

Vysoká škola strojní a textilní v Liberci
nositelka Řádu práce

Fakulta textilní

obor 31 - 20 - 8
automatizované systémy řízení
ve spotřebním průmyslu

Katedra technické kybernetiky

PROGRAMOVÉ VYBAVENÍ PRO PROVOZ SPECIALIZOVANÝCH
LABORATOŘÍ ÚVSH

J A N A B A B Á K O V Á

Vedoucí práce: RNDr. Klára Císařová, KTK VŠST Liberec

Konsultant: Ing. Ota Lang

KTK ASŘ TF 117

Rozsah práce a příloh

Počet stran 54

Počet příloh 9

11.5.1987

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

pro
s. Janu B a b á k o v o u
obor
31-20-8 ASŘ ve spotřebním průmyslu

Vedoucí katedry Vám ve smyslu nařízení vlády ČSSR č. 90/1980 Sb., o státních závěrečných zkouškách a státních rigorózních zkouškách, určuje tuto diplomovou práci:

Název tématu:
Programové vybavení pro provoz specializovaných
laboratoří ÚVSH - Ústav pro vědeckou soustavu
hospodaření, s návrhem aplikací pro textilní
průmysl

Zásady pro vypracování:

1. Prostudovat problematiku specializovaných laboratoří ÚVSH.
2. Analyzovat potřeby a možnosti využití výpočetní techniky u zadavatele.
3. Provést algoritmizaci a naprogramování problému v souladu s technickými možnostmi a potřebami RIA laboratoře ÚVSH.

VYSOKÁ ŠKOLA STROJNÍ A TEXTILNÍ
Ústřední knihovna
LIBEREC 1, STUDENTSKÁ 6
PSČ 461 17

V 36 / 87 T

M Í S T O P Ř Í S E Ž N Ě _ P R O H L Á Š E N Í

Místopřísežně prohlašuji, že jsem diplomovou práci
vytvořila sama s použitím uvedené literatury.

V Liberci 11.5.1987

Jana Babáková
Jana Babáková

O B S A H

1.	Úvod	str. 7
2.	Problematika specializovaných laboratoří ÚVSH	8
2.1.	Cíl budování RIA laboratoře	8
2.2.	Metodické zásady práce	8
2.3.	Radioimunoanalýza	10
2.4.	Ekonomické aspekty	12
3.	Potřeby a možnosti využití výpočetní techniky ve specializovaných laboratořích	13
3.1.	Počítače řady SMEP	14
3.1.1.	Minipočítač SM 4-20	15
3.2.	Současný stav	18
4.	Návrh struktury programového vybavení. Algoritmizace a naprogramování problému	19
4.1.	Program: Testování detektorů	19
4.1.1.	Popis programu	19
	Statistické charakteristiky pro zpracování souboru dat	
4.1.2.	Blokové schéma programu	24
4.1.3.	Výpis z programu	25
4.1.4.	Seznam proměnných	25
4.2.	Program: Kalibrační řada	26
4.2.1.	Popis programu	26
	Aproximace - metoda numerické matematiky	
	Výpočet hodnot funkce - Hornerovo schéma	
	Určení kořene funkce - metoda půlení intervalu	
	Grafický výstup funkce	
4.2.2.	Blokové schéma programu	41
4.2.3.	Výpis z programu	42

4.2.4.	Použité procedury	42
4.2.5.	Seznam proměnných	42
4.3.	Program: Vlastní kalibrace	44
4.3.1.	Popis programu	44
4.3.2.	Blokové schéma programu	46
4.3.3.	Výpis z programu	47
4.3.4.	Seznam proměnných	47
5.	Závěr	48
6.	Literatura	51
7.	Seznam příloh	53
8.	Seznam použitých symbolů a zkratek	54

1. Ú V O D

V současné době si již nelze představit život bez využití vědy a techniky. Urychlené zavádění nových poznatků do praxe a zejména rozvoj elektroniky a mikroelektroniky povede k rychlému uplatňování automatizace a robotizace ve všech oblastech národního hospodářství.

Počítač se v současnosti stává nevyhnutelnou složkou systému zpracování informací. Zpracování informací představuje proces, v němž jsou konkrétní data přetvářena do výsledků, které je možné použít k řízení a rozhodování. Podle toho, z které oblasti se informace zpracovávají, můžeme hovořit o zpracování vědecko-technických informací, ekonomických informací, informací nenumernického charakteru apod. Vědecko-technické problémy vyžadují odvození matematických vzorců a vhodnou volbu numerické metody, která je těžištěm řešení těchto úloh. [5]

Při řešení řady vědecko-technických problémů je důležitá spolupráce, někdy i na úrovni pracovišť ČSAV a SAV, vysokých škol a výzkumných ústavů. Příkladem spolupráce je i tato zadaná diplomová práce. Jejím cílem je prostudovat problematiku specializovaných laboratoří Ústavu pro vědeckou soustavu hospodaření, konkrétně seznámit se s problematikou RIA laboratoře ÚVSH Bezno, analyzovat potřeby a možnosti využití výpočetní techniky a vypracovat návrh programového vybavení pro provoz RIA laboratoře ÚVSH Bezno.

2. PROBLEMATIKA SPECIALIZOVANÝCH LABORATOŘÍ ÚVSH.

2.1. Cíl budování RIA laboratoře

Specializované pracoviště radiosaturační analýzy náročným a složitým analytickým postupem sleduje některé steroidy v mléku a krevním séru hospodářských zvířat, mykotoxiny v krmivech a některá onemocnění zvířat. Výsledky jsou určeny zejména pro využití v živočišné výrobě, ve veterinární praxi a v krmivářství. Hlavní náplní práce je stanovení hladiny progesteronu v mléku plemenic pro sledování správnosti inseminací a zabřezávání krav a pro sledování jejich zdravotního stavu. Tyto výsledky jsou určeny pro plošné využití, laboratoř je koncipována pro sledování přibližně jednoho statisíce krav. Stanovení progesteronu je důležitým článkem komplexního počítačového systému denních informací pro chov skotu DISKOT, pro který poskytuje část vstupních údajů. Systém DISKOT je v současné době plošně zaváděn v celé ČSSR.

2.2. Metodické zásady práce

Metodika testu nebřezosti vychází ze znalosti estrálního cyklu krav a ze znalosti dynamiky koncentrace progesteronu během něho. Předpokládá se jeho střední délka jednadvacet dnů. Nízkou koncentrací progesteronu v mléku a nepřítomností žlutého tělíska je charakterizována říje. Období mezi říjemi je charakterizováno přítomností a funkcí žlutého tělíska. Koncentrace progesteronu je pak obecně vysoká. V případě březosti koncentrace progesteronu cyklicky neklesá

a drží se na vysoké hodnotě až do období těsně před porodem. Test nebřezosti spočívá ve stanovení koncentrace progesteronu c v mléku odebraném v den inseminace a při kontrole, tj. dvacátý první den po správně provedené inseminaci a umožňuje zjistit:

1/ Správnost termínu inseminace

$c < 0,5$ [ng] ... inseminace byla provedena ve vhodnou dobu

$c > 0,5$ [ng] ... inseminace nebyla provedena ve vhodnou dobu

Metoda objektivně rozliší pravou a nepravou říji. Při zjištění nepravé říje umožní vyhledání pravé říje.

2/ Nebřezí krávy dvacátý první den po správně provedené inseminaci

$c < 0,5$ [ng] ... kráva není březí

$c > 0,5$ [ng] ... kráva je pravděpodobně březí

Metoda umožní vyhledat krávy, které nezabřezly a jsou opět v říji. Tyto nebřezí krávy je pak možno obvykle za dalších cca jedenadvacet dnů inseminovat. Předností metody je zjištění nebřezosti jedenadvacet dnů po inseminaci. Ranná diagnostika březosti, kterou provádí veterinární lékař, zjišťuje toto cca padesát dnů po inseminaci.

Pokud dvacátý první den po inseminaci je zjištěna funkce žlutého tělíska, lze usuzovat na březost, ale s pravděpodobností cca 60%. Důvodem je fakt, že ne všechny krávy mají estrální cyklus dlouhý jedenadvacet dnů.

3/ Opakovanými odběry /min. pětkrát týdně/ určit dynamiku koncentrace progesteronu jednotlivých kusů a zjistit případně odchylky fyziologického stavu.

Tento postup má velký význam ve veterinární medicíně tím, že umožní přesnější určení celkového zdravotního stavu

nejen jednotlivců, ale i celého stáda.

2.3. R a d i o i m u n o a n a l ý z a

Do RIA laboratoře ÚVSH Bezno přicházejí od uživatele /jednotlivých farem/ žádanky o radioimunoanalýzu vzorků mléka plemenic. Na žádance je vždy uvedeno, o jakou farmu se jedná, datum, kdy byly vzorky odebrány a kolik vzorků žádanka obsahuje. U každého vzorku je zaznamenáno číslo krávy a údaj, který informuje o tom, že u krávy byla provedena inseminace nebo kontrola anebo že jde o odběr pro veterináře. Údaje na žádance představují vstupní údaje pro kartu 14, která je jedním ze vstupů systému DISKOT. Společně s žádankami jsou zasílány vzorky mléka, které jsou v RIA laboratoři před vlastním stanovením množství progesteronu podrobeny řadě operací:

- odstředěním vzorků v chlazené odstředivce se oddělí tři vrstvy:
 - tuk
 - tekutina /mléko bez tuku/
 - nečistoty
- po propíchnutí zkumavky se odleje střední vrstva, přidá se k ní protilátka a značený progesteron, který se značí radioaktivní látkou Jodič 125 I a nechá se čtyřiašvacet hodin v lednici inkubovat
- následující den se přidá gamaglobulin a apretar, protřepe se a znovu se odstředí. Na dně zůstane usazenina, zbytek se vylévá do odpadních barelů.

U usazeniny se měří aktivita gama záření, ze které se vychází při stanovení hladiny progesteronu ve vzorku mléka.

Množství progesteronu v konkrétních vzorcích mléka se vyhodnocuje na základě kalibrační řady, která je vytvářena

z nulového mléka, tj. z mléka, odebraného krávě pět až sedm dní po porodu, které v podstatě neobsahuje progesteron.

Kalibrační řada se skládá z:

- totálu TC - je dán celkovou aktivitou gama záření před oddělením usazeniny a zbytku a udává se v impulsích za sto sekund
- nulové vazby BØ - vzorek obsahující nulové mléko
- nespecifické vazby NSB - vzorek s nulovým mlékem a pufrem, neobsahující protilátku a apretar. Pokud vztáhneme aktivitu NSB k aktivitě totálu TC, měla by činit maximálně patnáct procent
- standardů B - vzorky, kde k nulovému mléku je přidáno přesně stanovené množství progesteronu v ng.

Vzorky kalibrační řady se podrobí obdobným operacím jako konkrétní vzorky mléka, z každého vzorku tedy získáme usazeninu, u níž měříme aktivitu gama záření. Velikost aktivity závisí na množství progesteronu ve vzorku mléka - čím více je progesteronu, tím méně je impulsů, přičemž závislost je exponenciální.

Pokud se nám podaří vyjádřit tuto závislost aktivity na koncentraci progesteronu, můžeme u konkrétních vzorků přiřadit naměřené aktivitě určitou koncentraci progesteronu.

Výsledky z RIA laboratoře jsou zaznamenávány do karty 14. Na základě vstupních údajů v kartě 14 o jednotlivých kravách a na základě výsledků testu ne březosti je v kartě 14 označen výsledek inseminace nebo předběžný výsledek zabřeznutí anebo údaj potřebný pro veterináře.

Výsledky testu jsou uvedeny i do příslušné žádanky. Zootechnik tak denně dostává přehled o dojnicích, kterým je potřeba odebrat mléko pro laboratoř anebo které je nutno okomžité

předat k léčení nebo k synchronizaci říje.

2.4. E k o n o m i c k é a s p e k t y

Ekonomický přínos radioimunoanalytické metody, která spočívá ve zlepšení reprodukčních ukazatelů, celkového zdravotního stavu a užitkovosti, byl prokázán provozem modelového zařízení od roku 1976. Pohybuje se v rozmezí 0,2 - 1 mil. Kčs na tisíc krav ročně. Roční provoz /300 tisíc vzorků/ vyžaduje náklady cca 3 - 3,9 mil. Kčs. Přínos činnosti laboratoře pro zemědělství lze předpokládat a finančně vyjádřit hodnotou 20 - 100 mil. Kčs.

[13]

3. POTŘEBY A MOŽNOSTI VYUŽITÍ VÝPOČETNÍ TECHNIKY VE SPECIÁLIZOVANÝCH LABORATORÍCH

Systém provozu RIA laboratoře byl vypracován autorským kolektivem Výzkumného ústavu veterinárního lékařství v Brně, vedeným doc. MVDr. Karlem Hruškou, CSc. K provozu je nezbytně nutná počítačová technika, která je součástí této laboratorní technologie. Využívá se při těchto operacích:

- 1/ Vstup údajů^z měřicího přístroje prostřednictvím děrné pásky a jejich korekce podle variačního koeficientu.
- 2/ Vlastní výpočet podle programu, který využívá maticový počet a vyžaduje vnitřní paměť minimálně 128 KB.
- 3/ Grafické znázornění kalibrací, aproximací a dalších výsledků analýzy, přičemž se předpokládá nakreslení asi tří tisíc grafů ročně.
- 4/ Děrování děrné pásky pro zasílání výsledků dálnopisem pro systém DISKOT a zápis laboratorního protokolu.
- 5/ Grafické znázornění dynamiky koncentrace progesteronu a dalších steroidů zjištěné opakovaným odběrem mléka nebo krve.

Je také propracováno využití výpočetní techniky pro organizaci provozu laboratoře, plánování spotřeby materiálu, statistické vyhodnocování práce za zvolené období a kontrolu měřicích přístrojů. [13]

V době zadání tématu této diplomové práce nemělo ÚVSH Bezno vlastní výpočetní techniku a ani dostatek pracovníků, kteří by se mohli zabývat programovým vybavením a ostatními

problémy, spojenými se zaváděním automatizace. Nové oddělení se však tvoří a příprava softwaru před dokončením instalace počítače má pro realizaci automatizovaného systému velký význam, především z hlediska okamžitého maximálního využití výpočetní techniky.

Na pracovišti radiosaturační analýzy má být nainstalován minipočítač řady SMEP I z ČSSR - SM4-20.

3.1. P o č í t a č e ř a d y S M E P

Malé počítače řady SMEP jsou univerzální počítače tříapůlté generace, výkonností a parametry srovnatelné se středními počítači třetí generace. Jejich podstatnou výhodou je:

- řádově nižší cena
- malá náročnost na prostory a jejich parametry /pro jejich instalaci postačuje plocha cca 20 m² bez klimatizace/
- schopnost fungovat samostatně i jako inteligentní terminál pro střední a velké počítače
- široká možnost přídatných zařízení pro různé oblasti uplatnění, např. obrazovkové terminály, interaktivní terminály pro počítačovou grafiku, vstupně-výstupní grafické zařízení, pružné disky apod.

Počítačové systémy řady SMEP jsou založeny na bázi modulů vytvořených obvody s vysokým stupněm integrace. Z těchto modulů se dají sestavit velmi variabilní konfigurace výpočetních systémů, přizpůsobených potřebám konkrétní aplikace. Je možné vytvořit rozsáhlé systémy, které mají vlastnosti univerzálních počítačů, ale i velmi jednoduché, předem naprogramované systémy účelově orientované na konkrétní

aplikaci.

Vysoká variabilnost malých počítačů SMEP vytváří velmi širokou paletu oblastí jejich ekonomicky zdůvodněného využití. Při aplikaci středních počítačů, ale i malých počítačů s univerzálními vlastnostmi se řešila otázka nejvhodnějšího využití jejich vlastností pro plnění konkrétní funkce, kterou vyžaduje dané konkrétní aplikace. V podstatě se problém redukoval na vytvoření vhodných uživatelských programů při využití systémových vlastností univerzálního počítačového systému.

Při aplikaci malého počítače se vychází z požadovaných funkcí, které má počítač plnit, a na základě toho se navrhuje konkrétní počítačový systém vytvořený z jednotlivých modulů. Takto zkonstruovaný systém má různý stupeň univerzálnosti a mnohé jeho vlastnosti jsou napřed určené, případně až pevně naprogramované. Kriteriem pro volbu konkrétního systému je ekonomické hledisko, tj. zabezpečení všech požadovaných funkcí při minimálních nákladech na realizaci počítačového systému. [7]

3.1.1. M i n i p o č í t a č S M 4 - 20

Charakteristika

Minipočítač SM 4-20 je nejvýkonnějším modelem řady SMEP I. Je použitelný pro sběr a předzpracování dat, pro řízení vědeckotechnických experimentů, měřicích ústředí, pro zpracování hromadných dat, pro řízení spojitých a nespojitých technologických procesů, pro vytváření informačních systémů a řízeníází dat, pro řízení počítačových sítí atd. Procesor zabezpečuje vykonávání základního souboru instrukcí SMEP a rozšířený soubor instrukcí EIS. Po vybavení procesorem s pohyblivou řádovou čárkou /FPP/ SM 4220 lze pro-

vádět operace v pohyblivé řádové čárce v jednoduché a dvojnásobné přesnosti. Ve srovnání s SM 3-20 má rychlejší procesor a s ohledem na větší kapacitu paměti 256 KB i širší možnosti aplikace.

Procesor CM 2401

Procesor CM 2401 základní jednotky SM 4-20 zajišťuje řízení a přidělování společné sběrnice jednotlivým periferním zařízením, vykonává aritmetické a logické operace a dekóduje instrukce.

K procesoru CM 2401 řadíme v širším smyslu

- vlastní procesor
- zaváděcí modul
- zakončovací modul společné sběrnice
- operátorský panel
- jednoduchý časovač.

Tyto moduly jsou vzájemně propojeny pomocí společné sběrnice kromě procesoru pohyblivé řádové čárky, který se připojuje přímo k vlastnímu procesoru.

Minipočítač SM 4-20 je vybaven polovodičovou pamětí NMOS, která umožňuje samoopravu jedné chyby a indikaci dvojnásobné chyby při přenosu.

Rozšiřující technické prostředky

Paměť s pružnými disky CM 5626

- umožňuje zápis, uchování a čtení informace na magnetické médium - pružný disk.

K hlavním výhodám pružných disků v porovnání s ostatními magnetickými médii patří zejména:

- nízké pořizovací náklady
- snadná manipulace a archivování
- relativně nízká doba přístupu.

Kazetová disková jednotka CM 5410 /2 kusy/

- slouží k zápisu, uchování a čtení většího objemu dat. Informace se uchovává na dvanáctisektorovém výměnném disku v kazetě se zakládáním shora.

Pásková jednotka CM 5311 /2 kusy/

- je určena pro záznam a snímání číslicové informace na standardní magnetickou pásku šíře 12,7 mm.

Snímač / děrovač děrné pásky SPTP/3 /PLR/ - CM 6204

- kombinovaný modul slouží pro vstup a výstup děrné pásky počítače. Patří k periferním zařízením s papírovým médiem.

Abecedněčíslicový obrazovkový terminál CM 7202

- slouží ke komunikaci s počítačem

Bořová tiskárna Robotron 6313/4 /NDR/

- patří mezi malé tiskárny se všemi moderními vlastnostmi současných tiskáren /různé typy písma, obousměrný tisk, optimalizace tisku, různý způsob zavádění papíru atd./

Programové vybavení

Operační systém FOBOS 3

- umožňuje práci v jednoprogramovém režimu, kdy je zpracováván jeden program, nebo v multiprogramovém režimu, kdy jsou prostředky počítačového systému rozděleny mezi dva programy.

Operační systém DOS RV 2

- jedná se o multiprogramový, událostmi řízený operační systém reálného času.

3.2. S o u č a s n ý s t a v

V RIA laboratoři jsou pomocí přístroje JING 401 měřeny úrovně "gama" záření u jednotlivých vzorků, zobrazované a zároveň zaznamenávané na pětistopou pásku. Vyhodnocování naměřených hodnot se momentálně provádí na počítači HP 85, jehož vlastníkem je VÚVeL Brno. K přenosu dat i výsledků je využíván dálnopis.

Ze vzdálenosti laboratoře od výpočetní techniky samozřejmě vyplývá ztráta operativnosti, možnost zanesení chyb při přenosu a mnoho dalších problémů. [13]

Zavedení vlastní výpočetní techniky by vedlo ke zvýšení přesnosti, k možnosti přímého zásahu RIA pracoviště do zpracovávání vkládáním různých dat apod.

Testování detekčního přístroje se provádí vždy jednou za čtrnáct dní.

Vstupní data načteme do matice kontrolních měření o rozměru 16×16 , kde číslo sloupce označuje číslo sondy a číslo diagonály označuje číslo vzorku.

Vyhodnocením naměřených hodnot chceme pro každou sondu zjistit korekční koeficient, který zajistí korekci naměřené hodnoty.

Při zpracovávání a vyhodnocování souboru naměřených hodnot se využívají statistické charakteristiky.

Statistické charakteristiky jsou čísla, která shrnují informace o základním souboru a velmi dobře soubor charakterizují. Způsob jejich výpočtu je jednoznačně definován.

V podstatě existují statistické charakteristiky dvojího druhu:

- charakteristiky polohy
- charakteristiky rozptýlení.

Nejrozšířenější charakteristikou polohy je aritmetický průměr $\bar{x}$, definovaný takto:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

kde N je rozsah souboru.

Vlastnosti aritmetického průměru:

- a/ součet odchylek hodnot proměnné od aritmetického průměru je roven nule,
- b/ odečteme-li od každé hodnoty proměnné libovolnou konstantu a , potom aritmetický průměr z rozdílu $x_i - a$ bude o tuto konstantu menší. Dělíme-li každou hodnotu proměnné nenulovou konstantou b , bude aritmetický průměr b -násobně menší,

c/ součet čtverců odchylek od aritmetického průměru je menší než součet čtverců odchylek od jiné libovolné konstanty $a \neq \bar{x}$.

Hodnota aritmetického průměru je bezprostředně ovlivněna velikostí všech hodnot souboru, reprezentuje tedy kvantitativní stránku souboru.

Nejdůležitější charakteristikou pro rozptýlení hodnot ve statistickém souboru je rozptyl s^2 . Je definován takto:

$$s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$$

Při výpočtu můžeme použít zjednodušení:

$$s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 - \bar{x}^2$$

Z rozptylu je odvozena směrodatná odchylka jako kladně vzata odmocnina rozptylu:

$$s = + \sqrt{s^2}$$

Rozptyl a směrodatná odchylka dávají informaci o tom, jak jsou naměřené hodnoty rozptýleny.

Srovnáme-li rozptýlení u různých veličin, je na závažnou absolutní povahu údajů. Proto se pro srovnání zavádí poměr směrodatné odchylky k průměru, tj. $v = \frac{s}{\bar{x}}$. Tato míra se nazývá

variační koeficient.

[2], [6]

Variační koeficient ukazuje na kvalitu /soudržnost/ souboru:

pokud $v \leq 0,33$... soubor je soudržný

$v > 0,33$... soubor obsahuje vybočující extrémní hodnoty.

Pokud je variační koeficient vysoký, dá se předpokládat, že uvnitř souboru je nejméně jedna extrémní hodnota.

[8]

Při vyhodnocování naměřených hodnot musíme brát v úvahu, že některé sondy mohou být chybné:

- 1/ může nastat případ, že sonda vůbec nepracuje. Tu můžeme poznat podle toho, že naměřené hodnoty jsou buď extrémně vysoké nebo extrémně nízké, to v případě, že sonda neměří, a vykazuje pouze zbytkovou aktivitu;
- 2/ nebo může nastat druhý případ, kdy sonda má velký rozptyl.

Takovéto sondy je nutné vyhledat a označit, eventuálně navrhnout na vyloučení z "provozního" měření.

První případ:

pro každou sondu získáme měření v jednotlivých sondách šestnáct hodnot. Pokud některá sonda nefunguje, projeví se to tak, že hodnota z této sondy se příliš odchyluje od aritmetického průměru a zvyšuje hodnotu variačního koeficientu. Podle kriteria soudržnosti souboru zjistíme nesoudržné soubory a hledáme a analyzujeme v nich extrémní hodnoty.

Sondu, u níž se vyskytne extrém častěji než třikrát, navrhneme na vyloučení.

Druhý případ:

podle požadavků RIA laboratoře navrhujeme k vyloučení i ty sondy, které mají korekční koeficient větší než dvě procenta průměru.

Při výpočtu korekčního koeficientu se vychází ze statistických charakteristik. Využívají se přitom již vypočtené aritmetické průměry šestnácti hodnot u jednotlivých vzorků:

$$AP_S = \frac{1}{16} \sum_{D=1}^{16} A_{S,D}$$

kde S označuje číslo vzorku, D číslo detektoru.

Dále se zjišťuje, o kolik procent R se odlišují jednotlivé hodnoty daného vzorku od aritmetického průměru:

$$O_{S,D} = (A_{S,D}/AP_S) \cdot 100 \quad \text{%%}$$

$$R_{S,D} = O_{S,D} - 100 \quad \text{%%}$$

Korekční koeficient sondy je dán aritmetickým průměrem procentuálních odchylek u jednotlivých sond:

$$Q_D = \frac{1}{16} \sum_{S=1}^{16} R_{S,D} \quad \text{%%}$$

směrodatná odchylka je dána vztahem:

$$SD_D = \frac{1}{16} \sqrt{\sum_{S=1}^{16} (R_{S,D} - Q_D)^2} \quad \text{%%} \quad [13]$$

Zjištěné korekční koeficienty slouží k opravě původních hodnot, naměřených v "gama" přístroji - k původní hodnotě se přičte část této hodnoty, úměrná korekčnímu koeficientu:

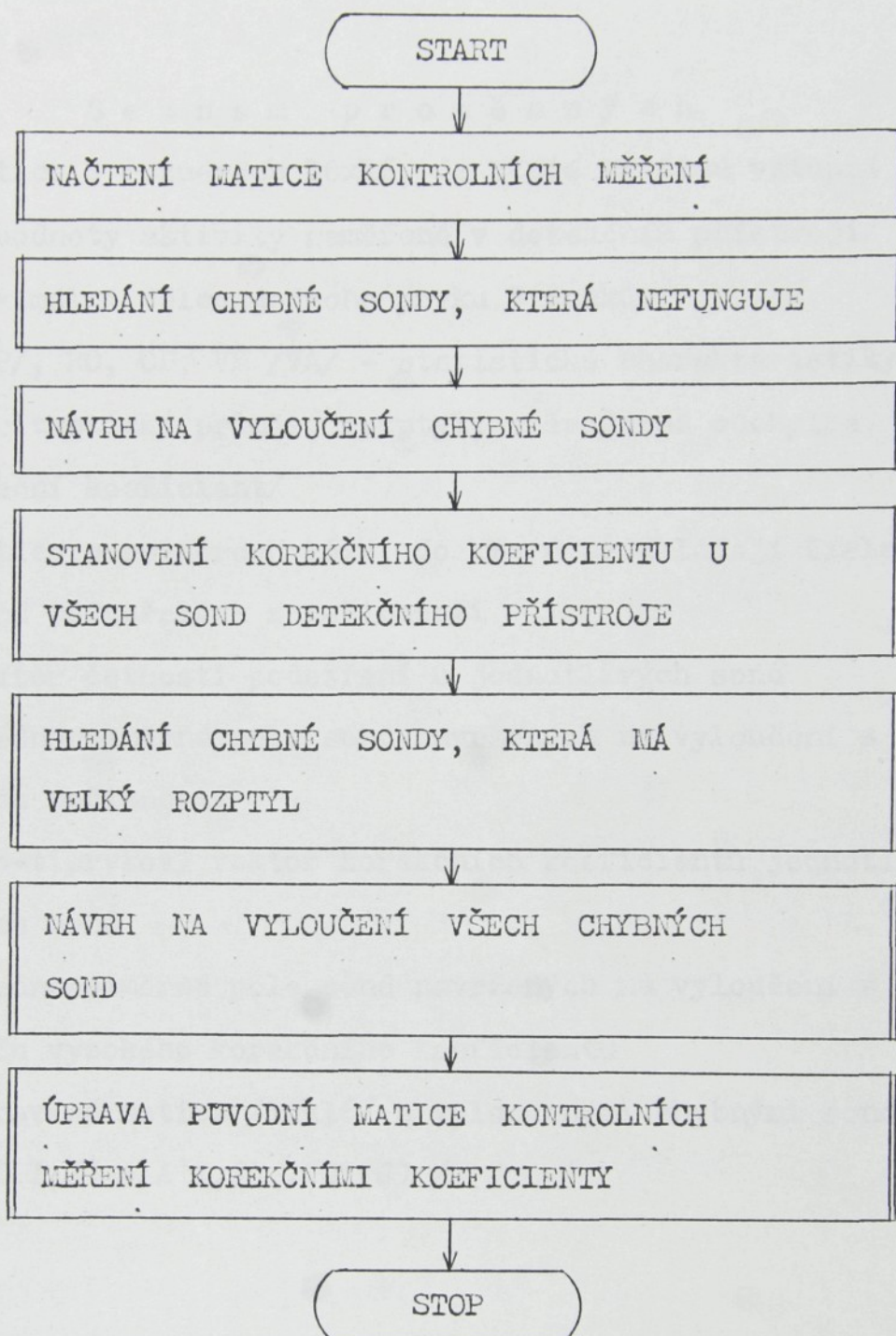
$A' = A + Q \cdot A$. Tento vztah můžeme upravit na tvar:

$$A' = (Q + 1) \cdot A$$

Korekční koeficienty mají velký význam, především z toho důvodu, aby nedocházelo při zpracování dalších hodnot, naměřených v detekčním přístroji, k vyhodnocování "falešných" údajů, které by mohly zkreslit výsledky a z nich vyvozené závěry.

Ve výstupním souboru dat budou uvedeny korekční koeficienty jednotlivých sond a sondy, které mají být vyloučeny.

4.1.2. B l o k o v é s c h é m a p r o g r a m u



4.1.3. V ý p í s z p r o g r a m u

Viz příloha č. 1

4.1.4. S e z n a m p r o m ě n n ý c h

- A - matice o rozměrech 16x16, do které se čtou vstupní data
/ hodnoty aktivity naměřené v detekčním přístroji/ o
maximální délce jednoho prvku 5 znaků
- AP /ARP/, RO, OD, VK /VA/ - statistické charakteristiky
/aritmetický průměr, rozptyl, směrodatná odchylka, va-
riační koeficient/
- B - matice o rozměrech 16x4, do které se ukládají čísla
sond podezřelých z nečinnosti
- C - vektor četnosti podezření u jednotlivých sond
- L1 - jednorozměrné pole sond navržených na vyloučení z dů-
vodu nečinnosti
- Q1 - 16-tiprvkový vektor korekčních koeficientů jednotli-
vých sond
- L2 - jednorozměrné pole sond navržených na vyloučení z dů-
vodu vysokého korekčního koeficientu
- D - upravená matice /16x16/ s vyloučenými chybnými sondami
/ $D(I,J) = A(I,J) \cdot Q1(J)$ /

4.2. Program: Kalibrační řada

4.2.1. Popis programu

Testování kalibrační řady se provádí každodenně a přináší s sebou nutnost řady zdlouhavých matematických výpočtů. Využití výpočetní techniky vede k usnadnění, urychlení a zefektivnění práce.

Program týkající se kalibrace se zabývá vyhodnocováním aktivity totálu TC, nespecifické vazby NSB, nulové vazby BØ a kalibrační řady standard B.

Vstupní soubor dat je dán hodnotami aktivit, naměřenými v detekčních sondách přístroje JNG 401, a to samozřejmě v těch, které prošly "kruhovým testem" jako vyhovující. Vstupní data je nutné ještě před zpracováním vynásobit příslušnými korekčními koeficienty detektorů, zjištěnými v předchozím programu.

Při vyhodnocování totálu je prověřována aktivita šestnácti zkumavek se vzorkem totálu, naměřené hodnoty se dále zpracovávají pomocí statistických charakteristik - zjišťuje se aritmetický průměr a variační koeficient. Aritmetický průměr by měl podle požadavků RIA laboratoře spadat do intervalu $\bar{x} = 25000 - 40000$ pulsů, variační koeficient by měl splňovat podmínku: $v \leq 2\%$.

Pokud je $v > 2\%$, upozorňuje nás to:

- buď na chybu dávkování, čili kontrola variačního koeficientu nám umožňuje kontrolu reprodukovatelnosti dávkování aktivity
- nebo na neseřízený "gama" počítač.

Aktivita NSB a standard B kalibrační řady se proměřuje vždy třikrát - vytváří se triplikát aktivit, aktivita BØ se proměřuje celkem šestkrát.

Kalibrační řada zahrnuje sedm standardů s různou koncentrací progesteronu, udávanou v ng / ml:

0,25; 0,50; 1,00; 2,00; 4,00; 8,00; 16,00.

Koncentrací progesteronu je nepřímo úměrná aktivita, čím vyšší je koncentrace progesteronu, tím nižší je aktivita měřeného vzorku.

Triplikáty aktivit se zpracovávají obdobně jako totál pomocí statistických charakteristik, zjišťuje se aritmetický průměr a variační koeficient. Pokud není splněna podmínka $v \leq 2\%$, je nutné vyřadit z triplikátu tu hodnotu, která se nejvíce odchyluje od aritmetického průměru, a nahradit ji průměrem zbývajících dvou hodnot. U triplikátu s opravenými hodnotami se opět zjistí aritmetický průměr a variační koeficient.

U NSB a BØ dále počítáme $\% \text{ NSB} / \text{TC}$ a $\% \text{ BØ} / \text{TC}$, a to tak, že aritmetický průměr NSB nebo aritmetický průměr BØ, zmenšený o průměrnou hodnotu NSB, vztáhneme k aritmetickému průměru totálu TC. U standardů kalibrační řady zjišťujeme procenta nulové vazby $\% \text{ B} / \text{BØ}$, která vypočítáme jako procentuálně vyjádřený podíl aritmetického průměru příslušného standardu a nulové vazby, přičemž od průměrné hodnoty B i BØ je odečtena průměrná hodnota NSB.

Každé koncentraci v kalibrační řadě odpovídají určitá procenta nulové vazby $\% \text{ B} / \text{BØ}$. Naší snahou je nalézt funkci, která by vyjadřovala vztah mezi těmito veličinami, formulovat matematický problém, který by aproximoval danou situaci. Matematická formulace problému je první úrovní modelování, které vzniká při řešení problémů matematickými metodami. Chyby, které při opisu matematickým aparátem vznikají, závisejí na tom, jakých zjednodušení jsme se při tomto mode-

lování dopustili. Tyto chyby jsou často zanedbatelné. Nejsou-li ovšem zanedbatelné, pak nezávisle na tom, s jakou přesností budou provedeny numerické výpočty, bude ve výsledku významná chyba.

Dalším zdrojem chyb pro formulovaný matematický problém je nepřesnost vstupních parametrů, protože vstupní údaje se pro nepřesnost měření, z kterých se získaly, mohou lišit od skutečných hodnot.

Druhá úroveň modelování vzniká při řešení matematického problému zvolenou numerickou metodou, kdy získáme algoritmus na řešení daného problému. U použité numerické metody je zapotřebí provést odhad chyby této metody. Musíme brát ale v úvahu, že čím ostřejší odhady nepřesnosti požadujeme, tím více dodatečné práce je potřeba na jejich získání.

Třetí úroveň modelování nastává při realizování daného algoritmu na reálném počítači, tj. na počítači s konečnou délkou slova. Protože většina čísel má nekonečné dekadické vyjádření, které musí být zaokrouhleno, nelze téměř nikdy provést aritmetické výpočty s úplnou přesností. Chyba, které se dopouštíme zaokrouhlením čísla, se nazývá zaokrouhlovací chyba. Tak jako chyby v empirických údajích, má i zaokrouhlovací chyba náhodný charakter, a proto je nesnadné je vyšetřit.

[4]

V našem případě můžeme koncentrace kalibrační řady považovat za množinu uzlových bodů $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ a procenta $\% B / B_0$ za hodnoty funkce y_i v uzlových bodech x_i , kde $i = 0, 1, \dots, n$. Cílem je nalézt aproximační funkci $F(x)$, která by byla proložena tak, aby co "nejlépe" aproximovala empirické body funkce y dané množinou bodů x .

Aproximace v numerické matematice spočívá většinou v aproximaci funkce $y(x)$ nějakou kombinací - nejčastěji lineární kombinací - funkcí z nějaké speciální třídy funkcí. Obecně lze vzít třídu $\{P_m(x)\}$, kde $P_m(x)$ je polynom m -tého stupně. Jiná třída, které se užívá vzhledem k důležitosti periodických funkcí, je třída goniometrických funkcí $\{\sin mx, \cos mx\}$, $m = 0, 1, \dots$. Dále existuje řada jiných tříd funkcí - třeba exponenciální funkce, které mohou vést ve speciálních případech k užitečným aproximacím. Pro obecné aplikace jsou však nejdůležitější polynomy a goniometrické funkce.

Předpokládejme, že aproximujeme funkci $y(x)$ lineární kombinací funkcí $f_m(x)$, takže

$$y(x) \approx a_0 f_0(x) + a_1 f_1(x) + \dots + a_m f_m(x) = F(x),$$

kde a_j , $j = 0, 1, \dots, m$, jsou konstanty.

Hlavním bodem problému aproximace je kritérium pro volbu konstant. Tři způsoby, jak to provést, vedou na tři typy aproximací:

- 1/ Interpolační aproximace, kde konstanty jsou zvoleny tak, že v bodech x_i souhlasí hodnoty aproximační funkce a jejích prvních r_i derivací s hodnotami funkce $y(x)$ a jejích příslušných derivací.
- 2/ Aproximace metodou nejmenších čtverců neboli aproximace v průměru, kde je účelem minimalizovat součet čtverců rozdílů $F(x_i) - y_i$.
- 3/ Čebyševova aproximace, kde cílem je minimalizovat maximum absolutní hodnoty rozdílu mezi $y(x)$ a její aproximací.

[1]

V konkrétním daném případě jsou hodnoty funkce y získány měřením, které je vždy zatíženo chybou, nejsou tedy dány

přesně. Proto nemá význam, aby se aproximační funkce ztožnila s danou funkcí v uzlových bodech, protože takováto funkce by reprodukovala chyby a naší snahou je chyby "vyhladit".

Ze tří typů aproximací vybereme aproximaci metodou nejmenších čtverců. Rozdíl mezi hodnotou $F(x)$ a naměřenou hodnotou y_i nazýváme reziduum měření

$$r_i = |F(x_i) - y_i|$$

Součet čtverců reziduí můžeme označit jako

$$Q = \sum_{i=0}^n r_i^2 = \sum_{i=0}^n (F(x_i) - y_i)^2.$$

Koeficienty $a_0, a_1, \dots, a_m$ v aproximační funkci $F(x)$ se určí tak, aby Q bylo minimální. Tedy

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 2 \sum_{i=0}^n (F(x_i) - y_i) \cdot \frac{\partial F(x_i)}{\partial a_k} = 0; \quad k = 0, 1, \dots, m,$$

přičemž
$$\frac{\partial F(x_i)}{\partial a_k} = f_k(x_i).$$

Z toho plyne:

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 2 \sum_{i=0}^n [a_0 f_0(x_i) + a_1 f_1(x_i) + \dots + a_m f_m(x_i) - y_i] f_k(x_i) = 0$$

Úpravou do maticového tvaru dostáváme:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n f_0(x_i)^2 & \sum_{i=0}^n f_0(x_i) f_1(x_i) & \dots & \sum_{i=0}^n f_0(x_i) f_m(x_i) \\ \sum_{i=0}^n f_1(x_i) f_0(x_i) & \sum_{i=0}^n f_1(x_i)^2 & \dots & \sum_{i=0}^n f_1(x_i) f_m(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=0}^n f_m(x_i) f_0(x_i) & \sum_{i=0}^n f_m(x_i) f_1(x_i) & \dots & \sum_{i=0}^n f_m(x_i)^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n f_0(x_i) y_i \\ \sum_{i=0}^n f_1(x_i) y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^n f_m(x_i) y_i \end{bmatrix}$$

Není-li bodů, v nichž jsme provedli měření, více než je parametrů v aproximujícím polynomu ($n \leq m + 1$), pak je aproximující polynom $F(x)$ shodný s interpolačním polynomem a ve všech uzlech platí: $r_i = 0$. Pokud jsme provedli měření ve více bodech, než je počet aproximujících funkcí

($n > m + 1$), pak není $F(x)$ obecně totožné s aproximovanou funkcí na celé množině $\{x_i\}$, ale má nejmenší střední kvadratickou odchylku vzhledem k aproximované funkci $y(x)$. [3]

Na základě zkušeností a poznatků RIA laboratoře jsou prověřovány následující aproximace:

LINEAR ... aproximace přímkou

KVADR ... aproximace polynomem druhého stupně

KUBIC ... aproximace polynomem třetího stupně.

Aproximace LINEAR

Mezi proměnnými x a y platí vztah $F(x) = ax+b$, kde a, b jsou neznámé parametry.

Koeficienty a, b určíme z podmínky, plynoucí z metody nejmenších čtverců:

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i + b))^2 = \min.$$

Aby tato podmínka pro extrém byla splněna, musí být parciální derivace výrazu Q podle a, b rovny nule:

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q}{\partial a} &= -2 \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)x_i = \\ &= -2 \left[\sum_{i=1}^n y_i x_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) a - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) b \right] = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial Q}{\partial b} &= -2 \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) \cdot 1 = \\ &= -2 \left[\sum_{i=1}^n y_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) a - nb \right] = 0 \quad .\end{aligned}$$

Tyto rovnice upravíme na tvar:

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right) b + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) a = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$n \cdot b + \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) a = \sum_{i=1}^n y_i$$

a jejich řešením obdržíme neznámé a, b :

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i x_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i}$$

$$a = \frac{n \sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i}$$

se střední lineární chybou

$$\xi_L = \left[\sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) \right] / (n - 1)$$

a se střední kvadratickou chybou

$$\xi_K = \sqrt{\left[\sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \right] / (n - 1)} \quad .$$

Vyšetřením výrazu $[a + \Delta a, b + \Delta b]$ se snadno zjistí, že toto řešení dává opravdu minimum.

[1], [3]

Aproximace KVADR a KUBIC

Volme za aproximující funkci polynom m -tého stupně

$/m = 2, 3/ :$

$$P_m(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots + a_1 x + a_0 .$$

Abychom vypočítali koeficienty a_j , $j = 0, 1, \dots, m$, vypočítáme parciální derivace výrazu Q , kde $Q = \sum_{i=1}^n (P_m(x_i) - y_i)^2$,

a položíme je rovny nule. Tím dostaneme

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 2 \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=0}^m a_j x_i^j - y_i \right) x_i^k = 0$$

kde $k = 0, 1, \dots, m$.

Tato rovnice vytváří soustavu $m + 1$ lineárních rovnic pro $m + 1$ neznámých a_j . Tato soustava se nazývá soustava normálních rovnic.

Úpravou do maticového tvaru dostaneme

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^0 x_i^0 & \sum_{i=1}^n x_i^0 x_i^1 & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^0 x_i^m \\ \sum_{i=1}^n x_i^1 x_i^0 & \sum_{i=1}^n x_i^1 x_i^1 & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^1 x_i^m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_i^m x_i^0 & \sum_{i=1}^n x_i^m x_i^1 & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^m x_i^m \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^0 y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^1 y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_i^m y_i \end{bmatrix}$$

a další úpravou získáme soustavu rovnic s neznámými koeficienty

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^m \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i^3 & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_i^m & \sum_{i=1}^n x_i^{m+1} & \sum_{i=1}^n x_i^{m+2} & \dots & \sum_{i=1}^n x_i^{2m} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_i^m y_i \end{bmatrix} \quad [3]$$

Nejrozšířenější metodou řešení soustavy lineárních rovnic je eliminační metoda, při níž se postupně vylučují neznámé.

Uvažujme soustavu n lineárních rovnic ve tvaru

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = a_{1,n+1}$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = a_{2,n+1}$$

$$\vdots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = a_{n,n+1}$$

a předpokládejme, že koeficienty a_{ij} jsou nenulové.

Odečteme-li první rovnici vynásobenou číslem a_{i1}/a_{11} od i -té rovnice pro $i = 2, \dots, n$, dostaneme tzv. první přidruženou soustavu. Nové koeficienty jsou dány vzorcem

$${}^1a_{ij} = a_{ij} - a_{i1} \cdot \frac{a_{1j}}{a_{11}}, \quad \begin{matrix} j = 1, 2, \dots, n+1 \\ i = 2, \dots, n \end{matrix}$$

Analogickým postupem obdržíme další přidružené soustavy: druhou rovnici soustavy vynásobenou číslem ${}^1a_{i2}/{}^1a_{22}$ pro $i = 3, \dots, n$ odečteme od i -té rovnice a dostaneme druhou přidruženou soustavu, kde

$${}^2a_{ij} = {}^1a_{ij} - {}^1a_{i2} \cdot \frac{{}^1a_{2j}}{{}^1a_{22}}, \quad \begin{matrix} j = 2, \dots, n+1 \\ i = 3, \dots, n \end{matrix}$$

atd.,

přičemž vylučujeme další proměnné, až převedeme původní soustavu na ekvivalentní soustavu:

$$x_1 + a'_{12}x_2 + \dots + a'_{1n}x_n = a'_{1,n+1}$$

$$0 + x_2 + \dots + a'_{2n}x_n = a'_{2,n+1}$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$0 + 0 + \dots + x_n = a'_{n,n+1} .$$

Matice této soustavy je trojúhelníková, protože má pod hlavní diagonálou samé nuly, a řešení takové soustavy rovnic je snadné. Nejprve se z poslední rovnice vypočte x_n a z dalších rovnic pak $x_{n-1}, \dots, x_1$.

Tuto metodu nazýváme Gaussovou metodou. Výpočet touto metodou můžeme rozdělit na dvě etapy:

- 1/ první etapou je proces eliminace - přímý chod, kterým převádíme řešenou soustavu na soustavu trojúhelníkovou,
- 2/ ve druhé etapě - zpětném chodu - následuje výpočet neznámých. [1]

Pro střední lineární chybu u aproximace polynomem platí vztah

$$\xi_L = \left[\sum_{i=1}^n (y_i - P_m(x_i)) \right] / (n - m - 1)$$

a pro střední kvadratickou chybu

$$\xi_K = \sqrt{\left[\sum_{i=1}^n (y_i - P_m(x_i))^2 \right] / (n - m - 1)} . \quad [3]$$

Abychom mohli navržené aproximace dobře porovnat, nalezneme u každé možnosti kořen x_{p_i} , $i = 1, 2, \dots, n$, aproximující funkce $F(x_i)$ rovné empirické hodnotě y_i .

U lineární aproximace zjistíme hodnotu x_{p_i} ze vztahu

$$x_{p_i} = \frac{y_i - b}{a} , \quad i = 1, \dots, n ,$$

kde a, b jsou koeficienty aproximační funkce $F(x)$.

U aproximace polynomem druhého stupně vycházíme při výpočtu x_{p_i} ze vzorce pro reálné kořeny kvadratické rovnice

$$xp_i = \frac{-a_1 \pm \sqrt{D}}{2a_2}, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$D = a_1^2 - 4 \cdot a_2 \cdot (a_0 - y_i)$$

kde a_0, a_1, a_2 jsou koeficienty aproximační funkce $P_2(x)$.
U aproximace polynomem třetího stupně předpokládáme, že žádný kořen tohoto polynomu nelze nalézt v uzavřeném tvaru, protože je-li tomu tak, dá se tento kořen obvykle snadno vypočítat /např. kořen kvadratické rovnice/. Musíme tedy hledat metodu, která vede k přibližnému řešení. Pro hledání kořenů polynomu $P_3(x)$ použijeme metodu půlení intervalu.
Pro zjednodušení značení zavedeme:

$$f(x_i) = P_3(xp_i) - y_i = a_3 xp_i^3 + a_2 xp_i^2 + a_1 xp_i + a_0 - y_i = 0$$

kde $a_j, j = 0, \dots, 3$ jsou koeficienty aproximační funkce $P_3(x)$.

Předpokládejme, že dovedeme nalézt takové dva body x_1, x_2 , že platí $f(x_1) \cdot f(x_2) < 0$ a že uvnitř intervalu $\langle x_1, x_2 \rangle$ je právě jeden kořen xp spojitě funkce $f(x)$.

V metodě půlení intervalu je interval $\langle x_1, x_2 \rangle$ dělen na dvě stejné části $\langle x_1, \bar{x} \rangle, \langle \bar{x}, x_2 \rangle$, kde $\bar{x} = (x_1 + x_2)/2$. Má-li být kořen určen s přesností ξ , pak délka intervalu, uvnitř kterého leží řešení, musí být rovna: $|x_2 - x_1| \leq \xi$. Pokud je tato podmínka splněna, pak $\bar{x}$ je aproximace kořene, pokud není splněna, pak je kořen obsažen v intervalu $\langle x_1, \bar{x} \rangle$ platí-li $f(x_1) \cdot f(\bar{x}) \leq 0$ nebo v intervalu $\langle \bar{x}, x_2 \rangle$ pro $f(x_1) \cdot f(\bar{x}) > 0$. Při výpočtu hodnoty $f(x)$ v bodě x_1 nebo $\bar{x}$ se postupuje podle Hornerova schematu.

$$\text{Vztah } f(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots + a_1 x + a_0 - y,$$

kde k výpočtu potřebujeme $2m-1$ násobení a m sčítání,
je upraven na tvar:

$$f(x) = (\dots ((a_m x + a_{m-1})x + a_{m-2})x + \dots + a_0),$$

kde k výpočtu potřebujeme jen m násobení a m sčítání.

Bylo dokázáno /Ostrovski, Pan/, že m násobení a m sčítání jsou dolní hranice, tj. Hornerovo schema je optimální algoritmus pro výpočet hodnot polynomu m -tého stupně, pokud ale nechceme vypočítat daný polynom ve velkém množství různých bodů.

Abychom obdrželi hodnotu $f(x)$, postupně vypočítáme

$$b_0 = a_0$$

$$b_1 = a_1 + b_0 \cdot x$$

$$b_2 = a_2 + b_1 \cdot x$$

$$\vdots$$

$$b_n = a_n + b_{n-1} \cdot x$$

kde $b_n = f(x)$.

Tento způsob výpočtu můžeme zapsat do Hornerova schematu:

$$\begin{array}{ccccccc} a_0 & a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ + & b_0 x & b_1 x & \dots & b_{n-1} x \\ \hline = b_0 & b_1 & b_2 & \dots & b_n = f(x) \end{array}$$

Podle hodnot $f(x_1)$ a $f(\bar{x})$ tedy vybereme nový interval, který je znovu půlen a celý proces se opakuje.

Nevýhodou metody půlení intervalu je velký počet kroků, výhodou je jednoduchá a snadná realizovatelnost na počítači.

Tato metoda konverguje pro libovolnou spojitou funkci. Ježiné omezení přesnosti, se kterou je kořen vypočítán, je tedy dáno počtem cifer, s nimiž se provádí výpočet. To znamená, že ježiné omezení přesnosti je zaokrouhlovací chyba v jednom kroku. [1],[3]

Při posuzování a vyhořnocování navržených modelů aproximace se vychází ze dvou hledisek:

- 1/ pro vyhodnocení modelu má význam velikost střední kvadratické chyby ξ_K : vybíráme tu aproximaci, která má nejmenší střední kvadratickou chybu,
- 2/ pro laboratorní potřeby je vyhodnocován výběrový korelační koeficient ρ_{xy} .

Koeficient korelace ρ_{xy} je statistický parametr charakterizující stupeň závislosti mezi dvěma náhodnými veličinami x, y . Výběrový korelační koeficient je definován vztahem

$$\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y},$$

kde σ_{xy} ... výběrová kovariance - představuje střední hodnotu součinu odchylek dvou náhodných proměnných x, y od jejich střední hodnoty $\bar{x}, \bar{y}$,

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

$\bar{x}$... výběrový průměr

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{n-1} \left[\sum_{i=1}^n x_i y_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i \right]$$

σ_x, σ_y ... výběrová směrodatná odchylka

$$\sigma_x = \sqrt{\sigma_x^2}$$

σ_x^2 ... výběrový rozptyl - představuje střední hodnotu dvojmoči odchylky náhodné proměnné x od její střední hodnoty $\bar{x}$

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \\ &= \frac{1}{n-1} \left[\sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right] . \end{aligned}$$

Po dosazení vztahů pro výběrovou kovariaci a výběrovou

směrodatnou odchylku obdržíme po úpravě rovnici pro výběrový koeficient korelace:

$$\rho_{xy} = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{\sqrt{n \left[\sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2 \right] \left[\sum_{i=1}^n y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 \right]}}$$

V případě, že korelační koeficient nabývá hodnot blízkých $|1|$, znamená to, že statistická závislost se blíží závislosti funkční. Pro $\rho_{xy} = 0$ nastává případ statistické nezávislosti.

2, 3, 13

U vybrané aproximace je vhodné určit citlivost metody, která udává, jakou nejmenší diferenci mezi dvěma koncentracemi je metoda schopna rozlišit.

Citlivost se určuje prostřednictvím nulové vazby, z tohoto důvodu se proměřují dva triplikáty, tzn. šest vzorků nulové vazby BØ. Z naměřených hodnot se vypočítá aritmetický průměr $\bar{x}$ a směrodatná odchylka SD. Směrodatná odchylka vymezuje dolní a horní hranici intervalu, do kterého spadají jednotlivé naměřené hodnoty, přičemž aritmetický průměr leží uprostřed intervalu: $x = \bar{x} \pm SD$. Pro určení citlivosti je rozhodující, kolik procent z aritmetického průměru činí hodnota výrazu $(\bar{x} - 2 \cdot SD)$. Pokud vybranou aproximační funkci položíme rovnu vypočteným procentům, můžeme zjistit koncentraci, která těmto procentům odpovídá. Velikost určené koncentrace odpovídá citlivosti zvolené aproximační metody.

Pro laboratorní potřeby je dále vyhodnocován tzv. padesátiprocentní intercept, tj. koncentrace odpovídající padesáti procentům B/BØ, protože právě v padesáti procentech B/BØ se dá většinou koncentrace zjistit s největší přesností.

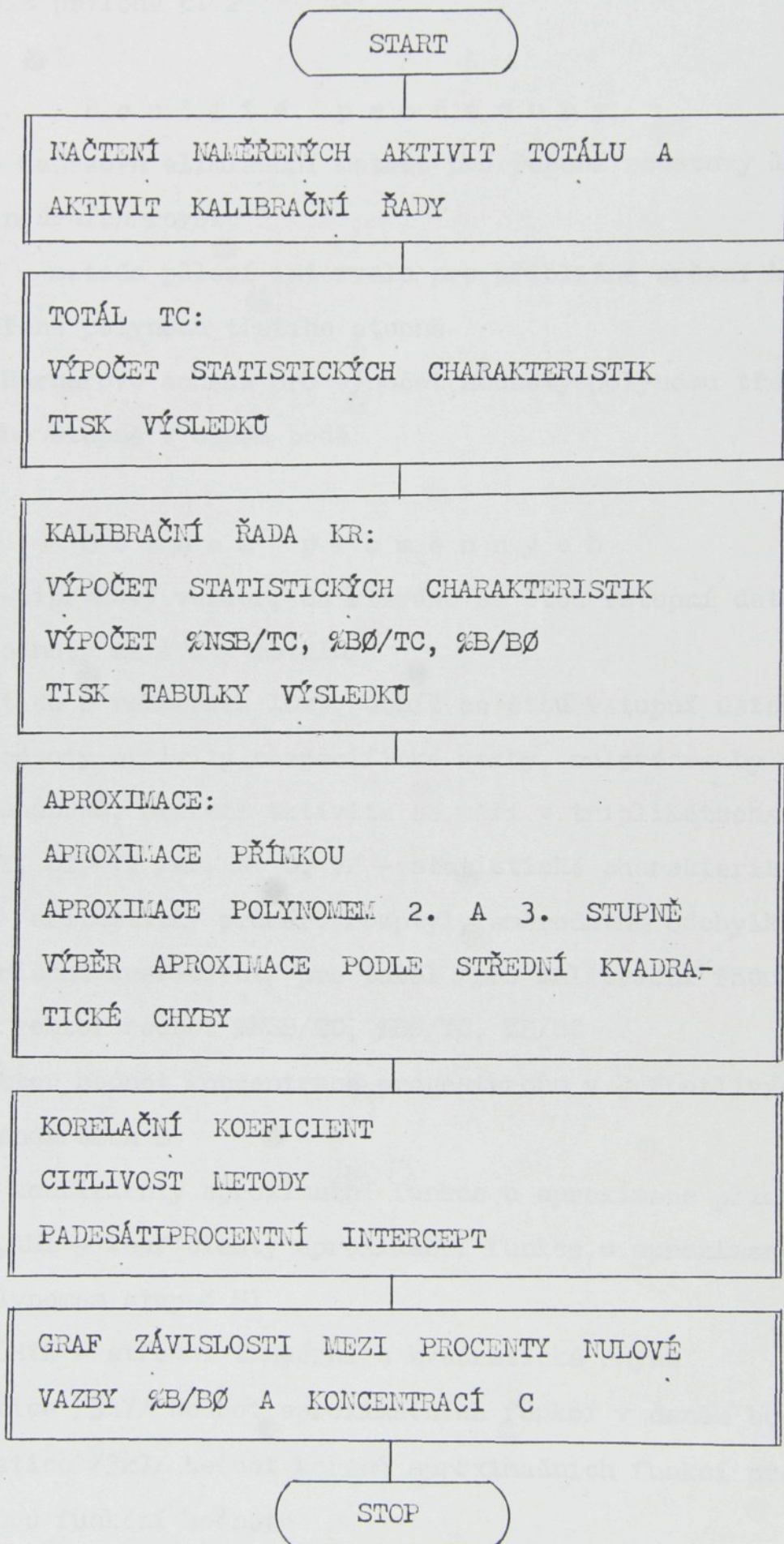
Dosažení dobré přehlednosti a názornosti vybrané aproximace umožňuje konstrukce grafické závislosti mezi procenty nulové vazby B/B_0 a koncentrací c , osu x ale volíme jako logaritmickou souřadnici $x = \log(c)$. To z toho důvodu, že chceme nelineární exponenciální závislost převést na přímkovou.

Při použití logaritmické souřadnice x u grafického znázornění je nutné i při aproximaci brát v úvahu, že $x_i = \log(c_i)$, nikoliv $x_i = c_i$, kde $i = 1$ až n a n je počet měření.

U grafického výstupu funkce na tiskárnu je souřadnice y dána řádkováním výstupního zařízení, souřadnice x jsou vypočteny a pomocí formátové konverze A jsou tištěny polem proměnných GRAF. Do grafu jsou vynášeny jak hodnoty x odpovídající koncentraci progesteronu /jsou značeny křížkem "X"/, tak hodnoty w zjištěné pro určitá $\%B/B_0$ z aproximační funkce /jsou značeny hvězdičkou "*"/. Označíme-li L jako pozici znaku pro hodnotu x , potom na vypočtenou pozici zaneseme znak pomocí příkazu $GRAF(L) = ZNAKL$. Obdobně znak pro hodnotu w zaneseme na vypočtenou pozici K příkazem $GRAF(K) = ZNAKA$. Po vytištění celého pole GRAF na tiskárně je nutné "zrušit" znaky pro hodnoty x a w na pozici L a K mezerou. Znaky pro tisk hodnot x a w , osy a mezery jsou zadány jako konstanty typu Hollerit příkazem DATA. [3]

Jako výsledek programu pro vyhodnocování kalibrační řady by měly být tištěny hodnoty koeficientů všech aproximačních funkcí, střední lineární a kvadratické chyby těchto funkcí, korelační koeficient, dále by měla být uvedena aproximační metoda, která byla vybrána, její citlivost, padesátiprocentní intercept a znázorněna grafická závislost $B/B_0[\%]$ na $c[ng/ml]$.

4.2.2. Blokové schéma programu



4.2.3. V ý p i s z p r o g r a m u

Viz příloha č. 2

4.2.4. P o u ž i t é p r o c e d u r y

ROVN - Gaussova eliminační metoda pro řešení soustavy lineárních rovnic

KORENY - metoda půlení intervalu pro přibližné určení kořene polynomu třetího stupně

POL - Hornerovo schema pro výpočet hodnoty polynomu třetího stupně v daném bodě

4.2.5. S e z n a m p r o m ě n n ý c h

T - 16-tiprvkový vektor, do kterého se čtou vstupní data /hodnoty aktivity totálu/

A - matice o rozměrech 10x3, do níž se čtou vstupní data /hodnoty aktivity nesespecifické vazby, nulové vazby a standardů, přičemž aktivita se měří v triplicátech/

APT, RT, OT, VT /AP, R, O, V/ - statistické charakteristiky /aritmetický průměr, rozptyl, směrodatná odchylka, variační koeficient/ pro totál /pro kalibrační řadu/

PROC - vektor hodnot %NSB/TC, %BØ/TC, %B/BØ

C - vektor hodnot koncentrace progesteronu v jednotlivých standardech B

AA,B - koeficienty aproximační funkce u aproximace přímkou

AØ,...,A $\overline{1}$ - koeficienty aproximační funkce u aproximace polynomem stupně 11

CHYL, CHYK - střední lineární a kvadratická chyba

P - matice /3x7/ hodnot aproximačních funkcí v daném bodě

XP - matice /3x7/ hodnot kořenů aproximačních funkcí pro danou funkční hodnotu

APROX - vybraná aproximační funkce

KOREL - výběrový korelační koeficient

CITLX - citlivost metody

INCPT - padesátiprocentní intercept

BMIN, BMAX - krajní hodnoty, mezi které je graficky znázorňována vybraná aproximační funkce

GRAF - pole, do něhož jsou ukládány znaky znázorňující grafickou závislost

4.3. Program: Vlastní kalibrace

4.3.1. Popis programu

Program týkající se vlastní kalibrace se zabývá stanovením výsledného množství progesteronu ve vzorcích mléka na základě hodnoty aktivity "gama" záření jednotlivých vzorků, změřené v detekčním přístroji JNG 401. U každého vzorku se stejně jako u vzorků kalibrační řady proměřuje triplikát a z naměřených tří hodnot aktivity se vypočítává aritmetický průměr a variační koeficient.

Pokud každou hodnotu aktivity v triplikátu vztáhneme k hodnotě aktivity nulové vazby, dostaneme pro každý vzorek tři hodnoty $\%B/B\emptyset$. Tato procenta nulové vazby by měla spadat do oblasti, jejíž hranice jsou dány krajními hodnotami procent nulové vazby B_{MIN} a B_{MAX} , určenými z aproximační funkce při vyhodnocování kalibrační řady. Padne-li aspoň jedna hodnota $\%B/B\emptyset$ mimo tuto oblast, objeví se na výstupu programu "hodnoty mimo křivku".

S využitím aproximace, vybrané při testování kalibrační řady, se hodnotám $\%B/B\emptyset$ v triplikátu přiřadí příslušné koncentrace progesteronu, u kterých provedeme výpočet základních statistických charakteristik. U těchto koncentrací je nutné kontrolovat, zda nejsou příliš rozptýleny okolo svého aritmetického průměru. Kontrola koncentrací vychází z kontroly hodnot aktivity v triplikátu. Pokud jednotlivé hodnoty aktivity A splňují podmínku: $A = \bar{A} \pm SD$, kde SD je směrodatná odchylka, nejsou nutné žádné úpravy. Nesplňuje-li ale jedna z hodnot triplikátu tuto podmínku, tj. leží mimo interval $\langle \bar{A} - SD, \bar{A} + SD \rangle$, potom koncentraci, která této hodnotě aktivity odpovídá, nahradíme průměrem zbývajících dvou hodnot a celkový aritmetický průměr označíme na-

příklad symbolem "!". Pokud nesplňují podmínku dvě hodnoty aktivity v triplicátu, potom je výsledný aritmetický průměr ze všech tří hodnot označen "*". U koncentrací je nutné také ověřovat, zda není aritmetický průměr u některého vzorku větší než 16 [ng/ml], což považujeme za horní hranici progesteronu v mléku. V případě, že tato eventualita nastane, je zdůrazněna znakem "?".

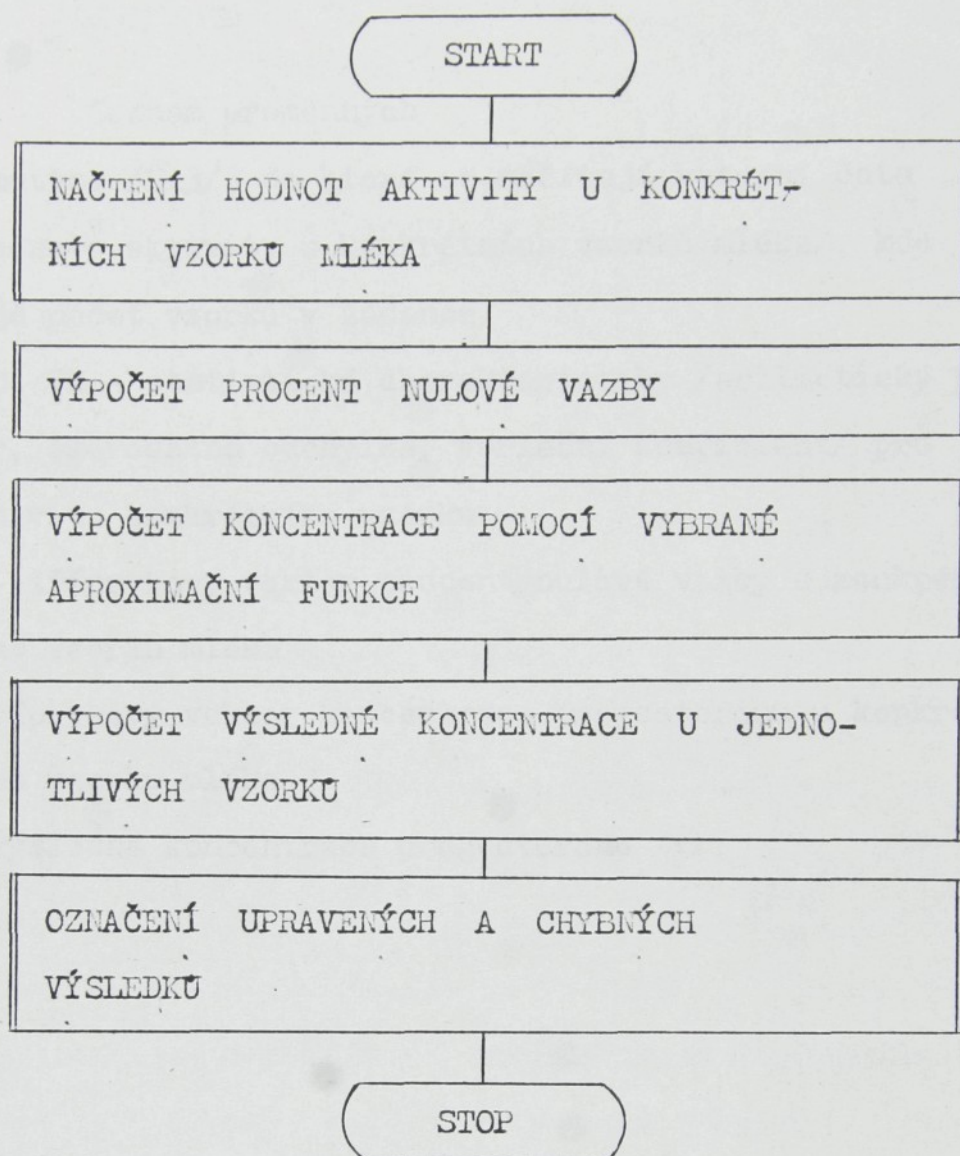
Výstupními hodnotami programu vlastní kalibrace jsou výsledné koncentrace progesteronu v jednotlivých vzorcích mléka, které jsou podkladem pro sledování správnosti inseminace, zabřezávání nebo zdravotního stavu krávy.

Vyhodnocením výsledků vlastní kalibrace by se měla zabývat poslední část návrhu programového vybavení RIA laboratoře.

Program, vztahující se k této části, by měl zjistit, kolik žádanek bude zpracováváno, kolik vzorků každá žádanka obsahuje a co je u jednotlivých vzorků sledováno. Zpětně by měl tento program zajistit provedení porovnání výsledků radioimunoanalýzy s kritériální hodnotou 0,5 [ng/ml] a podle vstupního údaje, zda šlo o inseminaci nebo kontrolu, vyvodit příslušné závěry, které musí být v určité formě zaznamenány na výstup karty 14 vždy ke správnému číslu krávy.

Zavedením programu vyhodnocujícího analýzu by se měla usnadnit práce s výsledky analýzy a odstranit přebytečná administrativní práce.

4.3.2. B l o k o v é s c h é m a p r o g r a m u



4.3.3. V ý p i s z p r o g r a m u

Viz příloha č. 3

4.3.4. Seznam proměnných

AKT - matice $/N \times 3/$, do které se načítají vstupní data
/hodnoty aktivity u konkrétních vzorků mléka/, kde
N je počet vzorků v žádance

APA, SO, VK - statistické charakteristiky /aritmetický průměr, směrodatná odchylka, variační koeficient/ pro aktivitu konkrétního vzorku

PROCl - tříprvkový vektor procent nulové vazby u konkrétního vzorku mléka

Cl - tříprvkový vektor koncentrace progesteronu u konkrétního vzorku mléka

APC - výsledná koncentrace progesteronu

5. Z Á V Ě R

V současné době jsou kladeny stále větší požadavky na rozvoj všech odvětví národního hospodářství, na stále lepší uspokojování rostoucích potřeb obyvatelstva.

Tedy i textilní a oděvní průmysl, tak jako ostatní odvětví resortu ministerstva průmyslu ČSR, stojí před náročným úkolem urychlit vědecko-technický pokrok, zabezpečit technickou přestavbu výrobní základny, účinněji využít současný vědecko-výzkumný, technický, materiální a pracovní potenciál.

Velký význam pro plnění úkolu má použití prostředků mikroelektroniky a výpočetní techniky pro automatizaci textilního a oděvního průmyslu. Dochází k automatizaci kontroly a klasifikace hotového zboží, k optimalizaci nakládání za použití počítače ve stříhárnách, vytvářejí se metody sběru a zpracování dat v provozu ve tkalcovnách, kontroly provozu prstencových a bezvřetenových dopřádacích strojů, probíhá automatizace režimu zušlechťovacích procesů apod. [10]

Řada algoritmů uvedených ve zpracované diplomové práci při návrhu programového vybavení RIA laboratoře ÚVSH Bezno má obecnou platnost a může být využita i v textilním a oděvním průmyslu, především při vyhodnocování výsledků různých výzkumů a měření.

Například:

- statistické charakteristiky se využívají:

- při zjišťování mechanických vlastností přízí a nití,

- jako jsou: - jemnost
- pevnost
 - pružnost
 - poměrné prodloužení
 - počet zákrutů
- při popisu struktury vláknenného pramene:
- délka vláken
 - hmotná nestejnoměrnost
- při somatometrickém výzkumu, který je základem vývoje velikostních sortimentů a stříhových konstrukcí oděvů a prádla v oděvním průmyslu.

Pro dostatečně široký soubor naměřených délkových a obvodových tělesných rozměrů se zjišťuje průměr $\bar{x}$, střední chyba m , směrodatná odchylka s , variační koeficient v , minimum $x_{\min}$ a maximum $x_{\max}$, odděleně pro muže a ženy. Na základě vypočtených charakteristik se provádí porovnání průměrů a variability zkoumaných tělesných rozměrů z různých kalendářních roků, opět zvlášť pro muže a ženy.

Somatometrický výzkum je nutný pro zabezpečení potřeb oděvů a prádla v jejich plném velikostním i druhovém rozsahu.

[11]

- aproximace a grafického znázornění průběhu závislosti dvou proměnných se často využívá při posuzování vlastností plošných textilií, jako jsou:
- stálost tvaru /srážlivost, splývavost, mačkavost, .../
 - vlastnosti povrchu /lesk, kluzavost, zádrhovost, .../
 - propustnost /vzduchu, vody, tepla, .../
 - mechanické vlastnosti /pevnost v tahu, tažnost, .../
- např. při sledování chování syntetických materiálů v pří-

padě, kdy jsou podrobeny tahové deformaci, si všímáme:

- průběhu závislosti modulu okamžité pružnosti na napětí
- průběhu závislosti viskozity plastického toku na napětí
- závislosti charakteristik dopružování /modul dopružování, viskozita dopružování/ na napětí
- závislosti časové konstanty na napětí.

Pro porovnání mohou být provedena měření také pro přírodní materiál.

[12]

Zavádění nových automatizovaných pracovišť, která musí být zajištěna nejen z technického hlediska /hardwaru/, ale i z hlediska programového vybavení /softwaru/, je předpokladem zvýšení produktivity práce, lepšího využití surovin, materiálů a energie, snížení nákladů, zkrácení pracovní doby apod.

6. L I T E R A T U R A

- / 1 / Ralston, A.: Základy numerické matematiky.
2. české vydání, Praha, Academia 1978
- / 2 / Hátle, J. - Likeš, J.: Základy počtu pravděpodobnosti a matematické statistiky.
2. vydání, Praha, SNTL/ALFA 1974
- / 3 / Oleřla, M. - Tišer, J.: Praktické použití Fortranu.
2. upravené vydání, Praha, NADAS 1979
- / 4 / Mikloško, J.: Syntéza a analýza efektivních numerických algoritmů.
1. vydání, Bratislava, VEDA 1979
- / 5 / Majerová, E.: Počítače v systéme spracovania informácií.
1. vydání, Bratislava, ALFA 1981
- / 6 / Kadeřábek, J.: Matematika III /Pravděpodobnost a statistika/.
Učební texty VŠST, Liberec, VŠST 1979
- / 7 / Kačík, K.: Súčasný trendy automatizácie v priemysle. Informačné systémy, roč. XII, 1983, č. 5, str. 403 - 405
- / 8 / Halada: Trochu matematiky pro řízení.
Moderní řízení, 1984, č. 10
- / 9 / Vojtěch, V. a kol.: Výběr informací z organizační a výpočetní techniky, příručka SMEP 1986.
Praha, NOTO 1986
- / 10 / Kapoun, M.: Rozvoj textilního a oděvního průmyslu po XVII. sjezdu KSČ.
Textil, roč. 41, 1986, č. 5-6, str. 157 - 159
- / 11 / Krátoška, J. - Zieglerová, H.: Somatometrický výzkum základem vývoje velikostních sortimentů a střihových konstrukcí oděvů a prádla.
Textil, roč. 40, 1985, č. 4, str. 136 - 140

/ 12 / Malčík, P.: Poromerní materiály a jejich reologické vlastnosti.

Textil, roč. 37, 1982, č. 8, str. 278 - 280

/ 13 / Dokumentace RIA laboratoře ÚVSH Bezno

7. SEZNAM PŘÍLOH

Příloha č.1: Výpis z programu: Testování detektorů

Příloha č.2: Výpis z programu: Kalibrační řada

Příloha č.3: Výpis z programu: Vlastní kalibrace

Příloha č.4: Vývojový diagram programu: Testování
detektorů

Příloha č.5: Vývojový diagram programu: Kalibrační
řada

Příloha č.6: Vývojový diagram programu: Vlastní
kalibrace

Příloha č.7: Struktura matice vstupních dat u testování
detektorů

Příloha č.8: Ukázka výstupu karty 14

Příloha č.9: Ukázka žádanky o radioimunoanalýzu

8. S E Z N A M P O U Ž I T Ý C H
 S Y M B O L Ů A Z K R A T E K

B - standard

BØ - nulová vazba

NSB - nespecifická vazba

TC - totál

ČSAV - Československá akademie věd

RIA - radioimunoanalýza

SAV - Slovenská akademie věd

ÚVSH - Ústav pro vědeckou soustavu hospodaření

VÚVeL - Výzkumný ústav veterinárního lékařství