

SPRACOVANIE A VIZUALIZÁCIA EXPERIMENTÁLNYCH DÁT

Ladislav ŠEVČOVIČ

<http://people.tuke.sk/ladislav.sevcovic>

Iste ste sa už ocitli v situáciách, že sa od vás chcel (niekedy aj dosť rýchlo) konkrétny výsledok a vy ste nevedeli kam z konopí . . .

MICHAL KAUKIČ, NUMERICKÁ ANALÝZA I.

ZNÁME MATEMATICKO-GRAFICKÉ PROGRAMY

- Gnumeric a Calc z kancelárskeho balíka OpenOffice sú plnohodnotnou náhradou za komerčný program Excel z MS Office, ďalej sú to

ZNÁME MATEMATICKO-GRAFICKÉ PROGRAMY

- 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,
- GNUPLOT,
- Octave a Octplot ako grafický výstup,
- PyLab,

ZNÁME MATEMATICKO-GRAFICKÉ PROGRAMY

- 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,
- GNUPLOT,
- Octave a Octplot ako grafický výstup,
- PyLab,
 - QtiPlot,
 - Kpl.

PROGRAM QtiPlot 0.8.5

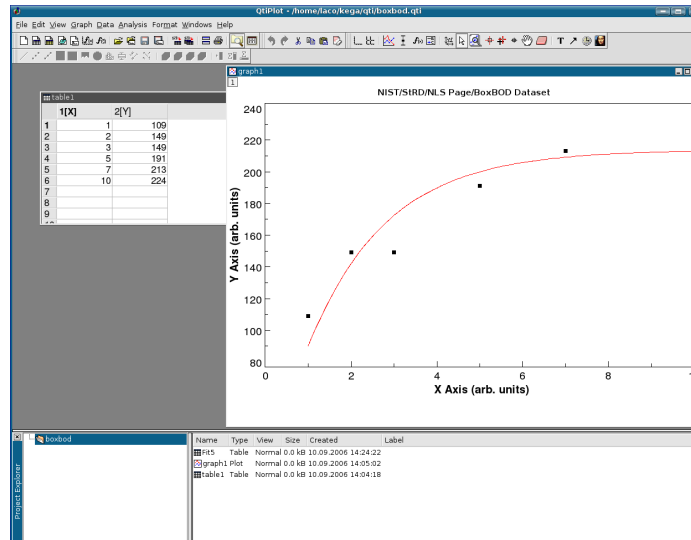
- Výkonný programový balík na analýzu dát a kreslenie grafov
- <http://soft.proindependent.com/qtiplot.html>

PROGRAM QtiPlot 0.8.5

- Výkonný programový balík na analýzu dát a kreslenie grafov
- <http://soft.proindependent.com/qtiplot.html>
- **Tabuľkové okno** – zobrazuje dáta na analýzu a na tvorbu grafu

PROGRAM QtiPlot 0.8.5

- Výkonný programový balík na analýzu dát a kreslenie grafov
- <http://soft.proindependent.com/qtiplot.html>
- **Tabuľkové okno** – zobrazuje dáta na analýzu a na tvorbu grafu
- **Grafické okno** – zobrazuje graf a výsledky „grafickej analýzy“



Obrázok 1: Grafické okno programu QtiPlot

OPTIMALIZAČNÉ METÓDY V PROGRAME QtiPlot 0.8.5

OPTIMALIZAČNÉ METÓDY V PROGRAME QtiPlot 0.8.5

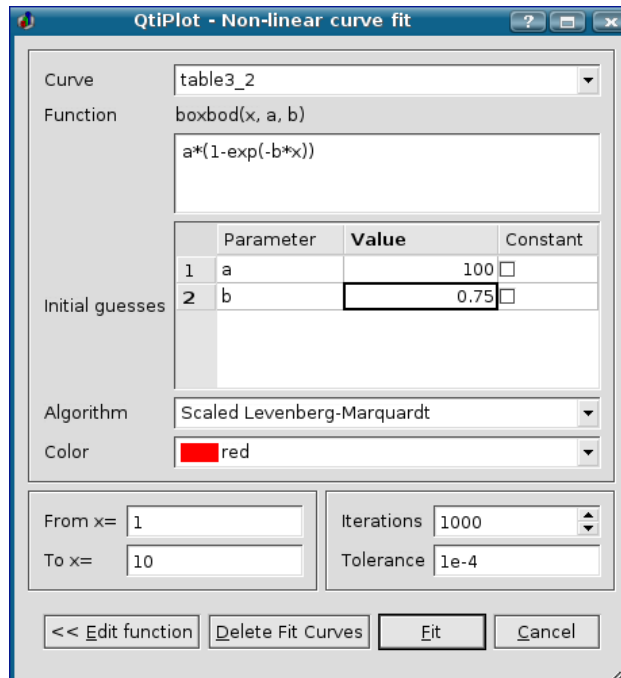
- Negradientná *Nelderova-Meadova metóda*

OPTIMALIZAČNÉ METÓDY V PROGRAME QtiPlot 0.8.5

- Negradientná *Nelderova-Meadova metóda*
- Gradientná *Levenbergova-Marquardtova metóda*

OPTIMALIZAČNÉ METÓDY V PROGRAME QtiPlot 0.8.5

- Negradientná *Nelderova-Meadova metóda*
- Gradientná *Levenbergova-Marquardtova metóda*



HLAVNÉ ČRTY METÓDY NAJMENŠÍCH ŠTVORCOV

- ▶ Majme nameranú funkčnú závislosť $f_i = f(x_i)$ v bodoch $i = 1, 2, \dots, n$.

HLAVNÉ ČRTY METÓDY NAJMENŠÍCH ŠTVORCOV

- ▶ Majme nameranú funkčnú závislosť $f_i = f(x_i)$ v bodoch $i = 1, 2, \dots, n$.
- ▶ Odchýlky modelovej F^* a experimentálnej funkcie f_i , vypočítané v nameraných bodoch, označíme e_i

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

HLAVNÉ ČRTY METÓDY NAJMENŠÍCH ŠTVORCOV

- ▶ Majme nameranú funkčnú závislosť $f_i = f(x_i)$ v bodoch $i = 1, 2, \dots, n$.
- ▶ Odchýlky modelovej F^* a experimentálnej funkcie f_i , vypočítané v nameraných bodoch, označíme e_i

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

Ďalej označíme

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

HLAVNÉ ČRTY METÓDY NAJMENŠÍCH ŠTVORCOV

- ▶ Majme nameranú funkčnú závislosť $f_i = f(x_i)$ v bodoch $i = 1, 2, \dots, n$.
- ▶ Odchýlky modelovej F^* a experimentálnej funkcie f_i , vypočítané v nameraných bodoch, označíme e_i

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

Ďalej označíme

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

- ▶ Úlohou je nájsť také odhady $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_k$ parametrov $p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*$, pre ktoré funkcia Φ (označovaná tiež ako *účelová* alebo *kriteriálna*) nadobúda minimum.

HLAVNÉ ČRTY METÓDY NAJMENŠÍCH ŠTVORCOV

- ▶ Majme nameranú funkčnú závislosť $f_i = f(x_i)$ v bodoch $i = 1, 2, \dots, n$.
- ▶ Odchýlky modelovej F^* a experimentálnej funkcie f_i , vypočítané v nameraných bodoch, označíme e_i

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

Ďalej označíme

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

- ▶ Úlohou je nájsť také odhady $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_k$ parametrov $p_1^*, p_2^*, \dots, p_k^*$, pre ktoré funkcia Φ (označovaná tiež ako *účelová* alebo *kriteriálna*) nadobúda minimum.
- ▶ Nutnou podmienkou pre minimum je potom splnenie rovnice

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

χ^2 TEST KVALITY FITOVANIA

- Predpokladáme, že máme k dispozícii n dvojíc meraných hodnôt (x_i, f_i) , pričom chyba veličiny x_i je zanedbateľne malá a chyba merania veličiny f_i je známa, rovná sa σ_{f_i} .

χ^2 TEST KVALITY FITOVANIA

- Predpokladáme, že máme k dispozícii n dvojíc meraných hodnôt (x_i, f_i) , pričom chyba veličiny x_i je zanedbateľne malá a chyba merania veličiny f_i je známa, rovná sa σ_{f_i} .
- **Optimálny postup** pre dáta s normálnou distribúciou šumu je hľadanie **váhovanej sumy štvorcov rezíduí**

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{F(x_i, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_k) - f_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2. \quad (4)$$

χ^2 TEST KVALITY FITOVANIA

- ▶ Predpokladáme, že máme k dispozícii n dvojíc meraných hodnôt (x_i, f_i) , pričom chyba veličiny x_i je zanedbateľne malá a chyba merania veličiny f_i je známa, rovná sa σ_{f_i} .
- ▶ **Optimálny postup** pre dáta s normálnou distribúciou šumu je hľadanie **váhovanej sumy štvorcov rezíduí**

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{F(x_i, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_k) - f_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2. \quad (4)$$

- ▶ Vo všetkých prípadoch χ^2 slúži, ako **indikátor zhody** medzi experimentálnymi a očakávanými hodnotami nejakej premennej.

χ^2 TEST KVALITY FITOVANIA

- ▶ Predpokladáme, že máme k dispozícii n dvojíc meraných hodnôt (x_i, f_i) , pričom chyba veličiny x_i je zanedbateľne malá a chyba merania veličiny f_i je známa, rovná sa σ_{f_i} .
- ▶ **Optimálny postup** pre dáta s normálnou distribúciou šumu je hľadanie **váhovanej sumy štvorcov rezíduí**

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{e_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{F(x_i, \hat{p}_1, \dots, \hat{p}_k) - f_i}{\sigma_{f_i}} \right)^2. \quad (4)$$

- ▶ Vo všetkých prípadoch χ^2 slúži, ako **indikátor zhody** medzi experimentálnymi a očakávanými hodnotami nejakej premennej.
- ▶ Praktické pravidlo pre **dobrý výsledok fitovania** má tvar

$$\chi^2 \approx n - k \quad (5)$$

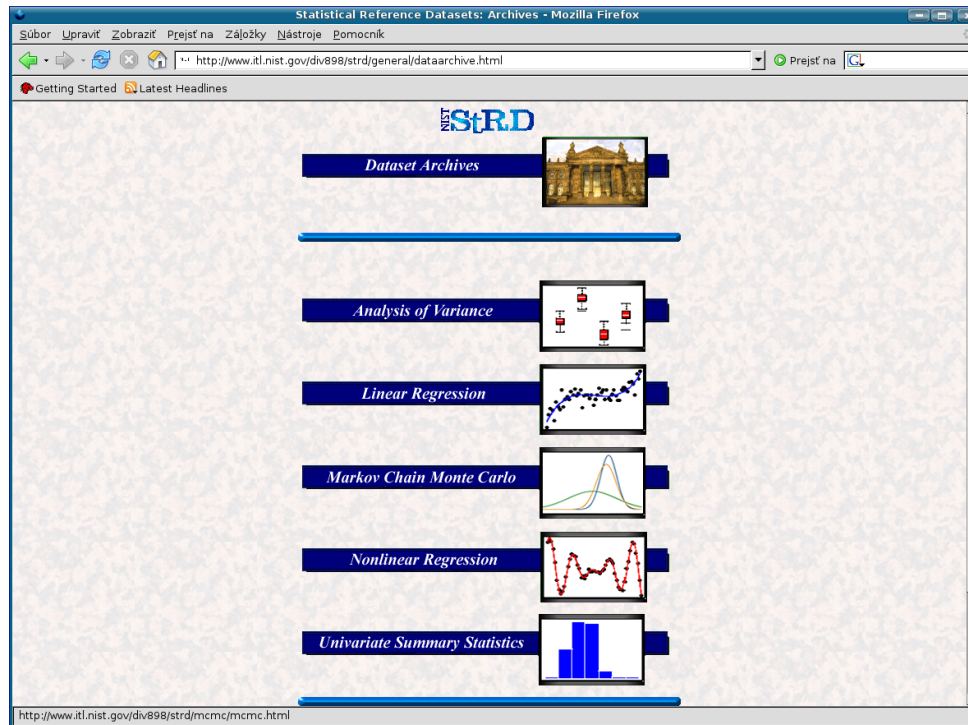
a platí pre jednu sériu meraní.

AKO SME TESTOVALI

- NIST – National Institute of Standards and Technology
- <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/general/dataarchive.html>

AKO SME TESTOVALI

- NIST – National Institute of Standards and Technology
- <http://www.itl.nist.gov/div898/strd/general/dataarchive.html>



ZÁVER

Tabuľka 1: 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 Squares*) a χ^2/doF je redukovaná hodnota χ^2 , 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	$\chi^2/\text{doF} = 12,727 3$	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	$\chi^2/\text{doF} = 292,002$	chi-square = 1168,008 876
		SQ = 1 168,088 77	$\chi^2 = 1 168,008$	

- Program QtiPlot počíta redukovanú hodnotu χ^2

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n - k'}, \text{ označená je ako } \text{Chi}^2/\text{doF} \quad (6)$$

- Program QtiPlot počíta redukovanú hodnotu χ^2

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n - k'}, \text{ označená je ako } \text{Chi}^2/\text{doF} \quad (6)$$

- a štandardná neistota parametra je vypočítaná podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{qti}} = \sqrt{\frac{(\text{cov})_{ii}}{\text{Chi}^2/\text{doF}}}. \quad (7)$$

- Program QtiPlot počíta redukovanú hodnotu χ^2

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n - k'}, \text{ označená je ako } \text{Chi}^2/\text{doF} \quad (6)$$

- a štandardná neistota parametra je vypočítaná podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{qti}} = \sqrt{\frac{(\text{cov})_{ii}}{\text{Chi}^2/\text{doF}}}. \quad (7)$$

- NIST údaj štandardnej neistoty parametra počíta podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{nist}} = \sqrt{(\text{cov})_{ii}}, \quad (8)$$

kde $(\text{cov})_{ii}$ je v oboch prípadoch *kovariančná matica* parametrov regresie.

- Program QtiPlot počíta redukovanú hodnotu χ^2

$$\tilde{\chi}^2 = \frac{\chi^2}{n - k'}, \text{ označená je ako } \text{Chi}^2/\text{doF} \quad (6)$$

- a štandardná neistota parametra je vypočítaná podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{qti}} = \sqrt{\frac{(\text{cov})_{ii}}{\text{Chi}^2/\text{doF}}}. \quad (7)$$

- NIST údaj štandardnej neistoty parametra počíta podľa vzťahu

$$\sigma^{\text{nist}} = \sqrt{(\text{cov})_{ii}}, \quad (8)$$

kde $(\text{cov})_{ii}$ je v oboch prípadoch *kovariančná matica* parametrov regresie.

- Pri rovnosti kovariančných matic, potom pre *súvis oboch údajov* platí

$$\sigma^{\text{nist}} = \sigma^{\text{qti}} \sqrt{\text{Chi}^2/\text{doF}}. \quad (9)$$

PROGRAM Kpl

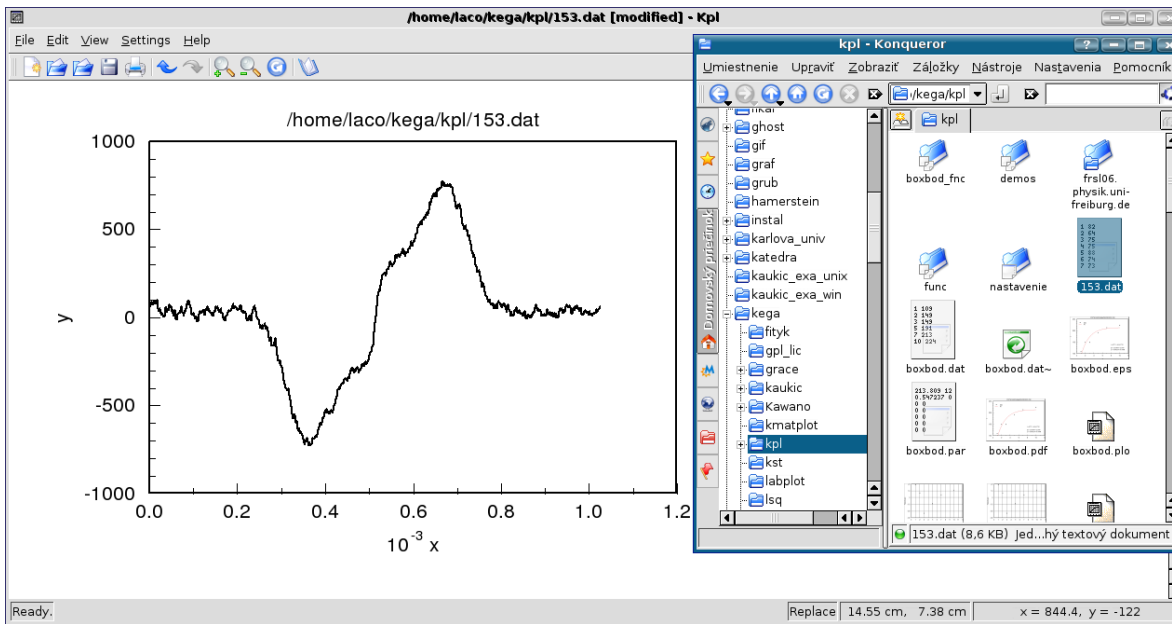
- Kpl 3.3 – vyhladzovanie, optimalizácia, derivovanie, integrovanie . . .

PROGRAM Kpl

- Kpl 3.3 – vyhladzovanie, optimalizácia, derivovanie, integrovanie ...
- <http://frsl06.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/>

PROGRAM Kpl

- Kpl 3.3 – vyhladzovanie, optimalizácia, derivovanie, integrovanie ...
- <http://frsl06.physik.uni-freiburg.de/privat/stille/kpl/>



Obrázok 2: Importovanie a zobrazenie dát metódou 'ťahaj a pusť'

POĎAKOVANIE

➤ Agentúra SR KEGA

➤ Ján BUŠA

<http://people.tuke.sk/jan.busa/kega>

➤ Michal KAUKIČ

➤ Peter MANN

<http://people.tuke.sk/peter.mann/ubuntu>

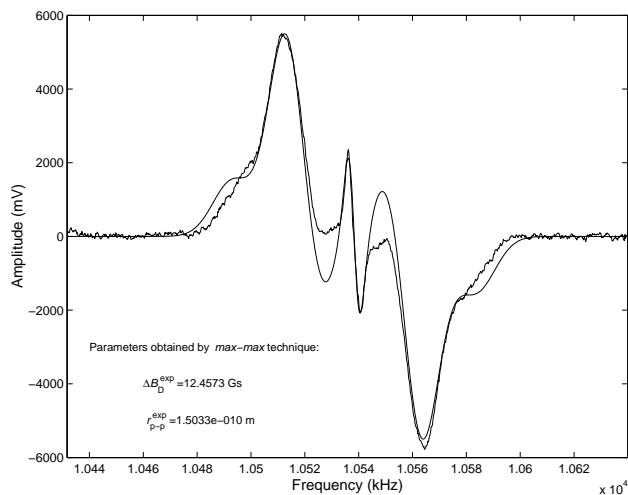
➤ Peter POPOVEC

Vzdialenosť protónov v H₂O $r = 1,58 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

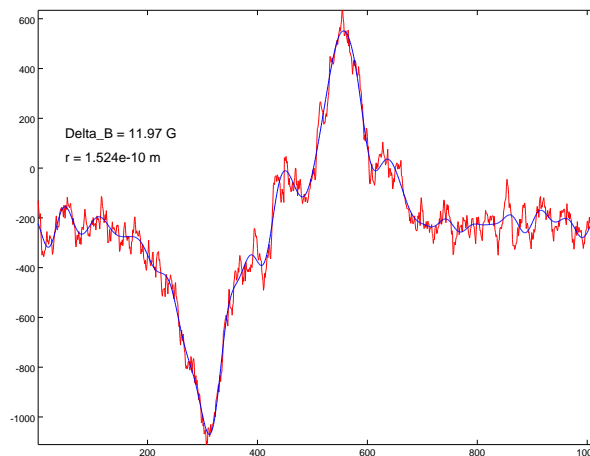
(A. Lötž a J. Voithländer: *Bruker Report*, Vol. 1, 40, 1991)

Vzdialenosť protónov v H_2O $r = 1,58 \cdot 10^{-10}$ m

(A. Lötž a J. Voitländer: *Bruker Report*, Vol. 1, 40, 1991)



Obrázok 3: Merané a simulované spektrum JMR protónov v $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
 $2\alpha = 10,7$ G (simulácia)
 $\Delta B_{\text{exp}} = 12,46$ G
 $r_{\text{exp}} = 1,503 \cdot 10^{-10}$ m



Obrázok 4: Jeden záznam spektra JMR $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ filtrovaný FFT
 $\Delta B_{\text{exp}} = 12,12$ G
 $r_{\text{exp}} = 1,517 \cdot 10^{-10}$ m