, tento predpoklad, ktorý býva obvykle splnený aspoň približne budeme v ďalšom akceptovať; vo všeobecnosti však nemusí byť splnený.

### Stručný slovník pojmov

*Aritmetický priemer* je súčet hodnôt pozorovaní (meraní, odčítaní a pod.) delený počtom hodnôt

$$x_i = \bar{X}_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_{i,k}. \quad (1)$$

*Citlivosť meracieho prístroja* je prakticky zmena hodnoty meranej veličiny, ktorá korešponduje s najmenším dielikom stupnice. Pre číslicové meracie prístroje je to podiel počtu číslíc zmeny údaja a zmeny vstupnej veličiny, ktorá zmenu vyvolala.

*Disperzia* (variancia) pozri *Rozptyl*.

*Chyba*, máme tu ma myсли chybu meracieho prístroja, ktorá má svoj pôvod v konštrukčnom usporiadani, v konečnom delení stupnice meraných hodnôt a pod. Základnými zdrojmi chýb sú:

- nedokonalosť meracích prístrojov,
- stárnutie a opotrebenie meracích prístrojov, čím sa môžu meniť ich charakteristiky a parametre,
- chyby experimentátora,
- nepresné metódy vyhodnocovania meraní,
- vplyv linearizácie, interpolácie a zaokrúhľovania,

- zlá kalibrácia, inštalácia alebo umiestnenie prístrojov atď.

*Chyba merania* (odchýlka) je rozdiel medzi nameranou  $X_i$  a skutočnou hodnotou  $\mu$  určujúcej veličiny v tom istom okamihu. Pri meraní určitej veličiny sa prevádzza len konečný počet meraní. Predpokladajme, že bolo prevedené meranie veličiny  $X$  a získané hodnoty  $X_1, X_2, \dots, X_n$ , ktorých chyby môžeme vyjadriť vztahom

$$\Delta X_i = X_i - \mu \quad (2)$$

a majú normálne rozdelenie. Aritmetický priemer nameraných hodnôt  $X_i$  podľa (1) dáva najpravdepodobnejšiu hodnotu meranej veličiny  $\mu \equiv \bar{X}_i$ .

*Korelácia* je kvantitatívna miera vztahu medzi dvoma veličinami vyjadrujeme ju ako

$$\begin{aligned} r(x_i, x_k) &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_i)(x_k - \bar{x}_k)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_i)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_k - \bar{x}_k)^2}} \\ &= \frac{D(x_i, x_k)}{\sqrt{D(x_i)} \sqrt{D(x_k)}}, \end{aligned} \quad (3)$$

kde  $D(x_i, x_k)$  je kovariancia,  $D(x_i)$  a  $D(x_k)$  sú disperzie, pričom  $-1 \leq r(x_i, x_k) \leq 1$ . Hodnota  $r(x_i, x_k) = 1$  znamená, že ide o funkčnú rastúcu závislosť, hodnota  $r(x_i, x_k) = -1$  zna-

mená funkčnú klesajúcú závislosť. Obidva prípady a prílastok funkčný zodpovedajú situáciu, keď všetky body ležia na priamke. Ak sú skúmané veličiny nezávislé, bude  $r(x_i, x_k) = 0$ , ale naopak nulový koeficient korelácie nemusí znamenať nezávislosť. Môže ísť o (to byť) zložitejší vzťah, napr. závislosť, ktorá v jednej časti rastie a v druhej klesá. Korelácia je štatistická (pravdepodobnosťná) závislosť dvoch náhodných veličín (premenných). Symbolom  $x_i$  a  $x_k$  sa tu nedáva bežný význam nezávisle a závisle premennej, pretože ani jednej z náhodných premenných neprisudzujeme charakter príčiny alebo následku.

*Kovariancia* (vzájomný rozptyl) je spoločná menlivosť daných dvoch vlastností a charakterizuje väzbu hodnôt výberu

$$D(x_i, x_k) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_{i,j} - \bar{x}_i)(x_{k,j} - \bar{x}_k). \quad (4)$$

*Merací prístroj* je zariadenie určené na prevod meranej veličiny na signál nesúci informáciu o jej hodnote (údaj). Charakterizujeme ho cílivosťou, schopnosťou replikovať údaje, rozptylom, presnosťou, hustotou pravdepodobnosti chýb meraní a pod. Priebeh registrácie môže byť spojity, keď je registrácia číslicová potom má schodíkový tvar.

*Náhodný výber* rozsahu  $n$  je  $n$ -tica náhodných premenných, ktoré sú stochasticky nezávislé a majú rovnak rozdelenie pravdepodobnosti.

*Neistota merania* (skrátene neistota) je parameter, ktorý súvisí s výsledkom merania a ktorý určuje rozptyl hodnôt, ktoré môžeme ešte racionalne priradiť k meranej veličine. (*Neistota* je teda interval, v ktorom sa s určitosťou, definovanou pravdepodobnosťou bude skutočná hodnota nachádzať.) Neistoty (z jednotlivych zdrojov) môžeme vydelenie pravdepodobnosti dvoma základnými metódami:

- štatistickými metódami z nameraných údajov, ktoré sa nazývajú *neistoty stanovené metódou A*, skrátene ich voláme neistoty typu A a označujeme ich ako  $u_A(x_i)$ ,

- neistoty získané iným spôsobom ako v predošom prípade, ktoré sa nazývajú *neistoty stanovené metódou B*, skrátene ich voláme neistoty typu B a označujeme ich ako  $u_B(x_i)$  (napr. výsledky získané pri predchádzajúcich meraniach, špecifikácie od výrobcu meracieho prístroja, údaje z certifikátov, kalibračných listov, neistoty referenčných údajov a pod.).

Vhodným zlúčením štandardných neistôt zo všetkých zdrojov získame celkovú (kombinovanú) štandardnú neistotu. Treba zdôrazniť, že nečleníme neistoty, ale metódy ich vydelenie na metódu A a metódu B. Neistoty určené oboma metódami sú rovnocenné, pokiaľ boli určené korektnie.

*Normálne (Gaussove) rozdelenie* sa používa na approximáciu v prípadoch, keď sa často vyskytujú malé odchylinky od menovitej hodnoty, pričom s rastúcou veľkosťou odchýlok pravdepodobnosť ich výskytu klesá, napr. keď je zdrojom neistoty merací prístroj od spoľahlivého výrobcu (môžeme predpokladať, že väčšina prístrojov bude zdrojom malých chýb).

*Opakovateľnosť* (replikateľnosť) je charakteristika meracieho systému a znamená, že distribučná funkcia chyby merania sa nemení pri opakovani meraní, teda akékoľvek súbory dát získané z nezávislých opakovanych meraní hodnoty  $f$  nejakej veličiny je možné modelovať ako realizáciu náhodných výberov z toho istého rozdelenia pravdepodobnosti. Stálosť distribučnej funkcie je podmienkou replikateľnosti meracieho systému. Merací prístroj bez driftu musí pri opakovani meraní jednej a tej istej hodnoty vyzkazovať vlastnosť, ktorá sa volá *replikateľnosť*. Matematicky to znamená, že súbory nezávisle nameraných dát sú realizáciou *náhodného výberu* z toho istého rozdelenia pravdepodobnosti (KUBÁČEK A KUBÁČKOVÁ, 2000).

*Presnosť merania* je miera nesúhlasu nameranej a skutočnej hodnoty určujúcej veličiny.

*Reprodukateľnosť merania* je opakovateľnosť výsledkov merania prevedených za rovnakých podmienok, ale v rôznych časových okamihoch.

*Rovnomerné (pravouhlé) rozdelenie pravdepodobnosti* sa používa v prípadoch, keď pravdepodobnosť výskytu ktorékoľvek odchýlky v celom intervale  $\pm z_{j\max}$  je rovnaká. V praxi sa používa najčastejšie, predovšetkým preto, že väčšinou nemáme k dispozícii dostatočné poznatky o rozdelení pravdepodobnosti výskytu odchýlok a teda nemáme dôvod dávať niektorým odchýlkom prednosť tým, že použijeme iný typ rozdelenia. Spojitá náhodná veličina  $X$  sa riadi zákonom rovnomerného rozdelenia (má rovnomerné rozdelenie), keď jej možné hodnoty ležia (nachádzajú sa) v určených hraniciach, okrem toho v hraniciach tohto intervalu sú všetky hodnoty náhodnej veličiny rovnako pravdepodobné (majú rovnakú hustotu pravdepodobnosti rozdelenia). S náhodnou veličinou, ktorá má vlastnosti rovnomerného rozdelenia sa často stretávame v meracej technike (praxi) pri zaokrúhľovaní údajov z meracích prístrojov na celý dielek delenia stupnice. Chyba pri zaokrúhľovaní údaja stupnice na najbližší dielek delenia je náhodná veličina  $X_i$ , ktorá môže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu medzi dvoma susednými dielektmi stupnice s konštantnou hustotou pravdepodobnosti. Keď sa chyby podriadujú zákonu rovnomerného rozdelenia počet prevedených meraní nemá vplyv na stupeň hodnovernosti výsledku merania na rozdiel od iných zákonov rozdelenia, napr. normálneho, kde zvyšovaním počtu meraní a ich spracovaním, môžeme podstatne zvýšiť presnosť odhadu meranej veličiny.

*Rozdelenie pravdepodobnosti* je funkcia vyjadrujúca pravdepodobnosť, že meranie (náhodná veličina) nadobudne určitú hodnotu alebo hodnoty z istého intervalu.

*Rozptyl* je stredná hodota druhej mocniny odchýlky náhodnej veličiny od jej strednej hodnoty

$$D(X_i) = s^2(X_i) = \frac{\sum_{k=1}^n (X_{i,k} - \bar{X}_i)^2}{n-1}. \quad (5)$$

*Rozptyl registrácie* je definovaný *disperziou* (druhým centrálnym momentom teoretickej distribúcie chýb merania daným prístrojom). Niekedy sa nazýva aj charakteristikou *vnútornej presnosti*. Charakteristika *vonkajšej presnosti* pri danom počte opakovaných meraní  $n$  konkrétnej hodnoty  $f_i$  je daná hodnotou veličiny

$$E[(\hat{f} - f_i)^2] = \frac{s^2}{n} + B^2, \quad (6)$$

kde  $B = E(\hat{f}) - f_i$ ,  $\hat{f}$  je uvažovaný odhad veličiny  $f$ ,  $E[\cdot]$  a  $E(\cdot)$  vyjadrujú strednú hodnotu veličiny. Hodnota  $B$  sa nazýva *vychýlenosť* (bias) odhadu  $\hat{f}$ . Keď prístroj (súbor dát získaných prístrojom) je charakterizovaný hustotou pravdepodobnosti, pre ktorú platí  $E(X_i) = 0$ , potom sú charakteristiky vonkajšej a vnútornej presnosti zhodné. *Rozptyl (disperzia) meracieho prístroja* je jeho dôležitou charakteristikou, avšak *nevystihuje úplne štatistické správanie chýb*. Lepšiou charakteristikou správania chýb meraní je ich rozdelenie pravdepodobnosti. Pri použití meracieho prístroja vzniká problém, ako túto hustotu poznať aspoň približne (KUBÁČEK A KUBÁČKOVÁ, 2000).

*Rozšírená neistota* je veličina definujúca interval okolo výsledku merania, ktorý zahrnuje veľkú časť rozdelenia pravdepodobnosti hodnôt, ktoré je môžne priradiť k meranej veličine.

*Signál* je fyzikálna veličina, ktorá je nositeľkou pridanéj namodulovanej informácie.

*Smerodajná odchýlka* je druhá odmocnina z rozptylu príslušného rozdelenia pravdepodobnosti.

*Štandardná neistota merania* je neistota merania vyjadrená ako smerodajná odchýlka. Pojem *štandardná neistota* (v meraní) a *smerodajná odchýlka* (odmocnina z disperzie resp. z rozptylu; charakterizuje presnosť merania) znamenajú to isté.

*Trojuholníkové (Simpsonove) rozdelenie* sa používa na modelovanie situácií (prípadov), ktoré sa podobajú normálnemu rozdeleniu.

*Vstupný odhad* je výsledok merania vypočítaný z odhadov vstupných dát pomocou funkcie mo-

delu merania.

*Výberová smerodajná odchýlka* je druhá odmocnina výberového rozptylu. Náhodnú chybu v klasickej teórii chýb najčastejšie zastupuje smerodajná odchýlka výberového súboru

$$s(X_i) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (X_{i,k} - \bar{X}_i)^2}{n-1}}, \quad (7)$$

zriedkavo smerodajná odchýlka aritmetického priemeru

$$s(\bar{X}_i) = \frac{s(X_i)}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (X_{i,k} - \bar{X}_i)^2}{n(n-1)}}. \quad (8)$$

*Výberový rozptyl* je veličina charakterizujúca rozptylenie výsledkov série  $n$  pozorovaní (meraní, odčítaní a pod.) rovnakej meranej veličiny, získaná ako druhá mocnina *výberovej smerodajnej odchýlky*.

*Výsledok merania* je hodnota, ktorá prislúcha meranej veličine a bola získaná meraním. Keď použijeme pomenovanie výsledok merania, musíme uviesť, či sa vzťahuje na:

- údaj meradla (meracieho prístroja),
- nekorigovaný výsledok,
- korigovaný výsledok.

*Nekorigovaný výsledok* je taký výsledok merania, pri ktorom nie sú uplatnené korekcie známych systematických chýb. *Korigovaný výsledok* merania je výsledok po korekcii systematických chýb. Výsledkom merania je často hodnota získaná výpočtom z výsledku viacerých opakovaných meraní. Vzhľadom na to, že skutočnú hodnotu meranej veličiny zistujeme procesom merania, ktorý je zaťažený rôznymi chybami, výsledok merania je len odhadom (skutočnej) hodnoty meranej veličiny. Pri udávaní výsledku merania je preto dôležité stanoviť aj kvalitu tohto odhadu, ktorá sa definuje pomocou *neistoty*. *Úplný údaj výsledku* obsahuje okrem výslednej hodnoty meranej veličiny aj údaj o neistote merania. (WIMMER A KOL., 2001, str. 103)

*Výstupná veličina* je veličina, ktorá pri vyhodnotení merania predstavuje meranú veličinu.

## Typy neistôt

Ako sme to už spomenuli, je pojem neistota (neistota merania) spojený s označením parameteru súvisiaceho s výsledkom merania a charakterizujúceho rozsah hodnôt, ktoré môžeme racionalne priradiť meranej veličine. Zmienili sme sa aj o tom, že neistota sa skladá z niekoľkých zložiek. Na určenie ich veľkosti sú principiálne k dispozícii tieto dve metódy:

- štatistické spracovanie nameraných údajov (metóda typu A),
- iné ako štatistické spracovanie nameraných údajov (metóda typu B).

Niekedy sa neistoty získané metódou A stručne označujú ako *neistoty typu A*, podobne neistoty získané metódou B ako *neistoty typu B*. Z týchto základných typov neistôt sa potom ľahko pomocou súčtu ich štvorcov určí výsledná *kombinovaná neistota*  $u_C$ . Predpokladajme, že máme jednoduchú výstupnú modelovú funkciu niekoľkých vstupných parametrov  $f = F(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_m)$ , kde  $f$  je odhad výstupnej veličiny,  $x_i$  sú odhady vstupných veličín a  $F$  je známy funkčný vzťah. Vo všeobecnosti potom môžeme pre neistotu  $u_f$  odhadu  $f$  napísat' vzťah

$$u_f = \sqrt{\sum_{i=1}^m A_i^2 u_{x_i}^2}, \quad (9)$$

kde  $u_{x_i}$  sú jednotlivé zložky neistôt,  $A_i$  je koeficient citlivosti (prevodu) príslušného zdroja neistoty, ktorý poznáme alebo sa určí ako parciálna derivácia funkcie  $f$  podľa príslušnej vstupnej veličiny  $x_i$

$$A_i = \frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_m)}{\partial x_i}. \quad (10)$$

Vidiet', že celá metodika určenia je dosť komplikovaná, preto v nasledujúcich častiach ukážeme

len základnú metodiku a hľavého čitateľa odkážeme na preštudovanie príslušnej literatúry (PALENČÁR A KOL., 2000; VDOLEČEK A KOL., 2001a,b, 2002a,b; UHRIN A KOL., 2006; MELOUN A MILITKÝ, 2004).

### Vyhodnotenie štandardných neistôt vstupnej veličiny metódou typu A

Metóda vyhodnotenia tohto typu neistôt je založená na štatistickej analýze opakovanej súrady. Keď máme  $n$  nezávislých rovnako presných pozorovaní ( $n > 1$ ), bude odhad výslednej hodnoty  $f$  reprezentovaný hodnotou výberového priemeru (aritmetického priemeru)  $\bar{f}_i$ . Neistota prislúchajúca odhadu  $f$  sa určí ako smerodajná odchýlka  $s(\bar{f}_i)$  tejto výslednej hodnoty, teda výberového priemeru  $\bar{f}_i$ . Tento typ neistoty sa označí ako  $u_{Af}$  a môžeme ju vyjadriť v tvare

$$u_{Af} = s(\bar{f}_i) = \frac{s(f_i)}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (f_{i,k} - \bar{f}_i)^2}{n(n-1)}}. \quad (11)$$

Táto neistota je spôsobená kolísaním nameraných údajov. Keď máme k dispozícii malý počet meraní ( $n < 10$ ) je hodnota určená podľa tohto vzťahu nespoľahlivá a mali by sme túto neistotu (spôsobenú kolísaním nameraných údajov) odhadnúť metódou typu B na základe iných informácií ako sú súčasné namerané údaje.

### Vyhodnotenie štandardných neistôt vstupnej veličiny metódou typu B

Ako sme to už uviedli vyhodnotenie neistoty vstupnej veličiny metódou typu B je založené na iných ako štatistickej postupoch analýzy súrady pozorovaní. Naskytuje sa možnosť analógie so systematickými zložkami chýb, avšak neide

o jednoznačnú súvislosť pretože metódou typu B je možné odhadnúť aj vplyv náhodnej chyby, napr. pri kalibrácii použitím predchádzajúcich meraní. Štandardná neistota typu B sa odhaduje pomocou racionálneho úsudku na základe všetkých možných a dostupných informácií. Najčasťejšie sa používajú:

- údaje výrobcu meracieho prístroja,
- skúsenosti z predchádzajúcej súrady meraní,
- skúsenosti s vlastnosťami správania materiálov a techniky a poznatky o nich,
- údaje získané z kalibrácií a z certifikátov,
- neistoty referenčných údajov v príručkach.

Pri určovaní neistoty typu B sa vychádza z čiasťkových neistôt jednotlivých zdrojov  $u_{Bz_j}$ . Keď poznáme maximálnu odchýlku  $j$ -teho zdroja neistoty  $z_{j,\max}$ , neistota  $u_{Bz_j}$  sa určí podľa vzťahu

$$u_{Bz_j} = \frac{z_{j,\max}}{k}, \quad (12)$$

kde  $k$  je súčinitel' získaný zo zákona rozdelenia pravdepodobnosti, ktorým sa riadi zdroj neistoty (napr. pre normálne rozdelenie je  $k = 2$ , prípadne  $3$ , pre rovnomerné rozdelenie  $k = \sqrt{3}$ , pre trojuholníkové rozdelenie  $k = \sqrt{6}$  atď., podrobnosti pozri odkaz *Rovnomerné rozdelenie pravdepodobnosti*).<sup>5</sup> V niektorých prípadoch môže byť už neistota  $u_{Bz_j}$  známa, napr. z kalibračného certifikátu výrobcu meracieho prístroja. Výsledná neistota sa metódou B určí podobne ako v prípade závislosti vstupných funkcií od viacerých parametrov, pre  $p$  zdrojov  $z_1, z_2, \dots, z_j, \dots, z_p$  platí

$$u_{Bf} = \sqrt{\sum_{j=1}^p A_j^2 u_{Bz_j}^2}, \quad (13)$$

kde  $u_{Bz_j}$  sú neistoty jednotlivých zdrojov a  $A_j$  sú ich súčinitele citlivosti. Takýmto spôsobom sa

<sup>5</sup>V prípadoch, keď môžeme odhadnúť len dolnú ( $z^-$ ) a hornú hranicu ( $z^+$ ) meranej veličiny  $X_i$  a ďalšie informácie nemáme k dispozícii, je vhodné priradiť (prisúdiť) meranej veličine *rovnomerné rozdelenie a ako mieru* neistoty  $u_B(X_i)$  použiť odhad smerodajnej odchýlky  $s(X_i)$  tohto rozdelenia, teda  $u_B(X_i) = s(X_i) = \sqrt{\frac{(z^+ - z^-)^2}{12}}$ .

neistota vyhodnocovaná metódou typu B prevedie do nového tvaru a vzhľadom na predchádzajúce predstavy aj tieto neistoty ziskavajú charakter smerodajnej odchýlky. Ako s takými, prípadne s ich druhými mocninami ako s rozptylom, sa pracuje ďalej. V samostatnej časti to ukážeme na príkladoch.

### Kombinovaná a rozšírená neistota

V praxi sa zriedka vystačí len s jedným alebo druhým typom neistoty samostatne. Potom je potrebné stanoviť výsledný efekt kombinovaných neistôt meraní (alebo určení) oboch typov, A a B. Výsledná kombinovaná neistota veličiny  $f$  sa označuje  $u_{Cf}$  a je vlastne odhadom smerodajnej odchýlky spojenej s výsledkom, ktorý je rovný druhej odmocnine kombinovaného rozptylu získaného zo všetkých rozptylov vstupných veličín; druhej odmocnine zo súčtu štvorcov oboch typov neistôt A a B podľa vzťahu

$$u_{Cf} = \sqrt{u_{Af}^2 + u_{Bf}^2} \quad (14)$$

a zo všetkých prípadných kovariancí. Postup na stanovenie kombinovanej standardnej neistoty je iný pre *nekorelované* a iný pre *korelované* veličiny.

Pre veličiny *nekorelované* (vzájomne nezávislé) je kombinovaná standardná neistota  $u_{Cf}$  stanovená ako kladná druhá odmocnina z kombinovaného rozptylu  $u_{Cf}^2$ , ktorý sa určí pomocou vzťahu

$$u_{Cf}^2 = \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial F}{\partial x_i} \right)^2 u^2(x_i), \quad (15)$$

kde  $F$  je funkcia vyjadrujúca závislosť výstupnej veličiny  $f$  od vstupných veličín  $x_i$ .

Pre veličiny *korelované* (vzájomne závislé) vstupujú do neistôt aj ich kovariancie  $D(x_i, x_k)$  vzťahujúce sa na odhadu  $x_i$  a  $x_k$  ako ďalší vplyv na vyjedrovanú neistotu

$$D(x_i, x_k) = u(x_i) \cdot u(x_k) \cdot r(x_i, x_k), \quad (16)$$

kde  $r(x_i, x_k)$  je korelačný koeficient. Kovariaciu dvoch náhodných veličín  $x_i^{(k)}$  a  $x_k^{(k)}$ , ktor-

rých odhady sú získané z hodnôt opakovanych meraní a sú vyjadrené aritmetickými priemermi  $\bar{x}_i^{(k)}$  a  $\bar{x}_k^{(k)}$ , môžeme určiť podľa nasledujúceho vzťahu (horný index  $(k)$  vyjadruje, že máme do činenia s korelovanými veličinami)

$$D(x_i, x_k) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_{i,j}^{(k)} - \bar{x}_i^{(k)}) (x_{k,j}^{(k)} - \bar{x}_k^{(k)}). \quad (17)$$

Kombinovaný rozptyl vzťahujúci sa na odhad funkčne závislej výstupnej veličiny od korelovaných vstupných veličín je vyjadrený vzťahom

$$\begin{aligned} u_C^2(f) &= \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial F}{\partial x_i} \right)^2 u^2(x_i) + \\ &+ 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n \frac{\partial F}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial x_k} D(x_i, x_k). \end{aligned} \quad (18)$$

Kombinovaná štandardná neistota je rovná odmocnine s takto vyjadreného kombinovaného rozptylu. Z vyjadrenia rozvoja neistôt získame príspevky jednotlivých zdrojov neistôt k celkovej neistote, preto je vhodné previesť v tejto fáze analýzu príspevkov jednotlivých zdrojov celkovej (kombinovanej štandardnej) neistoty a na základe jej výsledku prípadne previesť úpravu metodiky merania za účelom zníženia neistôt, ktoré sa na celkovej neistote najviac podielajú.

Tam kde nevystačíme so štandardnými neistotami je potrebné použiť ich *rozšírenie* pomocou koeficientu rozšírenia  $k_r$ . Pôvodne stanovená smerodajná odchýlka (teda aj štandardná neistota) predstavuje napr. pri najčastejšie používanom *normálnom rozdelení* interval určený s pravdepodobnosťou asi 68 %. Podobne je to aj pri iných typoch (zákonoch) rozdelenia pravdepodobnosti. Aby sme dosiahli väčší interval pokrytie, blížiaceho sa k 100 %, je potrebné rozšíriť štandardnú neistotu koeficientom rozšírenia  $k_r$ , ktorého význam je v podstate zhodný s významom kvantilov pri Gaussovom (normálnom) rozdelení, kde  $k_r = 2$  pre rozšírenie na 95%-nú a  $k_r = 3$  pre rozšírenie na 99,7%-nú pravdepodobnosť a pod. Rozšírená neistota je potom vy-

jadrená vzťahom

$$U_f = k_r \cdot u_{Cf}, \quad (19)$$

kde  $U_f$  je rozšírená neistota,  $k_r$  je koeficient rozšírenia a  $u_{Cf}$  je kombinovaná neistota. Výsledok merania sa potom vyjadri v tvare

$$f = \bar{f} \pm U_f \quad (20)$$

a znamená, že najlepším odhadom meranej veľičiny je  $f$  a že interval od  $f - U_f$  do  $f + U_f$  je interval, od ktorého je možné očakávať, že obklopuje veľkú časť hodnôt, ktoré môžu byť priradené (prisúdené) výstupnej veličine  $f$ .

### Zdroje neistôt

Ako zdroje neistôt možeme označiť všetky javy, ktoré nejakým spôsobom môžu ovplyvňovať neurčitosť jednoznačného stanovenia výsledku merania a tým oddaľujú (posúvajú) nameranú hodnotu od skutočnej hodnoty. Veľký vplyv na výsledok má aj tá skutočnosť akú meraciu metódu používame, priamu alebo nepriamu. Na neistoty tiež vplýva výber meracích prístrojov (analogových alebo číslicových), vzorkovačov, použitie rôznych filtrov, iných prostriedkov a zariadení v celej trase prenosu a úprave meraného signálu. K neistotám výrazne prispievajú rušivé vplyvy prostredia v najširšom slova zmysle. Na tomto mieste spomenieme najčastejšie sa vyskytujúce zdroje neistôt:

- nevhodný výber prístroja (rozlišovacia schopnosť a pod.),
- neúplná alebo nedokonalaá definícia meranej veličiny alebo jej realizácia,
- nevhodný, resp. nereprezentatívny výber vzoriek merania,
- nevhodný postup pri meraní,
- zjednodušenie alebo nesprávne zaokrúhlenie konštánt a prevzatých hodnôt,
- linearizácia, approximácia, interpolácia alebo extrapolácia pri vyhodnocovaní,

- nekompenzované alebo neznáme vplyvy prostredia,
- nedodržanie zhodných podmienok pri opakovanych meraniach,
- subjektívne vplyvy obsluhy (experimentátora),
- nepresnosť etalónov a referenčných zdrojov alebo materiálov.

Niektoré zo zdrojov sa prejavujú významne alebo výhradne v neistotách vyhodnocovaných metódou typu A, iné zase pri požití metódy typu B. Mnohé zdroje môžu byť príčinou oboch skupín neistôt a preto vzniká nebezpečenstvo v podobe zabudnutia (vynechania) jednej zo zložiek, čo môže mať výrazne skreslujúci účinok. Situácia sa komplikuje, keď na meranie niekoľkých vstupných veličín používame rovnaký merací prístroj alebo keď sú medzi vstupnými parametrami iné kovariačné väzby. Výsledná neistota je potom podstatne väčšia a celá metodika spracovania nameraných údajov je primerane zložitejšia.

### Príklady stanovenia neistoty

Čísla, ktoré vyjadrujú výsledok merania v tvare  $f = \bar{f} \pm U_f$  (alebo  $f = \bar{f} \pm u_{Cf}$ ) sú získané výpočtom a majú obyčajne toľko desatiných miest, kolko zobrazí použité výpočtové zariadenie (počítač, kalkulačka a pod.) V zobrazenom číslе sa číslice s výnimkou núl na začiatku zobrazenej hodnoty označujú ako *platné číslice*, napr. číslo 0,003 001 40 má šesť platných číslic (miest). Výsledná neistota merania sa zaokruhluje najviac na *dve platné číslice*. Takyto postup vnáša do výslednej číselnej hodnoty intervalu neistoty hodnoty zaokrúhlívaciu chybu nanajvýš 0,5 %. Napríklad výsledkom výpočtu je číslo 0,004 3234, zaokrúhlením získame hodnotu 0,004 3, alebo výsledkom výpočtu je číslo 0,004 0234, zaokrúhlením získame hodnotu 0,004 0 (keď je druhou platnou číslicou nula, treba ju vo výsledku uviesť). Z formátu čísla vyjadrujúceho interval

neistoty  $U_f$  vyplýva aj formát čísla  $\bar{f}$ , ktoré nemá význam uvádzat' v nižšom ráde ako je rám po-slednej platnej číslice neistoty. Uvedieme príklady:

1. Výpočtom sme získali tieto nezaokrúhlené čísla:

$$\bar{f} = 38,395\,799 \text{ cm}^2$$

$$U_f = 0,155\,9118 \text{ cm}^2$$

2. Po zaokrúhlení ich zapíšeme v tvare:

$$\bar{f} = 38,40 \text{ cm}^2$$

$$U_f = 0,16 \text{ cm}^2$$

3. Výsledok merania uvedieme v tvare:

$$f = (38,40 \pm 0,16) \text{ cm}^2$$

4. Pri zaokrúhlení na jedno (platné) desatinné miesto:

$$f = (38,4 \pm 0,2) \text{ cm}^2$$

5. Ďalšie možnosti zápisu výsledkov meraní:

$$I = (8,37 \pm 0,24) 10^{-3} \text{ A}$$

$$p = (1,2017 \pm 0,0024) \text{ Pa}$$

$$\lambda = 2,037(4) \text{ nm}$$

Poslednú formu zápisu výsledku merania používajú niektoré odborné časopisy a nahradzuje klasický tvar zápisu  $\lambda = (2,037 \pm 0,004) \text{ nm}$ .

## Číslicový merací prístroj<sup>6</sup>

Postup odhadu neistoty výsledku merania (typ B) je pre daný typ meracieho prístroja obyčajne stanovený výrobcom. Keď nemáme k dispozícii tento postup alebo nie je stanovený inak,

<sup>6</sup>Dovolená chyba číslicového voltmetra (ampérmetra) sa udáva súčtom relatívnej chyby v percentoch  $\delta_{\text{mh}}$  z meranej hodnoty a relatívnej chyby  $\delta_{\text{mr}}$  v percentoch, vzťahuje sa na najväčšiu hodnotu meracieho rozsahu prístroja (podrobnejšie pozri časť 5 Chyby elektrických meracích prístrojov).

je neistota výsledku principiálne určená diskrétnym charakterom číselného údaja na displeji prístroja. Najjemnejší krok delenia  $\delta$  daného rozsahu meracieho prístroja  $X_{\text{mr}}$  je určený zmenou údaja na poslednom digite o hodnotu  $\pm 1$ . Na príklad pre prístroj s päť digitovým displejom je  $\delta = 10^{-5} X_{\text{mr}}$  a meraná veličina sa s istotou nachádza v intervale hodnoty zobrazenej na displeji plus  $\delta$ . Rozdelenie pravdepodobnosti výskytu meranej veličiny v tomto intervale sa obyčajne považuje za rovnomerné. Potom sa stredná hodnota meranej veličiny odhaduje hodnotou zobrazenou na displeji plus  $\delta/2$  a príslušná neistota výsledku sa odhadne štandardnou odchýlkou rovnomerného rozdelenia

$$u_B = \frac{\delta}{\sqrt{12}} = \frac{\delta}{2\sqrt{3}}. \quad (21)$$

Jedným zo zdrojov neistoty je rozlíšiteľnosť poslednej platnej číslice. Napriek tomu, že sa pri opakovom meraní údaj na displeji nemení nie je neistota merania nulová. Pri odhade neistoty sa používa model rovnomerného rozdelenia pravdepodobnosti v intervale, ktorý je vymedzený rozlošovaciou schopnosťou  $\delta$  daného prístroja podľa vzťahu (21).

Príklad A:

Číslicový voltmeter opakovane ukazuje na displeji napätie  $U = 14,12 \text{ V}$  pri rozlišení 10 mV (presnosť 10 mV), môžeme teda predpokladať, že  $\delta^{(1)} = 0,01 \text{ V}$  a neistota je rovná

$$u_B^{(1)} = \frac{0,01}{2\sqrt{3}} = 0,002\,886\,75 \text{ V} = \\ = 0,0029 \text{ V} \approx 0,003 \text{ V}. \quad (22)$$

Údaj v technickej dokumentácii voltmetra nás však informuje, že na rozsahu 20 V pri rozlišení 10 mV (1 digit) má voltmeter presnosť

(0,3 % meranej hodnoty + 1 digit). Potom

$$\begin{aligned}\delta^{(2)} &= \left( \frac{14,12}{100} 0,3\% + 0,01 \right) = \\ &= (0,04236 + 0,01) = 0,05236 \text{ V.}\end{aligned}\quad (23)$$

Príslušná zložka neistoty bude

$$\begin{aligned}u_B^{(2)} &= \frac{\delta^{(2)}}{2\sqrt{3}} = \frac{0,05236}{2\sqrt{3}} = \\ &= 0,01511503 \text{ V} \approx 0,015 \text{ V,}\end{aligned}\quad (24)$$

čo je ale hodnota  $5\times$  väčšia, ako z predchádzajúceho výpočtu.

#### Príklad B:

Pri meraní číslicovým ampérmetrom s piatimi digitmi na rozsahu 10 A je údaj na displeji  $I = 0,0035 \text{ A}$ . Meraný prúd sa teda nachádza v intervale  $\delta I = (0,0035 \div 0,0036) \text{ A}$ . Strednú hodnotu meraného prúdu odhadneme ako  $\bar{I} = 0,00355 \text{ A}$ . Pre neistotu merania v prípade použitia modelu rovnomeného rozdelenia výskytu meranej veličiny dostávame

$$\begin{aligned}u_{BI} &= \frac{10^{-4}}{2\sqrt{3}} = 28,8675 \cdot 10^{-6} \text{ A} = \\ &= 0,000029 \text{ A}\end{aligned}\quad (25)$$

a pre model normálneho rozdelenia výskytu meranej veličiny je vysledok neistoty rovný

$$\begin{aligned}u_{BI} &= \frac{10^{-4}}{6} = 16,66667 \cdot 10^{-6} \text{ A} = \\ &= 0,000017 \text{ A.}\end{aligned}\quad (26)$$

Výsledok merania pre model rovnomeného rozdelenia potom zapíšeme v tvare

$$I = (0,003550 \pm 0,000029) \text{ A.}\quad (27)$$

#### Posuvné meradlo

V prípade posuvného meradla s najjemnejším delením stupnice 0,1 mm, keď predpokladáme

rovnomenné rozdelenie pravdepodobnosti, je interval neistoty výsledku merania podľa predchádzajúcej zásady (v časti *Číslicový merací prístroj*) rovný  $\delta = 0,2 \text{ mm}$  a podľa vzťahu (21)

$$u_B = \frac{0,1}{\sqrt{3}} = 0,057735 \text{ mm} = 0,058 \text{ mm.}\quad (28)$$

#### Jednoduché meranie teploty

Bežným liehovým teplomerom meríme teplotu kvapaliny v nádobe, pričom predpokladáme, že na teplomer nepôsobia iné, ako v danom prípade zanedbateľné vplyvy (sálanie, premenlivá teplota okolia, zmeny prúdenia vzduchu v miestnosti a pod.). Presnosť merania teplomerom je daná ako chyba odčítania teploty s veľkosťou jedného dielika stupnice, čiže  $\pm 1^\circ\text{C}$ . Výraz presnosť tu chápeme „klasicky“ prostredníctvom chyby, teda nie ako neistotu. Meranie prevádzkame opakovane v rôznych miestach nádoby tak, aby bolo možné určiť priemernú teplotu kvapaliny. Predpokladom merania je aj to, aby teplotné pole v meranom priestore bolo homogénne. Keď je táto podmienka splnená nemáme dôvod uvažovať o ďalších prídavných korekciách a môžeme použiť takýto postup. Opakoványm meraním, pri dostatočnej dobe ustálenia údaja teplomera (vylúčime prípadnú dynamickú chybu) sa získa minimálne potrebných desať meraní. Odhadom priemernej teploty  $\bar{t}$  je aritmetický priemer zo všetkých desať hodnôt  $\bar{t} = 35,4^\circ\text{C}$ . Štandardná neistota typu A je reprezentovaná smerodajnou odchýlkou súboru nameraných hodnôt od aritmetického priemera

$$u_A(t) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (t_i - \bar{t})^2} = 0,360^\circ\text{C.}\quad (29)$$

Štandardná neistota typu B má pri danom usporiadani merania jediný zdroj, ktorým je chyba odčítania s hodnotou  $\pm 1^\circ\text{C}$ . Oprávnené môžeme predpokladať rovnomenné rozdelenie pravdepodobnosti chyby teplomera, čiže

$$u_B(t) = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0,578^\circ\text{C.}\quad (30)$$

Kombinovanú štandardnú neistotu získame zlúčením oboch zložiek

$$\begin{aligned} u_C(t) &= \sqrt{u_A^2(t) + u_B^2(t)} = \\ &= \sqrt{0,360^2 + 0,578^2} = 0,681 \text{ } ^\circ\text{C}. \end{aligned} \quad (31)$$

Výsledok merania môžeme prezentovať pomocou rozštrenej neistoty s koeficientom rozšírenia  $k_r = 2$  (skutočná priemerná teplota sa nachádza v intervale neistoty s asi 95%-nou pravdepodobnos-

tou), takže zápis po zaokrúhlení na dve platné miesta bude mať tvar

$$t = (35,40 \pm 1,36) \text{ } ^\circ\text{C}. \quad (32)$$

V tabuľke 1 uvádzame orientačné hodnoty odhadu chýb niektorých meracích prístrojov a zariadení.

Tabuľka 1: Hodnoty odhadu chýb niektorých meracích prístrojov

Meracie zariadenie	Delenie stupnice	Chyba $z_{\max}$
Pásové meradlo	10 dielikov na 1 cm	1 mm
Posuvné meradlo	10 dielikov na nónius	0,1 mm
Posuvné meradlo	20 dielikov na nónius	0,05 mm
Posuvné meradlo	50 dielikov na nónius	0,02 mm
Mikrometer	50 dielikov na 0,5 mm	0,01 mm
Mechanické stopky	5 dielikov na 1 s	0,2 s
Digitálne stopky	min : sek : $\frac{\text{sek}}{100}$	0,01 s
Teplomer	5, 2 alebo 1 dielik na $1 \text{ } ^\circ\text{C}$	$(0,2 \div 1) \text{ } ^\circ\text{C}$

*Tvrdím len, že v každom štúdiu prírody je len toľko vlastnej vedy, kol'ko je v nej matematiky.*

---

IMMANUEL KANT

## 2 Numerické metódy spracovania výsledkov meraní

Úlohy súvisiace s vyhodnotením experimentálnych dát vo fyzikálnej a technickej praxi sa vyznačujú týmito základnými vlastnosťami:

- (a) rozsah a objem spracovaných dát obyčajne nie je veľký,
- (b) v dátach sa nachádzajú aj vybočujúce hodnoty merania a rôzne nehomogenity,
- (c) v dátach sa zvyčajne vyskytujú nelinearity, vzájomné väzby a pod., ktoré treba identifikovať a opísat',
- (d) parametre modelov majú obyčajne definovaný fyzikálny význam,
- (e) často narážame na istú neurčitosť' (nejasnosť', nepresnosť') pri výbere modelu na opis dát.

Pri projektovaní pokusu je experimentátor vedený snahou získať z meraní čo najviac fyzikálne zaujímavých informácií.<sup>7</sup> Preto experiment obyčajne prebieha za rôznych (kontrolovaných) podmienok. Zmenou istých veličín sledujeme ich vplyv na iné veličiny. Vo väčšine prípadov takto získame závislosť', o ktorej predpokladáme, že je spojité funkčná závislosť' jednej veličiny od druhej veličiny. Napr. teplotnú závislosť' odporu, závislosť' intenzity jadrového žiarenia od hrúbky absorbátora atď. Nameraním závislosti veličín práca experimentátora nekončí, naopak, nasleduje najdôležitejšia úloha a to *fyzikálne interpretovať výsledky meraní*. Pod pojmom interpretácie budeme rozumieť *odôvodnenie výsledkov*. V podstate ide o *určenie príčin*, ktoré spôsobujú daný výsledok. Experimentálna práca je takto z formálneho hľadiska „obrátenou“ úlohou k teoretickému postupu, ktorý z definovaných podmienok (príčin) predpokladá závery (následky) a tento fakt treba mať na zreteli pri spracovávaní merania. V konkrétnych

---

<sup>7</sup>Metóda pozorovania dáva cenné informácie o vonkajších javoch a vztáchoch (veľkosť', tvar, časová následnosť' a pod.). Poznávaciu hodnotu však stráca vtedy, keď sa pýtame na charakter vztáhov alebo na príčinu javov. Hlbšie poznanie skutočnosti umožňuje experimentálna metóda, ktoréj použitie znamená cielavedomí zásah do pôvodného stavu zámernej zmenou, ktorá je exaktne sledovaná za účelom získania nových vedeckých faktov. Experimentálna metóda identifikácie zámerne vyvoláva zmeny v skúmaných objektoch a na to používa najrôznejšie techniky. Cvičí tento rozdiel medzi pozorovateľom a experimentátorom vyjadril takto: „Pozorovateľ prírode načíva, experimentátor ju vypočítava.“ Dáta získané experimentom sa stanú odpovedou na experimentátorovu otázku len po ich logickom spracovaní, ktoré najčastejšie pozostáva z matematického vyhodnotenia a poznávania, zo zovšeobecnenia zistených faktov.

priípadoch sa najčastejšie stretneme s týmito situáciami:

- Fyzikálna interpretácia meranej závislosti nie je dobre prepracovaná, tzn., že v čase konania experimentu neexistuje teoretický model, ktorý by viac-menej úspešne predpovedal tvar funkčnej závislosti. Potom je možné získané závislosti interpretovať iba kvalitatívne, resp. v jednoduchých prípadoch vyslovit' hypotézu (napr. o lineárnej, resp. inej závislosti).
- Teoretický model predpovedá očakávanú závislosť, napr.  $y = a + bx$ . Experiment<sup>8</sup> lineárnu závislosť potvrdí. Treba nájsť „správne“ hodnoty parametrov, napr.  $a$ ,  $b$ , ktorým môžu odpovedať ďalšie dôležité informácie. Úlohami tohto druhu sa zaoberá vyrovnanáč počet. V súčasnej dobe sa široko využíva metóda najmenších štvorcov (NMŠ).<sup>9</sup> Za správne hodnoty sa považujú také hodnoty parametrov, ktoré dávajú najmenší súčet druhých mocnín odchýlok medzi nameranými a teoreticky predpovedanými hodnotami.

Pri spracovaní a interpretácii empirických dát nás v prvom rade zaujíma ich variabilita. Variabilita experimentálnych údajov má obyčajne viaceru príčin. Predovšetkým sa zaujímame o efekty v systéme merania a v systéme, ktorý sledujeme, najmä o systematické vplyvy. Cieľom je porozumieť týmto vplyvom, aby sme mohli na systém merania prípadne pôsobiť a tým nežiaduce vplyvy úplne vylúčiť. Táto zložka variability je obyčajne prekrytá inou, ktorej príčinou je nepresnosť merania a ďalšie náhodné vplyvy. K nim sa ešte pridáva aj výberová chyba, ktorá vzniká tým, že namerané údaje obvykle zastupujú väčší súbor. Údaje (experimentálne dáta) v niektorých charakteristikách nesúhlasia vždy presne s charakteristikami celého súboru (populácie), ktorých sa naše poznatky majú týkať. Snažíme sa teda identifikovať základné vzťahy variability.

Vo výskume nám úlohu štatistiky najlepšie približuje predstava o *signále* a *šume*. Predstava je taká, že dáta majú tvar

$$\text{DÁTA} = \text{SIGNÁL} + \text{ŠUM},$$

kde signál reprezentuje informáciu o sledovanom systéme. Táto konštrukcia odzrkadľuje, že signál vyjadrujúci určité „pravidelnosti“ je viac-menej prekrytý šumom. Dáta však môžu byť interpretované len keď disponujeme ich *modelom*, ktorého hlavnou časťou je nejaká rovnica. Modelom sa usilujeme vystihnúť podobu signálu, zjednodušene povedané model odzrkadľuje štruktúru dát. V štatistike teda dáta modelujeme podľa schémy

$$\text{DÁTA} = \text{MODEL(FUNKCIA)} + \text{REZIDUÁLNA HODNOTA},$$

<sup>8</sup>Experiment môžeme rozdeliť na časti, ktoré sú do istej miery samostatné, voláme ich *pokusy*.

<sup>9</sup>Metódu najmenších štvorcov, ako výpočtovú procedúru opísal Adrien-Marie Legendre r. 1805 v práci *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes*. On navrhol aj názov tejto metódy. Prvý, kto spojil metódu najmenších štvorcov s teóriou pravdepodobnosti bol Carl Friedrich Gauss r. 1809 v práci *Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium auctore*, C. F. G. 1809. Poznamenal, že túto metódu použil už roku 1795.

kde reziduálna hodnota (v niektorých prácach nevhodne označovaná ako chyba) vyjadruje rozdiel medzi modelom a meranými dátami, pričom je dôležité, aby tieto hodnoty neobsahovali žiadnu evidentnú štruktúru. Pokiaľ by reziduálne hodnoty mali nejakú štruktúru, je potrebné model upravovať až dovtedy, kým nezahrnie všetky identifikateľné štruktúry signálu. Modelom sa teda usilujeme čo najvernejšie reprezentovať reálny meraný systém.

Uvedieme hlavné črty metódy najmenších štvorcov. Majme nameranú funkčnú závislosť  $f_i = f(x_i)$  v bodoch  $i=1, 2, \dots, n$ . Teoretický model predpokladá závislosť  $y=F(x, p_1, p_2, \dots, p_k)$ , kde  $p_1, p_2, \dots, p_k$  sú parametre, ktoré sa nedajú vypočítať v rámci tohto modelu (čím menej parametrov, tým je model hodnotnejší).<sup>10</sup> Odchýlky modelovej  $F^*$  a experimentálnej funkcie  $f_i$ , vypočítané v nameraných bodoch, označíme  $r_i$  (rezíduum, reziduálna hodnota)<sup>11</sup>

$$r_i = F^*(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*) - f_i. \quad (33)$$

Vzhľadom na to, že považujeme kladné odchýlky za rovnako významné ako záporné, uvažujeme druhú mocninu  $r_i$ .<sup>12</sup> Ďalej označíme

$$\Phi = \sum_{i=1}^n r_i^2. \quad (34)$$

Úlohou je nájsť také odhady  $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_k$  parametrov  $p_1, p_2, \dots, p_k$ , pre ktoré funkcia  $\Phi$  (označovaná tiež ako *účelová alebo kriteriálna*) nadobúda minimum. Aby mala táto požiadavka zmysel, musí byť splnených niekoľko, nie práve samozrejmých predpokladov, o ktorých sa musíme pred začatím experimentu presvedčiť, pozri napr. (PETROVIČ A KOL., 1989, I., str. 74):

1. chyba nezávisle premennej  $x_i$  je zanedbateľne malá vzhľadom na chybu závisle premennej  $f_i$ . Nezávile premenná by nemala korelovať s chybou merania (poruchou) premennej  $f_i$ ,
2. chyba merania premennej  $f_i$  je náhodná veličina z normálne rozdeleného súboru, ktorý má nulovú strednú hodnotu a konštantný rozptyl v celej oblasti merania. Táto požiadavka sa nazýva *homoskedasticitou*, preto lebo skedastická funkcia je rovnaká (homogénna) pre všetky hodnoty nezávisle premennej. Inak povedané, variabilita chýb by nemala vôbec zavisieť od hodnôt nezávisle premenných. Keď táto požiadavka nie je splnená hovoríme o *heteroskedasticite*.<sup>13</sup>

<sup>10</sup>Informáciu, ktorú nemôžeme získať na základe modelu (teórie) treba nadobudnúť empiricky, čiže analýzou dát, čo je v niektorých prípadoch veľmi náročné a zložité.

<sup>11</sup>Rozdiel medzi chybou a rezíduom je hlavne ten, že chyba je „teoretická“ hodnota, lebo nepoznáme hodnoty parametrov  $p$ . Rezíduum je presne určená hodnota a môžeme ho teda vziať do úvahy pri rozhodovaní ako odhadnútú regresné koeficienty

<sup>12</sup>Všeobecne sa uvažuje nejaká párna funkcia, t. j. funkcia  $f(x)$  taká, že  $f(x)=f(-x)$ . Druhej mocnine sa dáva prednosť pred absolútou hodnotou, lebo je to hladká funkcia.

<sup>13</sup>Systematické chyby ovplyvňujú experiment v rovnakom zmysle, ale vo všeobecnosti všetky merania rôznou

Nutnou podmienkou pre minimum je potom splnenie rovnice

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p_j^*} = 2 \sum_{i=1}^n r_i \frac{\partial r_i}{\partial p_j^*} = 2 \sum_{i=1}^n r_i \frac{\partial F^*(x_i, p_1^*, \dots, p_k^*)}{\partial p_j^*} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, k. \quad (35)$$

Túto sústavu je možné explicitne riešiť v niektorých špeciálnych prípadoch. Všeobecne treba používať vybrané numerické metódy (KAUKIČ, 2006; PIRČ A BUŠA, 2002). Preberieme si tie funkčné závislosti, ktoré budeme potrebovať pri vyhodnocovaní laboratórnych záznamov.

## 2.1 Lineárna závislosť $y = a + bx$ a $y = ax$

Podľa vzťahu (35) máme dva parametre  $p_1^* = a$ ,  $p_2^* = b$

$$r_i = a + bx_i - f_i. \quad (36)$$

Z rovníc (34) a (35) dostaneme sústavu dvoch lineárnych rovníc pre neznáme  $a$  a  $b$ , ktoré môžme ľahko vyriešiť. Riešenie zapíšeme v tvare výhodnom na počítačové spracovanie. Označíme

$$\begin{aligned} s_1 &= \sum_{i=1}^n x_i, & s_2 &= \sum_{i=1}^n f_i, & s_3 &= \sum_{i=1}^n x_i^2, \\ s_4 &= \sum_{i=1}^n x_i f_i, & s_5 &= \sum_{i=1}^n f_i^2, & \nu &= ns_3 - s_1^2. \end{aligned}$$

Potom

$$\hat{a} = \frac{s_2 s_3 - s_1 s_4}{\nu}, \quad \hat{b} = \frac{ns_4 - s_1 s_2}{\nu}. \quad (37)$$

Dá sa ukázať, že pre štandardné neistoty odhadnutých parametrov  $\hat{a}$  a  $\hat{b}$  platia tieto vzťahy:

$$\sigma_a = \sigma_f^{ab} \sqrt{\frac{s_3}{\nu}}, \quad \sigma_b = \sigma_f^{ab} \sqrt{\frac{n}{\nu}}. \quad (38)$$

V experimentoch však nie vždy poznáme hodnotu štandardnej neistoty  $\sigma_f$ . Jej hodnotu môžeme získať len opakováním merania. Pri jednom experimente však máme nameraných  $n$  hodnôt  $f$  a keď sme všetky zmerali s rovnakou chybou, môžemu ju odhadnúť z rozdielov medzi nameranými bodmi a funkciou (33) vzťahom<sup>14</sup>

$$\sigma_f^{ab} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{a} + \hat{b}x_i - f_i)^2}{n - 2}}. \quad (39)$$

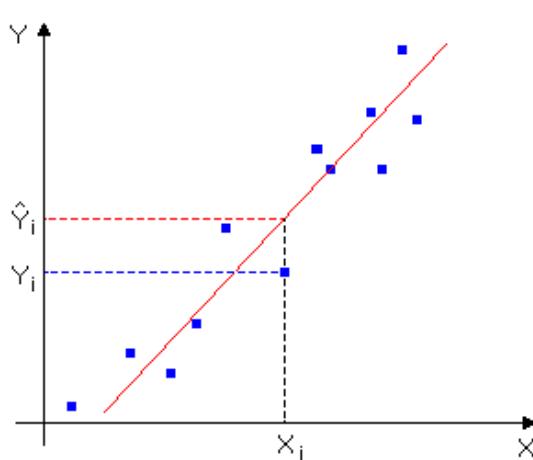
hodnotou. Majú nenulovú strednú hodnotu a prejavujú určitú mieru vzájomnej závislosti, t. j. sú korelované. Nedodržanie predpokladu náhodnosti a nezávislosti chýb i nenulovosti ich stredných hodnôt znemožňuje použitie štatistických metód vyhodnotenia.

<sup>14</sup>V menovateli vzťahu je hodnota  $n - 2$  namiesto  $n$  z toho dôvodu, aby bol odhad nevychýlený. Ak máme namerané iba dva body priamka určená metódou najmenších štvorcov prechádza presne cez ne a reziduálny súčet štvorcov je rovný nule, vzťah predstavuje výraz typu 0/0. Musíme mať teda namerané aspoň tri body, aby sme z rozptylu bodov okolo priamky odhadli neistotu merania. Odhad je *nevychýleny*, keď stredná hodnota odhadu sa rovná jej skutočnej hodnote (nezávisle od počtu meraní).

Podobne pre závislosť typu  $y = ax$  platia tieto vzťahy:

$$\hat{a} = \frac{s_4}{s_3}, \quad \sigma_f^a = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{a}x_i - f_i)^2}{n-1}}, \quad \sigma_a = \frac{\sigma_f^a}{\sqrt{s_3}}. \quad (40)$$

Odvodenie týchto vzťahov však presahuje rámec tejto práce a nie je ani jej cieľom. Čitateľ sa môže o metóde najmenších štvorcov podrobnejšie dočítať napr. v prácach autorov (KUDRAČIK, 1999; LYONS, 2001; PETROVIČ A KOL., 1989; SQUIRES, 2001; WOLBERG, 2006)



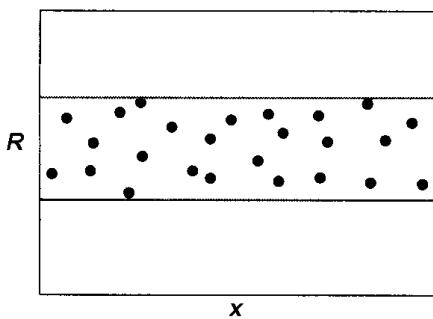
Obrázok 1: Regresná priamka. Dvojice  $(Y_i, X_i)$  sú získané meraním. Hodnota  $\hat{Y}_i$  je vypočítaná pomocou odhadnutých parametrov  $\hat{a}$  a  $\hat{b}$  regresnej priamky  $Y_i = a + bX_i$

Hodnotu nezávisle premennej vypočítanú pomocou regresnej rovnice nazývame aj *vyrovnanou* (odhadnutou) hodnotou  $\hat{Y}$ . Rozdiel medzi odhadnutou a nameranou hodnotou  $i$ -teho údaja je rezíduum  $r_i$

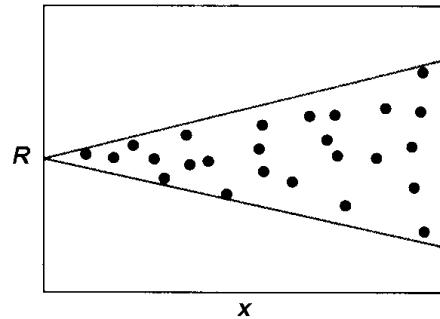
$$r_i = \hat{Y}_i - Y_i. \quad (41)$$

Ako sme to už spomenuli, rozdiel medzi chybou a rezíduom je hlavne ten, že chyba je „teoretická“ hodnota, lebo nepoznáme hodnoty koeficientov  $a$  a  $b$ . Rezíduum je teda presne určená hodnota a môžeme ho teda vziať do úvahy pri rozhodovaní ako odhadnúté regresné koeficienty. Pri hodnotení regresného modelu si okrem iných kritérií teda všímame rezíduá.

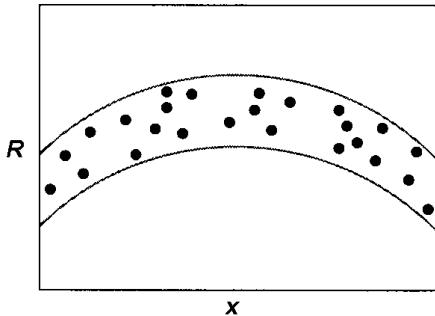
### Príklady grafov reziduálnych hodnôt



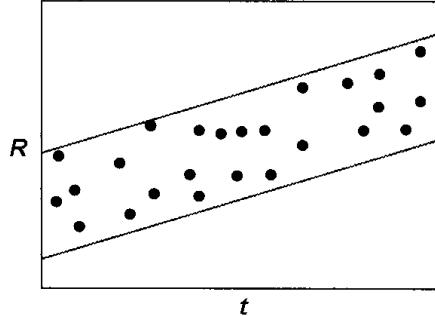
Obrázok 2: Predpoklad vhodne zvoleného modelu je splnený – homoskedasticita



Obrázok 3: Rozptyl bodov okolo regresnej krivky sa zvyšuje s rastúcim \$x\$ – heteroskedasticita

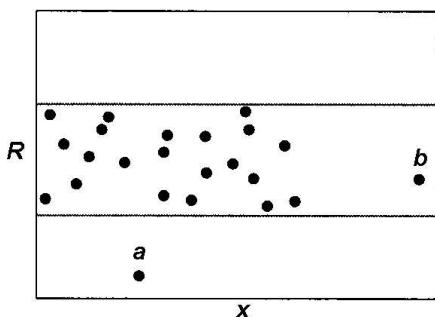


Obrázok 4: Nutnosť použiť iný model, v prípade lineárnej regresie použiť niektorú nelineárnu regresnú krivku



Obrázok 5: Priebeh nás upozorňuje, že časový faktor by mal byť súčasťou regresného modelu ( $t_i$  je časový okamih  $i$ -teho merania)

### Odláhlé pozorovania



Obrázok 6: Graf zobrazuje dva neobvyklé body a a b, ktoré môžeme klasifikovať ako odláhlé

- *Odláhlý bod* je taký, ktorý leží mimo základnú konfiguráciu bodov v grafe.
- *Extrémne odláhlé pozorovania* (extremes) sú také body  $x_i$ , ktoré predstavujú zásadne odlišnú kombináciu hodnôt  $x$ .
- *Vypočujúce odláhlé pozorovania* (outliers) sú také, vysoké alebo nízke hodnoty  $f_i$ , ktoré sa zásadne líšia od ostatných hodnôt  $f$ .
- Bod nazývame *vplyvným*, keď sa po jeho odstranení podstatne zmení poloha regresnej krivky.
- Body, ktoré sú odláhlé v smere  $x$  sú často vplyvné!

## 2.2 Polynomiálna závislosť'

Parametrami sú koeficienty v polynóme  $k$ -teho stupňa

$$F^* = a_k x^k + a_{k-1} x^{k-1} + \dots + a_1 x + a_0 = \sum_{l=0}^k a_l x^l,$$

$$r_i = \sum_{l=0}^k a_l x_i^l - f(x_i),$$

$$\frac{\partial F^*(x_i, a_0, a_1, \dots, a_k)}{\partial a_j} = \frac{\partial}{\partial a_j} \sum_{l=0}^k a_l x_i^l = x_i^j$$

a podľa rovnice (35) dostaneme sústavu rovníc

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a_j} = 2 \sum_{i=1}^n \left[ \sum_{l=0}^k a_l x_i^l - f(x_i) \right] x_i^j = 0.$$

Prehodením poradia sumácie dostávame sústavu  $k+1$  rovníc pre  $k+1$  neznámych  $a_0, \dots, a_k$

$$\sum_{l=0}^k B_{jl} a_l = y_j, \quad (42)$$

kde

$$B_{jl} = \sum_{i=1}^n x_i^{l+j}, \quad y_j = \sum_{i=1}^n f(x_i) x_i^j.$$

Sústavu (42) je možné riešiť napr. Gaussovou eliminačnou metódou. Pre  $k=1$  dostávame lineárnu závislosť, pre ktorú je riešenie zhodné s rovnicou (37).

### 2.3 Exponenciálna závislosť'

$$F^* = \alpha e^{\beta x}, \quad p_1^* = \alpha, \quad p_2^* = \beta, \quad r_i = \alpha e^{\beta x_i} - f(x_i)$$

a z rovnice (35) dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} &= 2 \sum_{i=1}^n \left[ \alpha e^{\beta x_i} - f(x_i) \right] e^{\beta x_i} = 0, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \beta} &= 2 \sum_{i=1}^n \alpha^2 x_i e^{2\beta x_i} - 2 \sum_i \alpha f(x_i) x_i e^{\beta x_i} = 0, \end{aligned}$$

čo je sústava transcendentných rovníc a na ich riešenie treba zvoliť približné numerické metódy. Aby sme sa tomu vyhli, pozmeníme úlohu a namiesto extrému účelovej funkcie  $\Phi$  budeme hľadať extrém funkcie  $\Phi^{(L)}$ , v ktorej namiesto  $F^*$  vystupuje  $\ln F^*$ . Logaritmovaním funkcie  $F^*$  dostaneme

$$\ln F^* = \ln \alpha + \beta x.$$

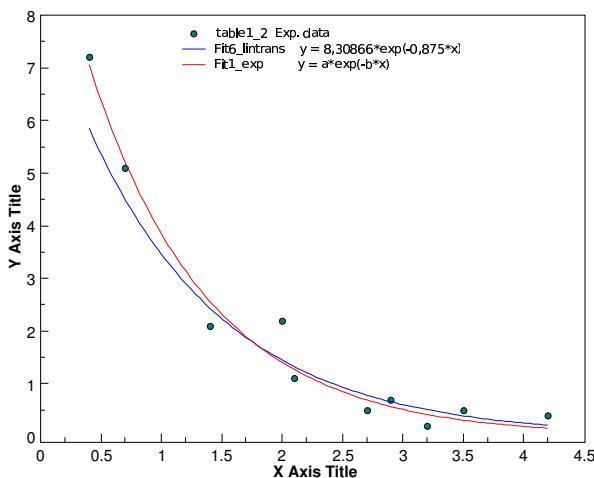
Ak označíme  $a = \ln \alpha$ ,  $b = \beta$ , môžeme použiť výsledky rovnice (37) pre lineárnu závislosť.

*Poznámka:*

*Ak použijeme metódu najmenších štvorcov na takto transformovanú nelineárnu funkciu, hľadané parametre nezodpovedajú minimálnemu súčtu štvorcov odchýlok  $\Phi = \sum_{i=1}^n [\ln f_i - \ln F^*(x_i)]^2$ , pretože transformácia do súradníc prirodzeného logaritmu ovplyvňuje odchýlky rozdielne v rôznych oblastiach pozdĺž krivky a tiež rozdielne ovplyvňuje pozitívne a negatívne chyby v tých istých bodech krivky; preto treba problém riešiť ako sústavu nelineárnych rovníc. Podľa Brunnovskej (1990, str. 50) však neexistuje všeobecné pravidlo pre nelineárne regresie, podľa ktorého by bolo možné dať prednosť jednej účelovej funkcie pred druhou. Ak rozptyl údajov nie*

je veľký, tento rozdiel nie je významný. Odhad cez transformáciu možno ešte zlepšiť zaviedením štatistickej váhy  $w_i = \left(\frac{f}{\sigma_f}\right)_i^2$  do účelovej funkcie (34), ktorá potom nadobudne tvar  $\sum_{i=1}^n w_i [\ln f_i - \ln F^*(x_i)]^2 = \min.$

### Transformácia dát a jej nedostatky



Obrázok 7: Priebehy regresných funkcií preložené experimentálne získanými bodmi fitovaním transformovanej a netransformovanej funkcie  $f(x, \alpha, \beta) = \alpha \exp(-\beta x)$

transformácia súradníc do prirodzeného logaritmu ovplyvňuje odchýlky rozdielne v rôznych oblastiach pozdĺž krivky a tiež rozdielne ovplyvní negatívne a pozitívne chyby v tých istých bodech krivky. Pre konečné nezanedbateľné chyby meranej premennej  $f_i$  uvedená transformácia teda nie je správna. Prejaví sa to napríklad vznikom heteroskedasticity. Pokiaľ mali hodnoty  $f_i$  konštantný rozptyl  $\sigma_{f_i}^2$ , hodnoty  $\ln f_i$  budú mať nekonštantný rozptyl

$$\sigma_{\ln f_i}^2 = \left( \frac{\sigma_{f_i}}{f_i} \right)^2,$$

t. j. konštantnú relatívnu chybu.

Preto nemôžeme použiť jednoduchú linearizáciu vzťahu logaritmovaním, ale problém treba riešiť ako sústavu nelineárnych rovíc. Príklad ilustruje obrázok 7. Aj keď linearizačná transformácia vedie k jednoduchému hľadaniu odhadu parametrov, výsledkom je obvykle *vyčýlený odhad*, ktorého štatistická analýza je zložitejšia. Linearizáciu však môžeme použiť na určenie štartovacích hodnôt odhadovaných parametrov pre nelineárnu aproximáciu MNŠ.

Záverom treba zdôrazniť, že funkcia  $F^*$  (tzv. modelová funkcia) musí byť fyzikálne opodstatnená. Ak sa predpokladá lineárna závislosť, nemá fyzikálne opodstatnenie vyrovnať meranú závislosť kvadratickou funkciou, i keď môžeme očakávať „lepšiu“ zhodu v zmysle

Použitím transformácie môžeme nelineárnu funkciu

$$f(x, \alpha, \beta) = \alpha \exp(-\beta x)$$

substitúciami  $y = \ln f$ ,  $\alpha' = \ln \alpha$  prepísat' do lineárneho tvaru

$$y = \alpha' - \beta x.$$

Keby sme pre túto závislosť použili metódu najmenších štvorcov, hľadané parametre by nezodpovedali minimálnemu súčtu štvorcov odchýlok

$$\Phi = \sum_{i=1}^n [\ln f_i - \ln f(x_i)]^2$$

pretože, ako sme to už spomenuli, transformácia súradníc do prirodzeného logaritmu ovplyvňuje odchýlky rozdielne v rôznych oblastiach

pozdĺž krivky a tiež rozdielne ovplyvní negatívne a pozitívne chyby v tých istých bodech krivky.

najmenších štvorcov. Aproximácia experimentálnych dát inými fyzikálne neodôvodnenými funkciami má význam iba z hľadiska vhodnejšieho uchovania informácie o experimentálnych dátach a z hľadiska niektorých numerických operácií, napr. interpolácie a extrapolácie.

## 2.4 Nelineárna approximácia MNŠ

Názvom lineárny model sa označuje model, ktorý je lineárhou kombináciou parametrov regresného modelu. To znamená, že aj lineárny regresný model môže byť z hľadiska priebehu modelovej funkcie nelineárny. Pre lineárny regresný model platí podmienka

$$A_j = \frac{\partial F(\mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial p_j} = \text{konšt}, \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad (43)$$

kde  $\mathbf{x}$  je vektor vysvetľujúcich (nezávisle) premenných a  $\mathbf{p}$  je  $k$  členný vektor neznámych regresných parametrov. Keď je parciálna derivácia  $A_j$  aspoň pre jeden parameter  $p_j$  jeho funkciou, ide o nelineárny regresný model<sup>15</sup>. Nelineárne regresné modely sa členia na:

- (1) *neseparabilné modely* (podmienka (43) neplatí pre žiadny parameter modelu),
- (2) *separabilné modely* (podmienka (43) platí aspoň pre jeden modelový parameter),
- (3) *vnútorne lineárne modely* (môžeme ich korektnou transformáciou previesť na lineárny regresný model).

Majme opäť teoretickú modelovú funkciu  $y = F(x, p_1, p_2, \dots, p_k)$ , kde  $p_j, j = 1, 2, \dots, k$  sú neznáme (hľadané) parametre. Predpokladajme, že vieme aké sú hodnoty parametrov  $p_j$  a tak pre každé  $x_i$  môžeme určiť  $F^*(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*)$  ako aj rezíduum

$$r_i = F^*(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*) - f_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (44)$$

kde  $f_i$  sú namerané hodnoty a  $F^*$  je approximačná (účelová) funkcia. Skutočné rezíduum  $r_i$  však nemôžeme určiť, lebo koeficienty  $p_j^*$  nepoznáme. Úlohou je teda určiť odhady  $\hat{p}_j$  approximačných koeficientov  $p_j^*$  a rezíduum

$$R_i = F^*(x_i, \hat{p}_1^0, \hat{p}_2^0, \dots, \hat{p}_k^0) - f_i, \quad (45)$$

kde  $\hat{p}_1^0, \hat{p}_2^0, \dots, \hat{p}_k^0$  sú začiatočné odhady koeficientov  $p_j^*$  a tieto už môžeme získať napr. grafickou metódou, použitím lineárnej MNŠ na transformovanú nelineárnu funkciu alebo odhadom zo znalosti úlohy.

Na určenie parametrov  $\hat{p}_j$  sa používa  $n$  meraní (pozorovaní) závisle premennej  $f_i$  a pri slúchajúcich hodnôt nezávisle premennej  $x_i$ . Podobne, ako pri lineárnej MNŠ cieľom je

---

<sup>15</sup>Takéto regresné modely sa často označujú aj ako *inherentne nelineárne*, čo znamená, že sú nelineárne v parametroch a lineárne alebo nelineárne v premenných.

minimalizovať súčet štvorcov odchýlok meraných hodnôt  $f_i$  od hodnôt určených pomocou modelovej funkcie v bodech  $x_i$ , čo môžeme zapísat' rovnicou

$$\Phi = \sum_{i=1}^n [F^*(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*) - f_i]^2 \rightarrow \min. \quad (46)$$

V prípade, že minimum funkcie  $\Phi$  budeme hľadať tak, že jej parciálne derivácie podľa  $p_j^*$  položíme rovné nule, dostaneme sústavu k rovníc, ktorá má aj pre jednoduchú nelineárnu funkciu  $F^*$  zložitý tvar a nemusí mať' jediné riešenie. Riešením nemusí byť globálne minimum funkcie  $\Phi$ , ale môže ísť o lokálne minimum alebo maximum, alebo inflexný bod. Aj v prípade, že sa voľbou „dobrých“ startovacích hodnôt dosiahne konvergencia, ide spravidla iba o konvergenciu k lokálnemu minimu. Hľadanie globálneho minima je však vecou bádateľa, ktorý model odhaduje (prípadne ho vytvára), ale nie použitého algoritmu.

Na odhad hľadaných parametrov  $p_j^*$  sa používajú iteračné metódy (PRESS ET AL., 1992; BRUNOVSKÁ, 1990; PETROVIČ A KOL., 1989; ZVÁRA, 1989). Týmito metódami sa vytvára postupnosť odhadov parametrov modelu, pre ktoré funkcia  $\Phi$  konverguje k minimálnej hodnote. Stručne opíšeme základ Gaussovej-Newtonovej metódy (metóda linearizácie), ktorá má oproti iným metódam nelineárneho odhadu určité prednosti, o ktorých sa zmienime na záver.

Aproximačnú funkciu  $F^*$  (deterministickú časť modelu) môžeme použiť Taylorovho lineárneho rozvoja zapísat' v tomto tvare

$$\begin{aligned} F^*(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*) &\approx F^*(x_i, \hat{p}_1^0, \hat{p}_2^0, \dots, \hat{p}_k^0) + \frac{\partial F^*}{\partial p_1^*}(p_1^* - \hat{p}_1^0) + \\ &+ \frac{\partial F^*}{\partial p_2^*}(p_2^* - \hat{p}_2^0) + \dots + \frac{\partial F^*}{\partial p_k^*}(p_k^* - \hat{p}_k^0). \end{aligned} \quad (47)$$

Ked' vypočítame uvedený výraz pre hodnoty v každom  $x_i$  a odpočítame  $f_i$  od oboch strán uvedenej rovnice, získame vzťah medzi  $r_i$  a  $R_i$ . Označme

$$\frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} = \left( \frac{\partial F^*}{\partial p_k^*} \right)_{x=x_i, p_k^*=\hat{p}_k^0},$$

potom môžeme získaný výsledok (47) zapísat' v tvare

$$\begin{aligned} \underbrace{F^*(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*) - f_i}_{r_i} &\approx \underbrace{F^*(x_i, \hat{p}_1^0, \hat{p}_2^0, \dots, \hat{p}_k^0) - f_i}_{R_i} + \frac{\partial F^*}{\partial p_1^*}(p_1^* - \hat{p}_1^0) + \\ &+ \frac{\partial F^*}{\partial p_2^*}(p_2^* - \hat{p}_2^0) + \dots + \frac{\partial F^*}{\partial p_k^*}(p_k^* - \hat{p}_k^0), \end{aligned} \quad (48)$$

ďalej označme

$$Q = \sum_{i=1}^n r_i^2 = \sum_{i=1}^n \left[ R_i + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \Delta p_1 + \dots + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \Delta p_k \right]^2.$$

Pre odhad koeficientov  $p_j^*$  metódou najmenších štvorcov platí  $Q = \min$ . Vypočítame teda derivácie pre  $Q(\Delta p_1, \dots, \Delta p_k)$

$$\frac{\partial Q}{\partial \Delta p_j} = 2 \sum_{i=1}^n \left[ R_i + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \Delta p_1 + \dots + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \Delta p_k \right] \frac{\partial D}{\partial \Delta p_j} = 0, \quad (49)$$

kde  $D = \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \Delta p_1 + \dots + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \Delta p_k$  je úplný diferenciál funkcie  $F^*$ .

Dosadením  $\frac{\partial D}{\partial p_j^*} = \frac{\partial F_i^*}{\partial p_j^*}$  do (49) a násobením každého člena v zátvorke uvedeným členom získame rovnicu (49) v tvare

$$\frac{\partial Q}{\partial \Delta p_j^*} = 2 \sum_{i=1}^n \left[ \frac{\partial F_i^*}{\partial p_j^*} R_i + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_j^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \Delta p_1 + \dots + \frac{\partial F_i^*}{\partial p_j^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \Delta p_k \right], \quad j = 1, 2, \dots, k$$

a úpravou do maticového tvaru dostaneme

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \right)^2 & \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_2^*} & \dots & \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i^*}{\partial p_2^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} & \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial F_i^*}{\partial p_2^*} \right)^2 & \dots & \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i^*}{\partial p_2^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} & \sum_{i=1}^n \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \frac{\partial F_i^*}{\partial p_2^*} & \dots & \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} \right)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta p_1 \\ \Delta p_2 \\ \vdots \\ \Delta p_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum \frac{\partial F_i^*}{\partial p_1^*} R_i \\ -\sum \frac{\partial F_i^*}{\partial p_2^*} R_i \\ \vdots \\ -\sum \frac{\partial F_i^*}{\partial p_k^*} R_i \end{bmatrix}.$$

Riešením tejto sústavy dostaneme pre vhodne zvolené začiatočné hodnoty  $\hat{p}_1^0, \hat{p}_2^0, \dots, \hat{p}_k^0$  hodnoty  $\Delta p_j$ . Riešenie opakujeme pre nové začiatočné hodnoty  $\hat{p}_1^1 = \hat{p}_1^0 + \Delta p_1, \hat{p}_2^1 = \hat{p}_2^0 + \Delta p_2, \dots, \hat{p}_k^1 = \hat{p}_k^0 + \Delta p_k$  dovtedy, dokedy nezískame dostatočne presné  $|\Delta p_j| \leq \varepsilon$ , kde  $\varepsilon$  je zvolená presnosť.

Vyhodou Gaussovej-Newtonovej metódy je jej výpočtová jednoduchosť a efektívnosť. V iteračnom procese ide o postupnosť lineárnych odhadov s čím súvisí aj možnosť využiť štatistické testy aplikované na lineárne modely. Keďže sa pri každej iterácii vykonáva lineárny odhad, môžeme použiť štandardné štatistiky na overenie linearizovaného modelu ( $F$ -test,  $t$ -test, index determinácie,  $\chi^2$  test atď.).

## Poznámky k nelineárnej regresii

- Pri lineárnej regresii existuje jediné minimum pre váhovanú sumu štvorcov odchylok, avšak pri nelineárnej regresii spravidla existuje *niekoľko lokálnych miním* pre rôzne  $\hat{p}_j$ . Do ktorého minima metóda konverguje určuje voľba začiatočných hodnôt  $\hat{p}_j^0$ . Navyše *hlavné, globálne minimum* nemusí znamenať „fyzikálne správne“ riešenie.
- V prípade, keď modelová funkcia obsahuje *veľa parametrov*, existuje spravidla aj *veľa lokálnych miním* v sume štvorcov odchylok. V takomto prípade metóda zle konverguje alebo získané hodnoty parametrov „citlivu“ závisia od voľby začiatočných hodnôt.

Preto je použiteľný počet parametrov obmedzený a závisí hlavne od neistôt v nameraných údajoch. Nepresným meraním (body sú veľmi „rozhadzané“) nie je možné preložiť krivku.

- Tak, ako pri všetkých numerických výpočtoch s väčším počtom údajov, aj pri regresii zohráva dôležitú úlohu numerická presnosť počítača. Preto je potrebné najmä pri rozsiahlejších súboroch údajov modelovú funkciu, parametre a namerané dáta normovať tak, aby sa príliš nelíšili od rádu  $10^0$ . Príklad normovania dát v prostredí programu MATLAB:  
`sdata=(xdata-mean(xdata))./std(xdata)`

## 2.5 $\chi^2$ test kvality fitovania

Pri opise metódy najmenších štvorcov sme mlčky obišli otázku vplyvu chýb merania na charakter a parametre (koeficienty) určovanej analytickej závislosti. Krátko sa zmienime o tom, akú novú informáciu môžeme získať, keď vezmeme do úvahy štandardné (stredné kvadratické) chyby experimentálnych dát. Predpokladajme, že máme k dispozícii  $n$  dvojic meraných hodnôt  $(x_i, f_i)$ , pričom chyba veličiny  $x_i$  je zanedbateľne malá a chyba merania veličiny  $f_i$  je známa, rovná sa  $\sigma_{f_i}$ .

Optimálny postup pre dátá s normálou distribúciou šumu je taký, ktorý hľadá minimum kriteriálnej (účelovej) funkcie metódy najmenších štvorcov, t. j. váhovanej sumy štvorcov reziduí alebo aspoň prostej reziduálnej sumy

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left( \frac{r_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left( \frac{F^*(x_i, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_k) - f_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2, \quad (50)$$

kde  $\sigma_{f_i}$  je chyba merania veličiny  $f$  v bode  $i$ . Tento výraz sa volá funkcia  $\chi$  kvadrát (chí kvadrát,  $\chi^2$ ) a metóda najmenších štvorcov, v ktorej sa aproximácia dát vykonáva so započítaním chýb meraní sa volá metóda  $\chi$  kvadrát. Poznamenajme, že  $\chi^2$  je opäť funkcia diskrétnej premennej a príspevok jednotlivých členov (rozdielov teoretických a meraných dát) je tým významnejší, čím presnejšie (s menšou hodnotou  $\sigma_{f_i}$ ) je zmeraná hodnota  $f_i$ . Je teda zrejmé, že keď nepoznáme chybu  $\sigma_{f_i}$ , nemôžeme vyslovíť žiadny záver ohľadne kvality fitovania.

Vo všetkých prípadoch  $\chi^2$  slúži, ako indikátor zhody medzi experimentálnymi a očakávanými hodnotami nejakej premennej. Pri dobrej zhode bude  $\chi^2$  stupňa  $n$ , pri zlej zhode bude omnoho väčšie ako  $n$ . Kritérium môžeme použiť len v tom prípade, keď poznáme očakávané hodnoty a štandardnú chybu. Pozrime sa na túto úlohu trochu podrobnejšie.

Pre jednoduchosť budeme predpokladať, že všetky merania sú zaťažené rovnakými štandardnými chybami  $\sigma_{f_i}$ . Potom  $\sigma_{f_i} = \sigma_f$  (pozri vzťahy 39 a 40) a v menovateľoch sumy výrazu (50) bude vystupovať pre všetky merania rovnaké  $\sigma_f$ . Po derivovaní vzťahu (50) za účelom hľadania koeficientov polynómu dostaneme tú istú sústavu rovníc, ako v metóde najmenších štvorcov. Keďže do sústavy rovníc vstupujú tie isté experimentálne dátá, potom prirodzene získame aj rovnaké parametre (koeficienty). Je teda na mieste otázka, akú novú

informáciu nám dá použitie známych hodnôt  $\sigma_f$ , ktoré nie sú obsiahnuté vo vypočítaných parametroch. Vzťah (50) má „väčší“ fyzikálny význam, ako vzťah (34),  $\chi^2$  funkcia je bezrozmerná veličina, ktorá sa, ako vidíme, rovná sume štvorcov odchýlok experimentálnych bodov od teoretickej (optimálnej) krivky v násobkoch štandardnej chyby  $\sigma_{f_i}$ .

Podmienka „fitovateľnosti“ dát je splnená, keď je počet  $k$  hľadaných parametrov rovný alebo menší ako počet nameraných bodov  $n$ . Predpokladáme však, že v mnohých prípadoch je splnený taký scenár experimentu, v ktorom  $n \gg k$ . Zdravý rozum nám hovorí, že keď má byť fitovanie dobré, rozdiely  $r_i$  by mali splňať rovnicu

$$r_i = |y_i - f(x_i)| \approx \sigma_{f_i}. \quad (51)$$

Je to len „hrubá“ indikácia, ale vždy je lepšia, ako letmý prelet očami „pozdĺž krivky“.<sup>16</sup> Keď naše kritérium (51) dosadíme do rovnice (50) dostaneme

$$\chi^2 \approx n. \quad (52)$$

Čím viac parametrov bude mať modelová funkcia použitá na fitovanie, tým tesnejšie bude fitovaná krivka sledovať namerané dátu. Fitovanie budeme teda pokladat za dobré, keď  $k = n$ . Tento predpoklad nás vedie k tomu, aby sme aj s prihliadnutím na požiadavku vyslovenú v úvode tejto časti, že modelová funkcia  $F^*(x_i, p_k^*)$  je tým hodnotnejšia, čím má menej parametrov, prijali praktické pravidlo pre *dobrý výsledok fitovania* v tvare

$$\chi^2 \approx n - k, \quad (53)$$

ktoré bude platiť pre jednu sériu meraní. Keby sme mohli zopakovat naše merania nekoľko ráz a po každej sérii vypočítať  $\chi^2$ , potom by sa jej stredná hodnota rovnala  $n - k$ .

Najčastejšie môžu nastat dva prípady:

- (a) keď bude  $\chi^2 \gg n - k$  nemôžeme vybranú modelovú funkciu  $F^*(x_i, p_k^*)$  použiť na fitovanie nakoľko  $\sigma_{f_i}$  sú pre ňu „príliš malé“,
- (b) keď  $\chi^2 \ll n - k$  fitovanie pokladáme za *veľmi dobré*, môžeme sa domnievať, že  $\sigma_{f_i}$  sú pre danú modelovú funkciu „dostatočne veľké“.

Vzťah (53) môžeme previesť na vhodnejší tvar, keď zavedieme *redukovanú hodnotu  $\chi^2$*  (alebo  $\chi^2$  na stupeň voľnosti), pre ktorú platí

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n - k}. \quad (54)$$

Keďže podľa (53) očakávame hodnotu  $n - k$ , má byť splnená rovnosť

$$\tilde{\chi}^2 = 1. \quad (55)$$

---

<sup>16</sup>Garcia (2000) volá tento prístup *eye-balling* a Press (1992) *chi-by-eye*.

Naše predchádzajúce kritériá (a) a (b) teda môžeme vyslovíť v takomto znení: keď získame pre  $\tilde{\chi}^2$  hodnotu rovnú rádovo jednotke alebo menej ako jedna, potom nemáme dôvod pochybovať o našom modeli; ale keď je získaný výsledok oveľa väčší ako jedna, potom je nepravdepodobné, že náš model je správny.

Na rozdiel od predchádzajúceho prístupu môžeme použiť  $\chi^2$  štatistiku s prihliadnutím na štatistické vlastnosti dát, ktoré budeme approximovať danou krivkou.<sup>17</sup> V krátkosti uvedieme základné myšlienky tohto prístupu.

Ako sme to už spomenuli v úvode tejto časti, predpokladáme, že chyba meranej premennej  $f$  je náhodná veličina z normálneho rozdelenia súboru. Za tohto predpokladu sú aj jednotlivé  $r_i$  nezávislé s normálnym rozdelením, s nulovou strednou hodnotou a disperziou  $r_i^2$ . Potom sa suma štvorcov zapísaná v tvare (50) riadi distribučným zákonom známym pod menom  $\chi^2$  rozdelenie (rozdelenie chí na druhú) s  $m$  stupňom voľnosti. Pod stupňom voľnosti rozumieme počet nameraných bodov  $n$  znížený o počet parametrov  $k$  (voľných koeficientov):  $m = n - k$ .<sup>18</sup>

Integrál typu

$$P(\chi^2 \geq \chi_0^2) = \int_{\chi_0^2}^{\infty} f_m(x) dx, \quad (56)$$

alebo jednoducho  $P(\chi^2)$ , kde  $f_m(\chi^2 = x)$  je hustota rozdelenia pravdepodobnosti pre rôzne stupne voľnosti, dovoľuje vypočítať kritické  $\chi_0^2$  pre úroveň  $P(\chi^2 \geq \chi_0^2)$ . Tieto hodnoty sú často vo forme tabuľiek súčasťou príručiek a učebník Štatistiky, alebo sú dostupné ako súčasť Štatistického softvéru, napr. program R. Na objasnenie uvedieme príklad, ako použiť tabuľku  $P(\chi^2)$ . Predpokladáme, že máme súbor 20 meraní. Experimentálne dátá zamýšľame interpretovať lineárnu závislosťou  $y = a + bx$ , pre ktorú vyčíslime parametre  $a$  a  $b$ . V tomto prípade sa počet stupňov voľnosti rovná  $m = 20 - 2 = 18$ . Ďalej predpokladajme, že výpočtom podľa vzťahu (50) sme získali hodnotu  $\chi^2 = 9$ . Z tabuľky 2 pre  $P(\chi^2)$  zistíme, že pri  $m = 18$  stupňoch voľnosti je pravdepodobnosť získat'  $\chi^2 \geq 9$  rovná  $\sim 95\%$ . Odchýlka nameraných údajov od očakávanej lineárnej závislosti je v tomto prípade nepodstatná. Keby sme získali výsledok  $\chi^2 = 28$ , z tabuľky zistíme, že takúto a väčšiu hodnotu môžeme očakávať v asi 5% prípadov. Model lineárnej závislosti nemusíme zamietnuť, ale môžeme o ňom pochybovať. Prirodzene za takýchto okolností zopakujeme experiment, aby sme získali nové dátá alebo použijeme inú modelovú funkciu. V prípade, keď je  $\chi^2 \geq 42$  (pravdepodobnosť  $\approx 0,1\%$ ) potvrdí sa, že preverovaná hypotéza je isto nesprávna (dané body nemôžeme approximovať

<sup>17</sup> Ako príklad nám môže poslúžiť meranie elektrického výkonu na rezistore. Prúd  $I$  prechadzajúci rezistorom sa riadi normálnym rozdelením, ale výkon  $P$  sa nemôže riadiť normálnym rozdelením pretože normálne rozdelenie pripúšťa výskyt akejkoľvek reálnej (teda aj zápornej) hodnoty náhodnej premennej. Výkon elektrického prúdu musí mať také rozdelenie, v ktorom platí  $f(x) = 0$  pre  $x < 0$ . V tomto prípade ide o rozdelenie odvozené z rozdelenia  $\chi^2$ . Takéto rozdelenie má veličinu, ktorá je súčtom  $n$  kvadrátov nezávislých premenných so štandardným normálnym rozdelením.

<sup>18</sup> Keď sa chyby meraných hodnôt  $f_i$  neradiu normálnym rozdelením, úloha sa stáva ešte zložitejšou. Na jej riešenie sa používa metóda, ktorá sa volá *Metóda najväčšej hodnovernosti*.

lineárnej závislostou). Na podrobnejšie oboznámenie sa s danou problematikou odporúčame čitateľovi špecializovanú literatúru, napr. (PRESS ET AL., 1992; RIEČANOVÁ A KOL., 1987; ZVÁRA A ŠTĚPÁN, 2001).

Tabuľka 2: Niektoré kritické hodnoty rozdelenia  $\chi^2$ . Uvedené sú hodnoty pravdepodobnosti  $P$  pre  $\chi^2 \geq \chi_P^2$  pri  $m$  stupňoch voľnosti

$m$	$P$					
	0,99	0,98	0,95	0,9	0,05	0,001
4	0,3	0,4	0,7	1,1	9,5	18,5
5	0,6	0,8	1,1	1,6	11,1	20,5
6	0,9	1,1	1,6	2,2	12,6	22,5
7	1,2	1,6	2,2	2,8	14,1	24,3
8	1,6	2,0	2,7	3,5	15,5	26,1
9	2,1	2,5	3,3	4,2	16,9	27,9
10	2,6	3,1	3,9	4,9	18,3	29,6
11	3,1	3,6	4,6	5,6	19,7	31,3
12	3,6	4,2	5,2	6,3	21,0	32,9
13	4,1	4,8	5,9	7,0	22,4	34,5
14	4,7	5,4	6,6	7,8	23,7	36,1
15	5,2	6,0	7,3	8,5	25,0	37,7
16	5,8	6,6	8,0	9,3	26,3	39,2
17	6,4	7,3	8,7	10,1	27,6	40,8
18	7,0	7,9	9,4	10,9	28,9	42,3
19	7,6	8,6	10,1	11,6	30,1	43,8
20	8,3	9,2	10,8	12,4	31,4	45,3
21	8,9	9,9	11,6	13,2	32,7	46,8
22	9,5	10,6	12,3	14,0	33,9	48,3
23	10,2	11,3	13,1	14,8	35,2	49,7
24	10,9	12,0	13,8	15,7	36,4	51,2

## 2.6 Výber modelu

Pri konštrukcii regresného modelu je obvykle našou snahou minimalizovať variabilitu výsledku. Zníženie *variability* (numericky vyjadrenej najčastejšie pomocou smerodajnej odchýlky, intervalu spoľahlivosti alebo neistoty) znamená zvýšenie presnosti. Môže pritom íst

o presnosť napr. regresných koeficientov (parametrov), predikciu, limity detekcie a pod. Najčastejšie používané veličiny (štatistiky) na vyjadrenie variability sú:

- reziduálny rozptyl,
- smerodajná odchýlka parametrov,
- interval spoľahlivosti.

Vo všetkých veličinách má rozhodujúci vplyv počet stupňov voľnosti  $n - k$ . Rastúci počet parametrov regresného modelu prispieva k zníženiu variability, teda k zvýšeniu „presnosti“ regresného modelu. Keď táto skutočnosť nie je prevážená výrazne lepším (tesnejším) preložením dát, nemá pridávanie ďalších parametrov (napr. zvyšovaním stupňa polynómu) žiadny zmysel. Preto *nemôžeme* na hodnotenie regresie použiť korelačný koeficient alebo koeficient viacnásobnej korelácie, ktorý počet parametrov vôbec neberie do úvahy. Na výber optimálneho modelu môžeme napr. použiť niektoré z týchto kritérií:

- *F – kritérium (max)*

$$F_r = \frac{(SST - SSE)(n - k)}{SSE(k - 1)}, \quad (57)$$

pri ktorom má štatistika  $F_r$  Fisherove rozdelenie s  $[(k - 1), (n - k)]$  stupňami voľnosti, kde  $SST = \sum(f_i - \bar{f})^2$ ,  $SSE = \sum(f_i - \hat{f})^2$  a  $k$  je počet parametrov.

- *Akaikeho informačné kritérium – AIC (min)*

$$AIC = n \ln \left( \frac{SSE}{n} \right) + 2k. \quad (58)$$

- *Index korelácie  $I_k$*  – charakterizuje silu (kvalitu) lineárnej závislosti, nadobúda hodnoty z intervalu  $[0, 1]$ .

$$I_k = \sqrt{\frac{SST - SSE}{SST}}. \quad (59)$$

Ako sme to už spomenuli, nevýhodou je, že zvyšovaním počtu regresných koeficientov v modely (závislosti), môžeme dotlačiť jeho hodnotu až k číslu 1.

- *Index determinácie  $I_d$*  – tento index penalizuje veľký počet koeficientov

$$I_d = \sqrt{I_k - \frac{(1 - I_k^2)(k - 1)}{n - k}}. \quad (60)$$

Teda:

1. Z dvoch závisostí s *rovnakým* počtom regresných koeficientov je vhodnejšia tá, pre ktorú je index korelácie  $I_k$  väčší.
2. Z dvoch závisostí s *nerovnakým* počtom regresných koeficientov je vhodnejšia tá, pre ktorú je index determinácie  $I_d$  väčší.

## 2.7 Interpolácia a extrapolácia

### Interpolácia

Meraním určíme konečný počet hodnôt  $x_1, x_2, \dots, x_n$  a im prislúchajúce  $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)$ . Predpokladajme, že  $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ . Často nás zaujíma hodnota veličiny  $f$  pre argument  $x$ , ktorý sa nezhoduje so žiadoucou z nameraných hodnôt a leží v intervale  $x_1 < x < x_n$ . Hodnotu funkcie  $f$  pre argument  $x$  odhadneme interpoláciou. Z formálneho hľadiska experiment poskytuje informácie iba o hodnotách funkcie v konečnom počte bodov a o hodnote funkcie v bode  $x$ , kde sme meranie nevykonali, nemôžeme tvrdiť nič, ak nemáme nejaké ďalšie informácie. Tým, že cez body  $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$  „preložíme krivku“, nahradíme konečné postupnosti (spojitou) funkciou. Cez namerané body môže prechádzať veľmi veľa rôznych funkcií. Ak z teórie poznáme funkciu, ktorá má prechádzať cez namerané body, postupujeme podľa predchádzajúcej kapitoly. V opačnom prípade môžeme funkčnú závislosť medzi meranými bodmi nahradíť jednoduchými funkiami, najčastejšie lineárnu, kvadratickou, zriedkavejšie polynómom vyššieho stupňa. Hovoríme o lineárnej, kvadratickej alebo polynomálnej interpolácii. Pri lineárnej interpolácii dostaneme „lomenú“ spojitú funkciu, ktorá však nemá derivácie práve v meraných bodech. Pri kvadratickej interpolácii môžeme dostať „hladšiu“ krivku, pri kubickej interpolácii a po častiach kubickej interpolácii (napr. kubické splajny) môžeme dosiahnuť spojitosť derivácie atď. Je zrejmé, že čím hustejšie budú body namerané, tým menej sa budú lísiť hodnoty získané interpoláciou rôznymi funkiami.

Naznačíme postup pri interpolácii polynómom. Predpokladajme, že cez  $k + 1$  nameraných bodov prechádza polynóm  $k$ -teho stupňa, t. j., že platí

$$f(x_i) = \sum_{j=0}^k a_j x_i^j, \quad i = 1, 2, \dots, k+1. \quad (61)$$

Dosadením známych hodnôt  $x_i$  a  $f_i$  dostávame  $k + 1$  lineárnych rovníc pre  $k + 1$  neznámych  $a_0, a_1, \dots, a_k$ . Vyriešením sústavy týchto rovníc dostaneme koeficienty  $a_0, \dots, a_k$  a môžeme vypočítať hodnotu funkcie  $f(x)$  v ľubovoľnom bode, ktorý leží mimo bodo  $x_1, \dots, x_{k+1}$

$$f(x) = \sum_{j=0}^k a_j x^j, \quad x \in (x_1, x_k),$$

pre  $k = 1$  dostávame lineárnu interpoláciu, pre  $k = 2$  kvadratickú, atď. Samozrejme, na výpočet koeficientov  $a_0, a_1, \dots, a_k$  vyberieme tie experimentálne body, ktoré ležia v najbližšom okolí bodu  $x$ . Počet meraní  $n$  je obvykle väčší ako  $k$ .

Na prvý pohľad by sa zdalo, že zvyšovaním stupňa polynómu  $k$  sa zvyšuje aj presnosť interpolácie. V skutočnosti merané veličiny  $x_i$  a  $f(x_i)$  sú zaťažené neistotami, ktoré sa zvýrazňujú pri výpočte vysokých mocnín hodnôt  $x_i$  v (61). Z tohto dôvodu sa vo väčšine prípadov uspokojíme s interpoláciou nízkeho rádu.

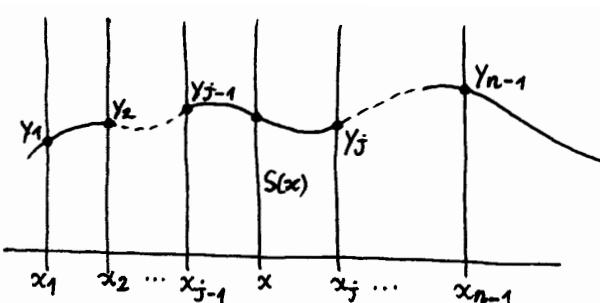
Poznámka:

Ked' hodnoty  $f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots, f(x_n)$  boli získané experimentálne a sú začlenené určitými nezanedbateľnými chybami, nie je spravidla vhodné metódu interpolácie aplikovať. Je dokázané, že za predpokladu normálneho rozdelenia chýb meraní s nulovou strednou hodnotou v každom uzlovom bode najhodnovernejšie výsledky dosiahneme metódou najmenších štvorcov. Uvedené predpoklady sú zvyčajne pri fyzikálnych alebo technických experimentoch splnené, preto je metóda najmenších štvorcov najpoužívanejšou metódou aproximácie (vyhľadenia šumu) experimentálne získaných dát.

### Interpolácia nameraných dát splajn-funkciou<sup>19</sup>

Interpolácia patrí k bežným operáciám pri spracovaní nameraných údajov, dovolí určiť približnú hodnotu medzi dvoma susednými bodmi nameranej závislosti. Neprirozený priebeh má takáto interpolačná funkcia v okolí nameraných bodov, v ktorých vytvára zdánlivé lokálne extrémy. Na ručné vykreslenie závislostí sa z tohto dôvodu používa krivítka alebo prekladanie bodov naväzujúcimi kružnicami.

Metóda bola nazvaná podľa pružného pravítka – *splajn* – používaného na vytvorenie zaoblených (hladkých) tvarov lodí. Interpolácia splajn-funkciou, najčastejšie polynomom tretieho stupňa, má rad výhod v porovnaní s klasickou interpoláciou polynomom prechádzajúcim všetkými nameranými bodmi (najmä nižšia krivost vzhľadom na menší rát polynómu, pri použití kubického splajnu je výsledok blízky praktickej interpolácie pomocou pružného pravítka).



Namerané hodnoty

$$f_1, f_2, \dots, f_n \quad (62)$$

pre hodnoty nezávislej premennej

$$x_1, x_2, \dots, x_n \quad (63)$$

chceme preložiť (opísat) optimálnou interpolačnou krivkou na každom úseku  $\langle x_j, x_{j-1} \rangle$  kubickej paraboly.

Predpokladajme, že  $x_1 < x_2 < \dots < x_{j-1} < x_j < \dots < x_n$  a označme  $h_j = x_j - x_{j-1}$ , pričom hľadáme súbor polynómov tretieho stupňa, ktoré v intervale  $\langle x_{j-1}, x_j \rangle$  interpolujú funkčné hodnoty a v hraničných bodoch na seba naväzujú tak, že vytvárajú hladkú krivku (čiaru). Nájdený súbor polynómov nazývame *splajn*, pri použití polynómov tretieho stupňa *kubický*

<sup>19</sup>Problém s hodnotami vypočítanými na základe lineárnej interpolácie je, že prvá derivácia lineárne interpolovanej funkcie nie je spojité. Pri riešení úlohy, kde záleží na tom, aby sme z interpolovaných hodnôt dostali funkciu so spojitou prvou deriváciou, musíme použiť, napr. splajnové metódy vyhľadzovania.

*splajn*, ktorý má pre praktické vyhodnocovanie meraní najväčší význam. Podmienkou hladkosti krivky v hraničných bodoch je spojitosť, vrátane spojostí derivácií až do  $N - 1$  rádu ( $N$  je stupeň polynómu), čiže pre kubický splajn je potrebné zaistiť spojitosť aj pre druhú deriváciu. V intervale  $\langle x_{j-1}, x_j \rangle$  môžeme interpolačný polynom zapísť v tvare

$$S_j(x) = a_0 + a_1(x - x_{j-1}) + a_2(x - x_{j-1})^2 + a_3(x - x_{j-1})^3 \quad (64)$$

pre  $j = 2, 3, \dots, n$ . Koeficienty takého polynómu v intervale  $(x_1, x_n)$

$$a_0, a_1, \dots, a_n \quad (65)$$

sa dajú jednoznačne určiť zo sústavy lineárnych algebraických rovníc

$$a_0 x_j^N + a_1 x_j^{N-1} + \dots + a_{n-1} x_j + a_n = f_j \quad (66)$$

pre  $j = 0, 1, 2, \dots, n$ . Determinant sústavy je Wanderingov determinant, o ktorom je známe, že je nenulový pre navzájom rôzne uzly (63). Sústava (66) má teda práve jedno riešenie (65).

## Extrapolácia

Ak z meraného priebehu funkcie odhadujeme hodnotu  $f(x)$  v bode  $x$ , ktorý leží mimo intervalu nameraných hodnôt, hovoríme o *extrapolácii*. Pri extrapolácii môžeme použiť numerické metódy ako pri interpolácii. Treba však mať vždy na zreteli, že pri extrapolácii musíme byť omnoho opatrnejší ako pri interpolácii, hlavne ak  $x$  je ďaleko od meraného intervalu. Pokiaľ je možné, snažíme sa nahradit extrapoláciu interpoláciou, t. j. meraním obsiahnuť čo najväčší interval hodnôt  $x_i$ . Mimo meraného intervalu môžu mať podstatný vplyv nové fyzikálne javy, ktoré sa neprejavia v meranom intervale. Napr. pri meraní teplotnej závislosti elektrického odporu vodiča v intervale teplôt od  $10^\circ\text{C}$  do  $40^\circ\text{C}$  nameráme lineárnu závislosť a extrapolujeme ju do  $100^\circ\text{C}$ , pričom dodatočným meraním zistíme, že vodič sa roztopil pri teplote  $80^\circ\text{C}$ , takže extrapolácia nad  $80^\circ\text{C}$  je neprípustná.

Numerické metódy uvedené v tejto časti sú základnými metódami, ktoré si každý experimentátor, skôr či neskôr bude nútene osvojiť a začať používať. S rozvojom výpočtovej techniky, programovacích metód a aplikačného softvéru sa rýchlo rozšírili do mnohých oblastí prírodných vied a techniky. V nasledujúcich dvoch kapitolách čitateľovi predstavíme dva programy, ktoré umožňujú ľahké a flexibilné používanie uvedených metód na numerické spracovanie experimentálnych dát a výsledky uložiť do kvalitného grafického výstupu v elektronickej alebo tlačenej podobe.

### 3 Program QtiPlot

QtiPlot je výkonný programový balík, ktorý poskytuje ako jednoduché tak aj veľmi zložité nástroje na analýzu dát a na kreslenie grafov. V tejto učebnej pomôcke sa budeme venovať opisu verzie QtiPlot 0.8.5 v prostredí OS GNU/Linux distribúcie UBUNTU 6.06. Domovská internetová stránka programu je na URL adrese <http://soft.proindependent.com/qtiplot.html> odkiaľ sa dá program stiahnuť. Na prácu v QtiPlote existujú dva druhy okien (pracovných prostredí):

- tabuľkové
- a grafické.

*Tabuľkové* okno zobrazuje dátá potrebné na tvorbu grafu. V *grafickom* okne je vyobrazený graf. Podľa toho, ktoré z okien je aktívne, tabuľkové alebo grafické, mení sa obsah hlavnej ponuky. V tejto kapitole opíšeme obe hlavné ponuky a bude uvedený jednoduchý príklad na tvorbu grafu. Vzhľadom na rozsah možností, ktoré poskytuje QtiPlot, budeme sa venovať len tým funkciám a ponukám QtiPlotu, ktoré sú potrebné na numerické spracovanie experimentálnych dát a ich grafickú prezentáciu.

#### 3.1 Ovládacie možnosti programu QtiPlot

Otvorenie QtiPlotu sa dá uskutočniť troma spôsobmi:

- kliknutie na ikonu QtiPlot na pracovnej ploche,
- Menu → Škola hrou → Mathematics → kliknutie na QtiPlot,
- z príkazového riadka X terminálu príkazom `qtiplot`.

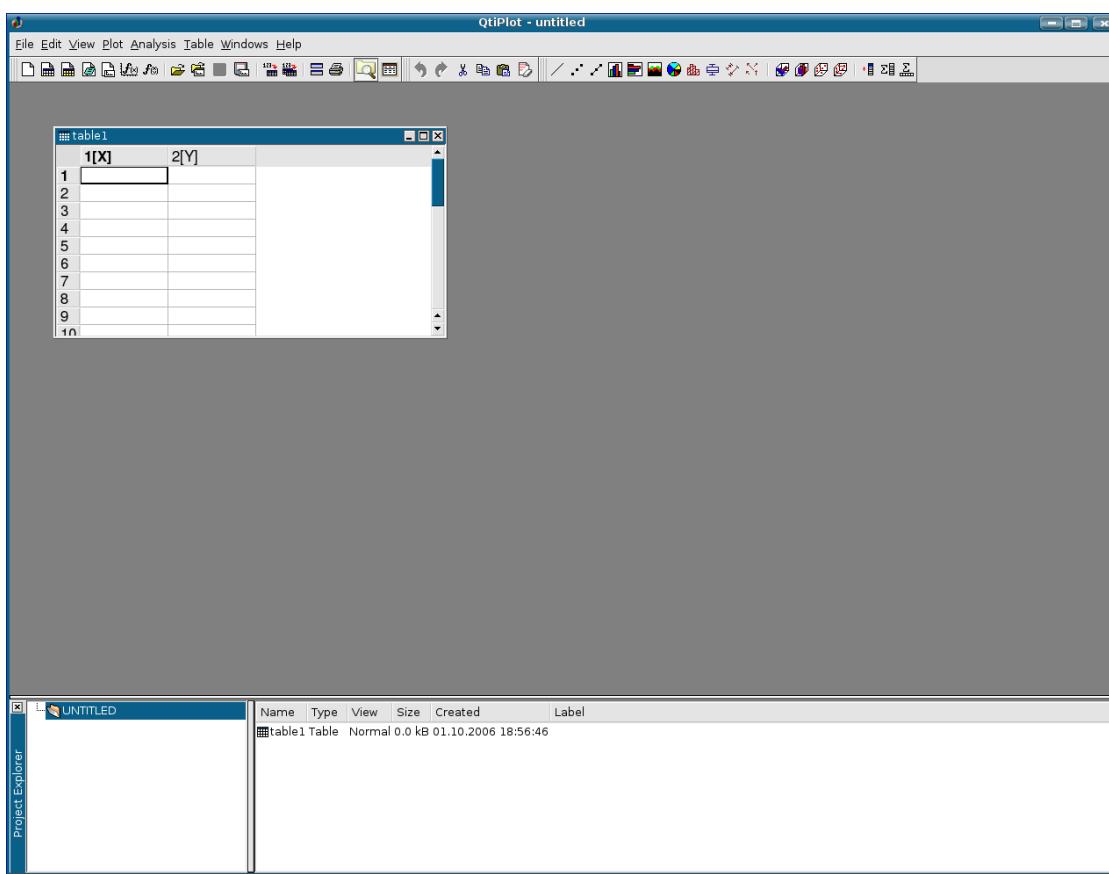
Pri prvom čítaní tejto kapitoly môže čitateľ, ktorý sa chce rýchlo oboznámiť s používaním programu, časť 3.1 preskočiť a pokračovať v čítaní časťou 3.2 na strane 47.

Na obrazovke sa zobrazí tabuľkové okno s príslušnými ponukami a ovládacími prvkami (obrázok 8). Zatvorenie QtiPlotu sa vykoná cez záložku File a potom Quit alebo stlačením klávesov Ctrl + Q (prípadne Alt + F4).

##### 3.1.1 Menu tabuľkového okna

Po vyvolaní QtiPlotu sa na obrazovke zobrazí okno s menom projektu UNTITLED (obrázok 8). Ako to vidieť na obrázku, ide o tabuľkové okno. Hlavné menu obsahuje tieto položky:

File Edit View Plot Analysis Tools Window Help



Obrázok 8: Tabuľkové okno programu QtiPlot

V ďalšom stručne opíšeme tie položky, ktoré sú potrebné na základné zoznámenie sa s možnosťami QtiPlotu.

## File

New	vytvorenie nového projektu
Open	otvorenie súboru s príponou .qti, editácia už vytvoreného projektu
Recent Projects	zoznam piatich naposledy otvorených projektov
Open image file	importovanie obrázku (jpg, bmp, gif, png a iné) do QtiPlot projektu
Import image ...	importovanie obrázkového súboru a konver- tovanie intenzity obr. do maticovej tabuľky
Save Project	uloženie dokumentu pod pôvodným menom
Save Project as	uloženie dokumentu pod novým menom

---

Open Template	otvorenie uloženej šablóny 2D grafu, 3D grafu, tabuľky a matice
Save as Template	uloženie šablóny aktuálneho objektu
Print	vytlačenie aktívneho grafu
Print All Plots	vytlačenie všetkých grafov projektu
Export ASCII	exportovanie ASCII dátového súboru z tabuľky
Import ASCII	importovanie súboru ASCII s príponou .dat
Quit	ukončenie práce s programom QtiPlot

**Edit**

Undo	zruší posledný vykonaný krok
Redo	vráti posledný vykonaný krok
Cut selection	vybratie vyznačenej oblasti
Copy selection	skopírovanie vyznačenej oblasti
Paste selection	vloženie skopírovanej oblasti
Delete selection	zmazanie vyznačenej časti dát (aj celého stĺpca, ak je vyznačený)
Delete fit tables	vymazanie obsahu tabuľky s hodnotami na vykreslenie fitovanej funkcie, zmizne aj graf vytvorený z týchto dát
Clear log information	vymazanie obsahu log súboru s informáciami o výsledkoch fitovania

**Plot**

Line	pospájanie bodov do jednej lomenej čiary
Scatter	bodový graf
Line + Symbol	čiarový graf s vyznačenými bodmi
Special Line/Symbol	zvislé čiary alebo „schodíky“, splajnová čiara
Columns	stĺpcový graf, zvislé stĺpce
Rows	stĺpcový graf, ale stĺpce sú vodorovné
Area	graf s vyfarbenou plochou pod čiarou grafu
Pie	koláčový graf
Vectors XYXY	vytvorenie vektorového grafu, prvé dva stĺpce musia obsahovať hodnoty začiatočných súradníc vektora a posledné dva

---

Vectors XYAM	koncové súradnice vektora vytvorenie vektorového grafu, prvé dva stĺpce musia obsahovať hodnoty začiatočných súradníc vektora a posledné dva uhol (v radiánoch) a amplitúdu vektora
Statistical Graphs	štatistické grafy
Panel	viac grafov v jednom okne
Plot 3D	trojdimenzionálne grafy

## Analysis

Statistics on Columns	štatistické vyhodnotenie dát v stĺpci
Statistics on Rows	štatistické vyhodnotenie dát v riadku
Sort Columns	usporiadanie dát v stĺpci
Sort Table	usporiadanie dát v celej tabuľke
Normalize	normalizovanie dát v stĺpci alebo vo všetkých stĺpcoch tabuľky
FFT ...	analýza dát v tabuľke rýchloou Fourierovou transformáciou
Correlate	výpočet korelácie dát dvoch vybraných stĺpcov tabuľky
Convolute	výpočet konvolúcie dát z dvoch vybraných stĺpcov tabuľky, prvý reprezentuje signál a druhý funkciu
Deconvolute	výpočet dekonvolúcie dát z dvoch vybraných stĺpcov tabuľky, prvý reprezentuje signál a druhý funkciu
Non-linear Curve Fit	nelineárna aproximácia dát vybraného stĺpca tabuľky (nesmú tvorit' priamu úmernosť)

## Table

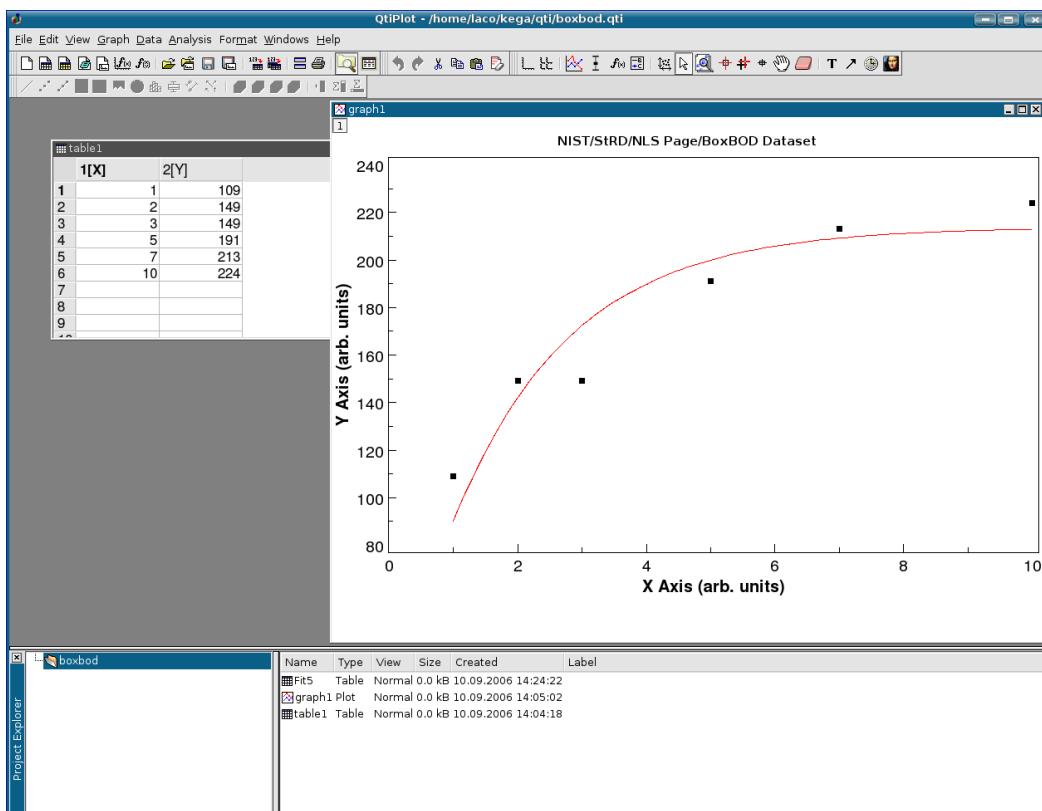
Set columns as	nastavenie dát v stĺpci ( $X, Y, Z$ , nenastavené)
Column Option ...	nastavenie vlastností stĺpca (počet riadkov, typ dát, formát čísel a pod.)
Set Column Value ...	matematické operácie s dátami v stĺpci
Fill Column with	vyplnenie stĺpca tabuľky vzostupnými

	alebo náhodnými číslami
Add column	pridanie nového stĺpca do tabuľky
Columns ...	pridanie stĺpcov do tabuľky, nastavenie počtu stĺpcov v tabuľke
Rows ...	pridanie riadkov do tabuľky, nastavenie počtu riadkov v tabuľke
Convet to matrix	konverzia dát v tabuľke do maticového tvaru

Po konverzii tabuľky do maticového tvaru v hlavnom menu pribudnú položky 3D a Matrix. V položke Matrix nájdeme príkazy na vytvorenie transponovanej a inverznej matice, vypočet determinantu štvorcovej matice, úpravu dát vo vytvorenjej maticovej tabuľke a konverziu maticovej tabuľky na XY tabuľku.

### 3.1.2 Menu grafického okna

Po vykreslení grafu z tabuľkových dát sa zmení hlavné menu a namiesto položiek Plot a Table budú Graph a Format a pribudne ešte položka Data (obrázok 9).



Obrázok 9: Grafické okno programu QtiPlot

V ďalšej časti uvedieme ponuky, ktoré budeme potrebovať na vytvorenie grafu a numerickú analýzu dát.

### Graph

Add/Remove Curve ...	pridanie/odobratie krivky do/z grafu
Add Error Bars	zobrazenie chyby nameraných dát úsečkami
Add Function ...	pridanie užívateľom definovanej funkcie
New Legend	pridanie legendy (obnovenie vymazanej)
Add Text	pridanie ľubovoľného textu (po kliknutí na graf sa otvorí okno na editovanie textu)
Draw Arrow/Line	pridanie šípky alebo úsečky so šípkou
Add time stamp	pridanie dátumu a času
Add Image	pridanie obrázka (jpg, bmp, gif, png a iné)
Add Layer	pridanie nového grafu do grafického okna
Remove Layer	odobratie grafu z grafického okna
Arrange Layers	úprava grafov (písмо, tituly, popis osí, ...)

### Data

Disable tools	zapnutie všeobecného kurzora
Zoom	zapnutie lupy
Rescale to show all	prekreslenie grafu do celého okna
Data reader	kliknutím na bod sa otvorí okno
Select data range	Data display a zobrazia sa súradnice umožní kurzorom myši alebo šípkami
Screen reader	klávesnice vybrať určitý rozsah dát čítač súradníc, otvorí okno Data display a načíta súradnice hociktorej pozície v okne grafu
Move data Points ...	umožní premiestnenie bodov grafu, zmeny sa prejavia aj v tabuľke
Remove Bad Data Points ...	umožní odstránenie bodov z grafu, y-ové hodnoty bodov sa vymažú z tabuľky

## Analysis

Translate	prekladanie dát vo vodorovnom a zvislom smere
Differentiate	výpočet prvej derivácie z dát
Integrate	numerický výpočet integrálu
Smooth	„vyhladenie“ krivky metódou FFT filtra, metódou pohyblivého priemeru a Savitzkého-Golayovou metódou
FFT filter	rôzne filtre (dolno a hornopriepustný, pásmovej priepustnej a blokový)
Interpolate ...	interpolácia dát (lineárna, kubická a Akimova)
FFT ...	inverzná a dopredná FFT
Fit Linear	lineárna regresia
Fit Polynomial ...	polynomická regresia do 9. stupňa
Fit Exponential Decay	regresia exponenciálnou tlmenou krivkou
Fit Exponential Growth ...	regresia exponenciálnou rastovou krivkou
Fit Boltzmann (Sigmoidal)	regresia Boltzmannovou funkciou
Fit Gaussian	regresia Gaussovou funkciou
Fit Lorentzian	regresia Lorentzovou funkciou
Fit Multi-peak	regresia na vyznačené maximá
Non-linear Curve Fit ...	Gaussovou alebo Lorentzovou funkciou nelineárna regresia Nelderovou- -Meadovou simplexovou a Levenbergovou-Marquardtovou metódou, k dispozícii sú základné matematické funkcie, sedem vsta- vaných funkcií a je tu aj možnosť definovať vlastné funkcie

## Format

Plot ...	otvorí sa okno so záložkami s možnosťami editovať rozsah, popis a formát osí, formát mriežky a všeobecné vlastnosti grafu
Curves ...	otvorí sa okno na editovanie grafických vlastností krivky
Scales ...	nastavenie rozsahu osí

- Axes ... editovanie formátu osí
- Grid ... editovanie formátu mriežky grafu
- Title ... editovanie názvu grafu

## 3.2 Príklady použitia programu

### 3.2.1 Zadávanie a import dát do tabuľky

#### Zadanie vlastných dát priamo do tabuľky

Vo fyzikálnych, chemických a iných laboratóriách získavame namerané hodnoty, ktoré potrebujeme vyhodnotiť napr. štatistickými metódami, vykonať regresnú analýzu rôznymi funkciemi a výsledky chceme znázorniť ako čiary v grafoch. Práve na grafické zobrazenie meraní a ich vyhodnotenie s výhodou môžeme použiť QtiPlot.

Graf vo všeobecnosti chápeme ako grafické zobrazenie funkcie  $y = f(x)$ , pričom  $x$  je nezávisle a  $y$  závisle premenná veličina. V tabuľkovom okne (obrázok 8) vkladáme do stĺpca 1[X] nezávisle premennú a do stĺpca 2[Y] a ďalších stĺpcov 3[Y], 4[Y] atď. závisle premenné. Počet premenných definujeme podľa našich požiadaviek, v prípade potreby vytvárame ďalšie stĺpce príkazom Table → Add column alebo pravým klikom myši v hlavičke tabuľky vyberieme z kontextového menu Add column.

#### Importovanie dátového súboru boxbod.dat

V úvode sme spomenuli, že funkcionality programu sme skúšali dátami z internetovej stránky Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006). Stiahli sme si dátá z kolekcie pre nelineárnu regresiu s názvom BoxBOD<sup>20</sup>, ktoré sú zaradené do kategórie s vysokou náročnosťou na spracovanie. Tabuľka bola uložená do dátového súboru s názvom boxbod.dat. Tento súbor teraz importujeme, postupným vyvolaním nasledovných ponúk File → Import ASCII → Set import option, nastavíme formát importovaných dát a potom vykonáme import dát do tabuľky, napr. z nástrojovej lišty kliknutím na ikonu



Vyhľadáme súbor boxbod.dat, po voľbe sa údaje prenesú do tabuľky, pozri obrázok 10.

V prípade potreby môžeme premenovať nazvy stĺpcov tabuľky. Klikneme 2× na poličko 1[X], otvorí sa okno s názvom Column option, v ktorom môžeme zmeniť názov stĺpca, počet

<sup>20</sup> [http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls\\_main.shtml](http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml)

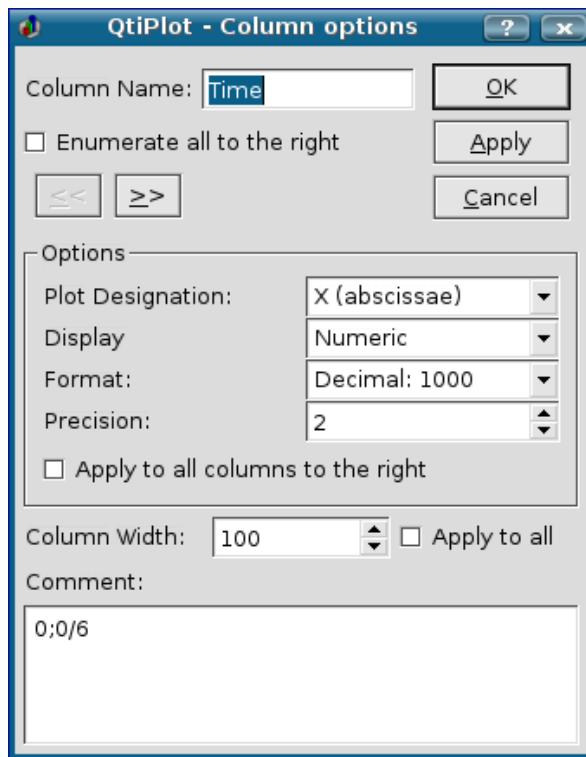
	1[X]	2[Y]
1	1	109
2	2	149
3	3	149
4	5	191
5	7	213
6	10	224

Obrázok 10: Tabuľkové okno s importovanými dátami

	Time[X]	2[Y]
1	1.00	109
2	2.00	149
3	3.00	149
4	5.00	191
5	7.00	213
6	10.00	224

Obrázok 11: Tabuľkové okno s importovanými dátami, premenovaným prvým stĺpcom a zmenou formátu dát

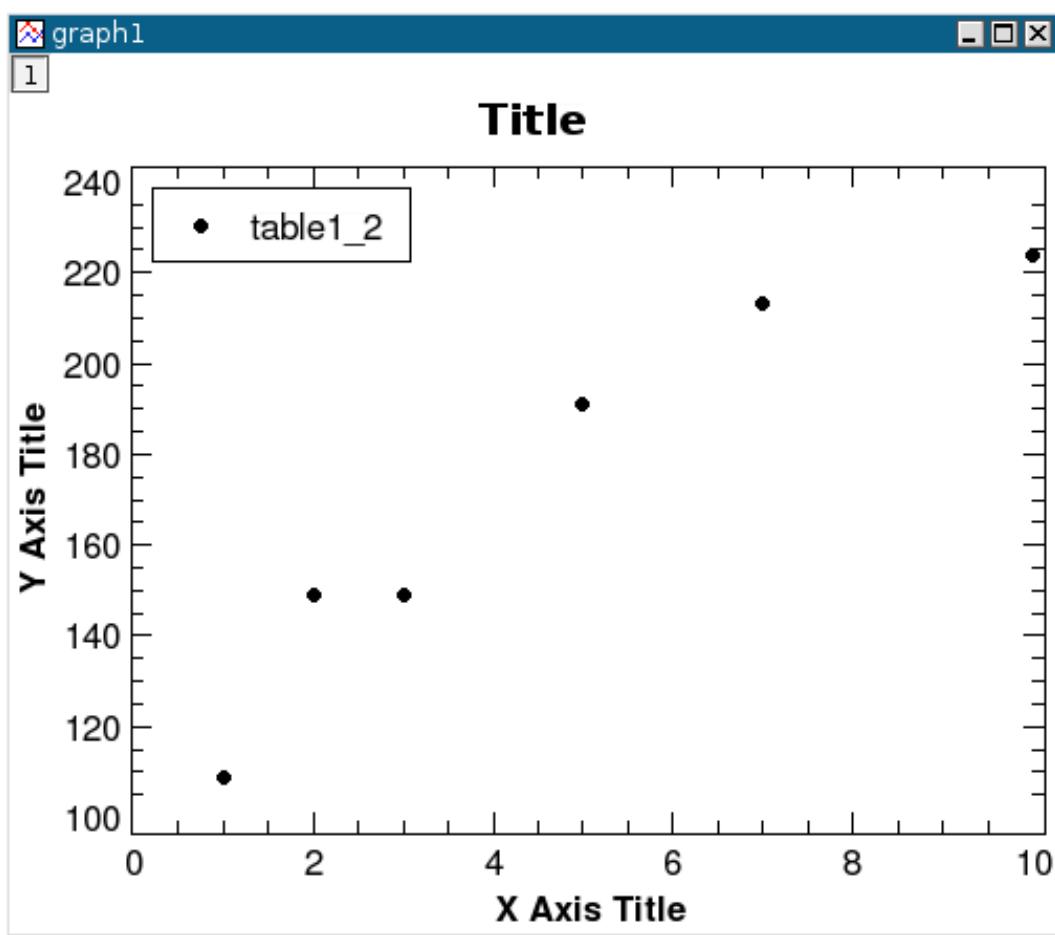
desatiných miest číselnej hodnoty premennej v stĺpci, šírku stĺpca, názov premennej a iné parametre (obrázok 12). Výsledok úpravy vidíme na obrázku 11.



Obrázok 12: Možnosti formátovania tabuľkového okna

### 3.2.2 Vytvorenie a úprava grafu

Kliknutím do hlavičky tabuľky a táhom myši (alebo stlačením klávesu Shift a súčasným pohybom klávesových šípkov) vyznačíme stĺpce závisle a nezávisle premennej a z hlavného menu zvolíme Plot → Scatter. Vykreslia sa body do grafu s názvom graph 1 (obrázok 13). Graf by sme mohli nazvať „surovým“. V tomto grafe je zobrazená legenda a v ľavom

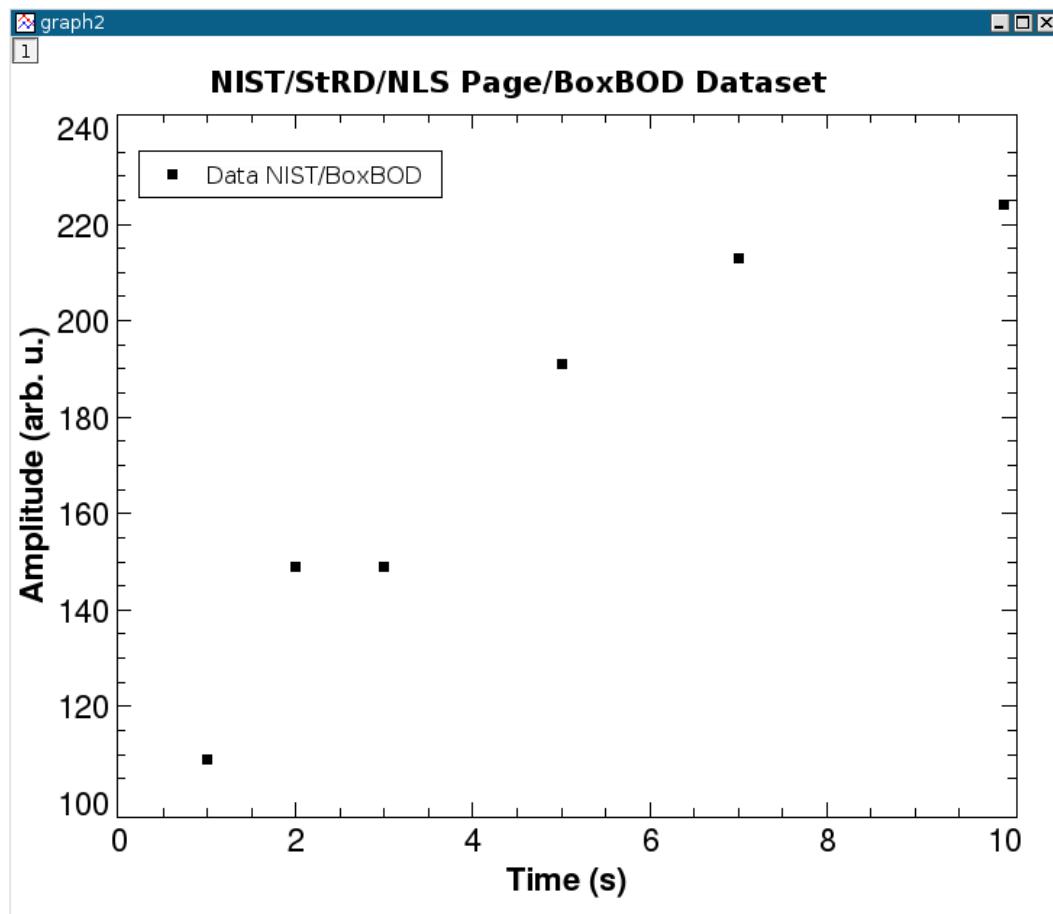


Obrázok 13: Zobrazenie dát tabuľky z obrázku 10

hornom rohu grafického okna je okienko [1]. Pokiaľ by sme nevysznačili v dátovej tabuľke nezávisle premennú, dvojklikom na toto okienko sa otvorí dialógové okno Add/Remove curves, v ktorom je ponuka presunutia údajov z okienka Available data do okienka Graph contents a potom kliknutím na položku Plot Association ... si môžeme vybrať nezávisle aj závisle premennú, ktoré chceme zobraziť v grafe.

Pomenovanie osí vykonáme dvojklikom na jednotlivé osi grafu alebo z hlavného menu zvolíme Format → Plot ... → Axis a prevedieme požadované úpravy. Dvojklikom do rámcika s legendou v ľavom hornom rohu grafu sa otvorí okno na editovanie legendy. Ak je to potrebné urobíme úpravy, zmeny sa prejavia klikom na položku Apply. Ukončenie editácie potvrdíme klikom na položku OK alebo Cancel. „Surový“ graf má názov Title, jeho premenovanie môžeme urobiť dvojklikom myši na tento názov alebo z hlavného menu zvolíme Format → Title ..., otvorí sa okno na editovanie textu, napíšeme nový názov a premenovanie potvrdíme klikom na položku Apply, pričom samozrejme môžeme použiť aj písma s diakritikou, grécke písmená, symboly a pod., pozri obrázok 18. Editáciu názvu ukončíme klikom na položku OK alebo Cancel. Podobným postupom zmeníme aj názvy osí.

Dvojklikom na ľubovoľný bod grafu môžeme zmeniť tvar, farbu a veľkosť symbolov na vykreslenie dát. V prípade, že v grafe máme hustú siet' kriviek aj s dátami, odporuča sa toto editovanie vykonáť z hlavného menu Format → Curves ... Opísané úpravy vidíme na obrázku 14.



Obrázok 14: Upravený graf z obrázku 13

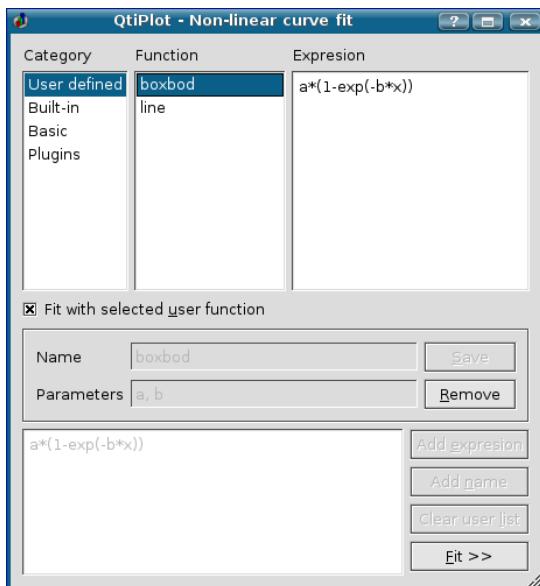
### 3.2.3 Nelineárna regresia pre súbor boxbod.dat

Aproximujme dátá znázornené v grafe na obrázku 14 exponenciálnou závislosťou v tvare

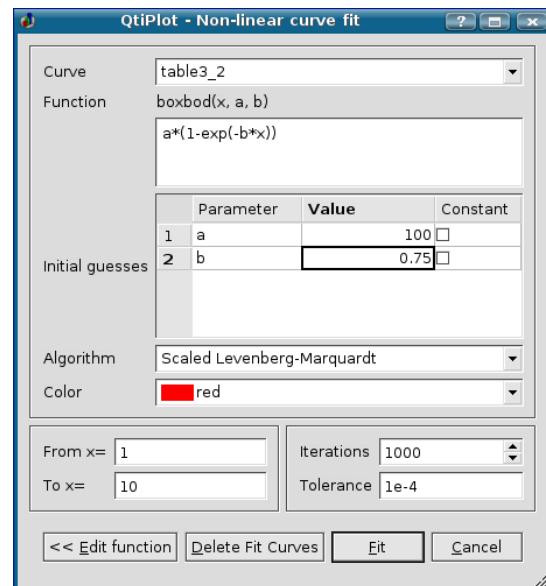
$$y = a[1 - \exp(-bx)],$$

ktorá je podľa (NIST, 2006) modelovou funkciou pre tieto dátá. V hlavnom menu klikneme na položku Analysis → Non-linear Curve Fit ... a vyberieme ponuku User defined. Do ľavého dolného okna zapíšeme approximačnú rovnicu  $a*(1-\exp(-b*x))$ , do okienka Name vpíšeme názov funkcie, napr. boxbod, do okienka Parameters vpíšeme symboly a, b fitovaných parametrov oddelených čiarkou a medzerou, potom kliknutím na položku Save vytvorenú funkciu uložíme (objaví sa v zozname Function), pozri obrázok 15. Klikom myši na prvok zoznamu z okna Category sa zobrazí v okne Function zoznam funkcií z danej kategórie (vybrané položky sa podfarbia modrou farbou). Vyberieme si samozrejme tú našu boxbod. V príprave

na fitovanie pokračujeme zaškrtnutím polička Fit with selected user function a potom kliknutím na položku Fit >>. Otvorí sa nám okno, v ktorom nastavíme štartovacie hodnoty Initial guesses, vyberieme algoritmus fitovania, rozsah nezávisle premennej, maximálny počet iterácií a toleranciu na ukončenie procesu (obrázok 16). Kliknutím na položku Fit sa odštartuje fitovanie a po jeho ukončení sa na pracovnej ploche objaví tabuľka Result Log s výsledkami, pričom sa v grafe zobrazí regresná krivka (obrázok 17). Výsledky fitovania môžeme vložiť



Obrázok 15: Okno na definovanie fitovacej funkcie pre dátá `boxbod.dat`

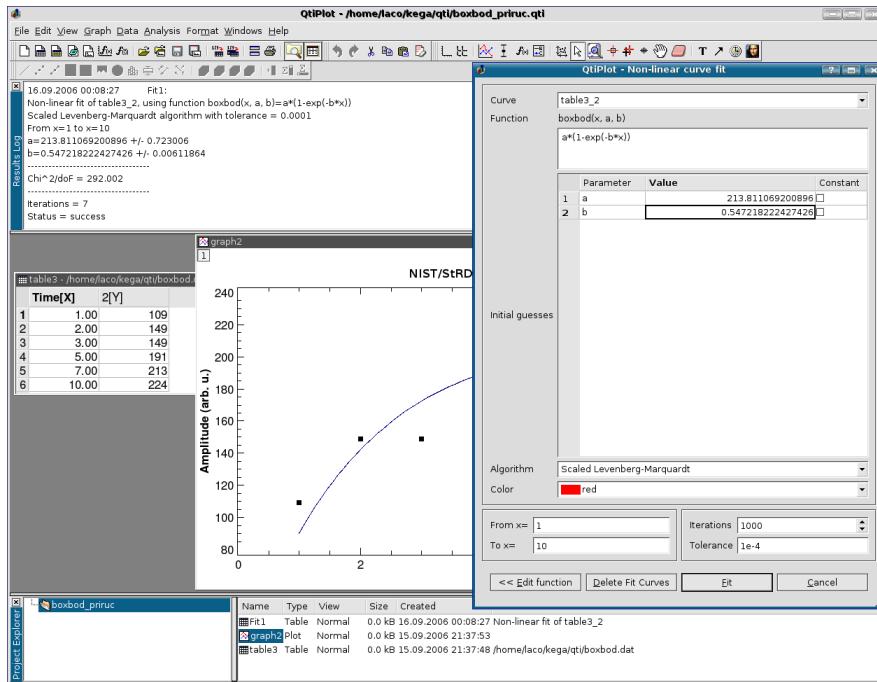


Obrázok 16: Okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá `boxbod.dat`

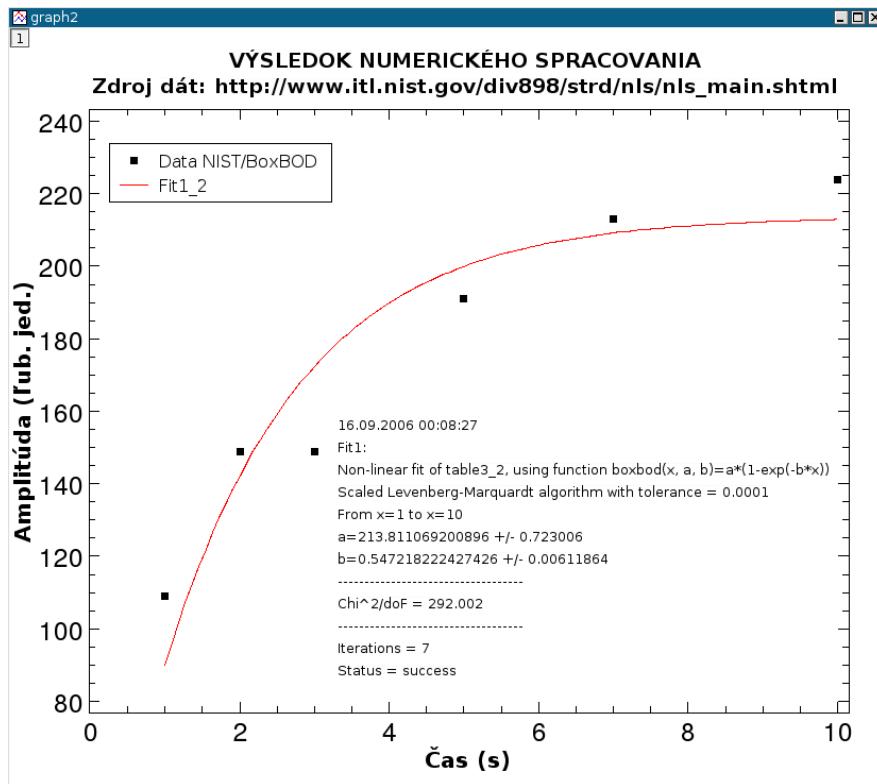
do pola grafu kopírovaním tabuľky cez schránku, pričom môžeme použiť postup na editovanie a vkladanie textu do plochy grafu Graph → Add text. Výsledok vidíme znázornený na obrázku 18 a uvádzame tu aj tabuľku výsledkov:

```
16.09.2006 00:08:27 Fit1:
Non-linear fit of table3_2,
using function boxbod(x, a, b)=a*(1-exp(-b*x))
Scaled Levenberg-Marquardt algorithm with tolerance = 0.0001
From x=1 to x=10
a=213.811069200896 +/- 0.723006
b=0.547218222427426 +/- 0.00611864
-----
Chi^2/doF = 292.002
-----
Iterations = 7
Status = success
```

Výpis nás informuje o dátume a čase fitovania, že toto fitovanie údajov z tabuľky `table3_2` funkciou `boxbod` je prvé v tomto projekte, urobené nelineárnom metódou použitím Levenbergovho-Marquardtovho algoritmu s toleranciou 0.0001. Ďalej sa uvádzajú rozsah nezávisle premennej `x`, fitované parametre `a` a `b` so štandardnými neistotami, hodnota  $\chi^2$ , počet iterácií a napokon hlásenie, že proces fitovania bol ukončený úspešne.



Obrázok 17: Hlásenie programu o ukončení a o výsledkoch fitovania



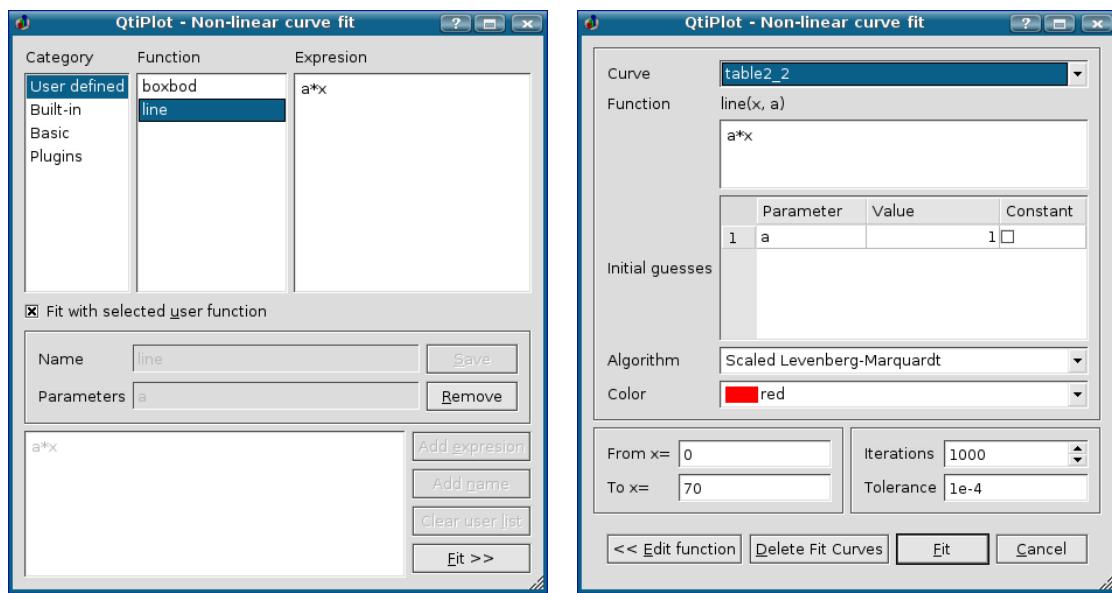
Obrázok 18: Nelineárna regresia dát BoxBOD exponenciálnou funkciou

### 3.2.4 Lineárna regresia funkciou $y = ax$

V krátkosti ešte opíšeme postup lineárnej regresie modelovou funkciou

$$y = ax,$$

ktorú použijeme na fitovanie dát Nolnt1 z kolekcie pre lineárnu regresiu už spomenutého inštitútu NIST (2006)<sup>21</sup>. V položke Analysis máme síce ponuku Fit Linear pre modelovou funkciou  $y = a + bx$ , ale akosi jej chýba možnosť riešiť prípad, keď parameter  $a = 0$ . Po môžeme si teda definovaním vlastnej funkcie  $y = a*x$ , ktorú nazveme line. Zopakujeme postup, ktorý sme použili v predošлом príklade nelineárnej regresie, výsledok vidíme na obrázkoch 19 a 20. Štartovaciu hodnotu parametra  $a$  nachádame implicitnú  $a = 1$  a taktiež algoritmus fitovania ponecháme bez zmeny. Jediné čo zmeníme je začiatočná hodnota nezávisle premennej, ktorú nastavíme na hodnotu 0, aby sa graf zobrazil tak, ako ten, ktorý je na WWW stránke inštitútu NIST. Grafický výsledok nie je „oslňujúci“, trochu ho upravíme, aby bolo jasné, že závislosť má rozsah v oboch smeroch osí od 0. Z hlavného menu vyberieme položku Format → Axes → Scale a začneme s úpravami. Najprv zmeníme  $x$ -ový rozsah, úpravu potvrďme klikom na Apply, postup zopakujeme pre  $y$ -ový rozsah. Očakávali sme, že čiara fitu bude predĺžená do začiatku súradnicového systému, nestalo sa tak, pozri obrázok 21.

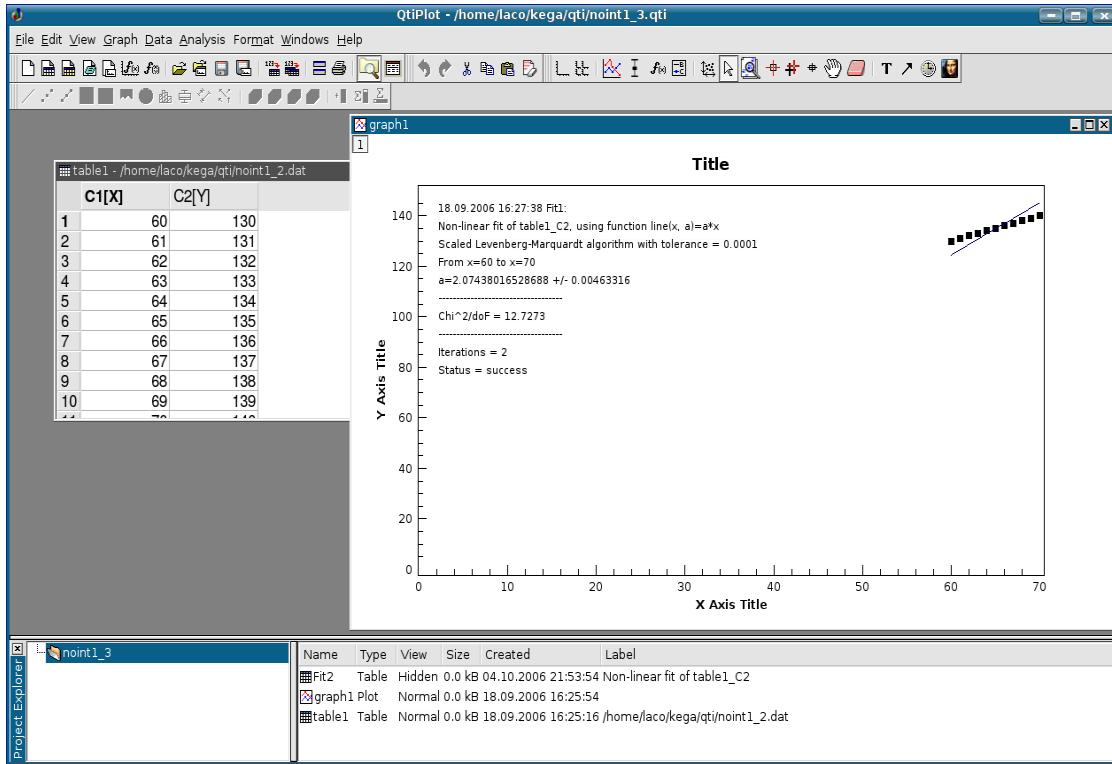


Obrázok 19: Okno na definovanie fitovacej funkcie pre dátá Nolnt1

Obrázok 20: Okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá Nolnt1

Programu na jej vykreslenie pravdepodobne chýba bod  $(0,0)$ . Úpravu môžeme vykonat dvoma spôsobmi:

<sup>21</sup> <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/lls.shtml>



Obrázok 21: Prvé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá Noint1

- Tabuľku Fit2, ktorá obsahuje dátá na zobrazenie fitovanej čiary doplníme bodom  $(0, 0)$  tak, že na jej začiatok vložíme nový riadok s hodnotami  $x = 0$  a  $y = 0$ . Klikneme na značku prvého riadku tabuľky, vyfarbí sa na modro, potom pravým klikom vyberieme z kontextového menu Insert Row. Do vytvorených prázdných políčok vložíme nuly. Touto úpravou dosiahneme to, že sa zobrazenie fitovanej čiary v grafe začne z bodu  $(0, 0)$ . Teraz už môžeme náš obrázok porovnať s obrázkom, ktorý je na WWW stránke inštitútu NIST, pozri obrázok 22. Výpis výsledku fitovania:

```

18.09.2006 16:27:38 Fit1:
Non-linear fit of table1_C2, using function line(x, a)=a*x
Scaled Levenberg-Marquardt algorithm with tolerance = 0.0001
From x=60 to x=70
a=2.07438016528688 +/- 0.00463316
-----
Chi^2/doF = 12.7273
-----
Iterations = 2
Status = success

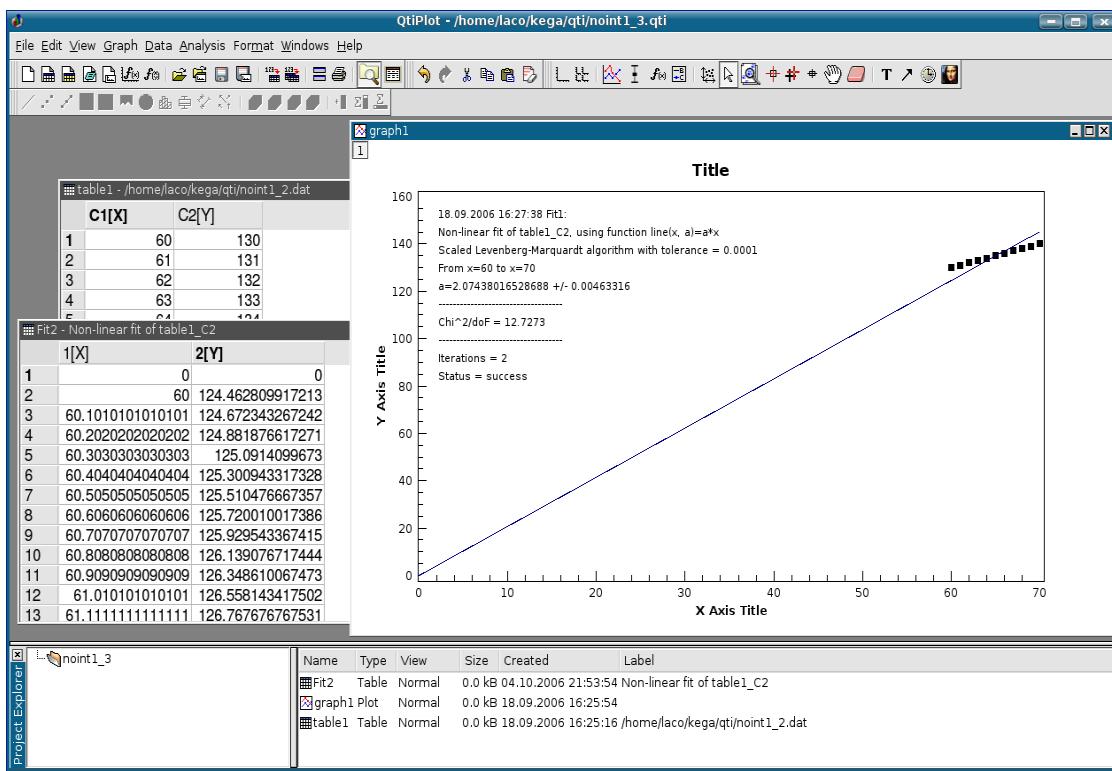
```

- Môžeme zopakovať postup z bodu 1 pre tabuľku table1 s dátami noint1.dat a urobiť nové fitovanie pre  $x$  od 0 do 70. Mohli by sme namietať, že je to „násilné konanie“

priadať do tabuľky body a tak ovplyvniť fitovanie. Priložené výpisu však ukazujú, že v oboch prípadoch sú získané parametre rovnaké. Výpis výsledku fitovania:

```
22.01.2006 01:51:44 Fit7:
Non-linear fit of table1_2, using function: user1(x, a, b)=a*x
Scaled Levenberg-Marquardt algorithm with tolerance = 0.0001
From x=0 to x=70
a=2.07438 +/- 0.00463
b=0.00000 +/- 0.00000
-----
chisq/dof = 12.7273
-----
Iterations = 2
Status = success
```

Ako vzor na „kozmetickú“ úpravu grafu nám môže poslúžiť príklad z obrázku 28. Urobíme ju pomôckami z položky Format a hotový projekt uložíme.



Obrázok 22: Druhé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá Noint1

### 3.3 Spôsoby zobrazenia viacerých grafov

Stáva sa, že sa vyžaduje zakreslenie dvoch (a niekedy aj viacerých) fyzikálnych veličín rôznych rozsahov do jedného grafu alebo zlúčiť viac grafov do jedného obrázku. Napr. chceme zobrazit priebeh rýchlosťi a zrýchlenia voľného pádu guľôčky vo viskoznom prostredí. Za predpokladu, že pohyb guľôčky sa deje iba vo zvislom smere veľmi malou rýchlosťou jej pohybová rovnica má tvar, pozri napr. (UHRIN A KOL., 2006, str. 50)

$$\frac{4}{3}\pi r^3 \rho \frac{dv}{dt} = \frac{4}{3}\pi r^3 g_n (\rho^* - \rho) - 6\pi r \eta v, \quad (67)$$

kde  $r$  je polomer guľôčky,  $v$  rýchlosť jej pohybu vzhľadom na pokojnú tekutinu,  $\rho$  je hustota (objemová hmotnosť) guľôčky,  $\rho^*$  je hustota tekutiny,  $g_n$  je normálne tiažové zrýchlenie a  $\eta$  je viskozita tekutiny.

Predchádzajúca rovnica je *lineárna diferenciálna rovnica prvého rádu* s konštantnými koeficientami s pravou stranou. Rieši sa známymi štandardnými metódami a jej riešenie pre počiatočnú podmienku – rýchlosť v čase nula sa rovná nule – má tvar

$$\begin{aligned} v &= v_0 \left[ 1 - \exp \left( -\frac{9}{2} \frac{\eta t}{r^2 \rho} \right) \right], \\ v_0 &= \frac{2 r^2 (\rho^* - \rho) g_n}{9 \eta}. \end{aligned} \quad (68)$$

Závislosť rýchlosťi od času je teda daná rozdielom dvoch členov. Člen  $v_0$  je časovo nezávislý, druhý člen je exponenciálne klesajúci, ktorý po určitom čase prakticky vymizne a guľôčka sa bude pohybovať rovnomerne a priamočiaro rýchlosťou  $v_0$ . Časový priebeh zrýchlenia bude rovný prvej derivácii rýchlosťi  $v$  podľa času

$$\begin{aligned} a &= a_0 \exp \left( -\frac{9}{2} \frac{\eta t}{r^2 \rho} \right), \\ a_0 &= \frac{(\rho^* - \rho) g_n}{\rho}. \end{aligned} \quad (69)$$

Urobíme numerický výpočet rýchlosťi  $v$  a zrýchlenia  $a$  pre pohyb plexisklovej guľôčky o polomere  $r = 1$  mm vo vode v časovom intervale od 0 do 2 sekúnd. Pomocou možnosti vkladania funkcií do grafov, z hlavného menu grafického okna vyberieme Graph → Add Function... Číselné hodnoty  $v_0$ ,  $a_0$  a konštantného člena v exponentoch sú:

$$v_0 = \frac{2 r^2 (\rho^* - \rho) g_n}{9 \eta} = \frac{2 (10^{-3})^2 (998 - 1200) 9,81}{9 \cdot 10^{-3}} = -0,44 \text{ m s}^{-1}$$

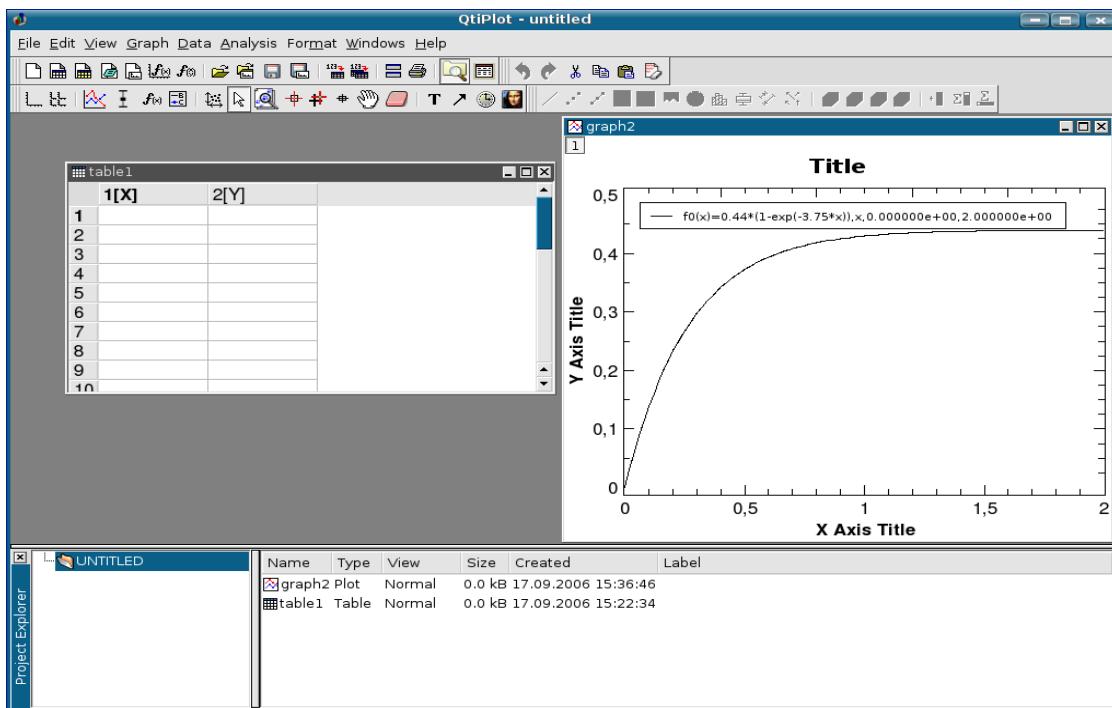
$$a_0 = \frac{(\rho^* - \rho) g_n}{\rho} = \frac{(998 - 1200) 9,81}{1200} = -1,65 \text{ m s}^{-2}$$

$$\frac{9}{2} \frac{\eta t}{r^2 \rho} = \frac{9 \cdot 10^{-3}}{2 (10^{-3})^2 1200} = 3,75 \text{ s}^{-1}$$

Znamienko mínus v prvých dvoch výrazoch má fyzikálny význam. Uvedomme si, že  $v$  a  $a$

sú vlastne  $z$ -ové zložky rýchlosťi a zrýchlenia v pravouhlom súradnicovom systéme a teda môžu byť kladné aj záporné.

V prvom kroku vytvoríme číselné hodnoty na zobrazenie rýchlosťi  $v$  a zrýchlenia  $a$ , ktoré použijeme na tvorbu kombinovaných grafických výstupov. Začneme novým projektom, potom z položky File v hlavnom menu vyberieme New Function Plot. Otvorí sa ponuka Add function curve, do okienka  $f(x)=$  vložíme  $0.44*(1-exp(-3.75*x))$  pre  $x$  od 0 do 2 a necháme vypočítať 100 hodnôt, klikneme na OK. Okno programu sa prepne do grafického módu a zobrazí sa priebeh nami zadanej funkcie  $f(x)=0.44*(1-exp(-3.75*x))$  vo forme spojitej čiary, obrázok 23. Vypočítané hodnoty potrebujeme uložiť do dátového súboru. Kurzorom



Obrázok 23: Grafický priebeh vzťahu 68

myši na čiare vykonáme dvojklik, otvorí sa editor parametrov čiary. Klikneme na položku Worksheet, aktivuje sa tabuľkové okno a zobrazí sa tabuľka vypočítaných hodnôt rýchlosťi, ktorú uložíme postupom File → Export ASCII, vyberieme oddelovač stĺpcov a pomenujeme ju rychlosť.dat. Postup zopakujeme na vytvorenie dát zrýchlenia, do okienka  $f(x)=$  vložíme  $1.65*exp(-3.75*x)$  pre  $x$  od 0 do 2 a opäť necháme vypočítať 100 hodnôt. Dátový súbor uložíme pod menom zrychlenie.dat. Teraz už máme uložené dáta potrebné na vytvorenie ukážok.

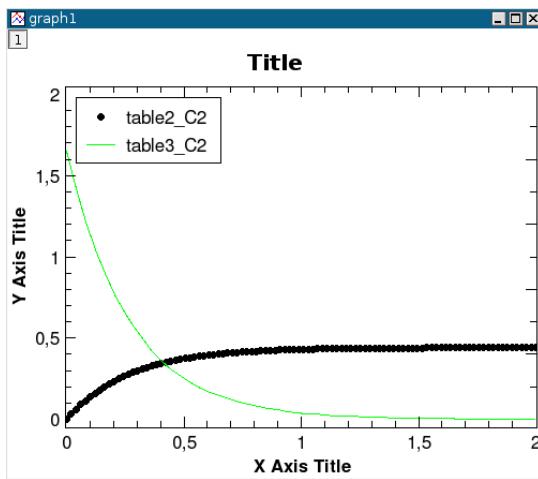
### 3.3.1 Zobrazenie dvoch priebehov v jednom grafe

Uložené dátá rychlosť.dat a zrychlenie.dat použijeme na vytvorenie dvoch priebehov v jednom grafu.

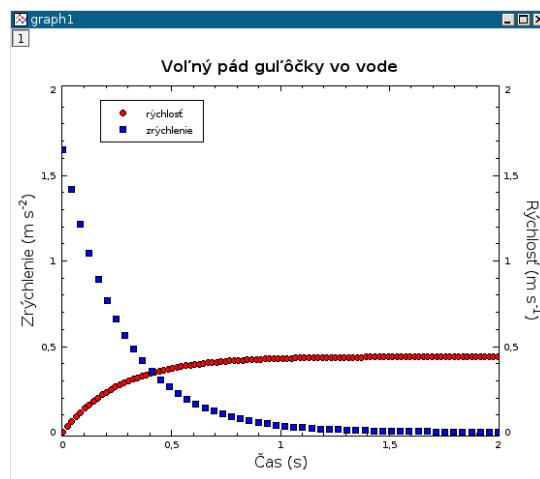
Začneme novým projektom, z ktorého vymažeme prázdnú tabuľku a budeme doňho importovať naše dátá, File → Import ASCII → Multiple files... alebo na nástrojovej lište klikneme na ikonku Import multiple data files



Vyhľadáme naše súbory, pričom súčasným stlačením klávesu **Ctrl** a klikom myši ich označíme na importovanie. V okne programu budeme mať dve tabuľky table2 s dátami rýchlosťi a table3 s dátami zrychlenia. Označíme stĺpce tabuľky table2 a z položky Plot hlavného menu vyberieme bodové zobrazenie Scatter, otvorí sa grafické okno s priebehom rýchlosťi. Do tohto grafu chceme vložiť aj priebeh zrychlenia. Na túto operáciu použijeme postup opísaný v časti 3.2.4 na strane 53. Klikneme teda do okienka **[1]** a v editore Add/Remove curves presunieme dátá table3 z okna Available data do okna Graph contents. Výsledok vidíme na obrázku 24. Graf upravíme pomôckami z položky Format a projekt nezabudnime uložiť. Upravený graf vidíme na obrázku 25. Pre ďaľšie použitie môžeme graf uložiť v niektorom z grafických formátov cez hlavné menu položkou File → Export Graph → Current, napr. eps.



Obrázok 24: Zobrazenie dát zo súčasne importovaných súborov rychlosť.dat a zrychlenie.dat

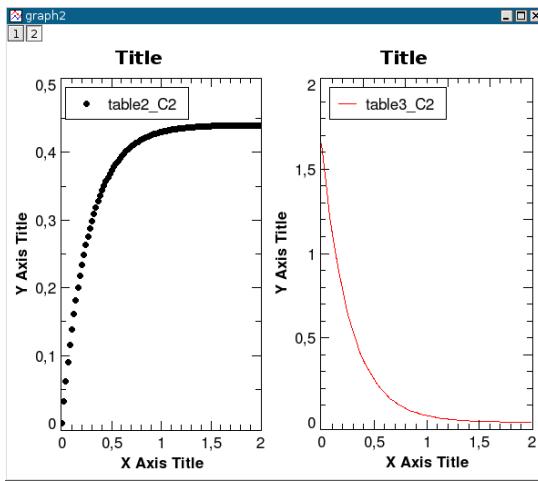


Obrázok 25: Upravený graf z obrázku 24

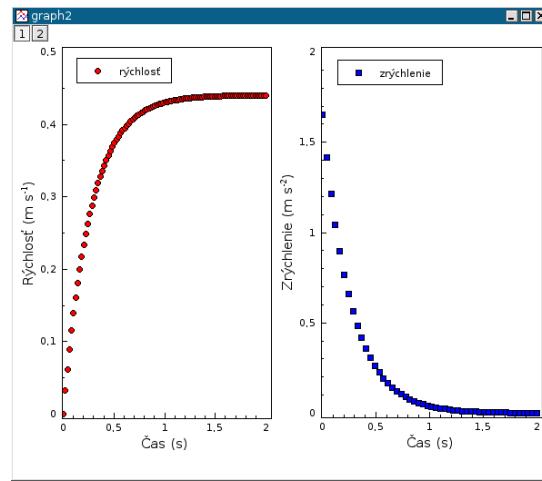
### 3.3.2 Zobrazenie dvoch grafov v jednom okne

V tejto časti opíšeme postup ako zlúčiť viac grafov do jedného obrázka použije na to naše dátá rychlosť.dat a zrychlenie.dat. Opäť začneme prácu novým projektom, z ktorého vymažeme

prázdnú tabuľku a do tohto projektu importneme naše data postupom z predchádzajucej časti. Z tabuľkového okna sériou príkazov Plot → Scatter vykreslíme priebeh rýchlosťi. Do aktívneho grafického okna, v ktorom je graf priebehu rýchlosťi  $v$ , vložíme nový graf pomocou ponuky Graph → Add Layer z hlavného menu programu, potvrdíme implicitnú ponuku kliknutím na položku Guess. V ľavom hornom okne pribudne okienko [2], klikneme naň dvakrát, otvorí sa editor Add/Remove curves a môžeme presunúť tabuľku table3 do Graph contents. Výsledok nášho snaženia vidíme na obrázku 26. Grafy upravíme pomôckami



Obrázok 26: Neupravené grafy priebehov rýchlosťi  $v$  a zrýchlenia  $a$  v jednom grafickom okne

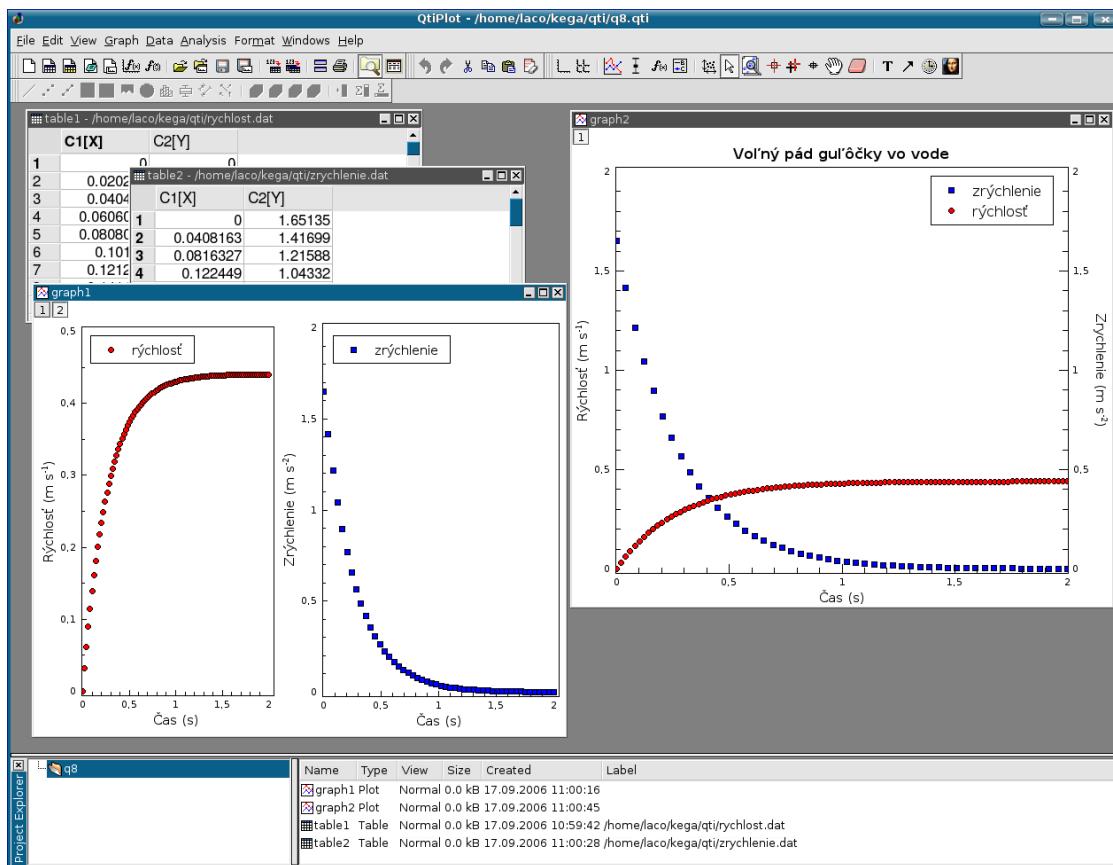


Obrázok 27: Upravené grafy z obrázku 26

z položky Format a vytvorený projekt nezabudnime uložiť. Upravené grafy sú na obrázku 27. Na ďalšie použitie môžeme obrázok s grafmi uložiť v niektorom z grafických formátov cez hlavné menu položkou File → Export Graph → Current, napr. eps, png, jpeg, bmp, pbm, pgm, ppm, xbm, xpm. Na obrázku 28 sú oba projekty znázornené v jednom grafickom okne, na postup vyhotovenia pozorný čitateľ už iste príde aj sám.

Stručne sme ukázali niektoré často používané procedúry spracovania dát a tvorby grafov. Týmito jednoduchými príkladmi sme samozrejme nevyčerpali všetky možnosti programu QtiPlot. Dobrým zdrojom ďalších informácií na prácu s programom je elektronický off-line HTML manuál prístupný na URL adrese: <http://soft.proindependent.com/manuals.html>.

V priloženej tabuľke uvádzame zoznam programom podporovaných matematických operátorov a zabudovaných funkcií, ktoré môžeme používať na vytvorenie vlastných funkcií, pri matematických operáciach s dátami v tabuľkách a pod.



Obrázok 28: Zobrazenie dvoch grafov v jednom okne a dvoch priebehov v jednom grafe

#### ZOZNAM MATEMATICKÝCH OPERÁTOROV A FUNKCIÍ PROGRAMU QTI PLOT

Názov	Popis
+	súčet
-	rozdiel
*	násobenie ( $a*b = a \cdot b$ )
/	podiel, delenie
^	umocnenie ( $a^b = a^b$ )
and	logické AND (vracia 0 alebo 1)
or	logické OR (vracia 0 alebo 1)
xor	logické Exclusive OR (vracia 0 alebo 1)
<	menšie ako (vracia 0 alebo 1)
<=	menšie ako alebo rovná sa (vracia 0 alebo 1)
<i>pokračovanie tabuľky na ďalšej strane</i>	

(pokračovanie tabuľky z predošej strany)	
Názov	Popis
$==$	rovná sa (vracia 0 alebo 1)
$\geq$	väčšie ako alebo rovná sa (vracia 0 alebo 1)
$>$	väčšie ako (vracia 0 alebo 1)
$\neq$	nerovná sa (vracia 0 alebo 1)
<b>abs(x)</b>	absolútna hodnota $x$
<b>acos(x)</b>	arkus kosínus
<b>acosh(x)</b>	arkus hyperbolický kosínus
<b>asin(x)</b>	arkus sínus
<b>asinh(x)</b>	arkus hyperbolický sínus
<b>atan(x)</b>	arkus tangens
<b>atanh(x)</b>	arkus hyperbolický tangens
<b>avg(x1,x2,x3,...)</b>	stredná hodnota argumentov
<b>bessel_j0(x)</b>	Besselova funkcia prvého druhu $J_0(x)$ rádu 0
<b>bessel_j1(x)</b>	Besselova funkcia prvého druhu $J_2(x)$ rádu 1
<b>bessel_jn(x,n)</b>	Besselova funkcia prvého druhu $J_n(x)$ rádu $n$
<b>bessel_y0(x)</b>	Besselova funkcia druhého druhu $Y_0(x)$ rádu 0
<b>bessel_y1(x)</b>	Besselova funkcia druhého druhu $Y_1(x)$ rádu 1
<b>bessel_yn(x,n)</b>	Besselova funkcia druhého druhu $Y_n(x)$ indexu $n$
<b>beta(a,b)</b>	Beta funkcia, $B(a,b) = \Gamma(a) \cdot \Gamma(b) / \Gamma(a+b)$
<b>cos(x)</b>	kosínus $x$
<b>cosh(x)</b>	hyperbolický kosínus $x$
<b>erf(x)</b>	chýbová funkcia
<b>erfc(x)</b>	$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x)$
<b>erfz(x)</b>	hustota pravdepodobnosti normálneho rozdelenia $Z(x)$
<b>erfq(x)</b>	koncová časť normálneho rozdelenia $Q(x)$
<b>exp(x)</b>	exponenciálna funkcia so základom e
<b>gamma(x)</b>	funkcia $\Gamma(x)$
<b>gammaln(x)</b>	logaritmus funkcie $\Gamma(x)$
pokračovanie tabuľky na ďalšej strane	

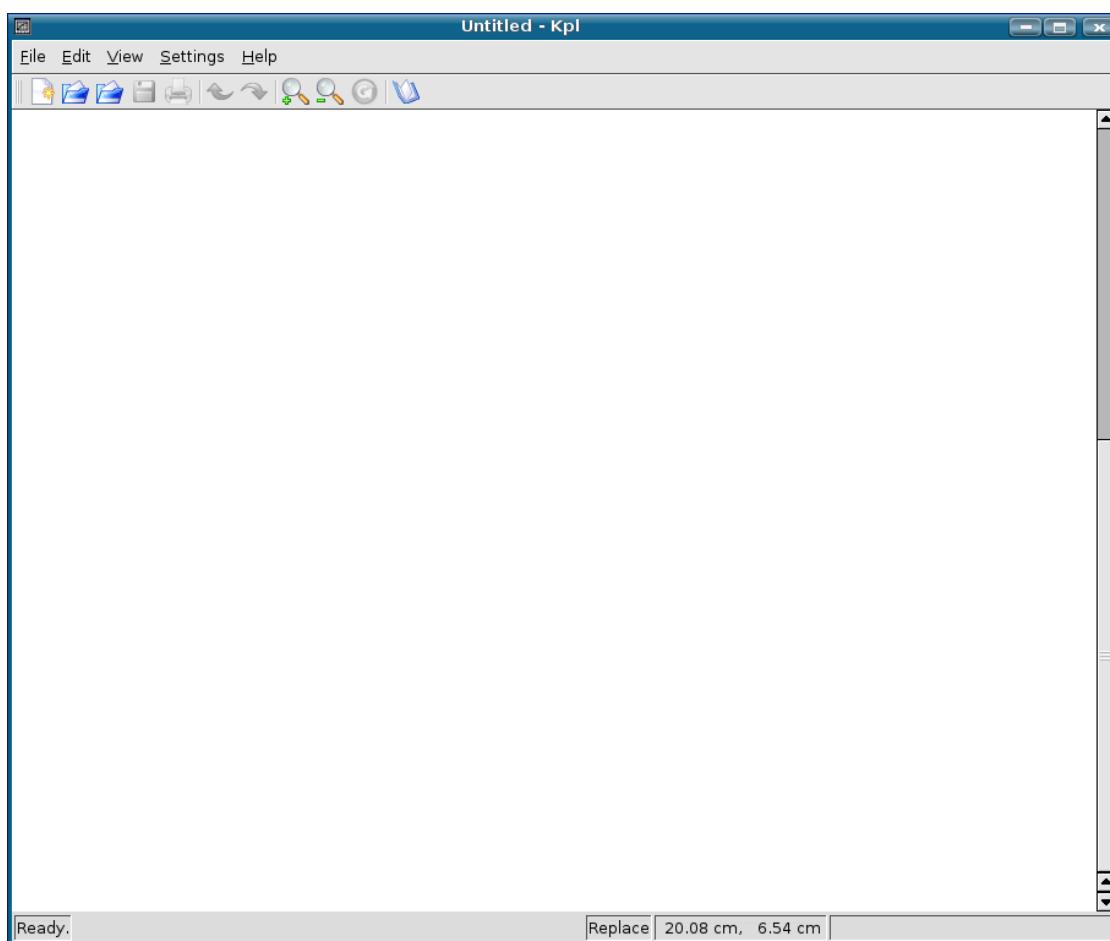
(pokračovanie tabuľky z predošej strany)	
Názov	Popis
<code>hazard(x)</code>	$h(x) = \text{erfz}(x)/\text{erfq}(x)$ <sup>22</sup>
<code>if(e1,e2,e3)</code>	ked' je e1 pravdivé, výpočíta sa e2 a ešte e3
<code>ln(x)</code>	prirodzený logaritmus $x$
<code>log(x)</code>	dekadický logaritmus $x$
<code>log2(x)</code>	logaritmus $x$ so základom 2
<code>min(x1,x2,x3,...)</code>	minimum zo zoznamu argumentov
<code>max(x1,x2,x3,...)</code>	maximum zo zoznamu argumentov
<code>rint(x)</code>	zaokrúhlenie na najbližšie celé číslo
<code>sign(x)</code>	funkcia znamienka $x$
<code>sin(x)</code>	sínus $x$
<code>sinh(x)</code>	hyperbolický sínus $x$
<code>sqrt(x)</code>	druhá odmocnina z $x$
<code>tan(x)</code>	tangens $x$
<code>tanh(x)</code>	hyperbolický tangens $x$

<sup>22</sup>V staršej literatúre sa uvádzajú pojmy *hazard function* ako ekvivalent pojmu *hazard rate* alebo *failure rate* používaneho v teórii obnovy a poistovníctve, v slovenčine ako intenzita poruchy (úmrtnosti). Je definovaná ako  $h(x) = f(x)/(1 - F(x))$ , kde  $f(x)$  a  $F(x)$  je hustota a distribučná funkcia doby životnosti nejakého prvku (J. Skrivánek).

## 4 Program Kpl

Program Kpl je jednoduchý z pohľadu ovládania, poskytuje rozsiahle možnosti na vyhľadzovanie, optimalizáciu a numerické operácie s nameranými dátami (napr. derivovanie, integrovanie); môžeme ho dopĺňať vlastnými funkiami a knižnicami, ktoré sa napíšu a skompilujú v programovacom jazyku C. Na rozdiel od programu QtiPlot neumožňuje štatistické výpočty a charakteristiky dát. V ďalších častiach opíšeme prácu s verziou Kpl 3.3 pre grafické používateľské prostredie KDE 3.5.2.

Domovská internetová stránka programu je na URL adrese <http://frs106.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/>. Autor Werner Stille ponúka k programu on-line príručku prístupnú na URL adrese <http://frs106.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/book/index.html>. Na prácu v Kpl máme k dispozícii jedno pracovné okno, pozri obrázok 29.



Obrázok 29: Pracovné okno programu Kpl

## 4.1 Ovládacie možnosti programu Kpl

Spustenie Kpl v prostredí OS GNU/Linux sa dá uskutočniť troma spôsobmi:<sup>23</sup>

- kliknutie na ikonu Kpl na pracovnej ploche (ked' ju máme vytvorenú),
- Menu → Kancelária → kliknutie na Kpl (ked' sme program inštalovali z deb balíčka),
- z príkazového riadka X terminálu príkazom kpl.

Na obrazovke sa zobrazí okno programu s príslušnými ponukami a ovládacími prvkami v hlavnom menu (obrázok 29). Zatvorenie Kpl sa vykoná cez záložku File a potom Quit alebo stlačením klávesov Ctrl + Q (prípadne Alt + F4).

Opäť, pri prvom čítaní tejto kapitoly môže čitateľ, ktorý sa chce rýchlo oboznámiť s používaním programu časť 4.1 preskočiť a pokračovať v čítaní časťou 4.2 na strane 66.

Hlavné menu programu obsahuje tieto položky:

File Edit View Settings Help

Opíšeme tie položky, ktoré sú potrebné na základné zoznámenie sa s možnosťami Kpl. Položky označené hviezdičkou \* sa aktivujú len v tom prípade, keď je otvorený grafický alebo dátový súbor.

### File

New	vytvorenie nového projektu
Open Plot File ...	otvorenie súboru s príponou .kpl, editácia už vytvoreného projektu
Open Data File ...	otvorenie súboru s príponou .dat, možnosť výberu desatinnej bodky alebo čiarky
Open Recent	desať naposledy otvorených projektov
Save*	uloženie dokumentu pod pôvodným menom
Save As ... *	uloženie dokumentu pod novým menom
Close*	zatvorenie aktuálneho projektu
Print*	vytlačenie aktívneho grafu
Display Plot*	zobrazenie grafickej prezentácie alebo obnovenie zobrazeného grafu
PostScript Output	voľba orientácie grafického listu na konverziu; na výšku alebo na šírku
PostScript Preview	voľba orientácie náhľadu grafu; na výšku alebo na šírku

<sup>23</sup>V prípade, keď inštaláciu vykonáte zo zdrojových súborov, musí sa cesta na spustenie z Menu nastaviť manuálne. Autor z vlastnej skúsenosti odporúča spuštať program z pracovnej plochy pomocou vytvorenej ikonky s odkazom na binárny súbor kpl.

---

New Window	otvorenie nového pracovného okna programu
Close Window	zatvorenie aktuálneho pracovného okna a ukončenie programu
Quit	ukončenie práce s programom Kpl

**Edit**

Undo*	zruší posledný vykonaný krok
Redo*	vráti posledný vykonaný krok
Items ...	jedna z najdôležitejších položiek, umožňuje vkladat', editovať a fitovať objekty a položky v grafe (napr. funkcie, polia, splajnové krivky a pod.)

**View**

Zoom In (Ctrl++)	zväčšovanie krokom
Zoom Out (Ctrl+-)	zmenšovanie krokom
Zoom ...	nastavenie faktora zväčšenia/zmenšenia (%)
Redisplay* (F5)	aktuálny dátový alebo grafický súbor sa znova načíta a zobrazí, aktivuje sa funkcia Autoplot
Reload Periodically	nastavenie periodického obnovovania zobrazenia, aktivuje sa funkcia Autoplot

**Settings**

Hide Toolbar	skrytie/zobrazenie hlavného menu
Hide Statusbar	skrytie/zobrazenie stavovej lišty
Show Function Source	zobrazenie zdrojového súboru funkcie v dialógu voľby jej parametrov
Autoplot	automatické zobrazenie projektu po načítaní dátového alebo grafického súboru
Add Files (Insert)	pridanie nového dátového alebo grafického súboru do aktuálneho s vykreslením
Calculate PS Bounding Box	automatický výpočet hraníc postscriptového okna grafu, bez aktivácie tejto položky sa vypočítajú hranice k niektorému rozmeru strany (napr. A4 na výšku)
Print PS Output	zobrazenie dialógu tlače postscriptového

---

Save Absolute Paths	súboru po jeho vytvorení do grafického súboru sa uloží absolútna cesta k dátam a knižniciam
Unsaved Changes Warning	zobrazenie varovania o neuložení súboru
Save Settings At End	uloženie všetkých nastavení aktuálneho zobrazenia pri ukončení programu
Save Settings	uloženie všetkých nastavení aktuálneho zobrazenia
Configure Shortcuts ...	definovanie vlastných klávesových skratiek
Configure Toolbars ...	pridanie/odobratie ikoniek do hlavného menu
Configure Notifications ...	nastavenie hlásení a varovaní programu
Configure Kpl ...	niektoré základné implicitné nastavenia programu

## Help

Kpl Handbook	otvorenie elektronického manuálu, keďže nainštalovali ste ho
Report Bug ...	dialóg na oznamovanie chýb programu autorovi e-mailovou poštou
About Kpl	základné informácie o programe Kpl
About KDE	základné informácie o grafickom prostredí KDE

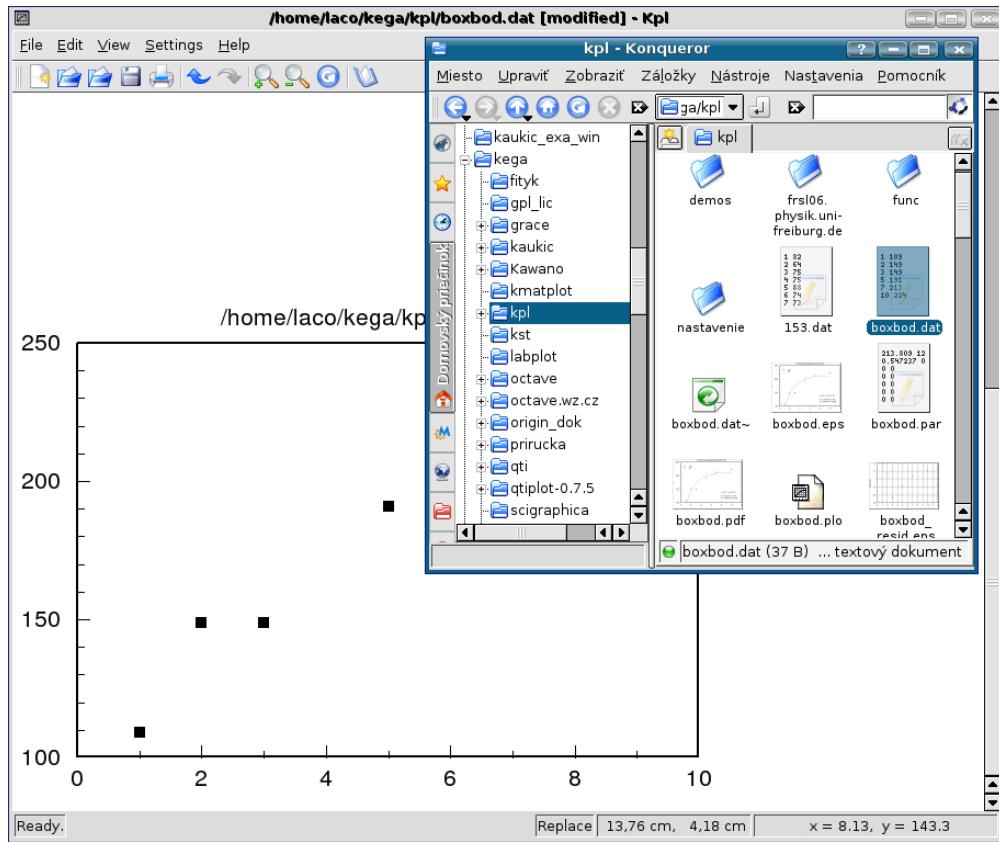
## 4.2 Príklady použitia programu

### 4.2.1 Importovanie dát, ich zobrazenie a úprava grafu

#### Importovanie dátového súboru `boxbod.dat`

Tak, ako v prípade programu QtiPlot, aj program Kpl a jeho funkcionality preskúšame dátami z internetovej stránky Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006). Stiahnite si dátá z kolekcie pre nelineárnu regresiu s názvom BoxBOD<sup>24</sup>, ktoré sú zaradené do kategórie s vysokou náročnosťou na spracovanie. Tabuľku uložte do dátového súboru s názvom `boxbod.dat`.

<sup>24</sup> [http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls\\_main.shtml](http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml)



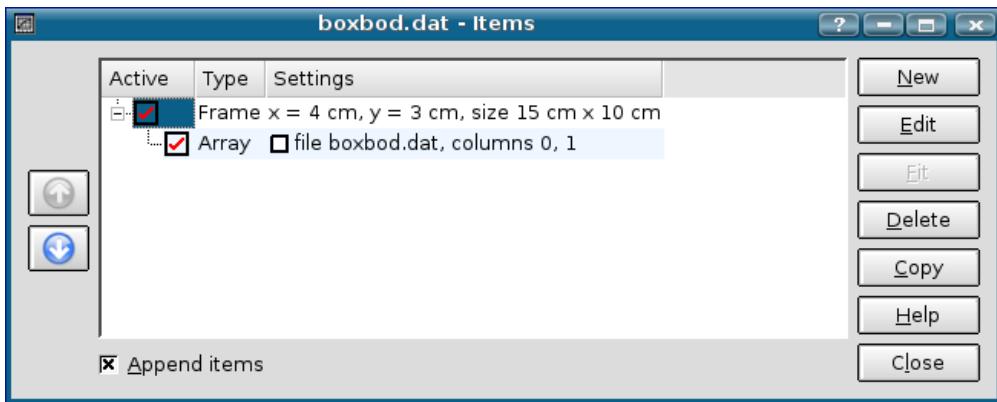
Obrázok 30: Importovanie a zobrazenie dát metódou ľahaj a pust'

Program Kpl má súčasť vlastný editor tabuľiek, ale s obmedzenými možnosťami formátovania, preto si na vytvorenie tabuľky vyberieme radšej nejaký textový ASCII editor (napr. Kate, gedit, KSpread a pod.). Dátový súbor vytvárame a editujeme v stĺpcovom formáte, a pri jeho ukladaní do pracovného priečinka mu pridávame príponu dat. Symbolom desatinnej rádovej čiarky môže byť *desatinná čiarka* alebo *desatinná bodka* a ako oddelovač (separátor) stĺpcov odporúčame použiť tabulátor (Tab) alebo medzerník (Space). Dátový súbor môžeme importovať dvoma spôsobmi:

1. Vyvolaním ponúk File → Open Data File ... sa otvorí dialógové okno, v ktorom zvolíme symbol desatinnej rádovej čiarky a vyhľadáme na disku súbor na importovanie.
2. Otvoríme program Kpl a potom nejaký program na spravovanie súborov (napr. Konqueror alebo Krusader), v ktorom vyhľadáme súbor, ktorý chceme zobrazit. Označíme ho ľavým klikom myšky a ľahom ho premiestníme do okna programu Kpl, kde klik uvoľníme (metóda Drag and Drop), pozri obrázok 30.

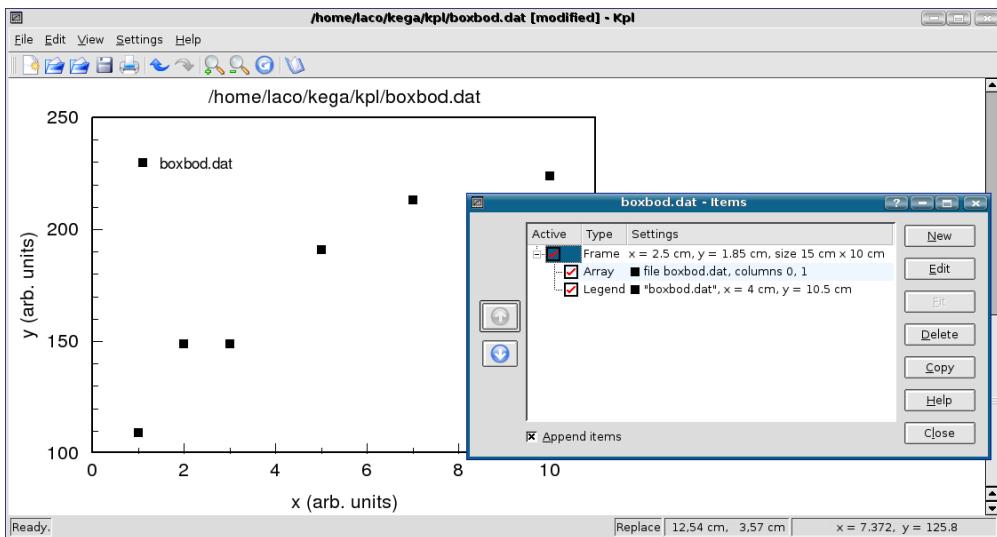
„Surový“ graf z obrázku 30 budeme upravovať vyvolaním položky Items ... Možeme ju aktivovať dvoma spôsobmi, pravým klikom myši do prázdmeho poľa v okne programu (mimo poľa grafu) a z kontextového menu vyberieme žiadanú položku alebo vyvolaním

ponúk Edit → Items ..., pozri obrázok 31.



Obrázok 31: Pracovné okno položky Items ...

Po pridaní legendy (výberom New), označení a zmene modulov osí (pozri na strane 74), zmene zafarbenia a symbolov dátových bodov (označením a výberom Edit) dostaneme takýto výsledok:



Obrázok 32: Upravený graf z obrázku 30

#### 4.2.2 Nelineárna regresia pre súbor boxbod.dat

Tak, ako v prípade programu QtiPlot approximujme dáta znázornené v grafe na obrázku 32 exponenciálnou závislosťou v tvare

$$y = a[1 - \exp(-bx)],$$

ktorá je podľa (NIST, 2006) modelovou funkciou pre tieto dáta. Program implicitne takúto funkciu neponúka, ale môžeme ju napísat' ako skript v programovacom jazyku C, napr.

`boxbod.c`, a skompilovaním vytvorí knižnicu (modul) `boxbod.so`.

Postup je nasledovný: v textovom editore napíšeme napríklad takéto funkcie v jazyku C. Prvá `boxbod_1` bude na vykreslenie fitovanej čiary do grafu, druhá `boxbod_2` na iteráciu:

```
*****  
/*      boxbod.c    2D functions for Kpl          */  
/*      Copyright (C) 2006 by Ladislav Sevcovic       */  
/*      <ladislav.sevcovic@tuke.sk>                 */  
/*      Released under the GPL; see file LICENSE for details. */  
/*      */  
/*      Use the following command to compile the C function */  
/*      and create a shared library:                   */  
/*      gcc -Wall -shared -fPIC -o boxbod.so boxbod.c -lm */  
/*      Do this in a X terminal windows (shell).        */  
/*      At the X terminal type:   nm boxbod.so>boxbod.def */  
/*      */  
/*      exponential(x, p) calculates of exponential     */  
/*      Returns: p[0] * (1 - exp(-p[1] * x))           */  
*****  
#include <math.h>  
*****  
double boxbod_1(double x, const double* p)  
{  
    return(p[0]*(1-exp(-p[1]*x)));  
}  
*****  
double boxbod_2(double x, const double* p)  
{  
    int i;  
    double f;  
    f = p[0];  
    for (i = 1; i < 3; i += 1)  
        f = p[i] * (1 - exp(- p[i + 1] * x));  
    return f;  
}  
*****
```

Súbor uložíme do pracovného priečinka pod menom `boxbod.c` a do príkazového riadka v okne X terminálu najprv napíšeme<sup>25</sup>

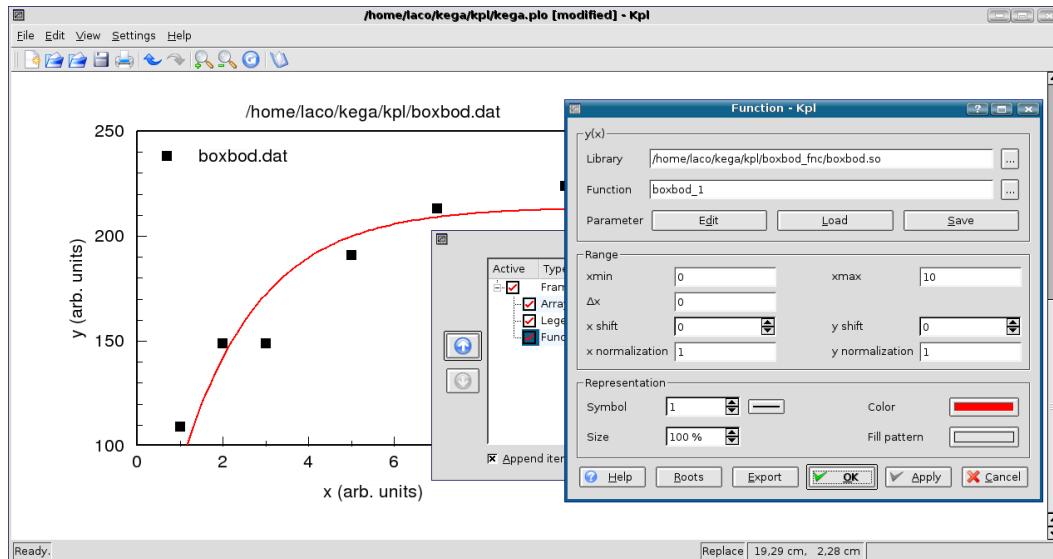
`gcc -Wall -shared -fPIC -o boxbod.so boxbod.c -lm`

a stlačním klávesu Enter prebehne kompliacia nášho skriptu do binárnej knižnice `boxbod.so`. Potom napíšeme

<sup>25</sup>Súčasťou OS GNU/Linux je aj kompilátor `gcc` jazyka C a rad ďalších programátorských nástrojov. Program `nm` vytlačí tabuľku symbolov (zoznam názvov) v abecednom poradí pre jeden alebo viac objektových súborov. Výstup obsahuje pre každý symbol meno, hodnotu, typ, veľkosť a pod.

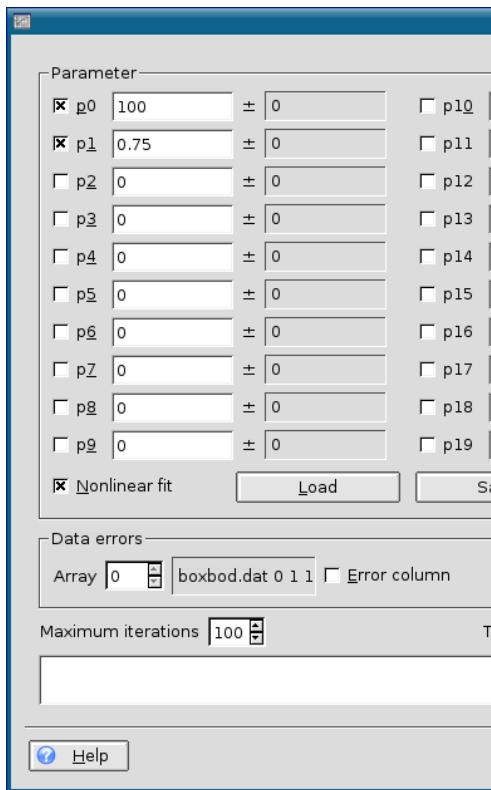
`nm_boxbody.so>boxbody.def`

a opäťovným odoslaním sa vytvorí tabuľka symbolov. Dva skompliované súbory `boxbody.so` a `boxbody.def` použijeme na fitovanie, môžeme ich teda presunúť do pracovného priečinka, v ktorom máme ostatné súbory s dátami pre Kpl alebo do osobitného podpriečinka, v ktorom budú len knižnice (aj budúce). Teraz už môžeme začať s fitovaním dát, v okne položky

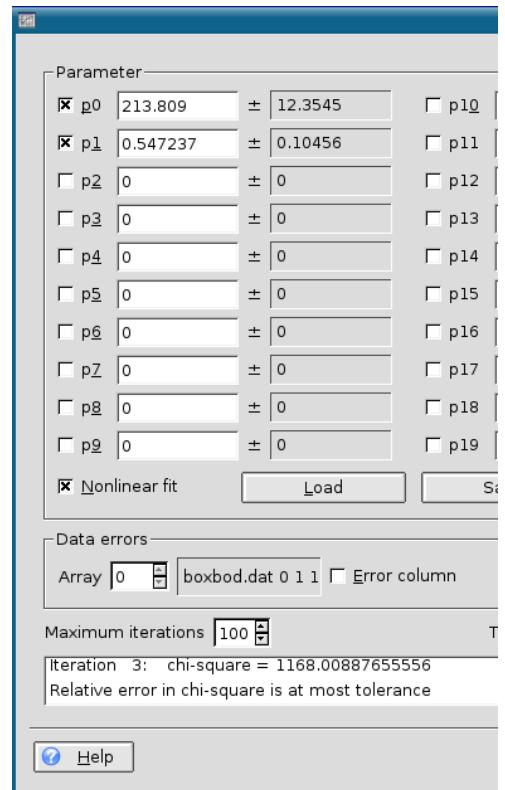


Obrázok 33: Okno položky Function na vykreslenie fitovanej funkcie

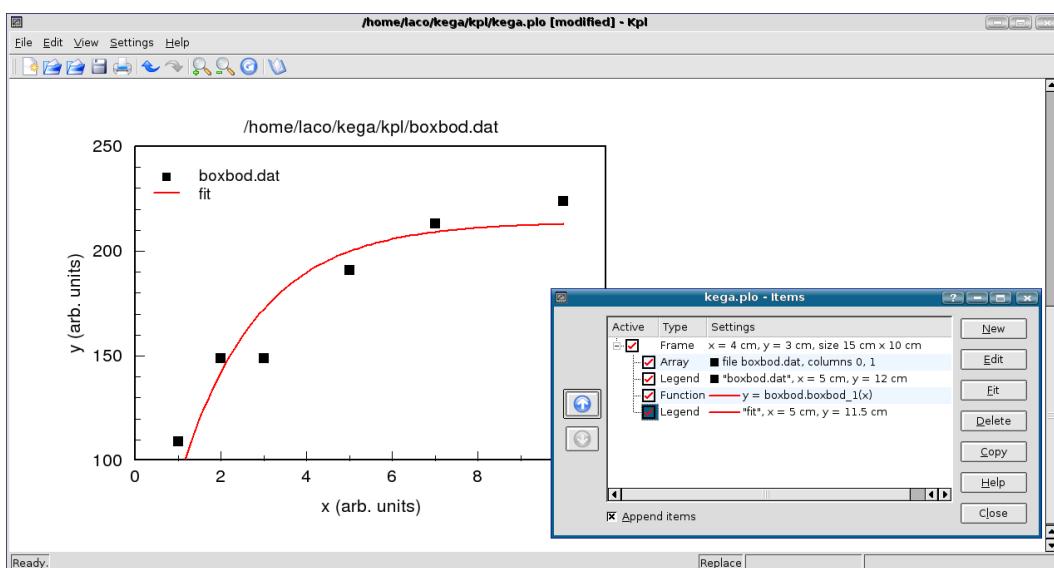
Items (obrázok 31) klikneme na ponuku New a potom na ponuku Function (obrázok 33). Vyhľadáme si našu knižnicu `boxbody.so` a z nej vyberieme funkciu `boxbody_1`, doplníme `xmax` na 10, vyberieme symbol, veľkosť a farbu fitovacej čiary v grafe a výber ukončíme potvrdením Apply a potom OK. Prejdeme opäť do okna Items, kde klikneme na novovytvorenú položku Function a potom na okienko Fit, čím sa nám otvorí okno Parameter fit, pozri obrázok 34. Zaškrtneme ľavé okienka  pre parametre `p0` a `p1` a do pravých vpíšeme ich štartovacie hodnoty, pre `p0=100` a pre `p1=0.75`. Fitovanie bude nelineárne, preto zaškrtneme aj okienko  Nonlinear fit. Kliknutím do položky Model sa otvorí okno Error model function, v ktorom opäť vyhľadáme knižnicu `boxbody.so` a z nej tentoraz vyberieme funkciu `boxbody_2`, ako argument zvolíme `ycolumn`. Kliknutím na položku Edit zadáme štartovacie parametre iteračného procesu (iteračný proces sa ukončí dobre aj so začiatocnými hodnotami `p0=1` a `p1=1`). Výsledné parametre fitovanej funkcie  $y=p[0] * (1 - \exp(-p[1] * x))$  sa vpíšu do príslušných okienok parametrov (obrázok 35). Kliknutím na položku Apply sa vysledok fitovania zobrazí v grafe (obrázok 36). Prácu s fitovaním ukončíme kliknutím na položku OK. Do grafu vložíme legendu, názvy osí a tak ďalej (pozri Kapitolu 5).



Obrázok 34: Výrez okna položky Parameter fit so štartovacími parametrami iteračného procesu fitovania



Obrázok 35: Výrez okna položky Parameter fit s výsledkami iteračného procesu fitovania



Obrázok 36: Výsledný graf s fitovanou krivkou pre dátá boxbd.dat

### 4.2.3 Lineárna regresia funkciou $y = ax$

Podobne ako v programe QtiPlot aj v tejto časti krátko opíšeme postup lineárnej regresie modelovou funkciou

$$y = ax,$$

ktorú použijeme na fitovanie dát Nolnt1 z kolekcie pre lineárnu regresiu už spomenutého inštitútu NIST (2006)<sup>26</sup>, aby sme mohli výsledky oboch programov porovnať.

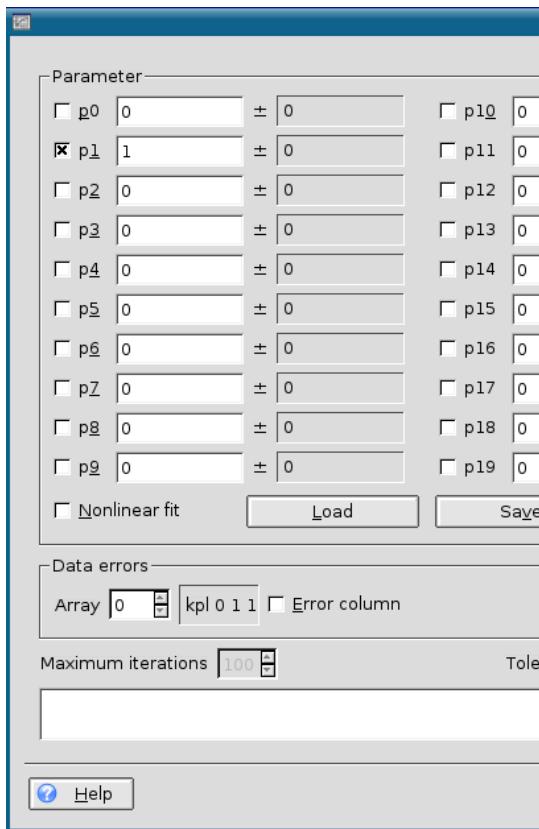
Aj v tomto prípade tabuľku dát môžeme doplniť bodom  $(0, 0)$ , aby sme získali výsledné grafické zobrazenie v takom tvare, aké je na WWW stránke inštitútu NIST. Úpravu prevedieme takto: z ponuky Items označíme položku Array a klikneme na okno Edit. Otvorí sa nám nové okno, v ktorom zaškrtneme okienko  Internal data a potom vyberieme ponuku Edit. Do odsadeného prvého riadka zapíšeme tri nuly s medzerami  $0\text{ }0\text{ }0$ , upravu potvrdíme klikom na Apply a editor zatvoríme klikom na OK.

Získanie optimálneho parametra  $a$  bude jednoduchšie ako v predošлом prípade, lebo môžeme na to použiť zabudovanú funkciu programu Kpl (samozrejme, môžeme si napísat aj vlastnú). Postup bude podobný, ako pri nelineárnej regresii, s tým rozdielom, že na fitovanie použijeme knižnicu fkt.so, z ktorej vyberieme funkciu polynom.

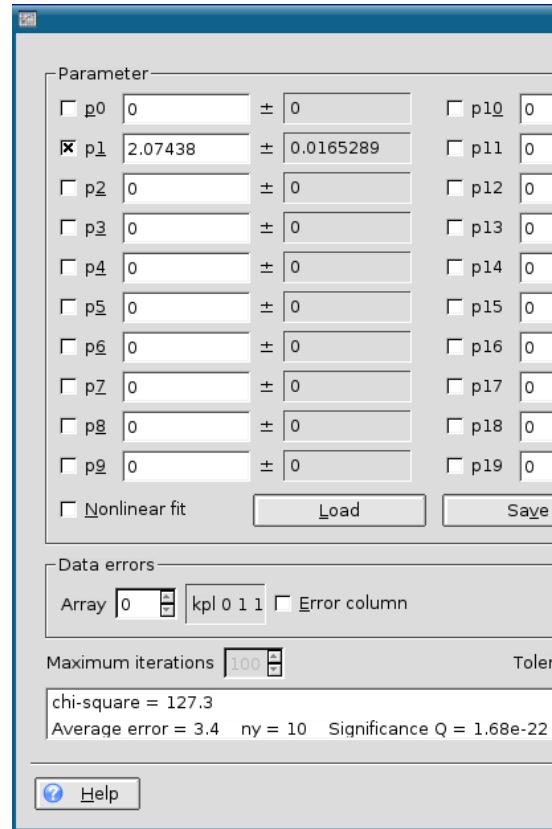
Úprave hodnôt v tabuľke noint1.dat sa však môžeme vyhnúť. Na rozdiel od postupu v prípade úpravy v programe QtiPlot (pozri na strane 53) však nemusíme upravovať žiadnu tabuľku, lebo program Kpl údaje na vykreslenie krivky fitovanej funkcie neukladá do osobitnej tabuľky. Vyvolaním okna položky Items označíme v nej položku Function a klikneme na okno Fit. Otvorí sa nám okno Parameter fit, v ktorom z ľavých okienok pre parametre zaškrtneme len okienko pre parameter  p1, do pravého okienka vpíšeme štartovaci hodnotu p1=1 a okienko  Nonlinear fit zostane nezaškrtnuté, pozri obrázok 37. Výsledky vidíme na obrázku 38 a na obrázku 39.

Vytvorené grafy upravené podľa odporúčaní z kapitoly 5 môžeme uložiť vo formáte \*.ps alebo \*.eps na ďalšie spracovanie (z hlavného menu File → PostScript Output).

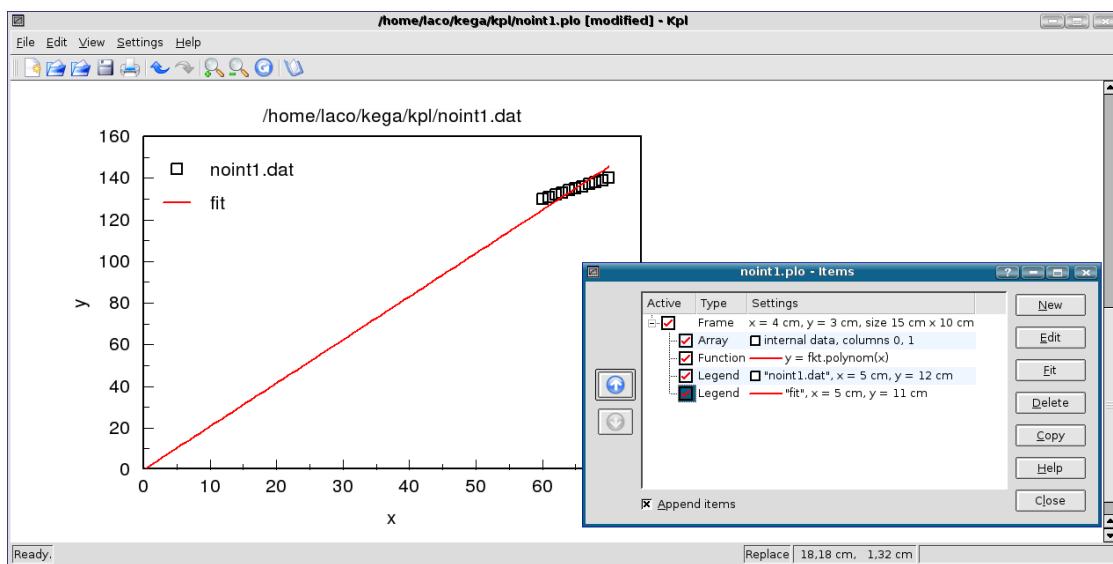
<sup>26</sup> <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/lls.shtml>



Obrázok 37: Výrez okna položky Parameter fit so štartovacím parametrom



Obrázok 38: Výrez okna položky Parameter fit s výsledkom iteračného procesu fitovania



Obrázok 39: Výsledný graf s fitovanou krivkou pre dátá noint1.dat

*Jeden obrázok má hodnotu tisíc slov.*

---

STARÉ ČÍNSKE PRÍSLOVIE

## 5 Niekol'ko pravidiel na tvorbu grafov

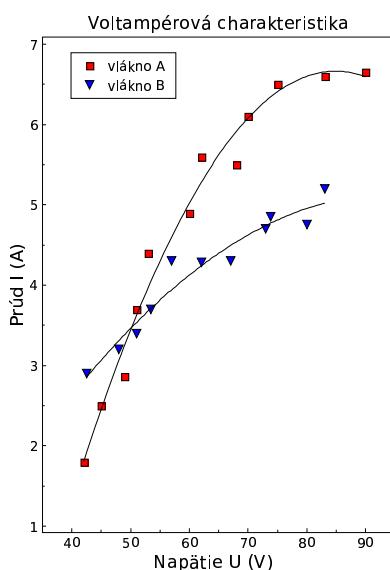
Z precízne vyhotoveného grafu nameranej fyzikálnej závislosti dvoch veličín sa dajú s dostačnou mierou presnosti určiť charakteristiky funkcie. Je možné napr. určiť polohu extrémov, inflexných bodov, pri lineárnej závislosti odčítať z grafu smernicu priamky atď. Graf je vždy názornejší ako tabuľka, tabuľka je však vždy presnejšia. Grafu dávame prednosť, keď chceme ukázať priebeh, tendenciu, štruktúru alebo obrazec.

Dôvod je jednoduchý a spočíva v rýchлом, pohodlnom a názornom prijímaní obrazovej informácie človekom. Dalo by sa povedať, že graf slúži na rýchlu kvalitatívnu orientáciu v nameranej závislosti a ak nás zaujímajú podrobnejšie kvantitatívne údaje, z pamäte počítača si necháme zobraziť tabuľku funkcie resp. analytický predpis, interpolačnú formulu atď. Z dôvodu názornosti je grafické zobrazenie funkcií veľmi časté i vo fyzikálnej literatúre a takmer každá nameraná závislosť je reprezentovaná grafom. Na zhotovenie grafov *nie sú jednoznačné pravidlá* a v každom odbore sú trocha odlišné zvyklosti určené napr. tradíciou, typografickými možnosťami časopisov a pod. Na zrozumiteľný a prehľadný graf budú kladené tieto požiadavky:

1. *Modul stupnice* grafu zvolíme tak, aby graf bol dostatočne veľký, t. j. interval nezávisle premennej má byť zobrazený na „vodorovnej“ osi viac ako na dvoch tretinách „vodorovného“ rozmeru grafu a analogicky interval na „zvislej“ osi. Pod pojmom *modul stupnice* rozumieme podiel intervalu nameraných (v prípade extrapolácie potrebných) hodnôt fyzikálnej veličiny k dĺžke osi, povedzme v mm, na ktorú chceme interval zobraziť. Napr. obrázok 40 znázorňuje graf, v ktorom keď zvolíme dĺžky osí 120 mm bude modul vodorovnej stupnice  $M_1 = (90 V - 40 V) / 120 \text{ mm} = 0,4166 \text{ V/mm}$  a zvislej stupnice  $M_2 = (7 A - 1 A) / 120 \text{ mm} = 0,05 \text{ A/mm}$ .
2. Osi vyznačíme plnou úsečkou a označíme jednotkami v *okruhlej závorke*, v ktorých je fyzikálna veličina vynášaná. Osi nekalibrujeme hodnotami, ktoré sme namerali, ale takými hodnotami, medzi ktorými je ľahká interpolácia.
3. V každom prípade do grafu vhodnými symbolmi vyznačíme namerané hodnoty. Ak je v jednom grafe viac priebehov alebo na jednom papieri viac grafov, pre rôzne priebehy volíme rôzne symboly na označenie nameraných hodnôt (napr. plné body pre jeden

graf, trojuholníky pre ďalší atď.). Od nameraných hodnôt nevedieme na osi žiadne čiary (pozri obrázok 40)<sup>27</sup>.

4. Každý graf opíšeme stručným komentárom, aby bolo jasné, akú závislosť graf vyjadruje.



Obrázok 40: Príklad nakresleného grafu, ktorý znázorňuje voltampérovú (VA) charakteristiku dvoch kovových vláken

Meranie je zaťažené chybami a po vynesení nameraných hodnôt zistíme, že body sú „rozhádzané“. Treba sa rozhodnúť ako preložiť cez namerané body čiaru. Ak sme meranie vyhodnotili metódou najmenších štvorcov a určili parametre z rovníc (35), potom pretabelujeme funkciu  $F^*(x, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_k)$  (Kapitola 2) a túto funkciu vnesieme do grafu. Získame tak jednoznačne určenú (v zmysle vyrovnavajúceho počtu vyrovnavajúcu) hladkú čiaru. Napr. pri lineárnej závislosti  $y = a + bx$  zistíme, že táto priamka neprechádza všetkými nameranými bodmi, ale približne polovica bodov je nad a približne polovica bodov pod priamkou. V ostatných prípadoch, keď nemôžeme použiť vyrovnavajúci počet, nemáme k dispozícii ani opodstatnený návod ako preložiť čiaru cez namerané body, tu záleží veľa od skúsenosti experimentátora. Oblasti zaťažené veľkými chybami sa premerajú znova, hustejšie resp. inými metódami. Čiaru, ktorú narysujeme, sa snažíme viest' tak, aby bola vyrovnaná, t. j. nemala fyzikálne neopodstatnené skoky, zalomenia a extrémy, aby bola dostatočne hladká, aby približne rovnaký počet nameraných bodov bol nad i pod čiarou a súčet štvorcov nameraných hodnôt od čiary by mal byť čo najmenší. Majme stále na pamäti, že čiara v takomto grafe má viac-menej kvalitatívny význam.

Pri dôslednejších experimentoch sa merania v každom bode opakujú za rovnakých podmienok a každý bod v grafe je spracovaný vyššie opísanými metódami pre opakovane merania. V takýchto prípadoch sa zvykne okrem najpravdepodobnejšej hodnoty (nameranej hodnoty) vyznačiť v grafoch aj štandardná neistota pre každý bod zvlášť.

## Zhrnutie

- Obrys grafu nesmie byť nikdy nakreslený hrubšou čiarou, ako čiary v ploche grafu, taktiež úsečky, ktoré vyznačujú chyby meraných hodnôt, nemôžu byť výraznejšie ako vlastné krvinky alebo priamky. Kóty na osiach musia udávať ľahko deliteľné hodnoty.

<sup>27</sup>Tento obrázok bol vytvorený programom QtiPlot, uložený vo formáte EPS a potom programom epstopdf konvertovaný do formátu PDF.

- Do grafu umiestňujeme čo najviac informácií, menej do legendy grafu.
- Dbáme na prehľadnosť grafu a čitateľnosť písma v grafe. Na popis osí sa častejšie používajú verzálky (veľké písmená), pre informácie vpísané do grafu minusky (malé písmená) písma z rodiny Sans Serif.
- Osi grafu nemajú byť dlhšie, ako určuje výskyt pokusných bodov, v grafe teda *nemajú byť prázdne plochy*. Osi nemusia začínať nulovou hodnotou.
- Vhodným tvarom grafu je obvykle štvorec alebo obdĺžnik (na ležato). Uzavretie grafu do štvorca alebo obdĺžnika zjednodušuje určenie hodnôt jednotlivých bodov. Kóty môžeme na protiľahlých osiach opakovať bez doplnenia čísel.
- Poznáme šesť hlavných druhov (typov) grafov:
  - bodový garf (scattergram),
  - čiarový (ariebehový) graf (line graph),
  - stĺpcový graf (bar graph),
  - histogram (vlastne stĺpcový graf so stĺpcami umiestnenými tesne vedľa seba),
  - koláčový diagram (pie graph),
  - trojrozmerný graf (three-dimensional graph).
- Dbáme na to, aby v bodovom a čiarovom grafe boli symboly a charakter jednotlivých čiar ľahko odlíšiteľný aj pri zmenšení tlače. V grafoch pripravovaných na počítači je potrebné správne zadat požadované vzdialenosť a popis kót, zvoliť len výrazné symboly, snažiť sa všetko vyjadriť jednou farbou a pod.

## Záver

Ked' hovoríme o príprave experimentálnych dát na prezentáciu a ďalšie vyhodnocovanie s použitím osobného počítača, potom samozrejme musíme venovať náležitú pozornosť nielen samotným programom, ale aj metódam a postupom spracovania dát.

Opis dvoch známych produktov z tejto oblasti nám v základoch objasnil ich všeobecné aj niektoré špecifické vlastnosti. Domnievame sa, že prvoradým prínosom štúdia tejto príručky sú základné informácie o ovládaní opísaných programov a získane poznatky, ako tvoriť grafické výstupy matematických funkcií a spracovaných experimentálnych dát na ďalšiu kvalitatívnu analýzu prípadne prezentáciu.

Tabuľka 2: Porovnanie parametrov fitovania pre referenčné dáta NIST s hodnotami získanými z programov QtiPlot a Kpl, a a b sú odhadované parametre,  $\sigma_a$  a  $\sigma_b$  sú štandardné neistoty (smerodajné odchýlky) odhadovaných parametrov, RSD je reziduálna štandardná odchýlka (*Residual Standard Deviation*), SQ je suma štvorcov odchýlok (*Sum of Squares*), Chi<sup>2</sup>/doF je redukovaná hodnota  $\chi^2$  a doF znamená *Degrees of Freedom* čiže  $n - k$

		NIST	QtiPlot	Kpl
Nolnt1 $n-k=10$	a	2,074 38	2,074 38	2,074 38
	$\sigma_a$	0,016 53	0,004 63	0,016 53
		RSD = 3,567 53	Chi <sup>2</sup> /doF = 12,7273	chi-square = 127,3
		SQ = 127,272 72	Chi <sup>2</sup> = 127,273	
BoxBOD $n-k=4$	a	213,809 41	213,809 53	213,809 00
	$\sigma_a$	12,354 52	0,722 99	12,354 50
	b	0,547 24	0,547 24	0,547 24
	$\sigma_b$	0,104 56	0,006 12	0,104 56
		RSD = 17,088 07	Chi <sup>2</sup> /doF = 292,002	chi-square = 1168,008 876
		SQ = 1 168,088 77	Chi <sup>2</sup> = 1 168,008	

Podklady k tejto príručke vznikali v priebehu práce autora na projekte KEGA *Využitie open source softvéru vo výučbe na vysokých školách*. Cieľom nebolo vykonanienejakej recenzie, na základe ktorej by sa dali oba programy rigorózne ohodnotiť. Každý z prezentovaných programov má svoje prednosti aj nedostatky (stále sa vyvíjajú a vylepšujú). Porovnanie výsledkov uvedených v tabuľke 2 má čitateľovi oboznámenému s funkčnosťou a hlavnými možnosťami programov uľahčiť rozhodovanie sa, ktorému z nich dá prednosť pri výbere. Pozorný čitateľ, ktorý vyskúšal program QtiPlot podľa nášho postupu (alebo stačí nazrieť do tabuľky 2) si isto všimne, že hodnoty štandardných neistôt, ktoré program vypočíta sú rádovo rozdielne od údajov inštitútu NIST. Je to spôsobené tým, že program QtiPlot počíta redukovanú hodnotu  $\chi^2$  (pozri vzťah 54) označenú ako Chi<sup>2</sup>/doF, kde doF znamená Degrees

of Freedom čiže  $n - k$  a štandardná neistota parametra je určená podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{qti}} = \sqrt{\frac{(\text{cov})_{ii}}{\text{Chi}^2/\text{doF}}} . \quad (70)$$

Na WWW stránke inštitútu NIST sa však dočítame, že ich údaj štandardnej neistoty parametra sa počíta podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{nist}} = \sqrt{(\text{cov})_{ii}} , \quad (71)$$

kde  $(\text{cov})_{ii}$  je v oboch prípadoch kovariančná matica parametrov regresie, pozri napr. v prá-  
cach (PRESS ET AL., 1992; KUDRACIK, 1999). Pri rovnosti kovariančných matíc, potom súvis  
oboch údajov môžeme vyjadriť vzťahom

$$\sigma^{\text{nist}} = \sigma^{\text{qti}} \sqrt{\text{Chi}^2/\text{doF}} . \quad (72)$$

Ked' teda potrebujeme výsledok numerického spracovania dát regresiou programom QtIP-  
lot uviesť so štandardnou neistotou hľadaných parametrov, musíme tento „nedostatok“  
výpočtu programu korigovať použitím vzťahu (72), štandardná neistota parametra regresie  
sa uvádzá v takom tvare, ako na WWW stránke inštitútu NIST.

Mali sme možnosť pracovať aj s programom Origin 6.1<sup>28</sup>, ktorému sa opisovaná verzia QtIP-  
lot 0.8.5 svojimi možnosťami a ponukou najviac približuje. Čo sa týka rozdielu z pohľadu  
bežného používateľa, QtIPlot má menší výber formátov do grafického výstupu. Nepokla-  
dáme to ale za taký veľký nedostatok. Origin 6.1 má však lepšie vypracované možnosti  
napr. ponuky Analysis v grafickom móde a rozšírenejšiu ponuku modulu Non-Linear Curve  
Fit..., lepšiu 3D grafiku a iné, ktoré nám však pri štandardnej práci s programom nebudú  
chýbať. Ako sme už spomenuli, QtIPlot je vo vývoji a neustále sa vylepšuje. V prípade  
uvádzania štandardných neistôt parametrov regresie program Origin ich uvádzá v takej  
forme, ako inštitút NIST. Tento rozdiel medzi programami je snáď jediný vážny nedostatok,  
s ktorým sme sa počas práce s programom QtIPlot stretli.

Záverom ešte jeden postreh, zo skúsenosti odporúčame otvárať uložené projekty programu  
Kpl klikom<sup>29</sup> na súbor s príponou plo. Pri otváraní projektu cez hlavné menu File → Open  
Plot File ... sa grafy v niektorých prípadoch nezobrazia presne tak, ako boli uložené (trochu  
sa posunú vložené texty, legendy a pod.). Tieto nedostatky sú súčasťou formálneho charakteru,  
lebo graf ľahko upravíte do pôvodného stavu (ak si ho ešte s odstupom času pamätáte :-),  
ale dokážu znepríjemniť pôžitok z už vykonanej práce.

Učenie a bádateľská práca je zaujímavá, často aj vzrušujúca činnosť. Ked' ju vykonávame deň  
čo deň tvorivo s láskou aj ako záľubu, prináša nám osobnú radosť i duševné uspokojenie.  
Nevyhne sa však pritom ani rutinnej a mechanickej práci, ktorú môže počítač v značnej  
miere uľahčiť.

<sup>28</sup>Komerčný program, cena aktuálnej verzie Origin 7.5 je asi 19 000,- SKK bez DPH.

<sup>29</sup>Alebo dvojklikom, podľa distribúcie a grafického prostredia OS GNU/Linux.

# CHYBY ELEKTRICKÝCH MERACÍCH PRÍSTROJOV

## Chyby analogových meracích prístrojov

Pre praktickú potrebu bola zvolená a normovaná charakteristika nazývaná *trieda presnosti*  $\delta_{\text{TP}}$ . Trieda presnosti zahrňa všetky chyby samotného prístroja a definuje tak medznú (maximálnu, dovolenú) relatívnu chybu v celom meracom rozsahu prístroja

$$\delta_{\text{TP}} = \frac{|\Delta_{\text{max}}|}{X_{\text{mr}}} 100 \text{ (\%}), \quad (73)$$

kde  $\Delta_{\text{max}}$  je medzná (maximálna) absulútна chyba prístroja a  $X_{\text{mr}}$  je najväčšia hodnota meracieho rozsahu. *Merací rozsah* je časť stupnice meracieho prístroja, na ktorej je možné merat s predpísanou presnosťou. Najväčšia hodnota meracieho rozsahu  $X_{\text{mr}}$  je určená

- hornou hranicou meracieho rozsahu (ked' je dolná hranica nula),
- súčtom oboch medzných hraníc (ked' je nula uprostred stupnice),
- rozdielom hornej a dolnej hranice (ked' je potlačená nula na stupnici).

Ked' má prístroj určitú tiedu presnosti je tým definovaná jeho maximálna dovolená relatívna chyba vyjadrená v % najväčšej hodnoty meracieho rozsahu. Trieda presnosti je uvedená na číselníku každého analogového meracieho prístroja. *Maximálnu absolútnu chybu prístroja* možeme vyjadriť vztáhom

$$\Delta_{\text{max}} = \pm \frac{X_{\text{mr}}}{100} \delta_{\text{TP}}. \quad (74)$$

*Relatívna chyba meraného údaja* je

$$\delta_{\text{rel}} = \pm \frac{\Delta_{\text{max}}}{X_{\text{mh}}} 100 = \pm \delta_{\text{TP}} \frac{X_{\text{mr}}}{X_{\text{mh}}} (\%),$$

kde  $X_{\text{mh}}$  je nameraná hodnota. Z posledného vztáhu je vidieť, že čím menšia je meraná hodnota (čím menšia je výchylka prístroja), tým väčšia bude relatívna chyba merania. Z toho vyplýva, že pri meraní analogovými meracími prístrojmi musíme voliť taký rozsah prístroja, aby jeho výchylka bola čo najväčšia!

## Príklad A

Analogovým voltmetrom s triedou presnosti  $\delta_{\text{TP}} = 1$  sme namerali na rozsahu  $X_{\text{mr}} = 60 \text{ V}$  napäťia  $58 \text{ V}$  a  $5 \text{ V}$ .

Absolútна chyba je pri všetkých meraniach rovnaká a je daná triedou presnosti použitého voltmetu

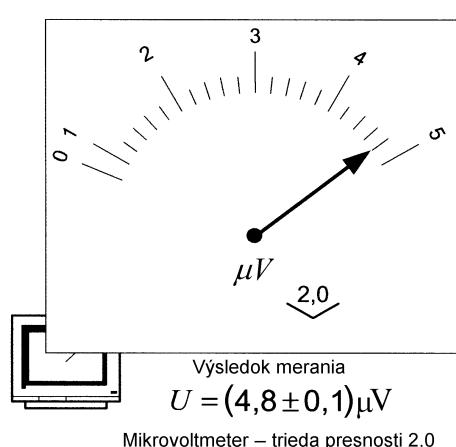
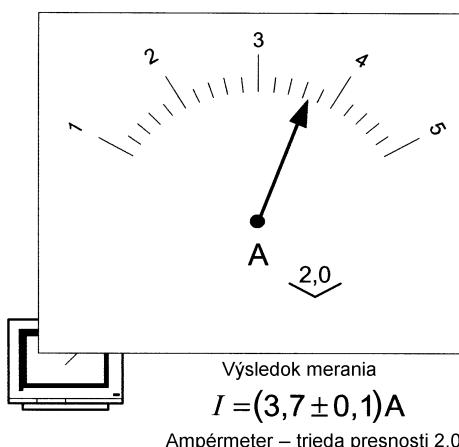
$$\Delta_{\max} = \pm \frac{X_{\text{mr}}}{100} \delta_{\text{TP}} = \pm \frac{60}{100} 1 = \pm 0,6 \text{ V}.$$

To znamená, že prístroj meria s presnosťou  $\pm 0,6 \text{ V}$  na celej stupnici pri meraní napäťa  $58 \text{ V}$  aj pri meraní napäťa  $5 \text{ V}$ . Veľkosti relatívnych chýb údajov budú

$$\delta_{\text{rel}} = \pm \delta_{\text{TP}} \frac{X_{\text{mr}}}{X_{\text{mh}}} = \pm 1 \frac{60}{58} = \pm 1,03 \%,$$

$$\delta_{\text{rel}} = \pm \delta_{\text{TP}} \frac{X_{\text{mr}}}{X_{\text{mh}}} = \pm 1 \frac{60}{5} = \pm 12 \text{ \%}.$$

Vidieť, že so znižovaním výchylky relatívna chyba údaja rýchle rastie, jej závislosť od výchylky je hyperbolická!



Obrázok 41: Na obrázku vidíme príklady zobrazenia hodnoty prúdu a napäťa analogovými meracími prístrojmi s triedou presnosti 2,0. Maximálna absolútna chyba hodnoty merania bola vypočítaná pomocou vzťahu (74)

### Chyby číslicových meracích prístrojov

Číslicové (digitálne meracie prístroje) merajú pomerne dobre len jednosmerné napäťa a prúdy, ostatné veličiny s niekoľkonásobne väčšiou chybou ako presné analogové (ručičkové) meracie prístroje, pretože sa u týchto prístrojov všetky merané veličiny prevádzajú pomocou usmerňovača na jednosmerné napätie. Usmernené napätie sa ďalej digitalizuje pomocou analogovo-číslicového prevodníka (AD). AD prevodníky vnášajú do merania ďalšie chyby. Nemá teda zmysel overovať triedu presnosti analogového meracieho prístroja pomocou bežného vreckového multimetra!

Väčšina výrobcov číslicových prístrojov uvádza presnosť prístroja (tzv. základnú chybu) v tvare  $\delta_{\text{cmp}} = \pm (\delta_{\text{mh}} + d)$ , niektorí v tvare  $\delta_{\text{cmp}} = \pm (\delta_{\text{mh}} + \delta_{\text{mr}})$ , kde

$\delta_{\text{mh}}$  je chyba z nameranej hodnoty, býva vyjadrená v % a je v celom meracom rozsahu konštantná, niekedy sa za ňu pripisuje značka rdg (reading–čítanie),

$\delta_{\text{mr}}$  je chyba z meracieho rozsahu, nemôžeme ju však jednoducho sčítať s chybou z nameranej hodnoty  $\delta_{\text{mh}}$ , ale ju musíme prepočítať na veľkosť nameranej hodnoty  $\left( \delta_{\text{mr}} \frac{X_{\text{mr}}}{X_{\text{mh}}} \right)$ ; niekedy sa za ňu pripisuje značka FS (full scale–plný rozsah),

$d$  je chyba udaná z počtu jednotiek (digitov) posledného miesta displeja. Jej prepočet na chybu z meracieho rozsahu závisí od počtu zobrazovaných miest displeja. Prepočet na percentuálnu chybu z meracieho rozsahu je rovný  $\delta_{\text{mr}} = \frac{d}{\text{max. počet indikovaných jednotiek}} 100 (\%)$ .

Celková relatívna chyba číslicového meracieho prístroja je pri meraní vyjadrená vztáhom

$$\delta_{\text{rel}} = \pm \left( \delta_{\text{mh}} + \delta_{\text{mr}} \frac{X_{\text{mr}}}{X_{\text{mh}}} \right) (\%), \quad (75)$$

kde  $X_{\text{mr}}$  je hodnota meracieho rozsahu a  $X_{\text{mh}}$  je nameraná hodnota.

Súčasné číslicové meracie prístroje majú automatické prepínanie rozsahov, aby bola pri meraní vždy dosiahnutá maximálna presnosť. Podľa maximálneho počtu zobrazených miest zistíme, na ktorom rozsahu multimeter práve meria. Napr. multimeter s maximálnou hodnotou 3 999 prepína pri meraní automaticky rozsahy 400 mV – 4 V – 40 V – 400 V. Multimeter s maximálnou hodnotou 1 999 prepína pri meraní automaticky rozsahy 200 mV – 2 V – 20 V – 200 V. Prepínanie rozsahov na meranie ostatných veličín prebieha podobne. Samozrejme chyby každého multimetra pre jednotlivé rozsahy najdete v návode na používanie meracieho prístroja.

### Príklad B

Číslicový voltmeter má na rozsahu 40 V základnú chybu  $\pm(0,9 \text{ rdg} + 0,1 \text{ FS})$ . Máme zistiť, relatívnu chybu nameraných napäť  $U_1 = 10 \text{ V}$  a  $U_2 = 28 \text{ V}$  na tomto rozsahu.

$$\delta_{\text{rel}}(U_1) = \pm \left( \delta_{\text{mh}} + \delta_{\text{mr}} \frac{X_{\text{mr}}}{U_1} \right) = \pm \left( 0,9 + 0,1 \frac{40}{10} \right) = \pm 1,3 \%,$$

$$\delta_{\text{rel}}(U_2) = \pm \left( \delta_{\text{mh}} + \delta_{\text{mr}} \frac{X_{\text{mr}}}{U_2} \right) = \pm \left( 0,9 + 0,1 \frac{40}{28} \right) = \pm 1,04 \%.$$

### Príklad C

Chyba číslicového multimetra s  $3 \frac{1}{2}$  miestným displejom (maximálna indikovaná hodnota je 1 999) je pre meranie striedavého prúdu udaná v tvare  $\delta_{\text{mh}} = \pm(1,5 \% + 7 \text{ dabit})^{30}$ . Máme zistiť veľkosť relatívnej chyby multimetra, keď meriame na rozsahu 40 A prúd 6 A.

<sup>30</sup> dabit je kombinácia (skupina) dvoch binárnych čísel (digitov) do jednej alebo štyroch kombinácií. Štyri možné stavy pre dabit sú 00, 01, 10 a 11.

Maximálny počet indikovaných jednotiek je 2 000.

$$\delta_{\text{mr}} = \frac{d}{\text{max. počet indikovaných jednotiek}} \cdot 100 = \frac{7}{2\,000} \cdot 100 = 0,35 \text{ \%}.$$

Celková chyba má tvar  $\pm(1,5 \text{ \%} + 0,35 \text{ FS})$ .

Relatívnu chybu určíme zo vzťahu

$$\delta_I = \pm \left( \delta_{\text{mh}} + \delta_{\text{mr}} \frac{X_{\text{mr}}}{X_{\text{mh}}} \right) = \pm \left( 1,5 + 0,35 \frac{40}{6} \right) = 3,83 \text{ \%}.$$

## Použitá literatúra

- BRANDEJS, M. 2003. *Linux – Praktický průvodce*. Brno : Konvoj, 2006, 2. vydanie, ISBN 80-7302-050-5
- BRUNOVSKÁ, A. 1990. *Malá optimalizácia*. Bratislava : Alfa, 1990, ISBN 80-05-00770-1
- BUŠA, J. 2006. *Octave – Rozšírený úvod*. Košice, 2006, ISBN 80-8073-595-6
- DÁVID, A. 1988. *Numerické metódy na osobnom počítači*. Bratislava : Alfa, 1988
- GARCIA, A., L. 2000. *Numerical Methods for Physics*. New Jersey : Prentice-Hall, 2000, ISBN 013-906744-2
- KAUKIČ, M. 1998. *Numerická analýza I. Základné problémy a metódy*. Žilina : MC Energy s. r. o. 1998
- KAUKIČ, M. 2006. *Základy programovania v PyLabe*. Košice, 2006, ISBN 80-8073-634-0
- KUBÁČEK, L. – KUBÁČKOVÁ, L. 2000. *Statistika a metrologie*. Olomouc : Univerzita Palackého v Olomouci, 2000, ISBN 80-244-0093-6
- KUDRACIK, F. 1999. *Spracovanie experimentálnych dát*. Bratislava : Univerzita Komenského, 1999, ISBN 80-223-1327-0
- LYONS, L. 2001. *A Practical Guide to Data Analysis for Physical Science Students*. Cambridge : Cambridge University Press, 2001, ISBN 0-521-42463-1
- MELOUN, M. – MILITKÝ, J. 2004. *Statistická analýza experimentalních dat*. Praha : Academia, 2004, ISBN 80-200-1254-0
- MOLER, C. B. 2004. *Numerical Computing with MATLAB*. Philadelphia : SIAM, 2004, ISBN 0-89871-560-1
- NIST 2006. *National Institute of Standards and Technology. Statistical reference Datasets*. <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/general/dataarchive.html>
- PALENČÁR, R. – VDOLEČEK, F. – HALAJ, M. 2000. AUTOMA, č. 7–8, 2000, str. 50–54, <http://www.automa.cz/>
- PAZOUREK, J. 1992. *Simulace biologických systémů*. Praha : GRADA, 1992, ISBN 80-85623-13-7
- PETROVIČ, P. – NADRCHAL, J. – PETROVIČOVÁ, J. 1989. *Programovanie a spracovanie dát I., II.* Košice : Edičné stredisko UPJŠ, 1989
- PIRČ, V. – BUŠA, J. 2002. *Numerické metódy*. Košice : elfa, 2002, ISBN 80-89066-25-9

- PRESS, W. H. et al. 1992. *Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computing*. New York : Cambridge University Press, 1992, 2<sup>nd</sup> Ed. Kniha v PDF formáte je dostupná na URL adrese: <http://www.nrbook.com/b/bookcpdf.php>
- RIEČANOVÁ, Z. a kol. 1987. *Numerické metódy a matematická štatistiká*. Bratislava : ALFA, 1987
- SQUIRES, G. L. 2001. *Practical Physics*. Cambridge : Cambridge University Press, 2001, ISBN 0-521-77940-5
- ŠESTÁK, Z. 2000. *Jak psát a prednášet o vede*. Praha : Academia, 2000, ISBN 80-200-0755-5
- UHRIN, J. – ŠEVČOVIČ, L. – MURÍN, J. 2006. *Fyzikálne merania*. Košice : elfa, 2006, ISBN 80-8086-032-7
- VDOLEČEK, F. – PALENČÁR, R. – HALAJ, M. 2001(a). *AUTOMA*, č. 10, 2001, str. 52–56, <http://www.automa.cz/>
- VDOLEČEK, F. – PALENČÁR, R. – HALAJ, M. 2001(b). *AUTOMA*, č. 12, 2001, str. 28–33, <http://www.automa.cz/>
- VDOLEČEK, F. – PALENČÁR, R. – HALAJ, M. 2002(a). *AUTOMA*, č. 4, 2002, str. 41–47, <http://www.automa.cz/>
- VDOLEČEK, F. – PALENČÁR, R. – HALAJ, M. 2002(b). *AUTOMA*, č. 5, 2002, str. 42–45, <http://www.automa.cz/>
- ZVÁRA, K. 1989. *Regresní analýza*. Praha : Academia, 1989, ISBN 80-200-0125-5
- ZVÁRA, K. – ŠTĚPÁN, J. 2001. *Pravděpodobnost a matematická statistika*. Bratislava : VEDA, 2001, ISBN 80-2240736-4
- WIMMER, G. – PALENČÁR, R. – WITKOVSKÝ, V. 2001. *Stochastické modely merania*. Bratislava : Grafické štúdio Ing. Peter Juriga, 2001, ISBN 80-968449-2-X
- WOLBERG, J. 2006. *Data Analysis Using the Method of Least Squares. Extracting the Most Information from Experiments*. Heidelberg : Springer-Verlag Berlin, 2006, ISBN 3-540-25674-1

## **Poznámky**

# SPRACOVANIE A VIZUALIZÁCIA EXPERIMENTÁLNYCH DÁT

Krátky úvod

© Ladislav Ševčovič

Oddelenie Európskych Projektov TU v Košiciach

Druhé opravené a doplnené vydanie 2008

Počet strán 84

Elektronická sadzba programom pdfTEX