PROGRAMY NA SPRACOVANIE
A VIZUALIZÁCIU EXPERIMENTÁLNYCH DÁT
Krátky úvod

Edícia vysokoškolských učebníc FEI TU v Košiciach

Prvé vydanie 2006

Počet strán 74

Elektronická sadzba programom pdfTEX

Vytlačili Východoslovenské tlačiarne, a. s., Košice

ISBN 80-8073-638-3

Edícia vysokoškolských učebníc

Fakulta elektrotechniky a informatiky

Technická univerzita v Košiciach

PROGRAMY NA SPRACOVANIE A VIZUALIZÁCIU EXPERIMENTÁLNYCH DÁT

Krátky úvod

Ladislav Ševčovič

fic Computing. New York : Cambridge University Press, 1992, 2nd Ed. Kniha v PDF formáte je dostupná na URL adrese: `http://www.library.cornell.edu/nr/bookcpdf.html`

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

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

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

UHRIN, J. – ŠEVČOVIČ, L. – MURÍN, J. 2006. *Fyzikálne merania*. Košice : elfa, 2006, ISBN 80-8086-032-7

ZVÁRA, K. – ŠTĚPÁN, J. 2001. *Pravděpodobnost a matematická statistika*. Bratislava : VEDA, 2001, ISBN 80-2240736-4

Obsah

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, zistiť (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 neekvidiš-

pri výbere. Pozorný čitateľ, ktorý vyskúšal program QtiPlot podľa nášho postupu (alebo stačí nazrieť do tabuľky 2) si isto všimne, že hodnoty štandardných neistôt, ktoré program vypočíta sú rádovo rozdielne od údajov inštitútu NIST. Je to spôsobené tým, že program QtiPlot počíta redukovanú hodnotu 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

$$\sigma^{\mathrm{qti}} = \sqrt{\frac{(\mathrm{cov})_{ii}}{\mathrm{Chi\hat{}2/doF}}}\,. \tag{21}$$

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

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

kde $(\mathrm{cov})_{ii}$ 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

$$\sigma^{\mathrm{qti}} = \frac{\sigma^{\mathrm{nist}}}{\sqrt{\mathrm{Chi\hat{}2/doF}}}\,. \tag{23}$$

Keď teda potrebujeme výsledok numerického spracovania dát regresiou programom QtiPlot uviesť so štandardnou neistotou hľadaných parametrov, musíme tento „nedostatok“ výpočtu programu korigovať použitím vzťahu (23), vynásobiť hodnotu σ^{qti} druhou odmocninou z `Chi^2/doF` (štandardná neistota parametra regresie sa uvádza v takom tvare, ako na WWW stránke inštitútu NIST).

Mali sme možnosť pracovať aj s programom Origin 6.1[21], ktorému sa opisovaná verzia QtiPlot 0.8.5 svojími možnosťami a ponukou najviac približuje. Čo sa týka rozdielu z pohľadu bežného používateľa, QtiPlot má menší výber formátov do 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,

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

2. *Oba programy majú prívetivé grafické prostredie, pod ktorým sa skrýva softvér profesionálnej kvality.*
3. *Program* QtiPlot *je vydareným klonom populárneho komerčného programu OriginLab^{TM}, ktorým môžete vykonať profesionálnu analýzu experimentálnych dát, nakresliť do grafu zložité funkcie. Grafický výstup je vysokej kvality vhodný na ďalšie spracovanie, napr. programom TEX.*
4. *Program* Kpl *je z pohľadu pomeru jednoduchosti ovládania k výkonnosti ojedinelý vo svojej kategórii. Môžeme ho dopĺňať vlastnými knižnicami na fitovanie dát a programovými skriptmi[2] na vykresľovanie 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 sústreďuje na jednu tému.

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

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

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

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

   - histogram (vlastne stĺpcový graf so stĺpcami umiestnenými tesne vedľa seba),
   - koláčový diagram (pie graph),
   - trojrozmerný graf (three-dimensional graph).
- Dbáme na to, aby v bodovom a čiarovom grafe boli symboly a charakter jednotlivých čiar ľahko odlíšiteľný aj pri zmenšení tlače. V grafoch pripravovaných na počítači je potrebné správne zadať požadované vzdialenosti a popis kót, zvoliť len výrazné symboly, snažiť sa všetko vyjadriť jednou farbou a pod.

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 merararaní*. Za hlavný dokument je možné považovať predovšetkým smernicu, ktorá bola vydaná pod názvom *Guide to Expression of the Uncertainty of Measurement (GUM)* (ISO, Switzerland 1995) medzinárodnými metrologickými orgánmi v roku 1993, korigovaná a doplnená v roku 1995. Pre prírodovedcov bude iste zaujímavé navštíviť WWW stránku Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006) `http://physics.nist.gov/cuu/Uncertainty/basic.html`, ktorá prináša základné informácie o neistotách a ich vyjadrovaní.

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

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

Stručný slovník pojmov

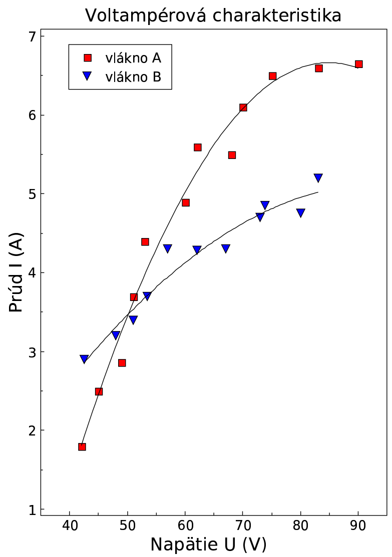
Chyba, máme tu ma mysli chybu meracieho prístroja, ktorá má svoj pôvod v konštrukčnom usporiadaní, v konečnom delení stupnice meraných hodnôt a pod. Základnými zdrojmi chýb sú:

- nedokonalosť prístrojov,
- stárnutie a opotrebenie prístrojov, čím sa môžu meniť ich charakteristiky a parametre,

jeme 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.



Obrázok 33: Príklad nakresleného grafu, ktorý znázorňuje voltampérovú (VA) charakteristiku dvoch kovových vlákien

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 pretabelujeme funkciu $F(x, p_1, \ldots, p_k)$ (Kapitola 2) a túto funkciu vynesieme do grafu. Získame tak jednoznačne určenú (v zmysle vyrovnávajúceho počtu vyrovnávajúcu) 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 vyrovnávajúci počet, nemáme k dispozícii ani opodstatnený návod ako preložiť čiaru cez namerané body, tu záleží veľa od skúsenosti experimentátora. Oblasti zaťažené veľkými chybami sa premerajú znova, hustejšie resp. inými metódami. Čiaru, ktorú narysujeme, sa snažíme viesť tak, aby

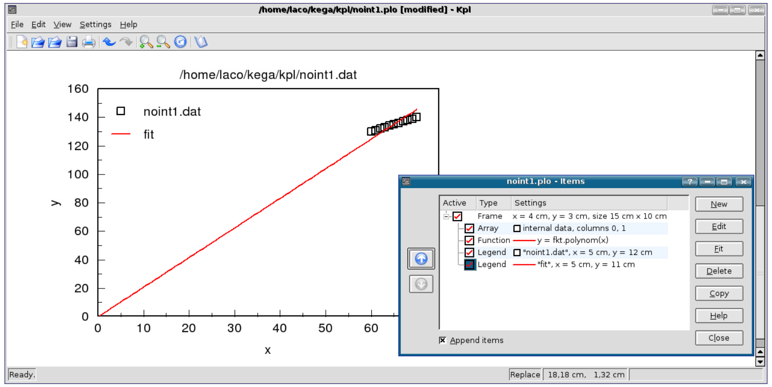
[20] Tento obrázok bol vytvorený programom QtiPlot, uložený vo formáte EPS a potom programom epstopdf konvertovaný do formátu PDF.

mocnina 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.

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 dáta noint1.dat

Tvrdím len, že v každom štúdiu prírody je len toľko vlastnej vedy, koľko 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 opísať,

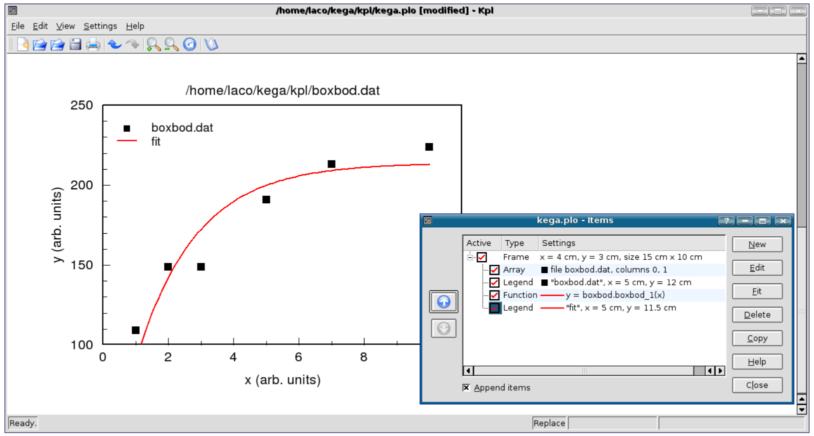
(d) parametre modelov majú obyčajne definovaný fyzikálny význam,

(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 spojitá funkčná závislosť jednej veličiny od druhej veličiny. Napr. teplotnú závislosť odporu, zá-

[4] *Metóda 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 cieľavedomí 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. Cavier 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.*

slušných okienok parametrov (obrázok 28). Kliknutím na položku Apply sa vysledok fitovania zobrazí v garafe (obrázok 29). Prácu s fitovaním



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

ukončíme kliknutím na položku OK. Do grafu vložíme legendu, názvy osí a tak ďalej (pozri Kapitolu 5).

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 NoInt1 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 tvare, aké je na WWW stránke inštitútu NIST. Úpravu prevedieme takto: z ponuky Items označíme položku Array a klikneme na okno Edit. Otvorí sa nám nové okno, v ktorom zaškrtneme okienko ☒ Internal data a potom vyberieme ponuku

[19] `http://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/lls.shtml`

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

$$\Phi = \sum_{i=1}^{n} \eta_i{}^2. \tag{2}$$

Úlohou je nájsť také odhady $p_1, p_2, \ldots, p_k$ parametrov $p_1^*, p_2^*, \ldots, p_k^*$, 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

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

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

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

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

$$\eta_i = a + bx_i - f_i. \tag{4}$$

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

[8] Systematické 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.

```
  f = p[0];
  for (i = 1; i < 8; i += 2)
    if (p[i])
      f += p[i] * (1 - exp(- p[i + 1] * x));
  return f;
}
/*****************************************************************/
```

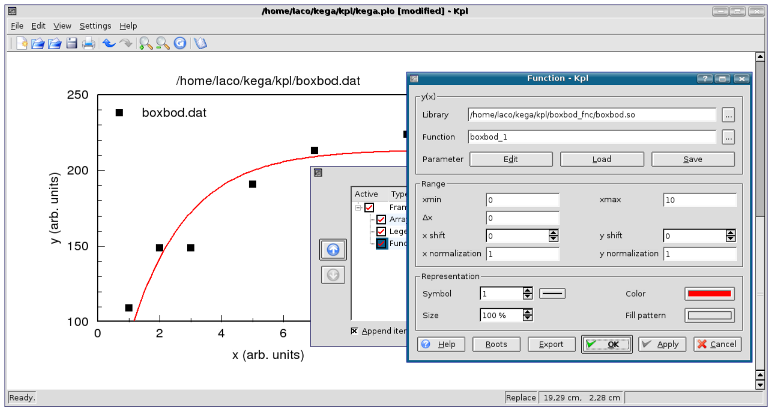
Súbor uložíme do pracovného priečinka pod menom `boxbod.c` a do príkazového riadka v okne X terminálu najprv napíšeme[18]

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

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

`nm␣boxbod.so>boxbod.def`

a opätovným odoslaním sa vytvorí tabuľka symbolov. Dva skompilované súbory boxbod.so a boxbod.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



Obrázok 26: Okno položky Function na vykreslenie fitovanej funkcie

položky Items (obrázok 24) klikneme na ponuku New a potom na ponuku

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

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

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

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

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

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 $a_0, \ldots, a_k$

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

kde

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

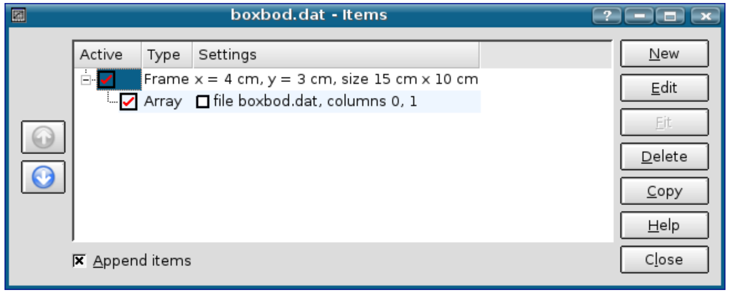
Sústavu (9) je možné riešiť napr. *Gaussovou eliminačnou metódou*. Pre $k=1$ dostávame lineárnu závislosť, pre ktorú je riešenie zhodné s rovnicou (5).

2.3 Exponenciálna závislosť

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

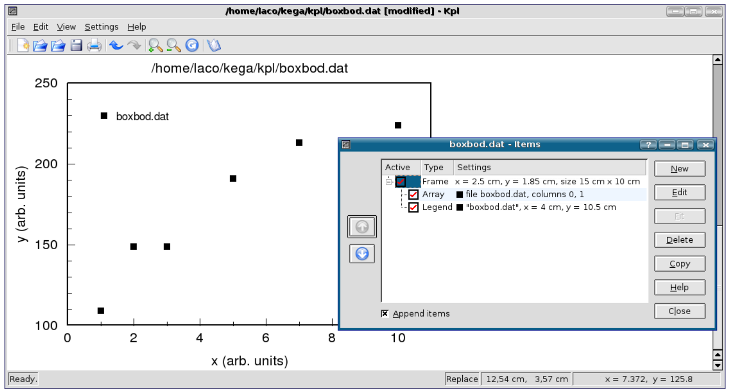
ho premiestnime do okna programu Kpl, kde klik uvoľníme (metóda Drag and Drop), pozri obrázok 23.

„Surový“ graf z obrázku 23 budeme upravovať vyvolaním položky Items ... Možeme ju aktivovať dvoma spôsobmi, pravým klikom myši do prázdmeho poľa v okne programu (mimo poľa grafu) a z kontextového menu vyberieme 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 65), zmene zafarbenia a symbolov dátových bodov (označením a výberom Edit) dostaneme takýto výsledok:



Obrázok 25: Upravený graf z obrázku 23

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 vezmeme do úvahy štandardné (stredné kvadratické) chyby experimentálnych dát. Predpokladajme, že máme k dispozíci 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_{fi}.

Optimálny postup pre dáta 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

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

kde σ_{fi} 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 aproximácia 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' žiaden 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 predpokladať, 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 dáta, 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)

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

Help

Kpl Handbook	otvorenie elektronického manuálu, 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 dátoveho súboru `boxbod.dat`

Tak, ako v prípade programu QtiPlot, aj program Kpl a jeho funkcionalitu preskúšame dátami z internetovej stránky Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006). Stiahnite si dáta z kolekcie pre nelineárnu regresiu s názvom BoxBOD[17], ktoré sú

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

Vzťah (13) môžeme previesť na vhodnejší tvar, keď zavedieme *redukovanú hodnotu* χ^2 (alebo χ^2 na stupeň voľnosti), pre ktorú platí

$$\widetilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n-k}. \tag{14}$$

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

$$\widetilde{\chi}^2 = 1. \tag{15}$$

Naše predchádzajúce kritériá (a) a (b) teda môžeme vysloviť v takomto znení : keď získame pre $\widetilde{\chi}^2$ 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 aproximovať danou krivkou.[11] V krátkosti uvedieme základné myšlienky tohoto prístupu.

Ako sme to už spomenuli v úvode tejto časti, predpokladáme, že chyba meranej premennej f je náhodná veličina z normálneho rozdelenia súboru. Za tohto predpokladu sú aj jednotlivé 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 rozumieme počet nameraných bodov n znížený o počet parametrov k (voľných koeficientov): $m = n - k$.[12]

Integrál typu

$$P\left(\chi^2 \geqq \chi_0^2\right) = \int_{\chi_0^2}^{\infty} f_m(x)\,\mathrm{d}x, \tag{16}$$

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

[12] Keď sa chyby meraných hodnôt f_i neriadia normálnym rozdelením, úloha sa stáva ešte zložitejšou. Na jej riešenie sa používa metóda, ktorá sa volá *Metóda najväčšej hodnovernosti*.

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 (keď ju máme vytvorenú),
- Menu → Kancelária → kliknutie na Kpl (keď sme program inštalovali z deb balíčka),
- z príkazového riadka X terminálu príkazom `kpl`.

Na obrazovke sa zobrazí okno programu s príslušnými ponukami a ovládacími prvkami v hlavnom menu (obrázok 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 56.

Hlavné menu programu obsahuje tieto položky:

File Edit View Settings Help

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

File

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

[16] V prípade, keď inštaláciu vykonáte zo zdrojových súborov, musí sa cesta na spustenie z Menu nastaviť manuálne. Autor z vlastnej skúsenosti odporúča spúšťať program z pracovnej plochy pomocou vytvorenej ikonky s odkazom na binárny súbor kpl.

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

2.5 Interpolácia a extrapolácia

Interpolácia

Meraním určíme konečný počet hodnôt $x_1, x_2, \ldots, x_n$ a im prislúchajúce $f(x_1), f(x_2), \ldots, f(x_n)$. Predpokladajme, že $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$. 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 $(x_1, f_1), (x_2, f_2), \ldots, (x_n, f_n)$ „preložíme krivku“, nahradíme konečné postupnosti (spojitou) funkciou. Cez namerané body môže prechádzať veľmi veľa rôznych funkcií. Ak z teórie poznáme funkciu, ktorá *rozdelenia chýb meraní s nulovou strednou hodnotou v každom uzlovom bode najhodnovernejšie výsledky dosiahneme metódou najmenších štvorcov. Uvedené predpoklady sú zvyčajne pri fyzikálnych alebo technických experimentoch splnené, preto je metóda najmenších štvorcov najpoužívanejšou metódou aproximácie (vyhladenia 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 použit' numerické metódy ako pri interpolácii. Treba však mat' vždy na zreteli, že pri extrapolácii musíme byt' omnoho opatrnejší ako pri interpolácii, hlavne ak x je d'aleko od meraného intervalu. Pokial' je možné, snažíme sa nahradit' extrapoláciu interpoláciou, t. j. meraním obsiahnut' čo najväčší interval hodnôt x_i. Mimo meraného intervalu môžu mat' podstatný vplyv nové fyzikálne javy, ktoré sa neprejavia v meranom intervale. Napr. pri meraní teplotnej závislosti elektrického odporu vodiča v intervale teplôt od 10 °C do 40 °C nameráme lineárnu závislost' 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 osvojit' a začat' používat'. S rozvojom výpočtovej techniky, programovacích metód a aplikačného softvéru sa rýchlo rozšírili do mnohých oblastí prírodných vied a techniky. V nasledujúcich dvoch kapitolách čitatel'ovi predstavíme dva programy, ktoré umožňujú l'ahké a flexibilné používanie uvedených metód na numerické spracovnie experimentálnych dát a výsledky uložit' do kvalitného grafického výstupu v elektronickej alebo tlačenej podobe.

(pokračovanie tabuľky z predošlej strany)

Názov	Popis
`bessel_j0(x)`	Besselova funkcia prvého druhu $J_0(x)$ rádu 0
`bessel_j1(x)`	Besselova funkcia prvého druhu $J_2(x)$ rádu 1
`bessel_jn(x,n)`	Besselova funkcia prvého druhu $J_n(x)$ rádu n
`bessel_y0(x)`	Besselova funkcia druhého druhu $Y_0(x)$ rádu 0
`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)`	`erfc(x)=1-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)=erfz(x)/erfq(x)`[15]
`if(e1,e2,e3)`	keď je `e1` pravdivé , výpočíta sa `e2` a ešte `e3`
`ln(x)`	prirodzený logaritmus x
`log(x)`	dekadický logaritmus x
`log2(x)`	logaritmus x so základom 2
`min(x1,x2,x3,...)`	minimum zo zoznamu argumentov
`max(x1,x2,x3,...)`	maximum zo zoznamu argumentov
`rint(x)`	zaokrúhlenie na najbližšie celé číslo
`sign(x)`	funkcia znamienka x
`sin(x)`	sínus x

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

[15] V staršej literatúre sa uvádza pojem *hazard function* ako ekvivalent pojmu *hazard rate* alebo *failure rate* používaneho v teórii obnovy a poisťovníctve, 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).

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 dáta 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.

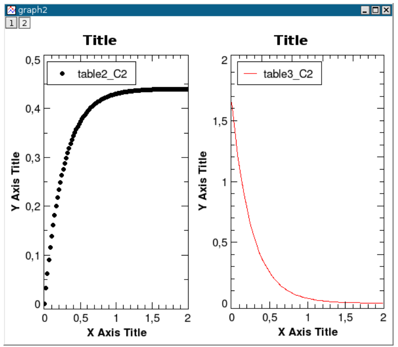
3.1 Ovládacie možnosti programu QtiPlot

Otvorenie QtiPlotu sa dá uskutočniť troma spôsobmi:

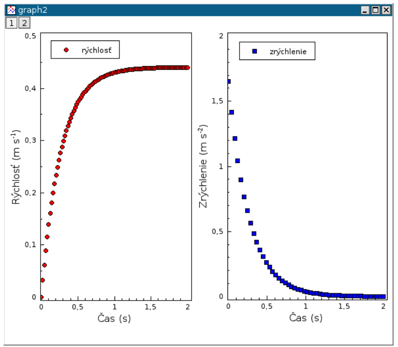
- kliknutie na ikonu QtiPlot na pracovnej ploche,
- Menu → Škola hrou → Mathematics → kliknutie na QtiPlot,
- z príkazového riadka X terminálu príkazom `qtiplot`.

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 34.

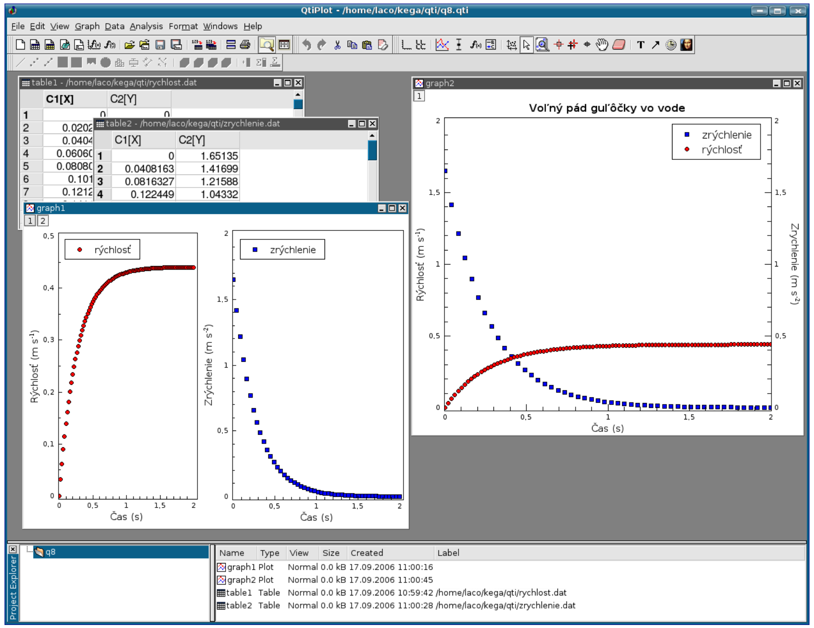
Na obrazovke sa zobrazí tabuľkové okno s príslušnými ponukami a ovládacími prvkami (obrázok 1). Zatvorenie QtiPlotu sa vykoná cez záložku File a potom Quit alebo stlačením klávesov Ctrl + Q (prípadne Alt + F4).



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



Obrázok 20: Trochu upravené grafy z obrázku 19



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

	projektov
Open image file	importovanie obrázku (jpg, bmp, gif, png a iné) do QtiPlot projektu
Import image ...	importovanie obrázkového súboru a konvertovanie 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 všetkych grafov projektu
Export ASCII	exportovanie ASCII dátového súboru z tabuľky
Import ASCII	importovanie súboru ASCII s príponou .dat
Quit	ukončenie práce s programom QtiPlot

Edit

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

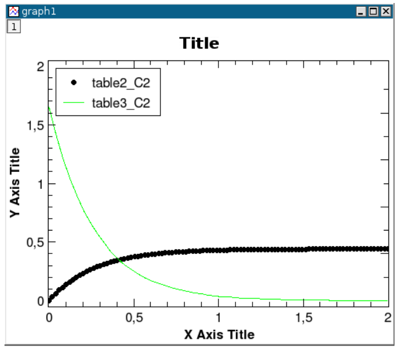
Plot

Line	pospájanie bodov do jednej lomenej čiary
Scatter	bodový graf
Line + Symbol	čiarový graf s vyznačenými bodmi
Special Line/Symbol	zvislé čiary alebo „schodíky", splajnová čiara
Columns	stĺpcový graf, zvislé stĺpce
Rows	stĺpcový graf, ale stĺpce sú vodorovné
Area	graf s vyfarbenou plochou pod čiarou grafu

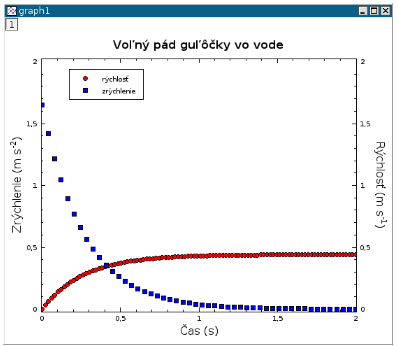
Vypočítané hodnoty potrebujeme uložiť do dátového súboru. Kurzorom myši na čiare vykonáme dvojklik, otvorí sa editor parametrov čiary. Klikneme na položku Worksheet, aktivuje sa tabuľkové okno a zobrazí sa tabuľka vypočítaných hodnôt rýchlosti, ktorú uložíme postupom File → Export ASCII, vyberieme oddeľovač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

3.3.1 Zobrazenie dvoch priebehov v jednom grafe

Uložené dáta rychlost.dat a zrychlenie.dat použijeme na vytvorenie dvoch priebehov v jednom grafe. Začneme novým projektom, z ktorého vyma-

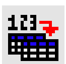


Obrázok 17: Zobrazenie dát zo súčasne importovaných súborov rychlost.dat a zrychlenie.dat



Obrázok 18: Upravený graf z obrázku 17

žeme prázdnu 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

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 vytvorenej 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).

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

Graph

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

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 zobraziť priebeh rýchlosti 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)

$$\frac{4}{3}\pi r^3 \rho \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \frac{4}{3}\pi r^3 g_\mathrm{n}(\rho^* - \rho) - 6\pi r \eta v, \tag{18}$$

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

$$\begin{aligned} v &= v_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{9}{2}\frac{\eta\, t}{r^2 \rho}\right)\right], \qquad (19)\\ v_0 &= \frac{2\, r^2(\rho^* - \rho)\, g_\mathrm{n}}{9\,\eta}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} a &= a_0 \exp\left(-\frac{9}{2}\frac{\eta\, t}{r^2 \rho}\right), \qquad (20)\\ a_0 &= \frac{(\rho^* - \rho) g_\mathrm{n}}{\rho}. \end{aligned}$$

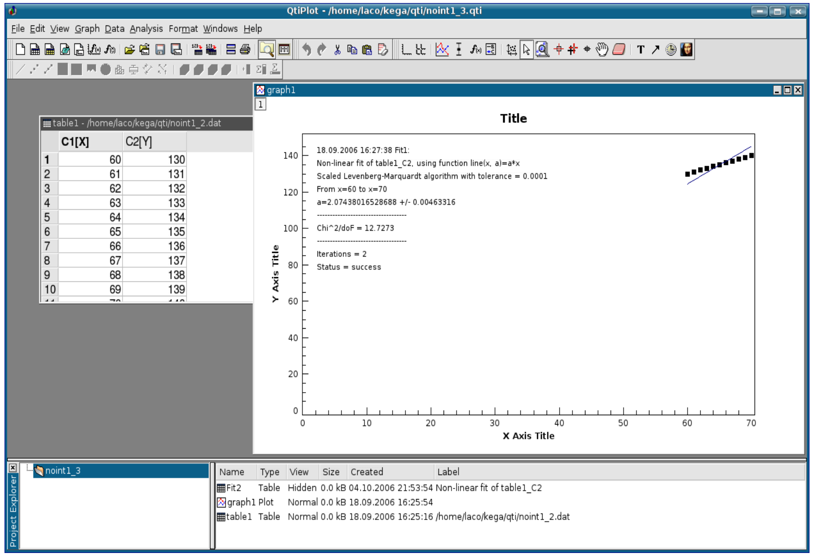
Urobíme numerický výpočet rýchlosti v a zrýchlenia a pre pohyb plexisklovej guľôčky o polomere $r = 1$ mm vo vode v časovom intervale od 0 do 2 sekúnd. Pomocou možnosti vkladania funkcií do grafov, z hlavného menu grafického okna vyberieme Graph → Add Function... Číselné

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 Gaussovou alebo Lorentzovou funkciou
Non-linear Curve Fit ...	nelineárna regresia Nelderovou-Meadovou simplexovou a Levenbergovou-Marquardtovou metódou, k dispozícii sú základné matematické funkcie, sedem vstavaných 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

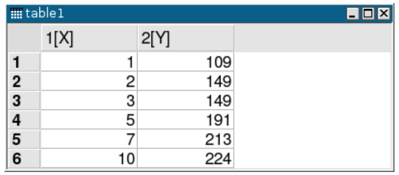


Obrázok 14: Prvé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dáta NoInt1

čok vložíme nuly. Touto úpravou dosiahneme to, že sa zobrazenie fitovanej čiary v grafe začne z bodu $(0, 0)$. Teraz už môžeme náš obrázok porovnat' s obrázkom, ktorý je na WWW stránke inštitútu NIST, pozri obrázok 15. Výpis výsledku fitovania:

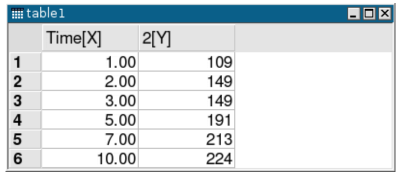
```
18.09.2006 16:27:38  Fit1:
Non-linear fit of table1_C2, using function line(x, a)=a*x
Scaled Levenberg-Marquardt algorithm with tolerance = 0.0001
From x=60 to x=70
a=2.07438016528688 +/- 0.00463316
-----------------------------------
Chi^2/doF = 12.7273
-----------------------------------
Iterations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

2. Môžeme zopakovat' postup z bodu 1 pre tabuľku table1 s dátami `noint1.dat` a urobit' nové fitovanie pre x od 0 do 70. Mohli by sme namietat', že je to „násilné konanie" pridat' do tabuľky body a tak ovplyvnit' fitovanie. Priložené výpisy však ukazujú, že v oboch prípadoch sú získané parametre rovnaké. Výpis výsledku fitovania:



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

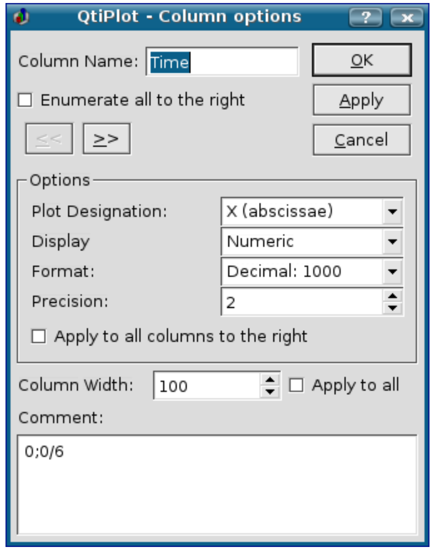
Obrázok 3: Tabuľkové okno s importovanými dátami



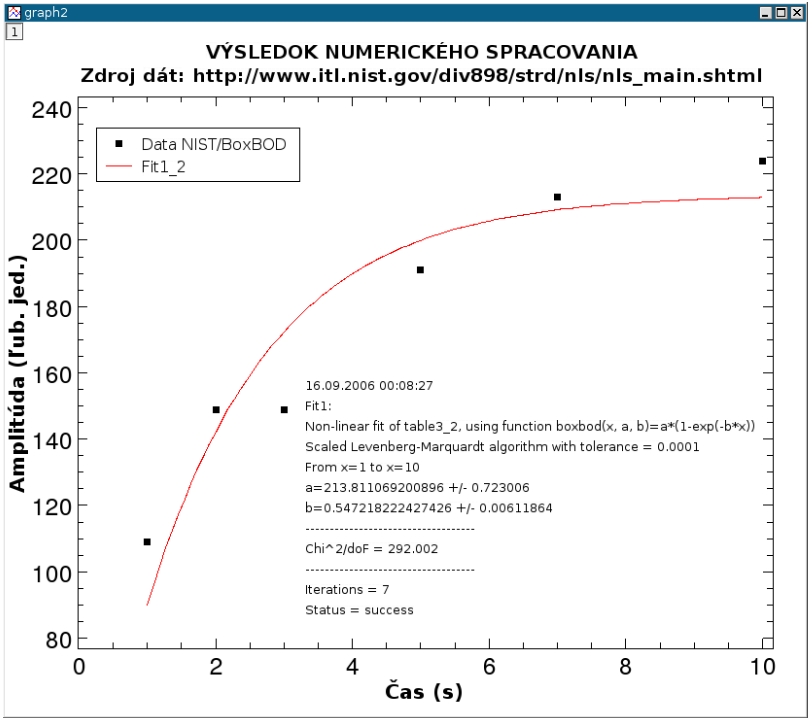
	Time[X]	2[Y]
1	1.00	109
2	2.00	149
3	3.00	149
4	5.00	191
5	7.00	213
6	10.00	224

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

V prípade potreby môžeme premenovat' nazvy stĺpcov tabuľky. Klikneme 2× na políčko 1[X], otvorí sa okno s názvom Column option, v ktorom môžeme zmenit' názov stĺpca, počet desatinných 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



Obrázok 11: Nelineárna regresia dát BoxBOD exponenciálnou funkciou

s toleranciou `0.0001`. Ďalej sa uvádza rozsah nezávisle premennej `x`, fitované parametre `a` a `b` so štandardnými neistotami, hodnota $\tilde{\chi}^2$, 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

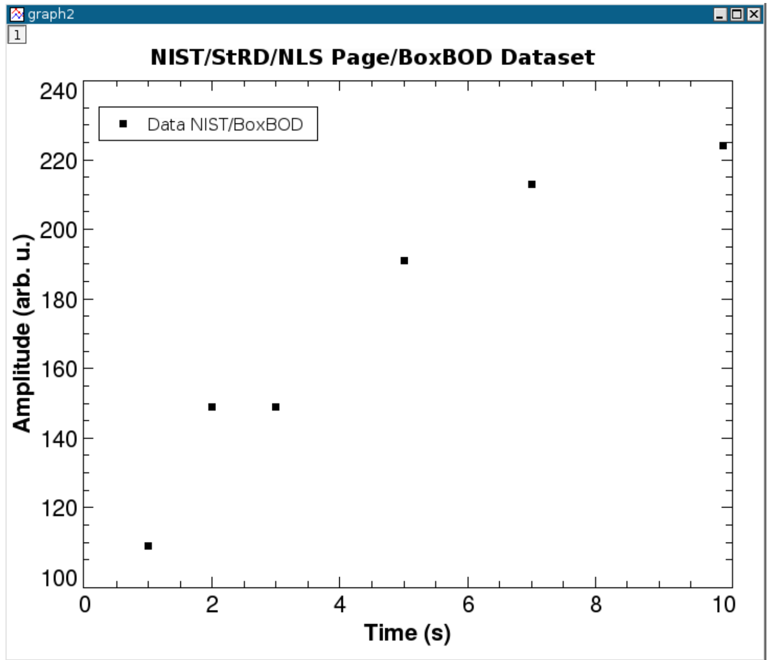
$$y = ax,$$

ktorú použijeme na fitovanie dát NoInt1 z kolekcie pre lineárnu regresiu už spomenutého inštitútu NIST (2006)[14]. V položke Analysis máme síce ponuku Fit Linear pre modelovou funkciou $y = a + bx$, ale akosi jej

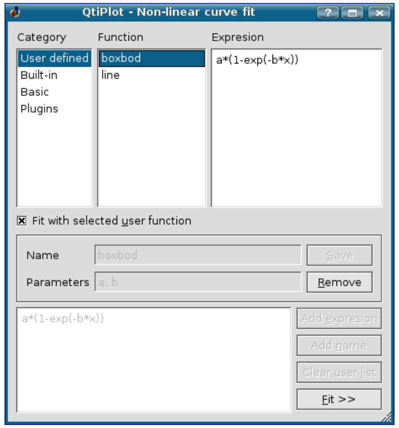
[14] `http://www.itl.nist.gov/div898/strd/lls/lls.shtml`

žadované úpravy. Dvojklikom do rámčeka 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. Editáciu názvu ukončíme klikom na položku OK alebo Cancel. Podobným postupom zmeníme aj názvy osí.

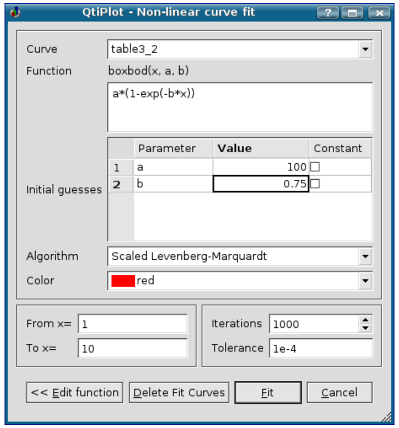
Dvojklikom na ľubovolný bod grafu môžeme zmeniť tvar, farbu a veľkosť symbolov na vykreslenie dát. V prípade, že v grafe máme hustú sieť kriviek aj s dátami, odporúča sa toto editovanie vykonať z hlavného menu Format → Curves ... Opísané úpravy vidíme na obrázku 7.



Obrázok 7: Upravený graf z obrázku 6



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



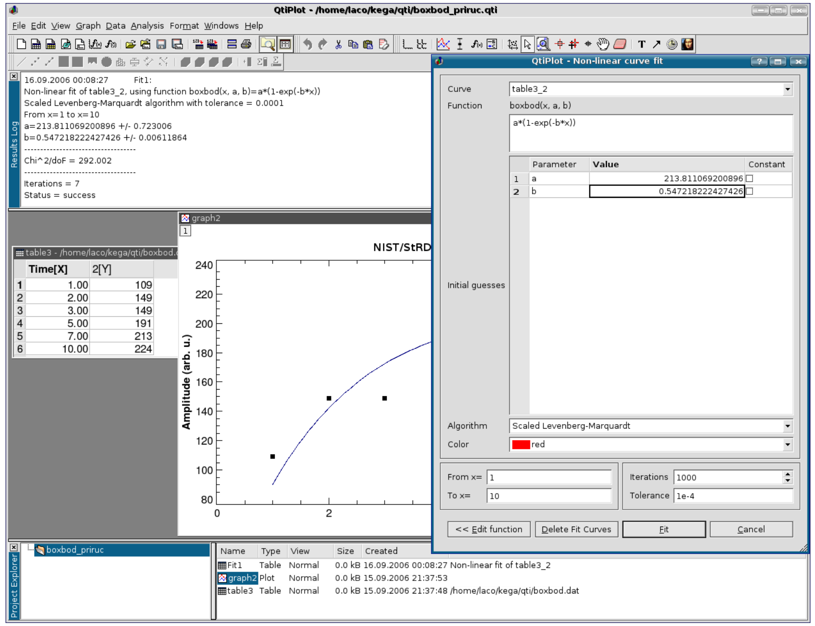
Obrázok 9: Druhé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dáta BoxBOD

3.2.3 Nelineárna regresia pre súbor boxbod.dat

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

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

ktorá je podľa (NIST, 2006) modelovou funkciou pre tieto dáta. V hlavnom menu klikneme na položku Analysis → Non-linear Curve Fit ... a vyberieme ponuku User defined. Do ľavého dolného okna zapíšeme našu aproximačnú rovnicu `a*(1-exp(-b*x))`, do okienka Name vpíšeme meno našej funkcie, napr. `boxbod`, do okienka Parameters vpíšeme symboly a, b fitovaných parametrov oddelených čiarkou a medzerou, potom kliknutím na položku Save vytvorenú funkciu uložíme (objaví sa v zozname Function), pozri obrázok 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 boxbod. 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 nezávile 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 ob-



Obrázok 10: Hlásenie programu o ukončení a o výsledkoch fitovania

javí tabuľka Result Log s výsledkami, pričom sa v grafe zobrazí regresná krivka (obrázok 10).

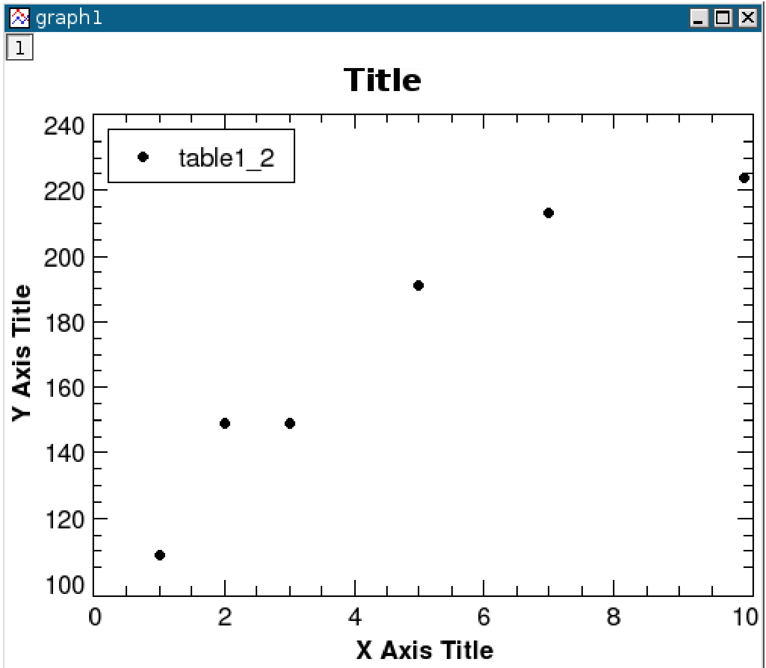
Výsledky fitovania môžeme vložiť do poľa grafu kopírovaním tabuľky cez schránku, pričom môžeme použiť postup na editovanie a vkladanie textu do plochy grafu Graph → Add text. Výsledok vidíme znázornený na obrázku 11 a uvádzame tu aj tabuľku výsledkov:

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

Výpis nás informuje o dátume a čase fitovania, že toto fitovanie údajov z tabuľky `table3_2` funkciou `boxbod` je prvé v tomto projekte, urobené nelineárnou metódou použitím Levenbergovho-Marquardtovho algoritmu

3.2.2 Vytvorenie a úprava grafu

Kliknutím do hlavičky tabuľky a ťahom 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). Graf by sme

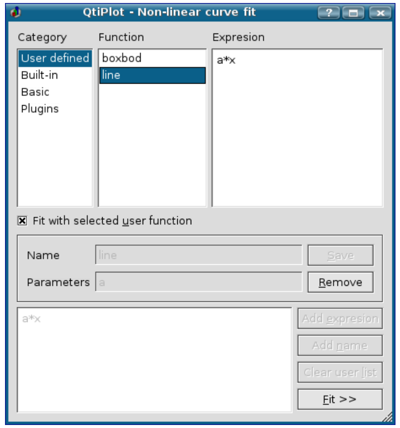


Obrázok 6: Graf vykreslený z dát tabuľky z obrázku 3

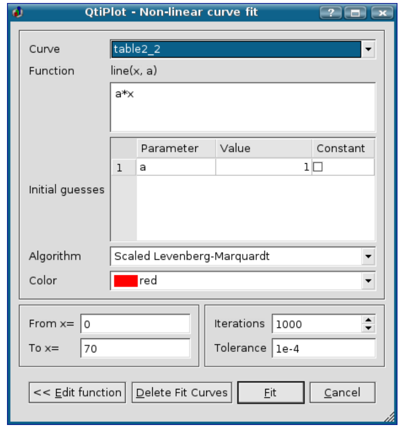
mohli nazvať „surovým“. V tomto grafe je zobrazená legenda a v ľavom hornom rohu grafického okna je okienko $\boxed{1}$. Pokiaľ by sme nevyznačili v dátovej tabuľke nezávisle premennú, dvojklikom na toto okienko sa otvorí dialógové okno Add/Remove curves, v ktorom je ponuka presunutia údajov z okienka 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 z hlavného menu zvolíme Format → Plot ... → Axis a prevedieme po-

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 predošlom príklade nelineárnej regresie, výsledok vidíme na obrázkoch 12 a 13. Štartovaciu hodnotu parametra a nacháme implicitnú $a = 1$ a taktiež algoritmus fitovania ponecháme bez zmeny. Jediné čo zmeníme je začiatočná hodnota nezávisle premennej, ktorú nastavíme na hodnotu 0, aby sa graf zobrazil tak, ako ten, ktorý je na WWW stránke inštitútu NIST. Grafický výsledok nie je „oslňujúci“, trochu ho upravíme, aby bolo jasné, že závislosť má rozsah v oboch smeroch osí od 0. Z hlavného menu vyberieme položku Format → Axes → Scale a začneme s úpravami. Najprv zmeníme x-ový rozsah, úpravu potvrdíme klikom na Apply, postup zopakujeme pre y-ový rozsah. Očakávali sme, že čiara fitu bude predĺžená do začiatku súradnicového systému, nestalo sa tak, pozri obrázok 14.



Obrázok 12: Prvé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dáta NoInt1



Obrázok 13: Druhé okno na definovanie požadaviek fitovania pre dáta NoInt1

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

1. Tabuľku Fit2, ktorá obsahuje dáta 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 prázdnych polí-

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 funkciami 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 dátoveho súboru `boxbod.dat`

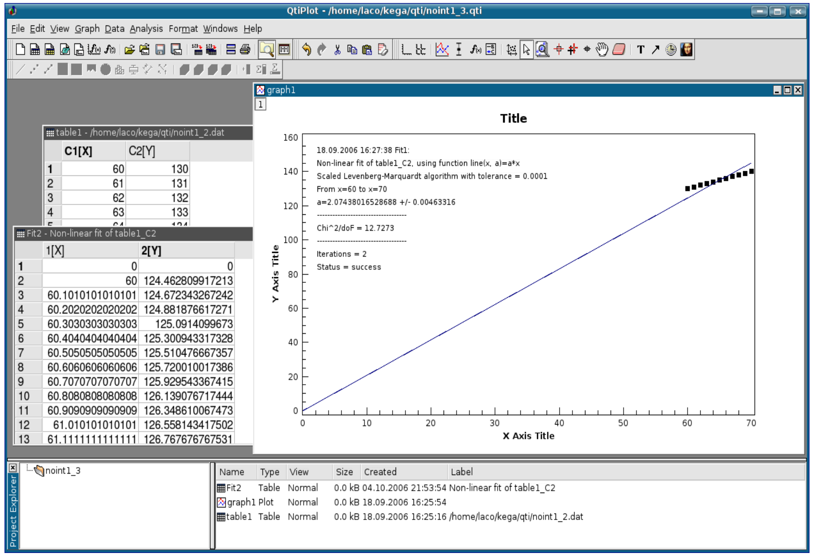
V úvode sme spomenuli, že funkcionalitu programu sme skúšali dátami z internetovej stránky Národného inštitútu štandardov a technológií Spojených štátov amerických (NIST, 2006). Stiahli sme si dáta z kolekcie pre nelineárnu regresiu s názvom BoxBOD[13], ktoré sú zaradené do kategórie s vysokou náročnosťou na spracovanie. Tabuľka bola uložená do dátového súboru s názvom `boxbod.dat`. Tento súbor teraz importujeme, postupným vyvolaním nasledovných ponúk File → Import ASCII → Set import option, nastavíme formát importovaných dát a potom prevedieme import dát do tabuľky, napr. z nástrojovej lišty kliknutím na ikonu

Vyhľadáme súbor boxbod.dat, operáciou sa údaje prenesú do tabuľky, pozri obrázok 3.

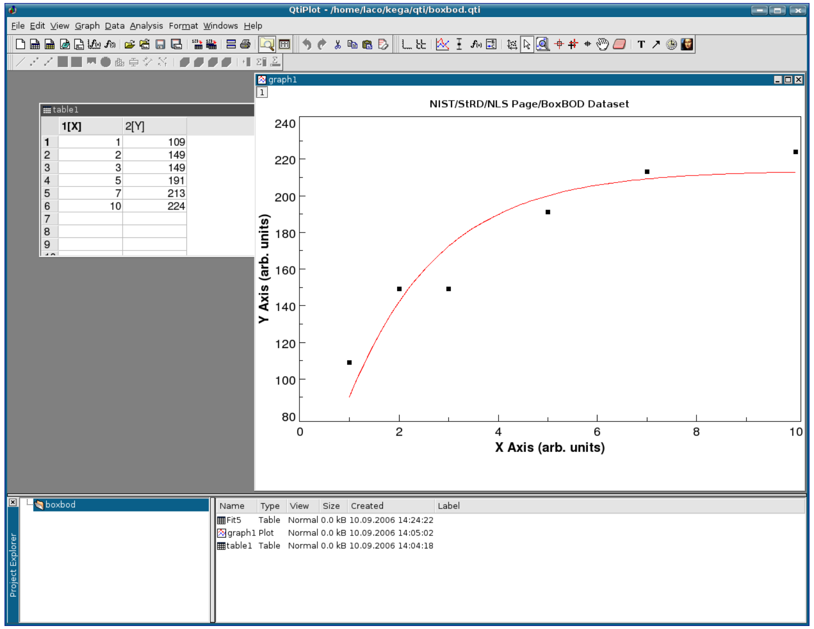
[13] `http://www.itl.nist.gov/div898/strd/nls/nls_main.shtml`


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

Ako vzor na „kozmetickú“ úpravu grafu nám môže poslúžiť príklad z obrázku 21. Urobíme ju pomôckami z položky Format a hotový projekt uložíme.



Obrázok 15: Druhé okno na definovanie požiadaviek fitovania pre dáta NoInt1



Obrázok 2: Grafické okno programu QtiPlot

Data

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

hodnoty v_0, a_0 a konštantného člena v exponentoch sú:

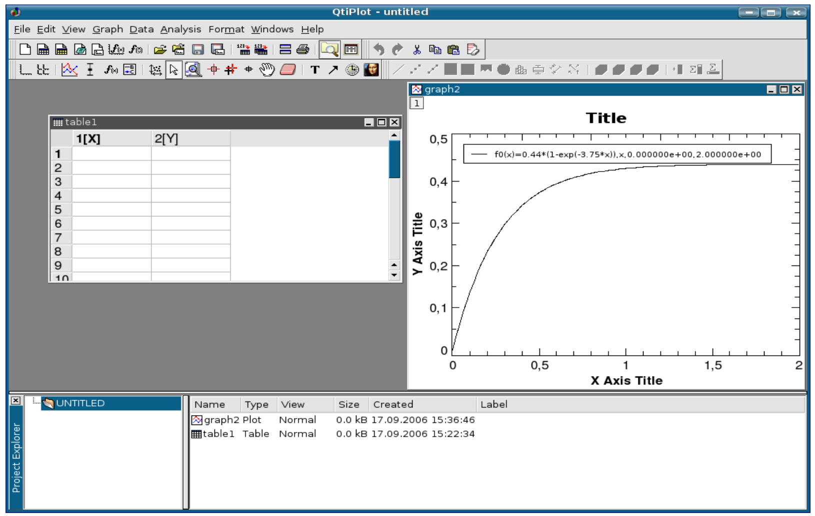
$$v_0 = \frac{2\,r^2(\rho^* - \rho)\,g_n}{9\,\eta} = \frac{2(10^{-3})^2(998 - 1\,200)\,9{,}81}{9\cdot 10^{-3}} = -0{,}44\ \mathrm{m\,s^{-1}}$$

$$a_0 = \frac{(\rho^* - \rho)g_n}{\rho} = \frac{(998 - 1\,200)\,9{,}81}{1\,200} = -1{,}65\ \mathrm{m\,s^{-2}}$$

$$\frac{9}{2}\,\frac{\eta\,t}{r^2\rho} = \frac{9\cdot 10^{-3}}{2(10^{-3})^2 1\,200} = 3{,}75\ \mathrm{s^{-1}}$$

Znamienko mínus v prvých dvoch výrazoch má fyzikálny význam. Uvedomme si, že v a a sú vlastne z-ové zložky rýchlosti a zrýchlenia v pravouhlom súradnicovom systéme a teda môžu byt' kladné aj záporné.

V prvom kroku vytvoríme číselné hodnoty na zobrazenie rýchlosti v a zrýchlenia a, ktore použijeme na tvorbu kombinovaných grafických výstupov. Začneme novým projektom, potom z položky File v hlavnom menu vyberieme New Function Plot. Otvorí sa ponuka Add function curve, do okienka f(x)= vložíme `0.44*(1-exp(-3.75*x))` pre x od 0 do 2 a necháme vypočítat' 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 vzt'ahu 19

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
Statistical Graphs	štatistické grafy
Panel	viac grafov v jednom okne
Plot 3D	trojdimenzionálne grafy

Analysis

Statistics on Columns	štatistické vyhodnotenie dát v stĺpci
Statistics on Rows	štatistické vyhodnotenie dát v riadku
Sort Columns	usporiadanie dát v stĺpci
Sort Table	usporiadanie dát v celej tabuľke
Normalize	normalizovanie dát v stĺpci alebo vo všetkých stĺpcoch tabuľky
FFT ...	analýza dát v tabuľke rýchlou 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)

Table

Set columns as	nastavenie dát v stĺpci (X, Y, Z, nenastavené)
Column Option ...	nastavenie vlastností stĺpca (počet riadkov, typ dát, formát čísiel a pod.)

dve tabuľky table2 s dátami rýchlosti 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 rýchlosti. Do tohto grafu chceme vložiť aj priebeh zrýchlenia. Na túto operáciu použijeme postup opísaný v časti 3.2.4 na strane 41. Klikneme teda do okienka $\boxed{1}$ a v editore Add/Remove curves presunieme dáta 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 grafickych formátov cez hlavné menu položkou File → Export Graph → Current, napr. eps.

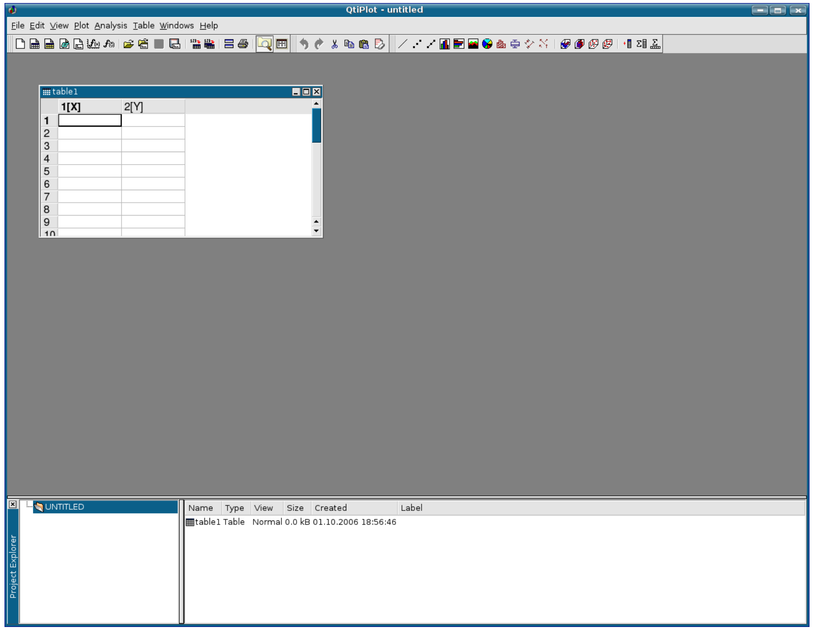
3.3.2 Zobrazenie dvoch grafov v jednom okne

V tejto časti opíšeme postup ako zlúčiť viac grafov do jedného obrázka použije na to naše dáta rychlost.dat a zrychlenie.dat. Opäť začneme prácu novým projektom, z ktorého vymažeme prázdnu tabuľku a do tohto projektu importneme naše data postupom z predchádzajucej časti. Z tabuľkového okna sériou príkazov Plot → Scatter vykreslíme priebeh rýchlosti. Do aktívneho grafického okna, v ktorom je graf priebehu rýchlosti 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 $\boxed{2}$, 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 grafickych 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.

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`.

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.



Obrázok 1: Tabuľkové okno programu QtiPlot

Hlavné menu obsahuje tieto položky:

File Edit View Plot Analysis Tools Window Help

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

File

New	vytvorenie nového projektu
Open	otvorenie súboru s príponou .qti, editácia už vytvoreného projektu
Recent Projects	zoznam piatich naposledy otvorených

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
ˆ	umocnenie (`a^b` $= a^b$)
`and`	logické `AND` (vracia 0 alebo 1)
`or`	logické `OR` (vracia 0 alebo 1)
`xor`	logické `Exclusive OR` (vracia 0 alebo 1)
$<$	menšie ako (vracia 0 alebo 1)
$<=$	menšie ako alebo rovná sa (vracia 0 alebo 1)
$==$	rovná sa (vracia 0 alebo 1)
$>=$	väčšie ako alebo rovná sa (vracia 0 alebo 1)
$>$	väčšie ako (vracia 0 alebo 1)
$!=$	nerovná sa (vracia 0 alebo 1)
`abs(x)`	absolútna hodnota x
`acos(x)`	arkus kosínus
`acosh(x)`	arkus hyperbolický kosínus
`asin(x)`	arkus sínus
`asinh(x)`	arkus hyperbolický sínus
`atan(x)`	arkus tangens
`atanh(x)`	arkus hyperbolický tangens
`avg(x1,x2,x3,...)`	stredná hodnota argumentov

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

(pokračovanie tabuľky z predošlej strany)	
Názov	**Popis**
`sinh(x)`	hyperbolický sínus x
`sqrt(x)`	druhá odmocnina z x
`tan(x)`	tangens x
`tanh(x)`	hyperbolický tangens x

má prechádzať cez namerané body, postupujeme podľa predchádzajúcej kapitoly. V opačnom prípade môžeme funkčnú závislosť medzi meranými bodmi nahradiť jednoduchými funkciami, najčastejšie lineárnou, kvadratickou, zriedkavejšie polynómom vyššieho stupňa. Hovoríme o lineárnej, kvadratickej alebo polynomiálnej interpolácii. Pri lineárnej interpolácii dostaneme „lomenú" spojitú funkciu, ktorá však nemá derivácie práve v meraných bodoch. Pri kvadratickej interpolácii môžeme dostať „hladšiu" krivku, pri kubickej interpolácii a po častiach kubickej interpolácii (napr. *kubické splajny*) môžeme dosiahnuť spojitosť derivácie atď. Je zrejmé, že čím hustejšie budú body namerané, tým menej sa budú líšiť hodnoty získané interpoláciou rôznymi funkciami.

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

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

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 $x_1, \dots, x_{k+1}$

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

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

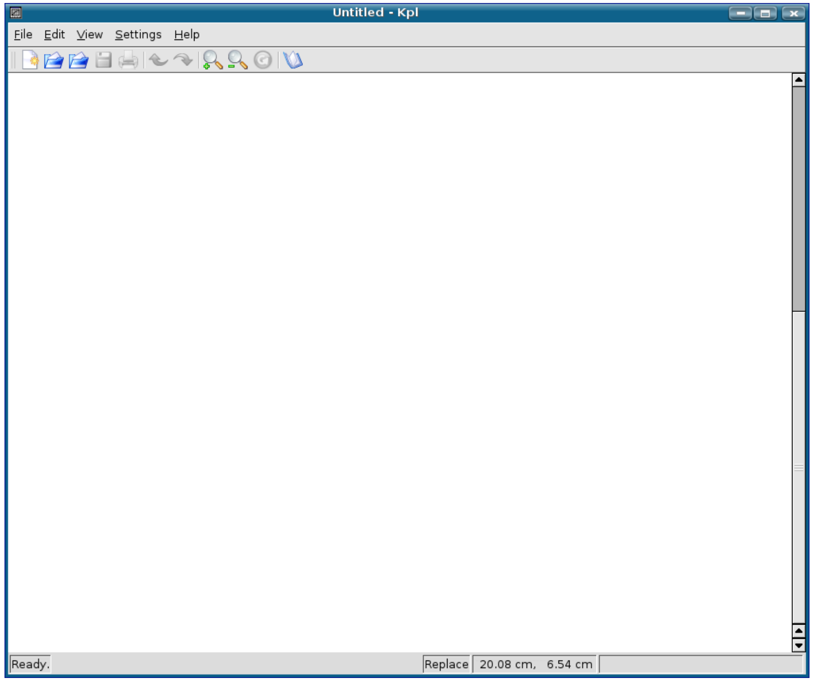
Na prvý pohľad by sa zdalo, že zvyšovaním stupňa polynómu k sa zvyšuje aj presnosť interpolácie. V skutočnosti merané veličiny x_i a $f(x_i)$ sú zaťažené neistotami, ktoré sa zvýrazňujú pri výpočte vysokých mocnín hodnôt x_i v (17). Z tohto dôvodu sa vo väčšine prípadov uspokojíme s interpoláciou nízkeho rádu.

Poznámka:

Keď hodnoty $f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots f(x_n)$ boli získané experimentálne a sú zaťažené určitými nezanedbateľnými chybami, nie je spravidla vhodné metódu interpolácie aplikovať. Je dokázané, že za predpokladu normálneho

4 Program Kpl

Program Kpl je jednoduchý z pohľadu ovládania, poskytuje rozsiahle možnosti na vyhladzovanie, optimalizáciu a numerické operácie s nameranými dátami (napr. derivovanie, integrovanie); môžeme ho doplňať vlástnými funkciami a knižnicami, ktoré sa napíšu a skompilujú v programovacom jazyku C. Na rozdiel od programu QtiPlot neumožňuje štatistické výpočty a charakteristiky dát. V ďalších častiach opíšeme prácu s verziou Kpl 3.3 pre grafické používateľské prostredie KDE 3.5.2. Domovská internetová stránka programu je na adrese `http://frsl06.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/`. Autor Werner Stille ponúka k programu on-line príručku prístupnú na URL adrese `http://frsl06.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/book/index.html` . Na prácu v Kpl máme k dispozícii jedno pracovné okno, pozri obrázok 22.



Obrázok 22: Pracovné okno programu Kpl

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 $P(\chi^2 \geqq \chi_0^2)$. Tieto hodnoty sú často vo forme tabuliek 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 dáta zamýšľame interpretovať lineárnou závislosťou $y = a + bx$, pre ktorú vyčíslime parametre a a b. V tomto prípade sa počet stupňov voľnosti rovná $m = 20 - 2 = 18$. Ďalej predpokladajme, že výpočtom podľa vzťahu (10) sme získali hodnotu $\chi^2 = 9$. Z tabuľky 1 pre $P(\chi^2)$ zistíme, že pri $m = 18$ stupňoch voľnosti je pravdepodobnosť získať $\chi^2 \geqq 9$ rovná $\sim 95\,\%$. Odchýlka nameraných údajov od očakávanej lineárnej závislosti je v tomto prípade nepodstatná. Keby sme získali výsledok $\chi^2 = 28$, z tabuľky zistíme, že takúto a väčšiu hodnotu môžeme očakávať v asi 5 % prípadov. Model lineárnej závislosti nemusíme zamietnuť, ale môžeme o ňom pochybovať. Prirodzene za takýchto okolností zopakujeme experiment, aby sme získali nové dáta alebo použijeme inú modelovú funkciu. V prípade, keď je $\chi^2 \geqq 42$ (pravdepodobnosť $\approx 0{,}1\,\%$) potvrdí sa, že preverovaná hypotéza je isto nesprávna (dané body nemôžeme aproximovať lineárnou 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 $\chi^2 \geqq \chi_P^2$ pri m stupňoch voľnosti

	P					
m	0,99	0,98	0,95	0,9	0,05	0,001
4	0,3	0,4	0,7	1,1	9,5	18,5
5	0,6	0,8	1,1	1,6	11,1	20,5
6	0,9	1,1	1,6	2,2	12,6	22,5
7	1,2	1,6	2,2	2,8	14,1	24,3
8	1,6	2,0	2,7	3,5	15,5	26,1
9	2,1	2,5	3,3	4,2	16,9	27,9
10	2,6	3,1	3,9	4,9	18,3	29,6
11	3,1	3,6	4,6	5,6	19,7	31,3

pokračovanie tabuľky na ďalšej strane

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

Edit

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

View

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

Settings

Hide Toolbar	skrytie/zobrazenie hlavného menu
Hide Statusbar	skrytie/zobrazenie stavovej lišty
Show Function Source	zobrazenie zdrojového súboru funkcie v dialógu voľby jej parametrov
Autoplot	automatické zobrazenie projektu po načítaní dátového alebo grafického súboru
Add Files (Insert)	pridanie nového dátového alebo grafického súboru do aktuálneho s vykreslením
Calculate PS Bounding Box	automatický výpočet hraníc postscriptového okna grafu, bez aktivácie tejto po-

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_{fi}.

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

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

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

$$\chi^2 \approx n. \tag{12}$$

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

$$\chi^2 \approx n - k, \tag{13}$$

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

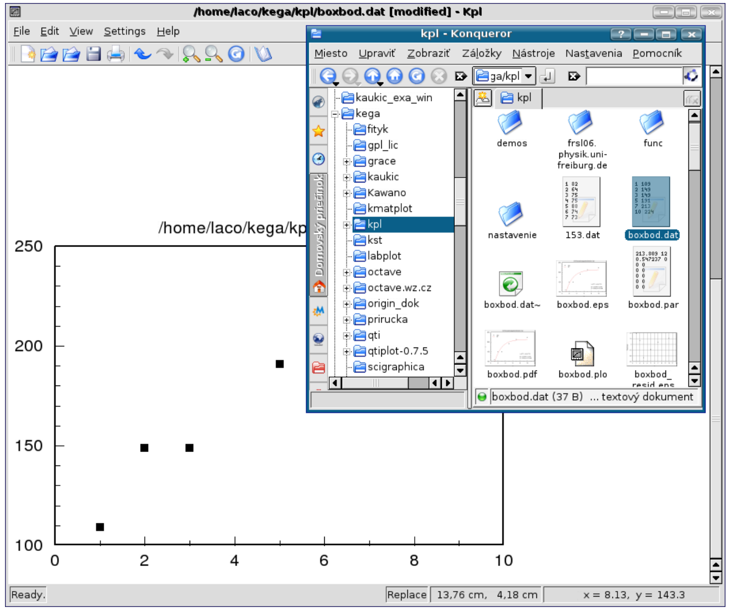
Najčastejšie môžu nastať dva prípady:

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

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

[10] Garcia (2000) volá tento prístup *eye-balling* a Press (1992) *chi-by-eye*.

zaradené do kategórie s vysokou náročnosťou na spracovanie. Tabuľku uložte do dátového súboru s názvom `boxbod.dat`.



Obrázok 23: Importovanie a zobrazenie dát metódou ťahaj a pusť

Program Kpl má síce vlastný editor tabuliek, ale s obmedzenými možnosťami formátovania, preto si na jej vytvorenie 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 príponou `dat`. Symbol desatinnej rádovej čiarky môže byť *desatinná čiarka* alebo *desatinná bodka* a ako oddeľovač (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 správovanie súborov (napr. Konqueror alebo Krusader), v ktorom vyhľadáme súbor, ktorý cheme zobraziť. Označíme ho ľavým klikom myšky a ťahom

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 $\sum_{i=1}^{n}\left[\ln f_i - \ln F(x_i)\right]^2$, *pretože transformácia do súradníc prirodzeného logaritmu ovplyvňuje odchýlky rozdielne v rôznych oblastiach pozdĺž krivky a tiež rozdielne ovplyvní 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 funkcii pred druhou. Ak rozptyl údajov nie je veľký, tento rozdiel nie je významný. Odhad cez transformáciu možno ešte zlepšiť zavedením štatistickej váhy* $w_i = \left(\sigma^2_{\ln F}/\sigma^2_f\right)_i^{-1}$ *do účelovej funkcie (2), ktorá potom nadobudne tvar* $\sum_{i=1}^{n} w_i\left[\ln f_i - \ln F(x_i)\right]^2 = \min.$

Záverom treba zdôrazniť, že funkcia F (tzv. modelová funkcia) musí byť fyzikálne opodstatnená. Ak sa predpokladá lineárna závislosť, nemá fyzikálne opodstatnenie vyrovnávať meranú závislosť kvadratickou funkciou, i keď môžeme očakávať „lepšiu“ zhodu v zmysle najmenších štvorcov. Aproximácia experimentálnych dát inými fyzikálne neodôvodnenými funkciami má význam iba z hľadiska vhodnejšieho uchovania informácie o experimentálnych dátach a z hľadiska niektorých numerických operácií, napr. interpolácie a extrapolácie.

4.2.2 Nelineárna regresia pre súbor boxbod.dat

Tak, ako v prípade programu QtiPlot aproximujme dáta znázornené v grafe na obrázku 25 exponenciálnou závislosťou v tvare

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

ktorá je podľa (NIST, 2006) modelovou funkciou pre tieto dáta. Program implicitne takúto funkciu neponúka, ale môžeme ju napísať ako skript v programovacom jazyku C, napr. `boxbod.c`, a skompilovaním vytvoriť knižnicu (modul) `boxbod.so`.

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

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

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

$$s_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i, \qquad s_2 = \sum_{i=1}^{n} f_i, \qquad s_3 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2,$$
$$s_4 = \sum_{i=1}^{n} x_i f_i, \qquad s_5 = \sum_{i=1}^{n} f_i^2, \qquad v = n s_3 - s_1^2.$$

Potom

$$a = \frac{s_2 s_3 - s_1 s_4}{v}, \quad b = \frac{n s_4 - s_1 s_2}{v}. \tag{5}$$

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

$$\sigma_a = \sigma_f^{ab} \sqrt{\frac{s_3}{v}}, \quad \sigma_b = \sigma_f^{ab} \sqrt{\frac{n}{v}}. \tag{6}$$

V experimentoch však nie vždy poznáme hodnotu štandardnej neistoty σ_f. Jej hodnotu môžeme získať len opakovaním 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) vzťahom[9]

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

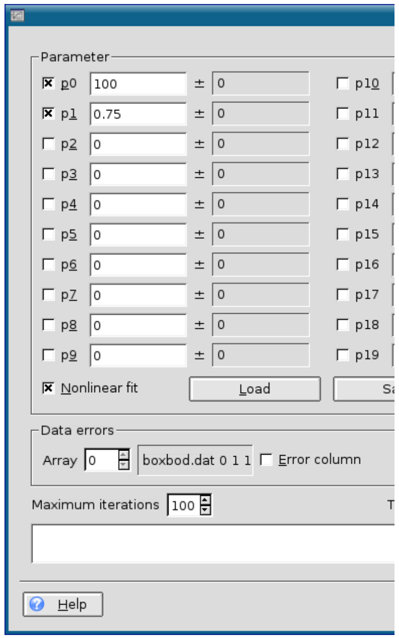
Podobne pre závislosť typu $y = ax$ platia tieto vzťahy:

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

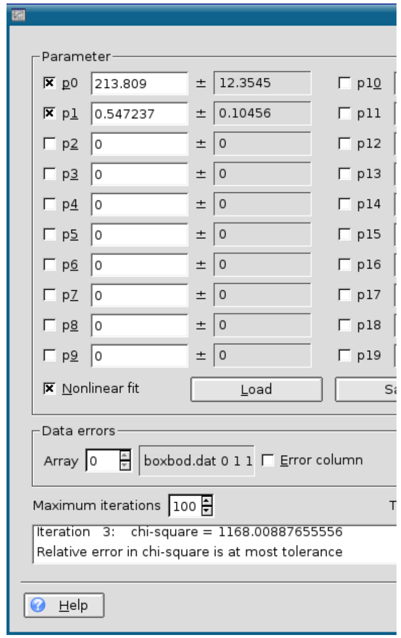
Odvodenie týchto vzťahov však presahuje rámec tejto práce a nie je ani jej cieľom. Čitateľ sa môže o metóde najmenších štvorcov podrobnejšie

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

Function (obrázok 26). Vyhľadáme si našu knižnicu boxbod.so a z nej vyberieme funkciu `boxbod_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. Zaškrtneme ľavé okienka ☒ pre parametre



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



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

p0 a p1 a do pravých vpíšeme ich štartovacie hodnoty, pre `p0=100` a pre `p1=0.75`. Fitovanie bude nelineárne, preto zaškrtneme aj okienko ☒ Nonlinear fit. Kliknutím do položky Model sa otvorí okno Error model function, v ktorom opäť vyhľadáme knižnicu boxbod.so a z nej tentoraz vyberieme funkciu boxbod_2, ako argument zvolíme xcolumn. Kliknutím na položku Edit zadáme štartovacie parametre iteračného procesu (iteračný proces sa ukončí dobre aj so začiatočnými hodnotami `p0=1` a `p1=1`). Výsledné parametre fitovanej funkcie `y=p[0]*(1-exp(-p[1]*x))` sa vpíšu do prívislosť anódového prúdu magnetrónu od indukcie magnetického poľa, 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 stretneme s týmito situáciami:

- Fyzikálna interpretácia meranej závislosti nie je dobre prepracovaná, tzn., že v čase konania experimentu neexistuje teoretický model, ktorý by viac-menej úspešne predpovedal tvar funkčnej závislosti. Potom je možné získané závislosti interpretovať iba kvalitatívne, resp. v jednoduchých prípadoch vysloviť hypotézu (napr. o lineárnej, resp. inej závislosti).
- Teoretický model predpovedá očakávanú závislosť, napr. $y = a + bx$. Experiment[5] 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 $i = 1, 2, \ldots, n$. Teoretický model predpokladá závislosť $F = F(x, p_1^*, p_2^*, \ldots, p_k^*)$, kde $p_1^*, p_2^*, \ldots, p_k^*$ sú parametre, ktoré sa nedajú vypočítať v rámci tohto modelu (čím menej parametrov, tým je model hodnotnejší). Odchýlky teoretickej F a experimentálej funkcie f_i, vypočítané v nameraných bodoch, označíme η_i

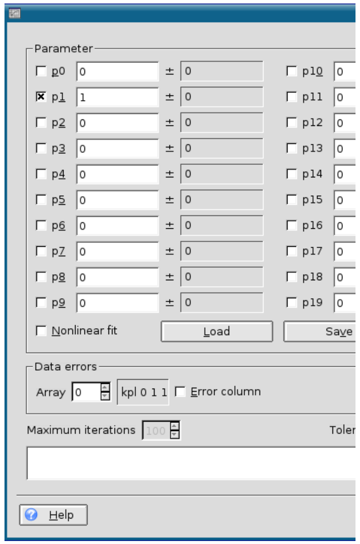
$$\eta_i = F(x_i, p_1^*, p_2^*, \ldots, p_k^*) - f_i. \tag{1}$$

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

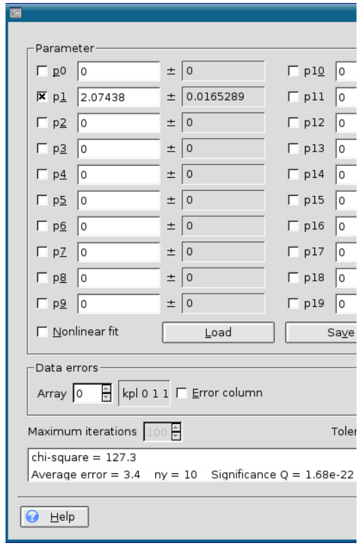
[6] Metódu najmenších štvorcov, ako výpočtovú procedúru opísal *Adrien-Marie Legendre* r. 1805 v práci *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes*. On navrhol aj názov tejto metódy. Prvý, kto spojil metódu najmenších štvorcov s teóriou pravdepodobnosti bol *Carl Friedrich Gauss*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

Edit. Do odsadeného prvého riadka zapíšeme tri nuly s medzerami 0␣0␣0, upravu potvrdíme klikom na Apply a editor zatvoríme klikom na OK.

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



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 postupu programom QtiPlot (pozri na strane 41) 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.

Jeden obrázok má hodnotu tisíc slov.

STARÉ ČÍNSKE PRÍSLOVIE

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

1. *Modul stupnice* grafu zvolíme tak, aby graf bol dostatočne veľký, t. j. interval nezávisle premennej má byť zobrazený na „vodorovnej" osi viac ako na dvoch tretinách „vodorovného" rozmeru grafu a analogicky interval na „zvislej" osi. Pod pojmom *modul stupnice* rozumieme podiel intervalu nameraných (v prípade extrapolácie potrebných) hodnôt fyzikálnej veličiny k dĺžke osi, povedzme v mm, na ktorú chceme interval zobraziť. Napr. obrázok 33 znázorňuje graf, v ktorom keď zvolíme dĺžky osí 120 mm bude modul vodorovnej stupnice $M_1 = (90\,\mathrm{V} - 40\,\mathrm{V})/120\,\mathrm{mm} = 0{,}416\,6\,\mathrm{V/mm}$ a zvislej stupnice $M_2 = (7\,\mathrm{A} - 1\,\mathrm{A})/120\,\mathrm{mm} = 0{,}05\,\mathrm{A/mm}$.

2. Osi vyznačíme plnou úsečkou a označíme jednotkami v *okruhlej zátvorke*, v ktorých je fyzikálna veličina vynášaná. Osi nekalibru-

- chyby experimentátora,
- nepresné metódy vyhodnocovania meraní,
- vplyv linearizácie, interpolácie a zaokrúhľovania,
- 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 jednotlivých 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 predošlom 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 hodota 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* (od-

bola vyrovnaná, t. j. nemala fyzikálne neopodstatnené skoky, zalomenia a extrémy, aby bola dostatočne hladká, aby približne rovnaký počet nameraných bodov bol nad i pod čiarou a súčet štvorcov nameraných hodnôt od čiary by mal byť čo najmenší. Majme stále na pamäti, že čiara v takomto grafe má viac-menej kvalitatívny význam.

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

Zhrnutie

- Obrys grafu nesmie byť nikdy nakreslený hrubšou čiarou, ako čiary v ploche grafu, taktiež úsečky, ktoré vyznačujú chyby meraných hodnôt, nemôžu byť výraznejšie ako vlastné 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 mínusky (malé písmená) písma z rodiny Sans Serif.
- Osi grafu nemajú byť dlhšie, ako určuje výskyt pokusných bodov, v grafe teda *nemajú byť prázdne plochy*. Osi nemusia začínať nulovou hodnotou.
- Vhodným tvarom grafu je obvykle štvorec alebo obdĺžnik (na ležato). Uzavretie grafu do štvorca alebo obdĺžnika zjednodušuje určenie hodnôt jednotlivých bodov. Kóty môžeme na protiľahlých osiach opakovať bez doplnenia čísel.
- Poznáme šesť hlavných druhov (typov) grafov:
  - bodový garf (scattergram),
  - čiarový (priebehový) graf (line graph),
  - stĺpcový graf (bar graph),

Príručka je určená všetkým, ktorí potrebujú rýchle zvládnuť 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*

[3] *Elektronická verzia príručky, doplnky a opravy sú prístupné na URL adresách* `http://people.tuke.sk/ladislav.sevcovic/` *a* `http://people.tuke.sk/jan.busa/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.*

Záver

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

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

Tabuľka 2: Porovnanie parametrov fitovania pre referenčné dáta 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 Squres*), `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	`Chi^2/doF` = 12,727 3	`chi-square` = 127,3
		`SQ` = 127,272 72	`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	`Chi^2/doF` = 292,002	`chi-square` = 1168,008 876
		`SQ` = 1 168,088 77	`Chi^2` = 1 168,008	

vznikali v priebehu práce autora na projekte KEGA *Využitie Open-Source softvéru vo výučbe na vysokých školách*. Cieľom nebolo vykonanie nejakej 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 *tančnými hodnotami nezávisle premennej veličiny, pretože číselné spracovanie výsledkov je pri takýchto meraniach zložitejšie (ťažšie), ako pre ekvidištančné merania, napriek tomu, grafické riešenie je vo všeobecnosti nepresnejšie. Spomínané postupy a metódy však stratili na význame v súvislosti s rozvojom výpočtovej techniky a jej aplikácií v experimentálnej praxi.*

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

[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.*

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 vážny nedostatok, s ktorým sme sa počas práce s programom QtiPlot stretli.

Záverom ešte jeden postreh, zo skúsenosti odporúčame otvárať uložené projekty programu Kpl klikom[22] 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 síce formálneho charakteru, lebo graf ľahko upravíte do pôvodneho stavu (ak si ho ešte s odstupom času pamätáte :-), ale dokážu znepríjemniť pôžitok z už vykonanej práce.

Učenie a bádateľská práca je zaujímavá, často aj vzrušujúca činnosť. Keď 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.

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

Venujem mojej dcére
Alexandre

Použitá literatúra

BRANDEJS, M. 2003. *Linux – Praktický průvodce*. Brno : Konvoj, 2006, 2. vydanie, ISBN 80-7302-050-5

BRUNOVSKÁ, A. 1990. *Malá optimalizácia.* Bratislava : Alfa, 1990, ISBN 80-05-00770-1

BUŠA, J. 2006. *Octave – Rozšírený úvod*. Košice, 2006, ISBN 80-8073-595-6

DÁVID, A. 1988. *Numerické metódy na osobnom počítači*. Bratislava : Alfa, 1988

GARCIA, A., L. 2000. *Numerical Methods for Physics*. New Jersey : Prentice-Hall, 2000, ISBN 013-906744-2

KAUKIČ, M. 1998. *Numerická analýza I. Základné problémy a metódy*. Žilina : MC Energy s. r. o. 1998

KAUKIČ, M. 2006. *Základy programovania v PyLabe.* Košice, 2006, ISBN 80-8073-634-0

KUDRACIK, F. 1999. *Spracovanie experimentálnych dát.* Bratislava : Univerzita Komenského, 1999, ISBN 80-223-1327-0

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

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`

PAZOUREK, J. 1992. *Simulace biologických systému*. Praha : GRADA, 1992, ISBN 80-85623-13-7

PETROVIČ, P. – NADRCHAL, J. – PETROVIČOVÁ, J. 1989. *Programovanie a spracovanie dát I., II.* Košice : Edičné stredisko UPJŠ, 1989

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

PRESS, W. H. et al. 1992. *Numerical Recipes in C – The Art of Scienti-*

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“.

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

ISBN 80-8073-638-3

Sadzba programom pdfTEX

Poznámky