

[Domovská stránka](#)

[Print](#)

[Titulná strana](#)

[Obsah](#)

[◀◀](#) [▶▶](#)

[◀](#) [▶](#)

[Strana 1 z 101](#)

[Späť](#)

[Celá strana](#)

[Zatvoriť](#)

[Koniec](#)



Slovak
Open Source
Initiative

<http://www.skosi.org>

Táto publikácia vznikla s prispením grantovej agentúry SR KEGA v tematickej oblasti „Nové technológie vo výučbe“ – projekt: 3/2158/04 – „Využitie Open-Source softvéru vo výučbe na vysokých školách“.

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

Recenzovali: RNDr. Jaroslav Skřivánek, PhD.
RNDr. Ján Buša, CSc.

ISBN 80-8073-639-1

Sadzba programom pdfTEX

Copyright © 2006 Ladislav Ševčovič

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

Obsah

Úvod	6
1 Základné pojmy a definície z oblasti neistôt meraní	11
2 Numerické metódy spracovania výsledkov meraní	15
2.1 Lineárna závislosť	19
2.2 Polynomiálna závislosť	21
2.3 Exponenciálna závislosť	22
2.4 χ^2 test kvality fitovania	24
2.5 Interpolácia a extrapolácia	31
3 Program QtiPlot	35
3.1 Ovládacie možnosti programu QtiPlot	35
3.1.1 Menu tabuľkového okna	36
3.1.2 Menu grafického okna	41
3.2 Príklady použitia programu	46
3.2.1 Zadávanie a import dát do tabuľky	46
3.2.2 Vytvorenie a úprava grafu	49
3.2.3 Nelineárna regresia pre súbor boxbcd.dat	51
3.2.4 Lineárna regresia funkciou $y = ax$	55
3.3 Spôsoby zobrazenia viacerých grafov	60
3.3.1 Zobrazenie dvoch priebehov v jednom grafe	63
3.3.2 Zobrazenie dvoch grafov v jednom okne	64

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀](#) [▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 3 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

4 Program Kpl	71
4.1 Ovládacie možnosti programu Kpl	71
4.2 Príklady použitia programu	76
4.2.1 Importovanie dát, ich zobrazenie a úprava grafu	76
4.2.2 Nelineárna regresia pre súbor boxbcd.dat	80
4.2.3 Lineárna regresia funkciou $y = ax$	86
5 Niekol'ko pravidiel na tvorbu grafov	89
Záver	94
Použitá literatúra	98

[Domovská stránka](#)

[Print](#)

[Titulná strana](#)

[Obsah](#)

[◀◀](#) [▶▶](#)

[◀](#) [▶](#)

[Strana 4 z 101](#)

[Späť](#)

[Celá strana](#)

[Zatvoriť](#)

[Koniec](#)

[Domovská stránka](#)

[Print](#)

[Titulná strana](#)

[Obsah](#)

[Strana 5 z 101](#)

[Späť](#)

[Celá strana](#)

[Zatvoriť](#)

[Koniec](#)

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 dostatočne 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) maxím alebo miním funkčnej závislosti.

Grafy taktiež umožňujú veľmi názorne porovnávať experimentálne hodnoty s teoretickou krivkou (závislosťou). Z precízne vyhotoveného grafu nameranej závislosti dvoch veličín

sa dajú s dostatočnou presnosťou určiť napr. charakteristiky funkcie. Môžeme určiť polohu už spomínaných extrémov, inflexných bodov, pri lineárnej závislosti odčítať z grafu smernicu krivky a pod. Na okraj spomenieme, 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 approximácie) 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)¹. 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

¹ 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 licencií garantuje každému právo programy slobodne používať a šíriť ďalej.

- *Veusz,*
- *LabPlot,*
- *Grace (xmGrace),*
- *Scigraphica,*
- *Octave,*
- *PyLab,*
- *QtIPLOT 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 QtIPLOT je vydareným klonom populárneho komerčného programu Origin, ktorým môžete vykonať profesionálnu analýzu experimentálnych dát, nakresliť do grafu zložité funkcie. Grafický výstup je vysokej kvality vhodný na ďalšie spracovanie, napr. programom TeX.

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 8 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

4. Program Kpl je z pohľadu pomeru jednoduchosti ovládania k výkonnosti ojedinelý vo svojej kategórii. Môžeme ho dopĺňať vlastnými knižnicami na fitovanie dát a programovými skriptmi² na vykreslovanie všakovakých funkcií, ktoré sa napíšu a skompilujú v programovacom jazyku C. 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 krátke 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.

²Skripty 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.

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#) Strana [9](#) z [101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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 recenzentom Jaroslavovi Skřivánkovi a Jánovi Bušovi za starostlivé prečítanie rukopisu a cenné prípomienky, ktoré prispeli k spresneniu niektorých formulácií a ku skvalitneniu tejto príručky.³

Košice 2006

L. Ševčovič

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 10 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

³Elektronická verzia príručky, doplnky a opravy sú prístupné na URL adresách <http://people.tuke.sk/ladislav.sevcovic/> a <http://people.tuke.sk/jan.buska/kega/qtiplot>. Prípomienky a návrhy, 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)) <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

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 11 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

- IUPAP International Union of Pure and Applied Physics
- OIML International Organization of Legal Metrology

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 12 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Stručný slovník pojmov

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

- nedokonalosť prístrojov,
- stárnutie a opotrebenie prístrojov, čím sa môžu meniť ich charakteristiky a parametre,
- chyby experimentátora,
- nepresné metódy vyhodnocovania meraní,
- vplyv linearizácie, interpolácie a zaokrúhlňovania,
- zlá kalibrácia, inštalácia alebo umiestnenie prístrojov atď.

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

- štatistickými metódami z nameraných údajov, ktoré sa nazývajú *neistoty stanovené metódou A*, skrátene ich voláme neistoty typu A,
- neistoty získané iným spôsobom ako v predošлом prípade, ktoré sa nazývajú *neistoty stanovené metódou B*, skrátene ich voláme neistoty typu B (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 vyhodnocovania na metódu A a metódu B. Neistoty určené oboma metódami sú rovnocenné, pokiaľ boli určené korektne.

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

Rozptyl je stredná hodnota druhej mocniny odchýlky náhodnej veličiny od jej strednej hodnoty.

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

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

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 13 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

[Domovská stránka](#)

z disperzie resp. z rozptylu; charakterizuje presnosť merania) znamenajú to isté.

Vstupný odhad je výsledok merania vypočítaný z odhadov vstupných dát pomocou funkcie modelu merania.

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

[Print](#)

[Titulná strana](#)

[Obsah](#)

[◀◀](#) [▶▶](#)

[◀](#) [▶](#)

Strana **14** z **101**

[Späť](#)

[Celá strana](#)

[Zatvoriť](#)

[Koniec](#)

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.⁴ 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 prípadoch sa najčastejšie stretнемe s týmito situáciami:

- Fyzikálna interpretácia meranej závislosti nie je dobre prepracovaná, tzn., že v čase konania experimentu neexistuje teoretický model, ktorý by viac-

⁴Metóda pozorovania dáva cenné informácie o vonkajších javoch a vzťahoch (veľkosť, tvar, časová následnosť a pod.). Poznávaciu hodnotu však stráca vtedy, keď sa pýtame na charakter vzťahov alebo na príčinu javov. Hlbšie poznanie skutočnosti umožňuje experimentálna metóda, ktorej použitie znamená cielavedomí zásah do pôvodného stavu zámernou 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. Cvičenie tento rozdiel medzi pozorovateľom a experimentátorom vyjadril takto: „Pozorovateľ prírode načúva, experimentátor ju vypočúva.“ Dáta získané experimentom sa stanú odpoveďou na experimentátorovu otázku len po ich logickom spracovaní, ktoré najčastejšie pozostáva z matematického vyhodnotenia a poznávania, zo zovšeobecnenia zistených faktov.

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. $y = a + bx$. Experiment⁵ lineárnu závislosť potvrdí. Treba nájsť „správne“ hodnoty parametrov, napr. a , b , ktorým môžu odpovedať ďalšie dôležité informácie. Úlohami tohto druhu sa zaoberá vyrovnávací počet. V súčasnej dobe sa široko využíva *metóda najmenších štvorcov*.⁶ Za správne hodnoty sa považujú také hodnoty parametrov, ktoré dávajú *najmenší súčet druhých mocnín odchýlok* medzi nameranými a teoreticky predpovedanými hodnotami. Uvedieme hlavné črty metódy.

Majme nameranú funkčnú závislosť $f_i = f(x_i)$ v bodoch $i = 1, 2, \dots, n$. Teoretický model predpokladá závislosť $F = F(x, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*)$, 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). Odchýlky teoretickej F a experimentálnej funkcie f_i , vypočítané v nameraných bodoch, označíme η_i

$$\eta_i = F(x_i, p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*) - f_i. \quad (1)$$

⁵Experiment môžeme rozdeliť na časti, ktoré sú do istej miery samostatné, voláme ich *pokusy*.

⁶Metódu 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.

Vzhľadom na to, že považujeme kladné odchýlky za rovnako významné ako záporné, uvažujeme druhú mocninu η_i .⁷ Ďalej označíme

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

Úlohou je nájsť také odhady p_1, p_2, \dots, p_k parametrov $p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*$, pre ktoré funkcia Φ (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 ,
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.⁸

Nutnou podmienkou pre minimum je potom splnenie rovnice

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p_j} = 2 \sum_{i=1}^n \eta_i \frac{\partial \eta_i}{\partial p_j} = 2 \sum_{i=1}^n \eta_i \frac{\partial F(x_i, p_1, \dots, p_k)}{\partial p_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, k. \quad (3)$$

⁷Všeobecne sa uvažuje nejaká párná funkcia, t. j. funkcia $f(x)$ taká, že $f(x) = f(-x)$. Druhej mocnine sa dáva prednosť pred absolútnej hodnotou, lebo je to hladká funkcia.

⁸Systematické chyby ovplyvňujú experiment v rovnakom zmysle, ale vo všeobecnosti všetky merania rôznou 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.

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 výhodnocovaní laboratórnych záznamov.

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

Podľa vzťahu (3) máme dva parametre $p_1=a$, $p_2=b$

$$\eta_i = a + bx_i - f_i. \quad (4)$$

Z rovníc (2) a (3) 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

$$a = \frac{s_2 s_3 - s_1 s_4}{\nu}, \quad b = \frac{n s_4 - s_1 s_2}{\nu}. \quad (5)$$

Dá sa ukázať, že pre štandardné neistoty odhadnutých parametrov a a b platia

tieto vzťahy:

$$\sigma_a = \sigma_f^{ab} \sqrt{\frac{s_3}{\nu}}, \quad \sigma_b = \sigma_f^{ab} \sqrt{\frac{n}{\nu}}. \quad (6)$$

V experimentoch však nie vždy poznáme hodnotu štandardnej neistoty σ_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 (1) vzťahom⁹

$$\sigma_f^{ab} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (a + bx_i - f_i)^2}{n - 2}}. \quad (7)$$

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

$$a = \frac{s_4}{s_3}, \quad \sigma_f^a = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (ax_i - f_i)^2}{n - 1}}, \quad \sigma_a = \frac{\sigma_f^a}{\sqrt{s_3}}. \quad (8)$$

⁹V 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).

Print

Titulná strana

Obsah

<< >>

< >

Strana 20 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec

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 (LYONS, 2001; KUDRACIK, 1999; SQUIRES, 2001; PETROVIČ A KOL., 1989)

2.2. Polynomiálna závislosť

Parametrami sú koeficienty v polynóme k -teho stupňa

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

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

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

a podľa rovnice (3) 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

$$\sum_{l=0}^k B_{jl} a_l = y_j, \quad (9)$$

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 (9) je možné riešiť napr. Gaussovou eliminačnou metódou. Pre $k = 1$ dostávame lineárnu závislosť, pre ktorú je riešenie zhodné s rovnicou (5).

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#) [Strana 22 z 101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

2.3. Exponenciálna závislosť

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

a z rovnice (3) dostaneme

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

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \beta} = 2 \sum_{i=1}^n \alpha^2 x_i e^{2\beta x_i} - 2 \sum_i \alpha f(x_i) x_i e^{\beta x_i} = 0,$$

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 Φ budeme hľadať extrém funkcie $\Phi^{(L)}$, v ktorej namiesto F vystupuje $\ln(F)$. Logaritmovaním F dostaneme

$$\ln(F) = \ln(\alpha) + \beta x.$$

Ak označíme $a = \ln(\alpha)$, $b = \beta$, môžeme použiť výsledky rovnice (5) pre lineárnu závislosť.

Poznámka:

Ak použijeme metódu najmenších štvorcov na takto transformovanú nelineárnu funkciu, hľadané parametre nezodpovedajú minimálnemu súčtu štvorcov odchýlok $\sum_{i=1}^n [\ln f_i - \ln F(x_i)]^2$, 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 bodoch krivky; preto treba problém riešiť ako sústavu nelineárnych rovníc. Podľa Brunovskej (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 zavedením štatistickej váhy $w_i = (\sigma_{\ln F}^2 / \sigma_f^2)^{-1}$ do účelovej funkcie (2), ktorá potom nadobudne tvar $\sum_{i=1}^n w_i [\ln f_i - \ln F(x_i)]^2 = \min$.

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 najmenších štvorcov. Aproximácia experimentál-

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

2.4. χ^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 vezmemme do úvahy štandardné (stredné kvadratické) chyby experimentálnych dát. Predpokladajme, že máme k dispozícii n dvojíc meraných hodnôt (x_i, f_i) , pričom chyba veličiny x_i je zanedbateľne malá a chyba merania veličiny f_i je známa, rovná sa σ_{f_i} .

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

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\eta_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{F(x_i, p_1, \dots, p_k) - f_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2, \quad (10)$$

kde σ_{f_i} je chyba merania veličiny f v bode i . Tento výraz sa volá funkcia χ kvadrát (chí kvadrát, χ^2) a metóda najmenších štvorcov, v ktorej sa approximácia dát vykonáva so započítaním chýb meraní sa volá metóda χ kvadrát. Poznamenajme, že χ^2 je opäť funkcia diskrétnej premennej a príspevok jednotlivých členov (rozdielov teoretických a meraných dát) je tým významnejší, čím presnejšie (s menšou

hodnotou σ_{fi}) je zmeraná hodnota f_i . Je teda zrejmé, že keď nepoznáme chyby f_i , nemôžeme vyslovit' žiadnený záver ohľadne kvality fitovania.

Vo všetkých prípadoch χ^2 slúži, ako indikátor zhody medzi experimentálnymi a očakávanými hodnotami nejakej premennej. Pri dobrej zhode bude χ^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 predpokladat', že všetky merania sú zaťažené rovnakými štandardnými chybami σ_{fi} . Potom $\sigma_{fi} = \sigma_f$ (pozri vzťah [7](#)) a v menovateľoch sumy výrazu [\(10\)](#) bude vystupovať pre všetky merania rovnaké σ_f . Po derivovaní vzťahu [\(10\)](#) 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 σ_f , ktoré nie sú obsiahnuté vo vypočítaných parametroch. Vzťah [\(10\)](#) má „väčší“ fyzikálny význam, ako vzťah [\(2\)](#), χ^2 funkcia je bezrozmerná veličina, ktorá sa, ako vidíme, rovná sume štvorcov odchýlok experimentálnych bodov od teoretickej (optimálnej) krivky v násobkoch štandardnej chyby σ_f .

Podmienka „fitovateľnosť“ 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 η_i by mali

splňať rovnicu

$$\eta_i = |y_i - f(x_i)| \approx \sigma_{fi}. \quad (11)$$

Je to len „hrubá“ indikácia, ale vždy je lepšia, ako letmý prelet očami „pozdĺž krivky“. ¹⁰ Ked’ naše kritérium (11) dosadíme do rovnice (10) dostaneme

$$\chi^2 \approx n. \quad (12)$$

Čím viac parametrov bude mať modelová funkcia použitá na fitovanie, tým tesnejšie bude fitovaná krivka sledovať namerané dáta. Fitovanie budeme teda pokladat’ za dobré, ked’ $k = n$. 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

$$\chi^2 \approx n - k, \quad (13)$$

ktoré bude platíť pre jednu sériu meraní. Keby sme mohli zopakovať naše mera-nia nekonečne mnoho ráz a po každej sérii vypočítať χ^2 , potom by sa jej stredná hodnota rovnala $n - k$.

Najčastejšie môžu nastat’ dva prípady:

- (a) ked’ bude $\chi^2 \gg n - k$ nemôžeme vybranú modelovú funkciu $F(x_i, p_k)$ použiť na fitovanie napäťko σ_{fi} sú pre ňu „príliš malé“,

¹⁰Garcia (2000) volá tento prístup *eye-ball*ing a Press (1992) *chi-by-eye*.

Print

Titulná strana

Obsah

<< >>

< >

Strana 26 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec

(b) keď $\chi^2 \ll n - k$ fitovanie pokladáme za *veľmi dobré*, môžeme sa domnievať, že σ_{f_i} sú pre danú modelovú funkciu „dostatočne veľké“.

Vzťah (13) môžeme previesť na vhodnejší tvar, keď zavedieme *redukovanú hodnotu $\tilde{\chi}^2$* (alebo χ^2 na stupeň volnosti), pre ktorú platí

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n - k}. \quad (14)$$

Kedže podľa (13) očakávame hodnotu $n - k$, má byť splnená rovnosť

$$\tilde{\chi}^2 = 1. \quad (15)$$

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 χ^2 štatistiku s prihliadnutím na štatistické vlastnosti dát, ktoré budeme approximovať danou krivkou.¹¹ V krátkosti uvedieme základné myšlienky tohto prístupu.

¹¹Ako príklad nám môže poslúžiť meranie elektrického výkonu na rezistore. Prúd I prechádzajúci 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 odvodene z rozdelenia χ^2 . Takéto rozdelenie má veličina, ktorá je súčtom n kvadrátov nezávislých premenných so štandardným normálnym rozdelením.

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 η_i nezávislé s normálnym rozdelením, s nulovou strednou hodnotou a disperziou η_i^2 . Potom sa suma štvorcov zapísaná v tvare (10) riadi distribučným zákonom známym pod menom χ^2 *rozdelenie* (rozdelenie chí na druhú) s m stupňom voľnosti. Pod stupňom voľnosti rozumieeme počet namenaných bodov n znížený o počet parametrov k (voľných koeficientov): $m = n - k$.¹²

Integrál typu

$$P\left(\chi^2 \geq \chi_0^2\right) = \int_{\chi_0^2}^{\infty} f_m(x) dx, \quad (16)$$

alebo jednoducho $P(\chi^2)$, kde $f_m(\chi^2 = x)$ je hustota rozdelenia pravdepodobnosti pre rôzne stupne voľnosti, dovoľuje vypočítať kritické χ_0^2 pre úroveň $P(\chi^2 \geq \chi_0^2)$. Tieto hodnoty sú často vo forme tabuľiek súčasťou príručiek a učebníc 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 lineárnom závislostou $y = a + bx$, pre ktorú vypočítame parametre a a b . V tomto prípade sa počet stupňov voľnosti rovná $m = 20 - 2 = 18$. Ďalej predpokladajme, že výpočtom podľa vzťahu (10) sme získali hodnotu $\chi^2 = 9$. Z tabuľky 1 pre $P(\chi^2)$ zistíme, že pri $m = 18$ stupňoch voľnosti je pravdepodobnosť získať $\chi^2 \geq 9$ rovná $\sim 95\%$.

¹²Ked' sa chyby meraných hodnôt f_i neriadia normálnym rozdelením, úloha sa stáva ešte zložitejšou. Na jej riešenie sa používa metóda, ktorá sa volá *Metódou najväčzej hodnovernosti*.

Odhýlka 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 lineárной závislosťou). 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 1: Niektoré kritické hodnoty rozdelenia χ^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

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

(pokračovanie tabuľky z predošej strany)

m	P					
	0,99	0,98	0,95	0,9	0,05	0,001
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

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

(pokračovanie tabuľky z predošej strany)

	P					
m	0,99	0,98	0,95	0,9	0,05	0,001
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

2.5. 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 žiadnou 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 prechádzat' veľmi veľa rôznych funkcií. Ak z teórie poznáme funkciu, ktorá má prechádzat' cez namerané body, postupujeme podľa predchádzajúcej kapitoly. V opačnom prípade môžeme funkčnú závislosť medzi meranými bodmi

nahradiť jednoduchými funkciemi, najčastejšie lineárnom, kvadratickom, zriedkavejšie polynomom vyššeho stupňa. Hovoríme o lineárnej, kvadratickej alebo polynomiálnej interpolácii. Pri lineárnej interpolácii dostaneme „lomenú“ spojité funkcie, ktorá však nemá derivácie práve v meraných bodoch. Pri kvadratickej interpolácii môžeme dostať „hladšiu“ krvku, 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 funkciemi.

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

$$f(x_i) = \sum_{j=0}^k a_j x_i^j, \quad i = 1, 2, \dots, k+1. \quad (17)$$

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 bodov 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 začažené neistotami, ktoré sa zvýrazňujú pri výpočte vysokých mocnín hodnôt x_i v (17). 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 začažené určitými nezanedbatelnými 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 approximácie (vyhľadenia šumu) experimentálne získaných dát.

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 nahradíť 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

losti elektrického odporu vodiča v intervale teplôt od 10 °C do 40 °C nameráme lineárnu závislosť a extrapolujeme ju do 100 °C, pričom dodatočným meraním zistíme, že vodič sa roztopil pri teplote 80 °C, takže extrapolácia nad 80 °C je neprípustná.

Numerické metódy uvedené v tejto časti sú základnými metódami, ktoré si každý experimentátor, skôr či neskôr bude nútený osvojiť a začať používať. S rozvojom výpočtovej techniky, programovacích metód a aplikáčného 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`.

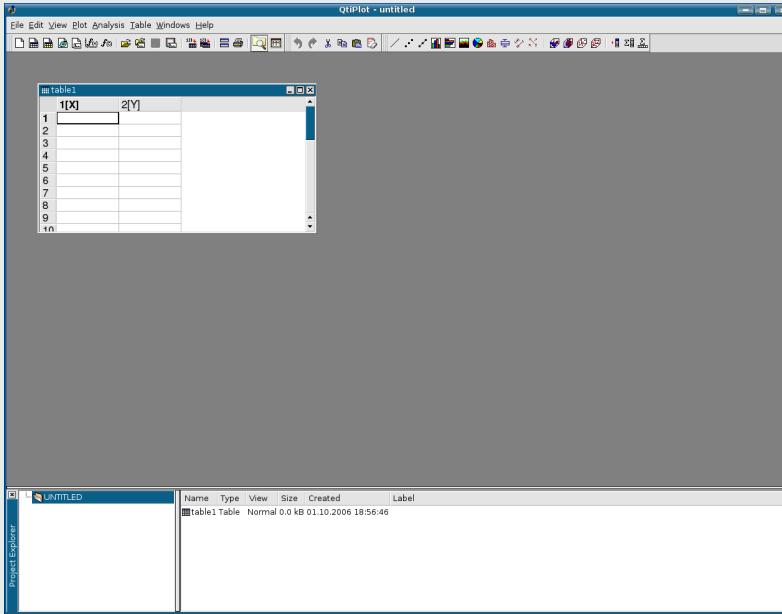
Pri prvom čítaní tejto kapitoly môže čitateľ, ktorý sa chce rýchlo oboznámiť s používaním programu, časť [3.1](#) preskočiť a pokračovať v čítaní časťou [3.2](#) na strane [46](#).

Na obrazovke sa zobrazí tabuľkové okno s príslušnými ponukami a ovládacími prvками (obrázok [1](#)). 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 [1](#)). Ako to vidieť na obrázku, ide o tabuľkové okno. Hlavné menu obsahuje tieto položky:

File Edit View Plot Analysis Tools Window Help



Obrázok 1: Tabuľkové okno programu QtPlot

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

File

New

vytvorenie nového projektu

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)[Strana 37 z 101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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

[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀](#) [▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 38 z 101

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 koncové súradnice vektora
Vectors XYAM	vytvorenie vektorového grafu, prvé dva stĺpce musia obsahovať hodnoty začiatočných súradníc vektora a posledné dva uhol (v radiánoch) a amplitúdu vektora

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 39 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Statistical Graphs
Panel
Plot 3D

štatistické grafy
viac grafov v jednom okne
trojdimenzionálne grafy

[Print](#)

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 tvoriť priamu úmernosť)

[Obsah](#)

Strana 40 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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 vytvorennej maticovej tabuľke a konverziu maticovej tabuľky na XY tabuľku.

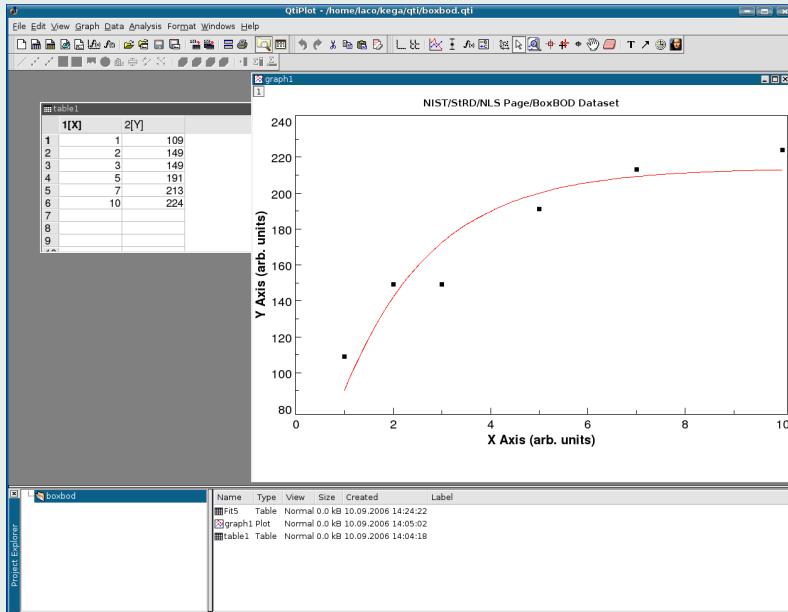
3.1.2. Menu grafického okna

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 2).

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 41 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)



Obrázok 2: Grafické okno programu QtiPlot

V d'álnej 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
Add Function ...
New Legend
Add Text

Draw Arrow/Line
Add time stamp
Add Image
Add Layer
Remove Layer
Arrange Layers

zobrazenie chyby nameraných dát úsečkami
pridanie užívateľom definovanej funkcie
pridanie legendy (obnovenie vymazanej)
pridanie ľubovoľného textu (po kliknutí na
graf sa otvorí okno na editovanie textu)
pridanie šípky alebo úsečky so šípkou
pridanie dátumu a času
pridanie obrázka (jpg, bmp, gif, png a iné)
pridanie nového grafu do grafického okna
odobratie grafu z grafického okna
úprava grafov (písmo, tituly, popis osí, ...)

Data

Disable tools
Zoom
Rescale to show all
Data reader

Select data range

Screen reader

Move data Points ...

zapnutie všeobecného kurzora
zapnutie lupy
prekreslenie grafu do celého okna
kliknutím na bod sa otvorí okno
Data display a zobrazia sa súradnice
umožní kurzorom myši alebo šípkami
klávesnice vybrať určitý rozsah dát
čítač súradníc, otvorí okno Data display
a načíta súradnice hociktorej pozície
v okne grafu
umožní premiestnenie bodov grafu,
zmeny sa prejavia aj v tabuľke

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀](#) [▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 43 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Remove Bad Data Points ... umožní odstránenie bodov z grafu,
y-ové hodnoty bodov sa vymažú
z tabuľky

[Print](#)

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, pásmový priepustný 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

[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 44 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 45 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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 1) 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 boxbody.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

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 46 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

s názvom BoxBOD, ktoré sú zaradené do kategórie s vysokou náročnosťou na spracovanie.¹³ 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 volbe sa údaje prenesú do tabuľky, pozri obrázok 3.

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

Obrázok 3: Tabuľkové okno s importovanými dátami

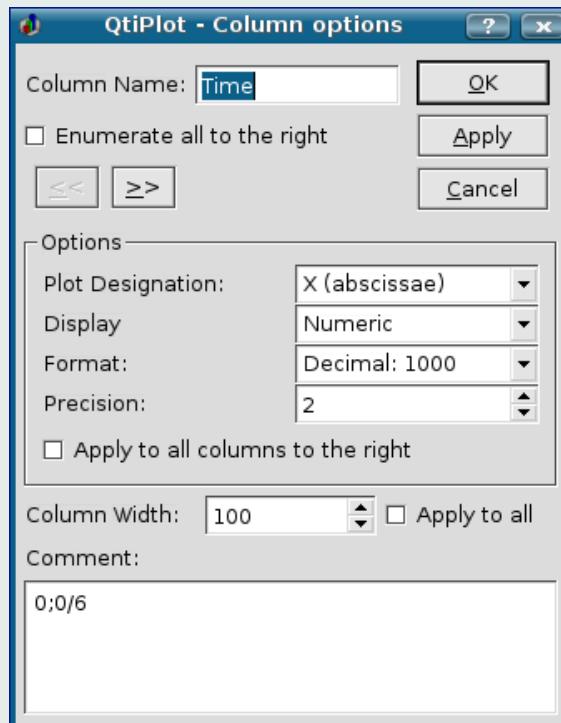
	Time[X]	2[Y]
1	1.00	109
2	2.00	149
3	3.00	149
4	5.00	191
5	7.00	213
6	10.00	224

Obrázok 4: Tabuľkové okno s importovanými dátami, premenovaným prvým stĺpcom a zmenou formátu dát

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

¹³ http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml

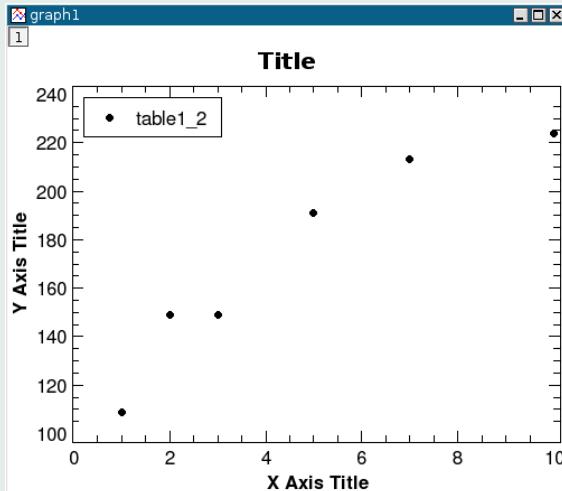
názov stĺpca, počet desatiných miest číselnej hodnoty premennej v stĺpci, šírku stĺpca, názov premennej a iné parametre (obrázok 5). Výsledok úpravy vidíme na obrázku 4.



Obrázok 5: 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 šípok) vyznačíme stĺpce závisle a nezávisle premennej a z hlavného menu zvolíme Plot → Scatter. Vykreslia sa body do grafu s názvom graph 1 (obrázok 6).



Obrázok 6: Zobrazenie dát tabuľky z obrázku 3

z hlavného menu zvolíme Format → Plot ... → Axis a prevedieme požadované

Graf by sme mohli nazvať „surovým“. V tomto grafe je zobrazená legenda a v ľavom hornom rohu grafického okna je okienko [1]. Po kiaľ by sme nevyznačili 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

Print

Titulná strana

Obsah

◀◀ ▶▶

◀ ▶

Strana 49 z 101

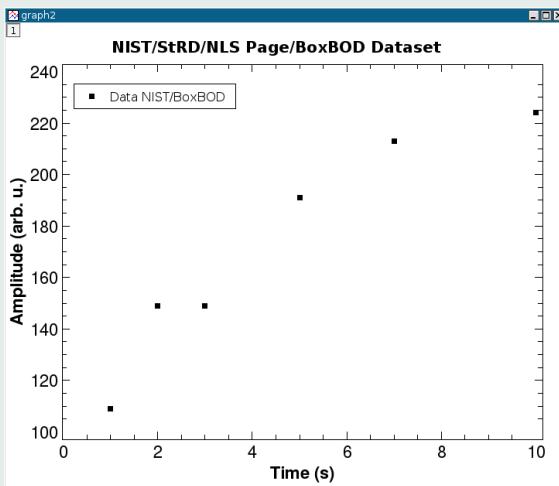
Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec

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 písmo s diakritikou, grécke písmená, symboly a pod., pozri obrázok 11.



Obrázok 7: Upravený graf z obrázku 6

Editáciu názvu ukončíme klikom na položku OK alebo Cancel. Podobným postupom zmeníme aj názvy osí. Dvojklikom na ľubo-volný bod grafu môžeme zmeniť tvar, farbu a veľkosť symbolov na vykreslenie dát. V prípade, že v grafe máme hustú siet' kriviek aj s dátami, odporúča sa toto editovanie vykonáť z hlavného menu Format → Curves ... Opísané úpravy vidíme na obrázku 7.

3.2.3. Nelineárna regresia pre súbor boxbody.dat

Aproximujme dátu znázornené v grafe na obrázku 7 exponenciálnou závislosťou v tvare

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

ktorá je podľa (NIST, 2006) modelovou funkciou pre tieto dátu. 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. boxbody, 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 8. 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 boxbody. V príprave na fitovanie pokračujeme zaškrtnutím políčka 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 9). 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 10).

Výsledky fitovania môžeme vložiť do poľa 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 11 a uvádzame tu aj tabuľku výsledkov:

Print

Titulná strana

Obsah

<< >>

< >

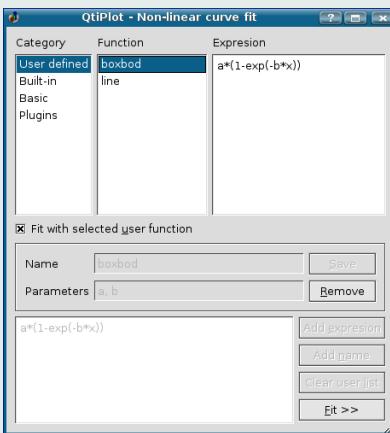
Strana 51 z 101

Späť

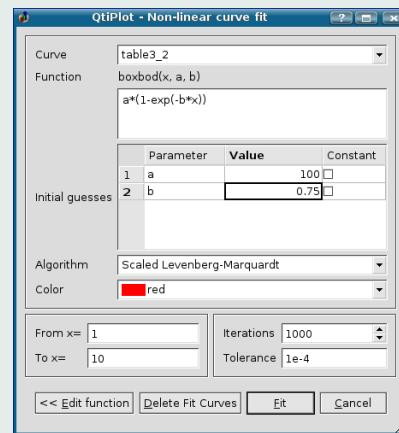
Celá strana

Zatvoriť

Koniec



Obrázok 8: Prvé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá BoxBOD



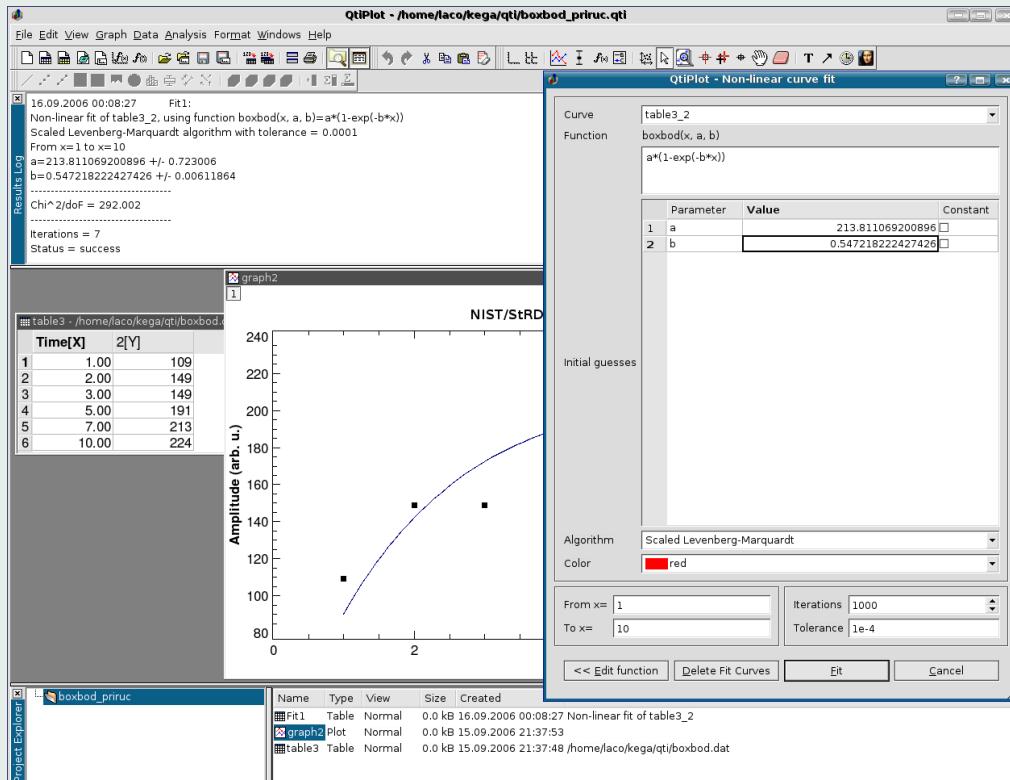
Obrázok 9: Druhé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá BoxBOD

```
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
```

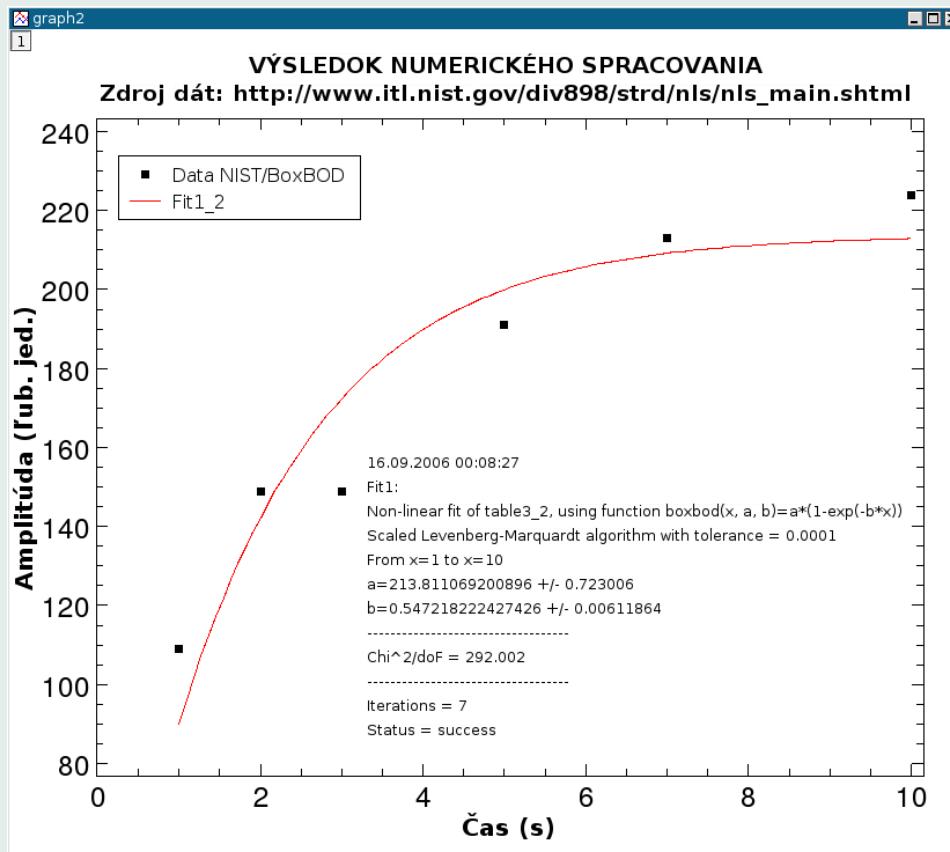
```
Iterations = 7
```

```
Status = success
```



Obrázok 10: Hlásenie programu o ukončení a o výsledkoch fitovania

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 metó-



Obrázok 11: Nelineárna regresia dát BoxBOD exponenciálnou funkciou

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 54 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

dou použitím Levenbergovho-Marquardtovho algoritmu s toleranciou 0.0001. Ďalej sa uvádzajú rozsah nezávislej premennej x , fitované parametre a a b so štandardnými neistotami, hodnota χ^2 , počet iterácií a napokon hlásenie, že proces fitovania bol ukončený úspešne.

3.2.4. Lineárna regresia funkciou $y = ax$

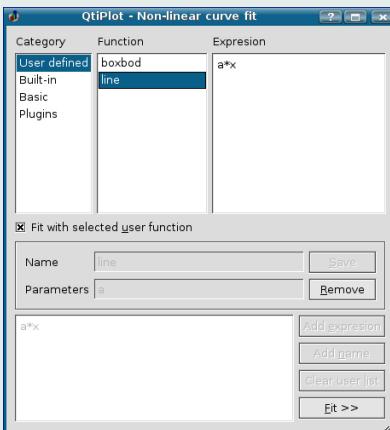
V krátkosti ešte opíšeme postup lineárnej regresie modelovou funkciou

$$y = ax,$$

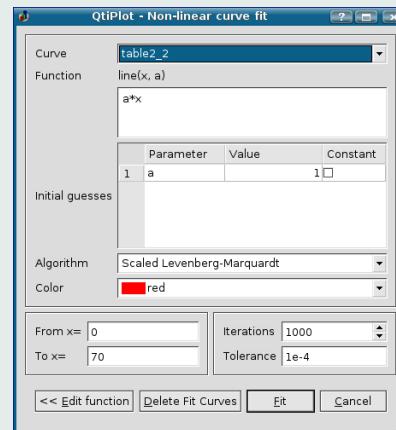
ktorú použijeme na fitovanie dát Nolnt1 z kolekcie pre lineárnu regresiu už spomenutého inštitútu NIST (2006)¹⁴. V položke Analysis máme sice ponuku Fit Linear pre modelovou funkciu $y = a + bx$, ale akosi jej chýba možnosť riešiť prípad, keď parameter $a = 0$. Pomôžeme si teda definovaním vlastnej funkcie $y = a*x$, ktorú nazveme line. Zopakujeme postup, ktorý sme použili v predošлом príklade nelineárnej regresie, výsledok vidíme na obrázkoch 12 a 13. Štartovaciu hodnotu parametra a nachádza implicitnú $a = 1$ a taktiež algoritmus fitovania ponecháme bez zmeny. Jediné čo zmeníme je začiatočná hodnota nezávislej 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 potvrdíme klikom na Apply, postup

¹⁴ <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/lls.shtml>

zopakujeme pre y -ový rozsah. Očakávali sme, že čiara fitu bude predĺžená do začiatku súradnicového systému, nestalo sa tak, pozri obrázok 14.



Obrázok 12: Prvé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátu Nolnt1



Obrázok 13: Druhé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátu Nolnt1

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

1. 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

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[!\[\]\(8d0d187fbabcb7ad93df3b27d28b4c4a_img.jpg\) !\[\]\(ebfff65b753f46c6b394a307c16a0e71_img.jpg\)](#)[!\[\]\(d8cfba92e4e35268b3484856b733339b_img.jpg\) !\[\]\(0a64d68ebdf10ca81c9cf3648bd8b7da_img.jpg\)](#)[Strana 56 z 101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Print

Titulná strana

Obsah

<< >>

< >

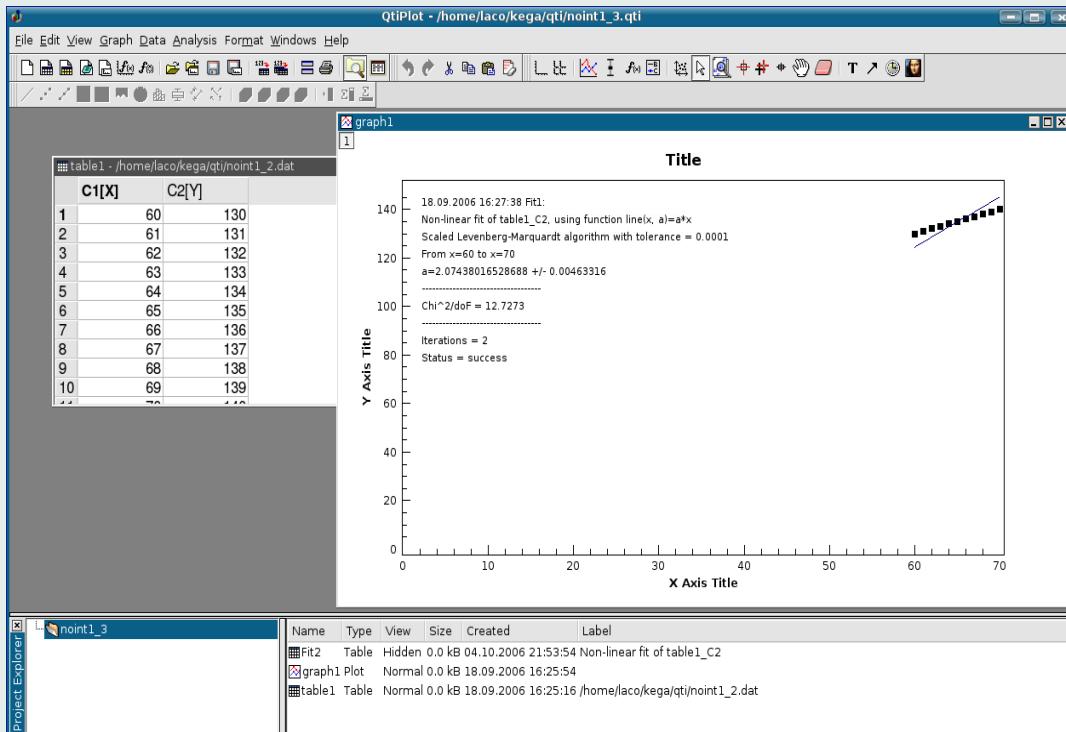
Strana 57 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec



Obrázok 14: Prvé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá Noint1

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 15. 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
```

2. 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“ pridať do tabuľky body a tak ovplyvniť fitovanie. Pripožené výpisy však ukazujú, že v oboch prípadoch sú získané parametre rovnaké. Výpis výsledku fitovania:

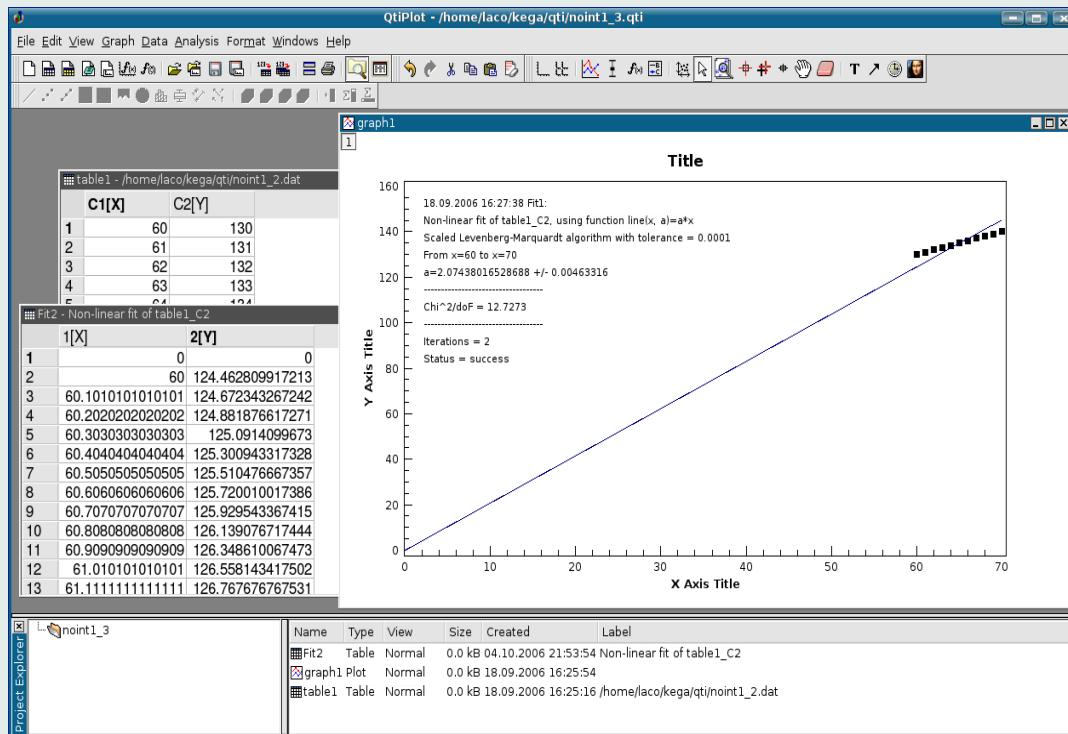
22.01.2006 01:51:44 Fit7:

```
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
```

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 58 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)



Obrázok 15: Druhé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dátá Nolnt1

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)

$$\frac{4}{3}\pi r^3 \rho \frac{dv}{dt} = \frac{4}{3}\pi r^3 g_n (\rho^* - \rho) - 6\pi r \eta v, \quad (18)$$

kde r je polomer guľôčky, v rýchlosť jej pohybu vzhľadom na pokojnú tekutinu, ρ je hustota (objemová hmotnosť) guľôčky, ρ^* je hustota tekutiny, g_n je normálne tiažové zrýchlenie a η 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

$$v = v_0 \left[1 - \exp \left(-\frac{9}{2} \frac{\eta t}{r^2 \rho} \right) \right], \quad (19)$$

$$v_0 = \frac{2 r^2 (\rho^* - \rho) g_n}{9 \eta}.$$

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

Print

Titulná strana

Obsah

◀
▶
◀
▶

Strana 60 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec

vymizne a guľôčka sa bude pohybovať rovnomerne a priamočiaro rýchlosťou v_0 . Časový priebeh zrýchlenia bude rovný prvej derivácií rýchlosťi v podľa času

$$a = a_0 \exp\left(-\frac{9}{2} \frac{\eta t}{r^2 \rho}\right), \quad (20)$$
$$a_0 = \frac{(\rho^* - \rho)g_n}{\rho}.$$

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:

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

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

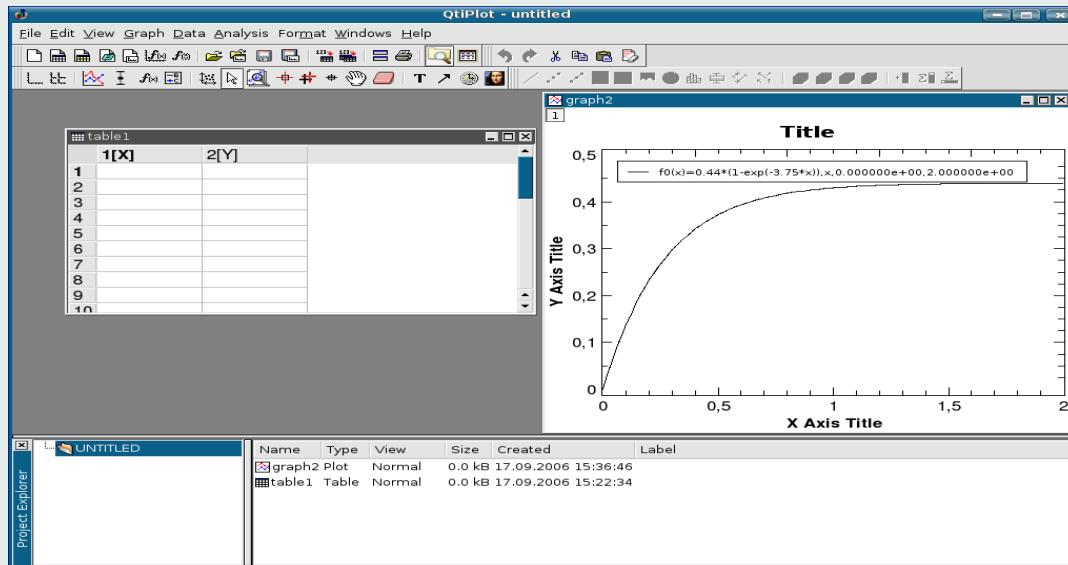
$$\frac{9}{2} \frac{\eta t}{r^2 \rho} = \frac{9 \cdot 10^{-3}}{2(10^{-3})^2 1200} = 3,75 \text{ s}^{-1}$$

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. Za-

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)[Strana 61 z 101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

čneme 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 16.



Obrázok 16: Grafický priebeh vzťahu 19

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 62 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Vypočítané hodnoty potrebujeme uložiť do dátového súboru. Kurzorom 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 oddeľovač stĺpcov a pomenujeme ju rychlosť.dat. Postup zopakujeme na vytvorenie dát zrýchlenia, do okienka $f(x) =$ vložíme $1.65 \cdot \exp(-3.75 \cdot x)$ 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.

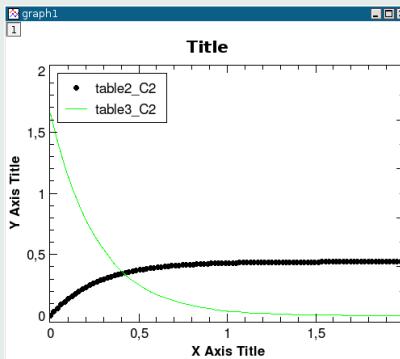
3.3.1. Zobrazenie dvoch priebehov v jednom grafe

Uložené dáta rychlosť.dat a zrychlenie.dat použijeme na vytvorenie dvoch priebehov v jednom grafe. Začneme novým projektom, z ktorého vymažeme prázdnú tabuľku a budeme doňho importovať naše dáta, File → Import ASCII → Multiple files... alebo na nástrojovej lište klikneme na ikonku Import multiple data files

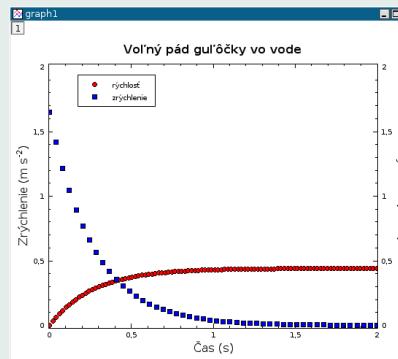


Vyhľadáme naše súbory, pričom súčasným stlačením klávesu Ctrl a klikom myši ich označíme na importovanie. V okne programu budeme mať dve tabuľky table2 s dátami rýchlosťi a table3 s dátami zrýchlenia. Označíme stĺpce tabuľky table2 a z položky Plot hlavného menu vyberieme bodové zobrazenie Scatter, otvorí sa grafické okno s priebehom rýchlosťi. Do tohto grafu chceme vložiť aj priebeh zrýchlenia. Na túto operáciu použijeme postup opísaný v časti 3.2.4 na strane 56. Klikneme teda do okienka ① a v editore Add/Remove curves presunieme dátu

table3 z okna Available data do okna Graph contents. Výsledok vidíme na obrázku 17. Graf upravíme pomôckami z položky Format a projekt nezabudnime uložiť. Upravený graf vidíme na obrázku 18. Pre ďaľšie použitie môžeme graf uložiť v niektorom z grafických formátov cez hlavné menu položkou File → Export Graph → Current, napr. eps.



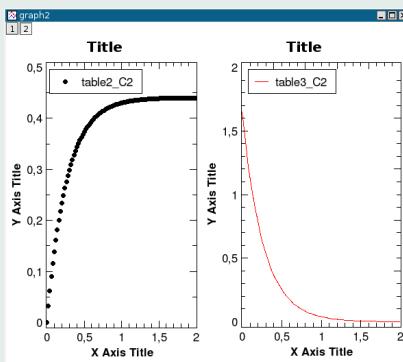
Obrázok 17: Zobrazenie dát zo súčasne importovaných súborov rychlosť.dat a zrychlenie.dat



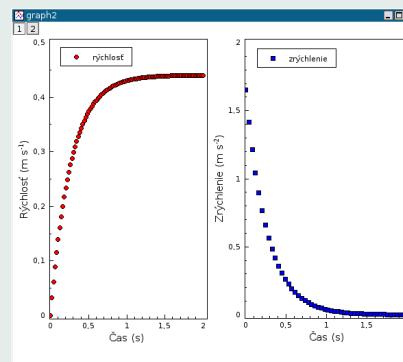
Obrázok 18: Upravený graf z obrázku 17

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,



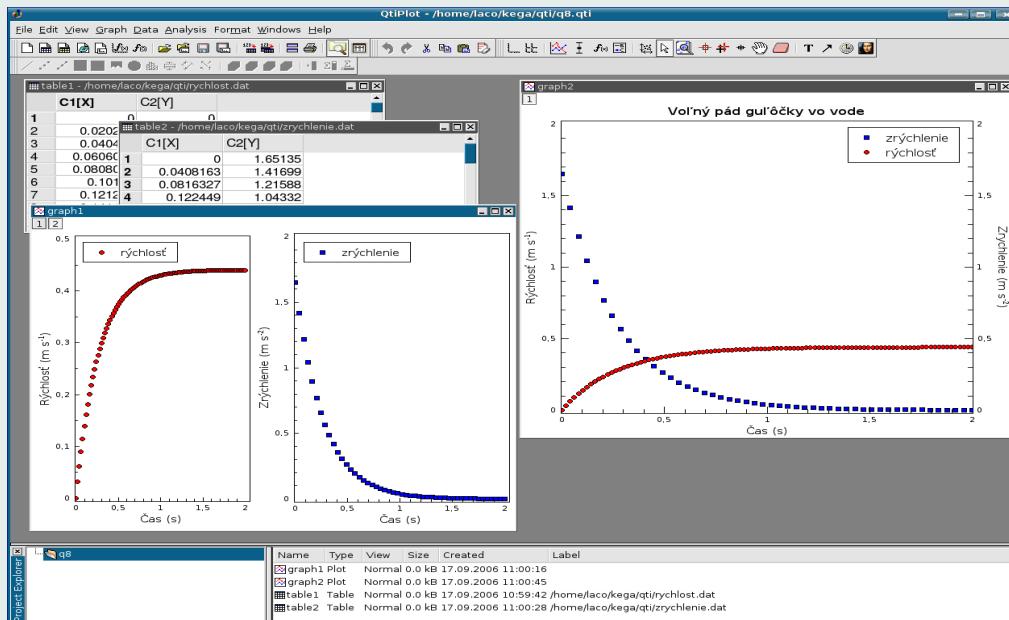
Obrázok 19: Neupravené grafy priebehov rýchlosťi v a zrýchlenia a v jednom grafickom okne



Obrázok 20: Trochu upravené grafy z obrázku 19

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 19. Grafy upravíme pomôckami z položky Format a vytvorený projekt nezabudnime uložiť. Upravené grafy sú na obrázku 20. 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 21 sú oba projekty znázornené v jednom grafickom okne, na postup vyhotovenia pozorný čitateľ už iste príde aj sám.



Obrázok 21: Zobrazenie dvoch grafov v jednom okne a dvoch priebehov v jednom grafe

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.

ZOZNAM MATEMATICKÝCH OPERÁTOROV A FUNKCIÍ PROGRAMU QtiPlot

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)

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

<i>(pokračovanie tabuľky z predošej strany)</i>	
Názov	Popis
\leq	menšie ako alebo rovná sa (vracia 0 alebo 1)
$=$	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)
$\text{abs}(x)$	absolútna hodnota x
$\text{acos}(x)$	arkus kosínus
$\text{acosh}(x)$	arkus hyperbolický kosínus
$\text{asin}(x)$	arkus sínus
$\text{asinh}(x)$	arkus hyperbolický sínus
$\text{atan}(x)$	arkus tangens
$\text{atanh}(x)$	arkus hyperbolický tangens
$\text{avg}(x_1, x_2, x_3, \dots)$	stredná hodnota argumentov
$\text{bessel_j0}(x)$	Besselova funkcia prvého druhu $J_0(x)$ rádu 0
$\text{bessel_j1}(x)$	Besselova funkcia prvého druhu $J_1(x)$ rádu 1
$\text{bessel_jn}(x, n)$	Besselova funkcia prvého druhu $J_n(x)$ rádu n
$\text{bessel_y0}(x)$	Besselova funkcia druhého druhu $Y_0(x)$ rádu 0

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 68 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

(pokračovanie tabuľky z predošej strany)	
Názov	Popis
bessel_y1(x)	Besselova funkcia druhého druhu $Y_1(x)$ rádu 1
bessel_yn(x,n)	Besselova funkcia druhého druhu $Y_n(x)$ indexu n
beta(a,b)	Beta funkcia, $B(a, b) = \Gamma(a) \cdot \Gamma(b) / \Gamma(a + b)$
cos(x)	kosínus x
cosh(x)	hyperbolický kosínus x
erf(x)	chýbová funkcia
erfc(x)	$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x)$
erfz(x)	hustota pravdepodobnosti normálneho rozdelenia $Z(x)$
erfq(x)	koncová časť normálneho rozdelenia $Q(x)$
exp(x)	exponenciálna funkcia so základom e
gamma(x)	funkcia $\Gamma(x)$
gammaln(x)	logaritmus funkcie $\Gamma(x)$
hazard(x)	$h(x) = \text{erfz}(x) / \text{erfq}(x)$ ¹⁵
if(e1,e2,e3)	ked' je e1 pravdivé , výpočíta sa e2 a ešte e3

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

¹⁵V 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. Skřivánek).

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

◀ ▶

◀ ▶

Strana 69 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

(pokračovanie tabuľky z predošej strany)	
Názov	Popis
$\ln(x)$	prirodzený logaritmus x
$\log(x)$	dekadický logaritmus x
$\log_2(x)$	logaritmus x so základom 2
$\min(x_1, x_2, x_3, \dots)$	minimum zo zoznamu argumentov
$\max(x_1, x_2, x_3, \dots)$	maximum zo zoznamu argumentov
$\text{rint}(x)$	zaokruhlenie na najbližšie celé číslo
$\text{sign}(x)$	funkcia znamienka x
$\sin(x)$	sínus x
$\sinh(x)$	hyperbolický sínus x
\sqrt{x}	druhá odmocnina z x
$\tan(x)$	tangens x
$\tanh(x)$	hyperbolický tangens x

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 70 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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 skomplilujú 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 adrese <http://frs106.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/>. Autor Werner Stille ponúka k programu on-line príručku prístupnú na URL adresse <http://frs106.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/book/index.html>. Na prácu v Kpl máme k dispozícii jedno pracovné okno, pozri obrázok 22.

4.1. Ovládacie možnosti programu Kpl

Spustenie Kpl v prostredí OS GNU/Linux sa dá uskutočniť troma spôsobmi:¹⁶

- kliknutie na ikonu Kpl na pracovnej ploche (ked' ju máme vytvorenú),
- Menu → Kancelária → kliknutie na Kpl (ked' sme program inštalovali z deb balíčka),

¹⁶V 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 vytvorennej ikonky s odkazom na binárny súbor kpl.

Print

Titulná strana

Obsah

◀ ▶

◀ ▶

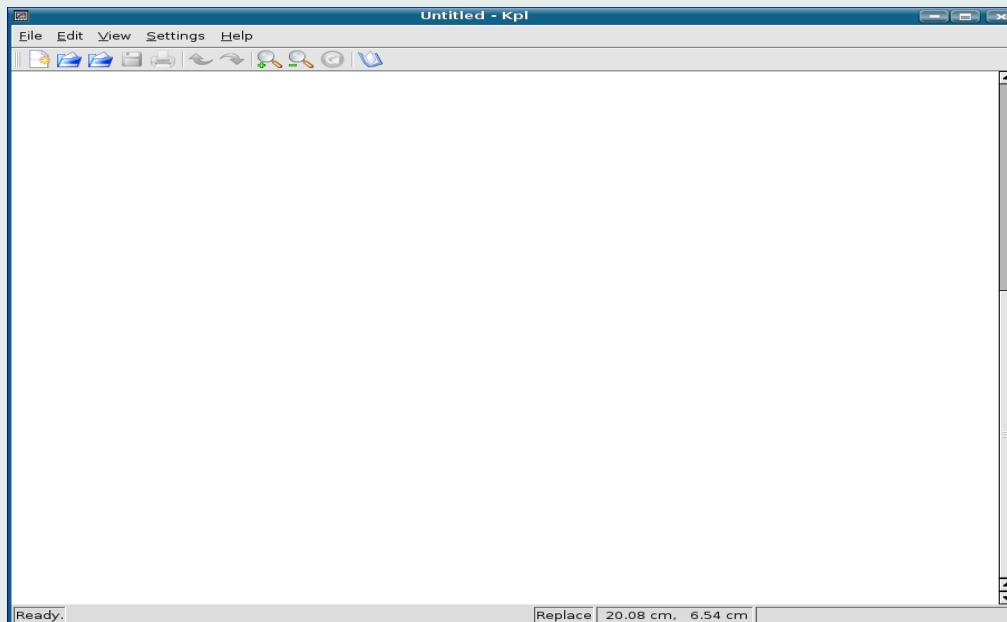
Strana 71 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec

[Domovská stránka](#)[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)[Strana 72 z 101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Obrázok 22: Pracovné okno programu Kpl

- z príkazového riadka X terminálu príkazom kpl.

Na obrazovke sa zobrazí okno programu s príslušnými ponukami a ovládacími prvky v hlavnom menu (obrázok 22). 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 **76**.

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 obnova zobrazeného grafu
PostScript Output	voľba orientácie grafického listu na konverziu;

PostScript Preview	na výšku alebo na šírku voľba orientácie náhľadu grafu;
New Window	otvorenie nového pracovného okna programu
Close Window	zatvorenie aktuálneho pracovného okna
Quit	a ukončenie programu ukončenie práce s programom Kpl

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 74 z 101

Edit

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

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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 súboru po jeho vytvorení |
| Save Absolute Paths | do grafického súboru sa uloží absolútна 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 |

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 75 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

menu

Configure Notifications ...

nastavenie hlásení a varovaní programu

Configure Kpl ...

niektoré základné implicitné nastavenia
programu

Help

Kpl Handbook otvorenie elektronického manuálu, keď je nainštalovaný

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 `boxbody.dat`

Tak, ako v prípade programu QtiPlot, aj program Kpl a jeho funkcia pre-skúšame dátami z internetovej stránky Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických ([NIST, 2006](#)). Stiahnite si dátá z kolekcie

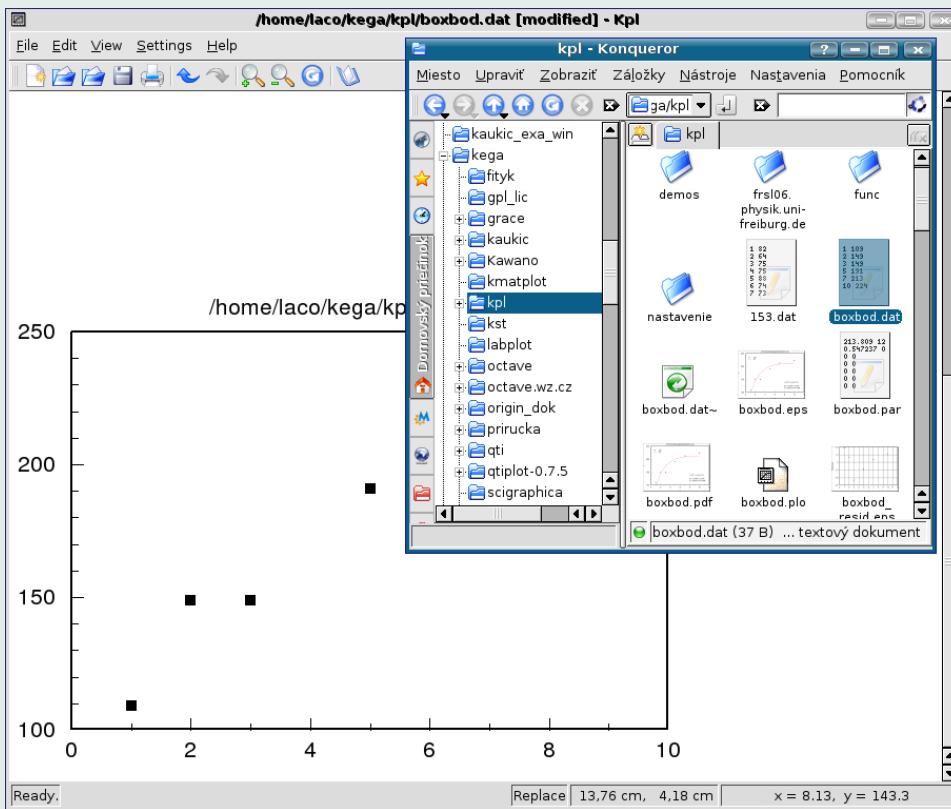
pre nelineárnu regresiu s názvom BoxBOD¹⁷, ktoré sú zaradené do kategórie s vysokou náročnosťou na spracovanie. Tabuľku uložte do dátového súboru s názvom `boxbody.dat`.

Program Kpl má sice vlastný editor tabuľiek, ale s obmedzenými možnosťami formátovania, preto si na vytvorenie tabuľky vyberme 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 *desatininná čiarka* alebo *desatininná 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 táhom ho premiestníme do okna programu Kpl, kde klik uvoľníme (metóda Drag and Drop), pozri obrázok 23.

„Surový“ graf z obrázku 23 budeme upravovať vyvolaním položky Items ... Možeme ju aktivovať dvoma spôsobmi, pravým klikom myši do prázdmeho pola v okne programu (mimo pola grafu) a z kontextového menu vyberieme

¹⁷ http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml



Obrázok 23: Importovanie a zobrazenie dát metódou ľahaj a pust'

Domovská stránka

Print

Titulná strana

Obsah

<< >>

< >

Strana 78 z 101

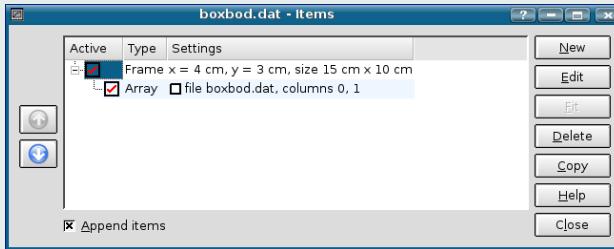
Späť

Celá strana

Zatvoriť

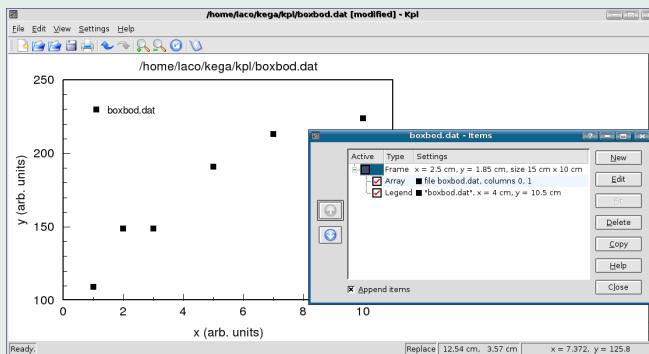
Koniec

žiadanú položku alebo vyvolaním ponúk Edit → Items ..., pozri obrázok 24.



Obrázok 24: Pracovné okno položky Items ...

Po pridaní legendy (výberom New), označení a zmene modulov osí (pozri na strane 90), zmene zafarbenia a symbolov dátových bodov (označením a výberom Edit) dostaneme takýto výsledok:



Obrázok 25: Upravený graf z obrázku 23

4.2.2. Nelineárna regresia pre súbor boxbody.dat

Tak, ako v prípade programu QtiPlot approximujme dátá znázornené v grafe na obrázku 25 exponenciálnou závislosťou v tvare

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

ktorá je podľa (NIST, 2006) modelovou funkciou pre tieto dátá. Program implcitne takúto funkciu neponúka, ale môžeme ju napísat' ako skript v programovacom jazyku C, napr. boxbody.c, a skompilovaním vytvorit' knižnicu (modul) boxbody.so.

Postup je nasledovný: v textovom editore napíšeme napríklad takéto funkcie v jazyku C. Prvá boxbody_1 bude na vykreslenie fitovanej čiary do grafu, druhá boxbody_2 na iteráciu:

```
*****
/*      boxbody.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 boxbody.so boxbody.c -lm */
/*      Do this in a X terminal windows (shell).           */
/*      At the X terminal type:   nm boxbody.so>boxbody.def */
*/
```

Print

Titulná strana

Obsah

<< >>

< >

Strana 80 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec

```
/*
 *      exponential(x, p) calculates of exponential
 *      Returns: p[0] * (1 - exp(-p[1] * x))
 ****
#include <math.h>
 ****
double boxbody_1(double x, const double* p)
{
    return(p[0]*(1-exp(-p[1]*x)));
}
 ****
double boxbody_2(double x, const double* p)
{
    int i;
    double f;
    f = p[0];
    for (i = 0; i < 3; i += 1)
        f == p[i] * (1 - exp(- p[i + 1] * x));
    return f;
}
 ****
```

Súbor uložíme do pracovného priečinka pod menom `boxbody.c` a do príkazového riadku v okne X terminálu najprv napíšeme¹⁸

```
gcc -Wall -fPIC -o boxbody.so boxbody.c -lm
```

¹⁸Súčasťou 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.

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)

Strana 81 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

a stlačním klávesu Enter prebehne komplilácia nášho skriptu do binárnej knižnice `boxbody.so`. Potom napíšeme

```
nm_boxbody.so>boxbody.def
```

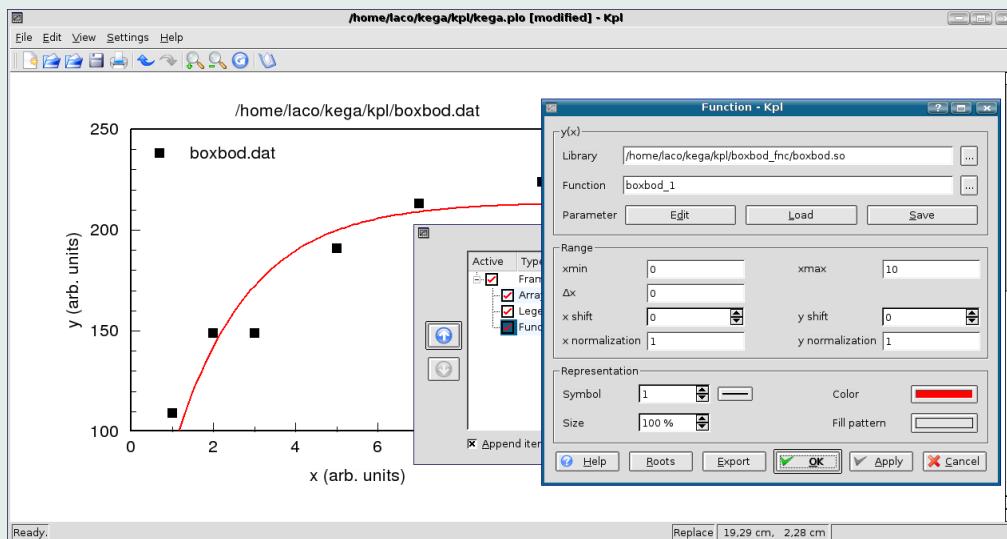
a opäťovným odoslaním sa vytvorí tabuľka symbolov. Dva skompilované súbory `boxbody.so` a `boxbody.def` použijeme na fitovanie, môžeme ich teda presunúť do pracovného priečinka, v ktorom máme ostatné súbory s dátami pre KPL alebo do osobitného podpriečinka, v ktorom budú len knižnice (aj budúce).

Teraz už môžeme začať s fitovaním dát, v okne položky Items (obrázok 24) klikneme na ponuku New a potom na ponuku Function (obrázok 26). Vyhladáme 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 27.

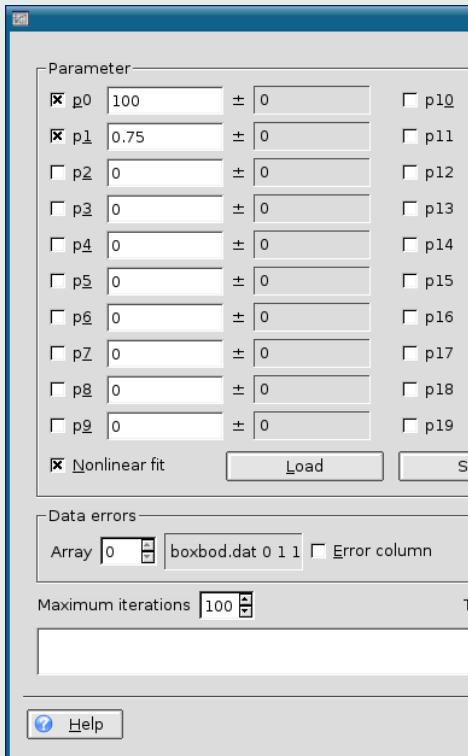
[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀◀](#) [▶▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 82 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

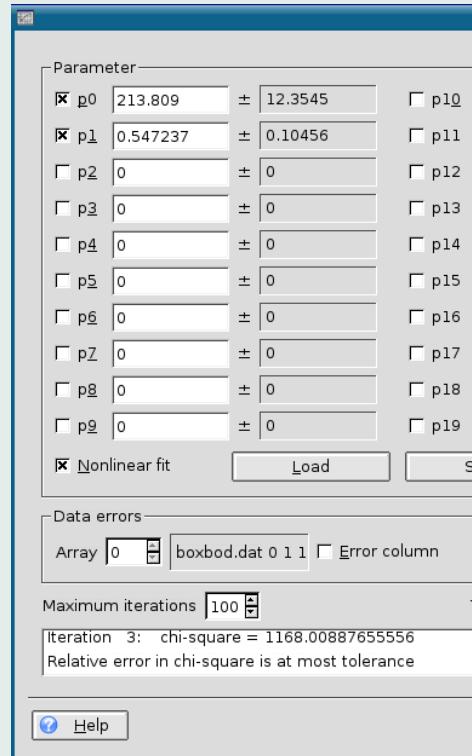
[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[Strana 83 z 101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Obrázok 26: Okno položky Function na vykreslenie fitovanej funkcie



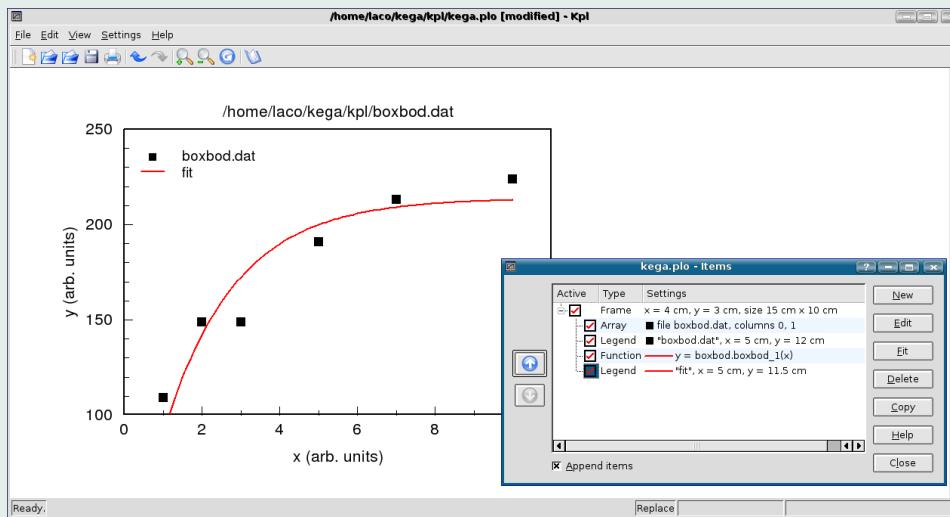
Obrázok 27: Výrez okna položky Parameter fit so štartovacími parametrami iteračného procesu fitovania

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



Obrázok 28: Výrez okna položky Parameter fit s výsledkami iteračného procesu fitovania

zaškrtneme aj okienko Nonlinear fit. Kliknutím do položky Model sa otvorí okno Error model function, v ktorom opäť vyhľadáme knižnicu `boxbod.so` a z nej tentoraz vyberieme funkciu `boxbod_2`, ako argument zvolíme `ycolumn`. Kliknutím na položku Edit zadáme štartovacie parametre iteráčného procesu (iteráčny proces sa ukončí dobre aj so začiatčnými 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 28). Kliknutím na položku Apply sa vysledok fitovania zobrazí v grafe (obrázok 29). Prácu s fitovaním ukončíme kliknutím na položku OK. Do grafu vložíme legendu, názvy osí a tak ďalej (pozri Kapitolu 5).



Obrázok 29: Výsledný graf s fitovanou krivkou pre dátá `boxbod.dat`

4.2.3. Lineárna regresia funkciou $y = ax$

Podobne ako v programe QtiPlot aj na tomto mieste v krátkosti ešte opíšeme postup lineárnej regresie modelovou funkciou

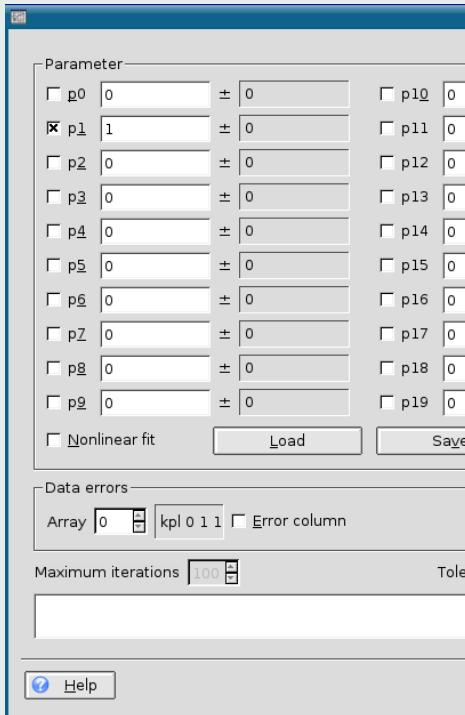
$$y = ax,$$

ktorú použijeme na fitovanie dát Nolnt1 z kolekcie pre lineárnu regresiu už spomenutého inštitútu NIST (2006)¹⁹, aby sme mohli výsledky oboch programov porovnať.

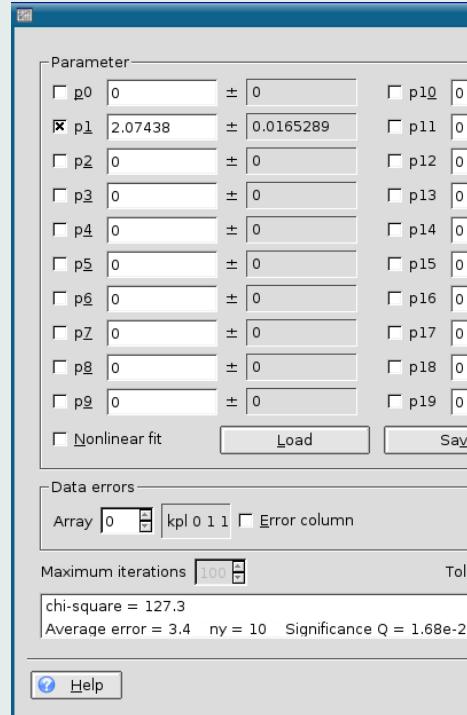
Aj v tomto prípade tabuľku dát môžeme doplniť bodom $(0, 0)$, aby sme získali výsledné grafické zobrazenie v takom tvaru, aké je na WWW stránke inštitútu NIST. Úpravu prevedieme takto: z ponuky Items označíme položku Array a klikneme na okno Edit. Otvorí sa nám nové okno, v ktorom zaškrtneme okienko 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.

¹⁹ <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/lls.shtml>



Obrázok 30: Výrez okna položky Parameter fit so štartovacím parametrom

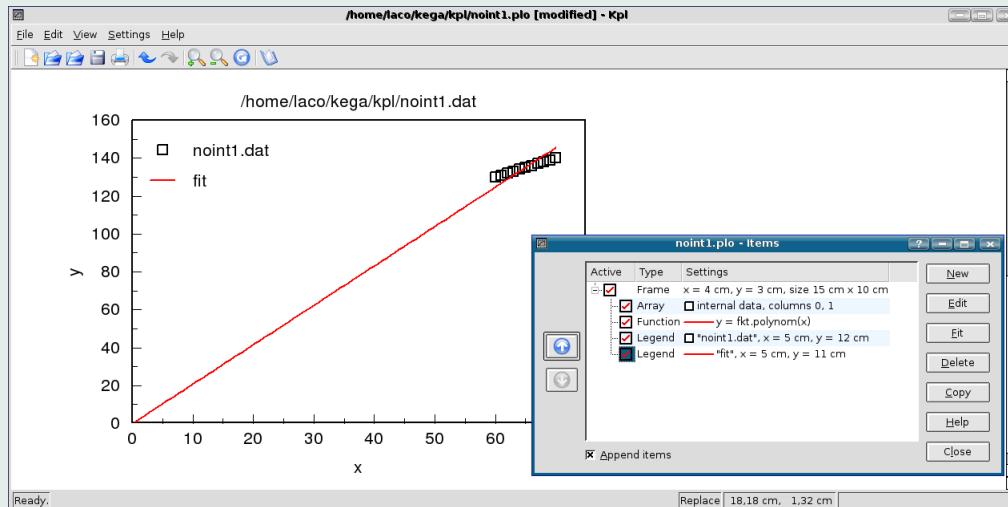


Obrázok 31: Výrez okna položky Parameter fit s výsledkom procesu fitovania

Úprave hodnôt v tabuľke noint1.dat sa však môžeme vyhnúť. Na rozdiel od postupu v prípade úpravy v programe QtiPlot (pozri na strane 56) 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 štartovaciu hodnotu p1=1 a okienko Nonlinear fit zostane nezaškrtnuté, pozri obrázok 30. Výsledky vidíme na obrázkoch 31 a 32.

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



Obrázok 32: 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 dostatočnou 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 zobrazit'. Napr. obrázok 33 znázorňuje graf, v ktorom keď zvolíme dĺžky osí 120 mm bude modul vodorovnej stupnice $M_1 = (90 \text{ V} - 40 \text{ V})/120 \text{ mm} = 0,4166 \text{ V/mm}$ a zvislej stupnice $M_2 = (7 \text{ A} - 1 \text{ A})/120 \text{ mm} = 0,05 \text{ A/mm}$.
2. Osi vyznačíme plnou úsečkou a označíme jednotkami v *okruhnej zátvorke*, 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 33)²⁰.
4. Každý graf opíšeme stručným komentárom, aby bolo jasné, akú závislosť graf vyjadruje.

²⁰Tento obrázok bol vytvorený programom QtiPlot, uložený vo formáte EPS a potom programom epstopdf konvertovaný do formátu PDF.

Print

Titulná strana

Obsah

◀ ▶

◀ ▶

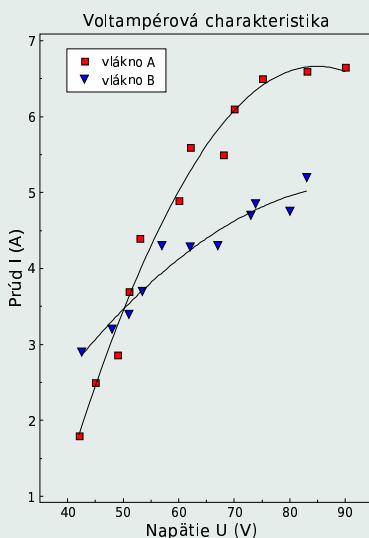
Strana 90 z 101

Späť

Celá strana

Zatvoriť

Koniec



Obrázok 33: Príklad nakreslenej grafu, ktorý znázorňuje voltampérovú (VA) charakteristiku dvoch kovových vláken

rysujeme, 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 čiaru v takomto grafe má viac-menej kvalitatívny význam.

Pri dôslednejších experimentoch sa merania v každom bode opakujú za rovna-

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 (3), potom pretabellujeme funkciu $F(x, p_1, \dots, p_k)$ (Kapitola 2) a túto funkciu vyniesieme 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 na-

kých 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 zvlášt'.

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 krivky alebo priamky. Kóty na osiach musia udávať ľahko deliteľné hodnoty.
- 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 zjednoduší určenie hodnôt jednotlivých bodov. Kóty môžeme na protiľahlých osiach opakovat' bez doplnenia čísel.
- Poznáme šest' 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 odlišiteľný aj pri zmenšení tlače. V grafoch prípravovaných na počítači je potrebné správne zadáť 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 využitie 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. 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.

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀](#) [▶](#)[◀](#) [▶](#)

Strana 94 z 101

[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

Tabuľka 2: Porovnanie parametrov fitovania pre referenčné dátá NIST s hodnotami získanými z programov QtiPlot a Kpl, a a b sú odhadované parametre, σ_a a σ_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^2/dof je redukovaná hodnota χ^2 a dof znamená *Degrees of Freedom* čiže $n - k$

		NIST	QtiPlot	Kpl
NoInt1 $n-k=10$	a	2,074 38	2,074 38	2,074 38
	σ_a	0,016 53	0,004 63	0,016 53
	RSD	= 3,567 53	$\text{Chi}^2/\text{dof} = 12,727\,3$	$\text{chi-square} = 127,3$
	SQ	= 127,272 72	$\text{Chi}^2 = 127,273$	
BoxBOD $n-k=4$	a	213,809 41	213,809 53	213,809 00
	σ_a	12,354 52	0,722 99	12,354 50
	b	0,547 24	0,547 24	0,547 24
	σ_b	0,104 56	0,006 12	0,104 56
	RSD	= 17,088 07	$\text{Chi}^2/\text{dof} = 292,002$	$\text{chi-square} = 1168,008\,876$
	SQ	= 1 168,088 77	$\text{Chi}^2 = 1\,168,008$	

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 χ^2 (pozri vzťah 14) označenú ako Chi^2/dof , kde dof znamená *Degrees of Freedom* čiže $n - k$ a štandardná

neistota parametra je určená podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{qti}} = \sqrt{\frac{(\text{cov})_{ii}}{\text{Chi}^2/\text{dof}}} . \quad (21)$$

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

$$\sigma^{\text{nist}} = \sqrt{(\text{cov})_{ii}} , \quad (22)$$

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

$$\sigma^{\text{nist}} = \sigma^{\text{qti}} \sqrt{\text{Chi}^2/\text{dof}} . \quad (23)$$

Ked' teda potrebujeme výsledok numerického spracovania dát regresiou programom QtiPlot uviesť so štandardnou neistotou hľadaných parametrov, musíme tento „nedostatok“ výpočtu programu korigovať použitím vzťahu (23), štandardná neistota parametra regresie sa uvádzá v takom tvare, ako na WWW stránke inštitútu NIST.

Mali sme možnosť pracovať aj s programom Origin 6.1²¹, ktorému sa opisovaná verzia QtiPlot 0.8.5 svojimi možnosťami a ponukou najviac približuje. Čo sa týka rozdielu z pohľadu bežného používateľa, QtiPlot má menší výber formátov do

²¹Komerčný program, cena aktuálnej verzie Origin 7.5 je asi 19 000,- SKK bez DPH.

grafického výstupu. Nepokladáme 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 uvádza v takej forme, ako inštitút NIST. Tento rozdiel medzi programami je snáď jediný vázny nedostatok, s ktorým sme sa počas práce s programom QtiPlot stretli.

Záverom ešte jeden postreh, zo skúsenosti odporúčame otvárať uložené projekty programu Kpl klikom²² 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 zneprijemniť 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. Nevyhneme sa však pritom ani rutinnej a mechanickej práci, ktorú môže počítač v značnej miere uľahčiť.

²²Alebo dvojklikom, podľa distribúcie a grafického prostredia OS GNU/Linux.

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 [23](#)

BUŠA, J. 2006. *Octave – Rozšírený úvod*. Košice, 2006, ISBN 80-8073-595-6 [8](#)

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 [26](#)

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 [8, 19](#)

KUDRACIK, F. 1999. *Spracovanie experimentálnych dát*. Bratislava : Univerzita Komenského, 1999, ISBN 80-223-1327-0 [21, 96](#)

LYONS, L. 2001. *A practical quide to data analysis for physical science students*. Cambridge : Cambridge University Press, 2001, ISBN 0-521-42463-1 [21](#)

[Print](#)[Titulná strana](#)[Obsah](#)[◀](#) [▶](#)[◀](#) [▶](#)Strana [98](#) z [101](#)[Späť](#)[Celá strana](#)[Zatvoriť](#)[Koniec](#)

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> 9, 11, 46, 51, 55, 76, 80, 86

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 18, 21

PIRČ, V. – BUŠA, J. 2002. *Numerické metódy*. Košice : elfa, 2002, ISBN 80-89066-25-9 19

PRESS, W. H. et al. 1992. *Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computing*. New York : Cambridge University Press, 1992, 2nd Ed. Kniha v PDF formáte je dostupná na URL adrese: <http://www.nrbook.com/b/bookcpdf.php> 26, 29, 96

RIEČANOVÁ, Z. a kol. 1987. *Numerické metódy a matematická štatistiká*. Bratislava : ALFA, 1987 29

SQUIRES, G. L. 2001. *Practical Physics*. Cambridge : Cambridge University Press, 2001, ISBN 0-521-77940-5 21

ŠESTÁK, Z. 2000. *Jak psáť a přednášet o věde*. Praha : Academia, 2000, ISBN 80-200-0755-5

[Domovská stránka](#)

[Print](#)

[Titulná strana](#)

[Obsah](#)

[◀◀](#) [▶▶](#)

[◀](#) [▶](#)

[Strana 100 z 101](#)

[Späť](#)

[Celá strana](#)

[Zatvoriť](#)

[Koniec](#)

UHRIN, J. – ŠEVČOVIČ, L. – MURÍN, J. 2006. *Fyzikálne merania*. Košice : elfa, 2006, ISBN 80-8086-032-7 [60](#)

ZVÁRA, K. – ŠTĚPÁN, J. 2001. *Pravděpodobnost a matematická statistika*. Bratislava : VEDA, 2001, ISBN 80-2240736-4 [29](#)

[Domovská stránka](#)

[Print](#)

[Titulná strana](#)

[Obsah](#)



[Strana 101 z 101](#)

PROGRAMY NA SPRACOVANIE A VIZUALIZÁCIU EXPERIMENTÁLNYCH DÁT

Krátky úvod

© Ladislav Ševčovič

Edícia vysokoškolských učebníč FEI TU v Košiciach

Prvé vydanie 2006

Počet strán **100**

Elektronická sadzba programom pdfTEX

ISBN 80-8073-639-1

[Späť](#)

[Celá strana](#)

[Zatvoriť](#)

[Koniec](#)