

Licenčný kurz Archimedes

Využitie tabuľkového procesoru ako laboratórneho denníku

RNDr. Silvia Dulanská, PhD

Bratislava, 2010

Katedra jadrovej chémie, PriFUK

Predslov

Nakoľko sa semestrálna úloha týka využitia tabuľkového procesoru Excel a má vychádzať z pracovnej (v mojom prípade hlavne laboratórnej) praxe, zostavené úlohy sa týkajú priameho využívania tabuľkového procesoru ako pomôcky pri vyhodnocovaní výsledkov z rádiochemických analýz.

Prvá, druhá úloha a tretia úloha sa týka merania a vyhodnocovania izotopu stroncia v analyzovaných vzorkách, štvrtá úloha sa týka porovnania regresnej analýzy uskutočnenej programom Excel a AdStatom.

1. Úloha

Výpočet aktivity stanovovaného rádionuklidu ^{90}Sr vo vzorke

Stroncium-90 je štiepnym produktom uránu. Je to beta žiarič o max. energii 0,54 MeV, ktorý sa s dobou polpremeny 28,82 r. rozpadá na Y-90. Ytrium-90 emituje žiarenie beta o energiách 0,521 MeV (0,01 %), 2,28 MeV (99,9 %). S dobou polpremeny 64,11 hod. sa rozpadá na stabilný izotop ^{90}Zr . Za 18 dní sa ustáľuje radioaktívna rovnováha medzi ^{90}Sr a ^{90}Y na 99 %. Stanovenie ^{90}Sr meraním žiarenia dcérskeho nuklidu je výhodnejšie z pohľadu účinnosti merania. Nevýhodou je predĺženie doby analýzy, alebo môže byť meranie uskutočnené v určitom štádiu nárastu ^{90}Y .

Čerenkovo žiarenie vzniká u vysoko energetických beta častíc v priehľadnom materiály, keď letiace beta častice v poli atómov a molekúl pôsobia na ne tak, že sa v nej otáčajú opačnými pólmi, a prevezmú od nej časť energie. Po doletu beta častice sa vracajú dipóly do pôvodnej polohy a získanú energiu vyžiaria vo forme fotónov. Podstatou merania aktivity pomocou kvapalinovej scintilačnej spektrometrie žiarenia beta je detekcia fotónov vzniknutých vo vialke (meracia kyveta) v dôsledku interakcie žiarenia beta so scintilátorom. Takto vzniknuté fotóny sú pomocou fotonásobiču prevedené na elektrický signál, ktorý sa ďalej upravuje. Výsledkom merania je číslo, ktoré udáva detekovateľnú početnosť fotónov, ktorých energia spadá do vopred zvoleného intervalu (0-50 keV). Meranie vzoriek na stanovenie objemovej aktivity nuklidov žiarenia beta sa uskutočňuje na zariadení TRICARB 2900TR pomocou programu QuantaSmartTM.

Kvapalinová scintilačná spektrometria (LSC) – je v súčasnosti najcitlivejšou univerzálnou a široko používanou meracou technikou na detekciu a kvantifikáciu rádioaktivity. LSC je aplikovateľná na všetky formy rádioaktívneho žiarenia. Je to analytická metóda, ktorá určuje aktivitu rádionuklidov z intenzity svetelných fotónov emitovaných kvapalným scintilátorom. Scintilačný proces teda vyžaduje konverziu energie jadrovej premeny na svetlo.

1. Výpočty použité v programe Excel

Výpočet aktivity ^{90}Sr pri použití metódy separácie pomocou extrakčnej chromatografie na Sr Resin, Empore diskoch a AnaLig Sr sorbente.

Za predpokladu, že analyzovaná vzorka neobsahuje ^{89}Sr , tento výpočet pre stanovenie aktivity ^{90}Sr v analyzovanej vzorke môžeme použiť pre meranie preparátu na nízko-energetickom proporcionálnom meracom zariadení alebo meraním Čerenkovovho žiarenia na kvapalnom scintilačnom spektrometri.

Hmotnostnú, resp. objemovú aktivitu ^{90}Sr a vypočítame na základe jeho dcérskeho rádionuklidu ^{90}Y podľa vzťahu

$$a = \frac{n_p - n_f}{E_Y \cdot R_{Sr} \cdot R_Y \cdot I_Y \cdot Q} \quad (1)$$

- kde
- n_p je početnosť impulzov preparátu, s^{-1}
 - n_f je početnosť impulzov pozadia, s^{-1}
 - E_Y je účinnosť detekcie ^{90}Y
 - R_{Sr} je chemický výtťažok stroncia
 - R_Y je chemický výtťažok yttria, $R_Y=1,0$ pre meranie ^{90}Y cez Čerenkovovo žiarenie
 - I_Y je korekčný faktor pre nárast ^{90}Y
 - Q je hmotnosť, resp. objem analyzovanej vzorky, kg, resp. dm^3

Pre výpočet korekčného faktora I_Y platí vzťah

$$I_Y = 1 - e^{-\frac{\ln 2}{T_{1/2}} \cdot (t_2 - t_1)} \quad (2)$$

- kde
- $T_{1/2}$ je doba polpremeny ^{90}Y , $T_{1/2}=64,1$ hod
 - $t_2 - t_1$ je doba od začiatku nárastu ^{90}Y t_1 (začiatok separácie Sr) po ukončenie nárastu ^{90}Y t_2 (začiatok separácie ^{90}Y po jeho náraste), hod.

Chemický výt'azok R s príslušnou štandardnou neistotou $u(R)$ sa vypočíta podľa vzťahu (3) v prípade, ak chemický výt'azok stanovujeme prídavkom stopovacieho rádionuklidu

$$R = \frac{N_{tr}}{t \cdot E \cdot A_{tr}} \quad (3)$$

$$u(R) = R \cdot \sqrt{\left(\frac{u(n_{tr})}{n_{tr}}\right)^2 + \left(\frac{u(E)}{E}\right)^2 + \left(\frac{u(A_{tr})}{A_{tr}}\right)^2} \quad (4)$$

kde N_{tr} je počet impulzov stopovacieho rádionuklidu
 t_{tr} je doba merania stopovacieho rádionuklidu, s
 n_{tr} je početnosť impulzov stopovacieho rádionuklidu, s⁻¹
 E je účinnosť detekcie
 A_{tr} je aktivita pridaného stopovacieho rádionuklidu, Bq

Pre výpočet rozšírenej štandardnej neistoty U_a platí vzťah

$$U_a = 2 \cdot a \cdot \sqrt{\left(\frac{u(n_Y)}{n_Y}\right)^2 + \left(\frac{u(E)}{E}\right)^2 + \left(\frac{u(R_{Sr})}{R_{Sr}}\right)^2 + \left(\frac{u(Q)}{Q}\right)^2} \quad (5)$$

Štandardnú neistotu početnosti impulzov preparátu ytria $u(n_Y)$ vypočítame podľa vzťahu (6). Ostatné príspevky k štandardnej neistote môžeme zanedbať.

Pre výpočet štandardnej neistoty počtu impulzov, resp. početnosti impulzov použijeme vzťah (6), resp. (7)

$$u(n) = \sqrt{\left(\sqrt{\frac{n_p}{t_p}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{n_f}{t_f}}\right)^2} \quad (6)$$

$$u(n) = \sqrt{\left(\sqrt{\frac{N_p}{t_p^2}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{N_f}{t_f^2}}\right)^2} \quad (7)$$

kde n_p je početnosť impulzov meraného preparátu
 N_p je počet impulzov merného preparátu
 t_p je doba merania preparátu
 n_f je početnosť impulzov pozadia
 N_f je počet impulzov pozadia

t_f je doba merania pozadia

Za predpokladu, že preparát i pozadie sa merajú rovnakú dobu, môžeme použiť nasledovný vzťah

ak $t_p = t_f$ a $N = N_p - N_f$,

potom
$$u(n) = n \cdot \left(\frac{\sqrt{N_p + N_f}}{N} \right) \quad (8)$$

Záver

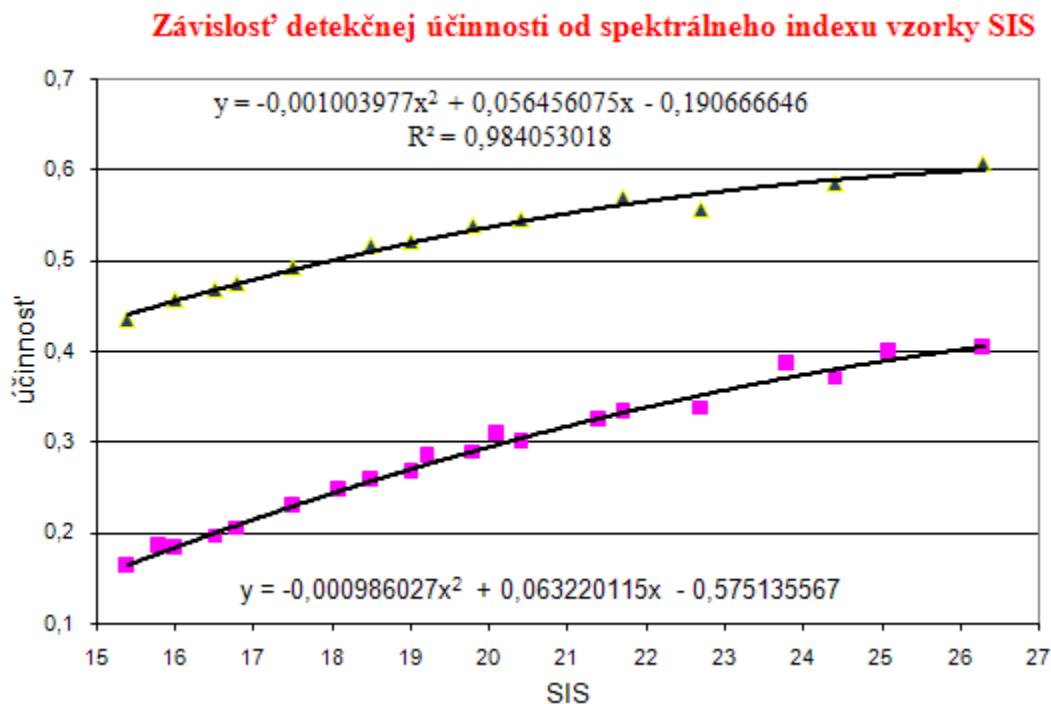
Programom Excel boli na základe vyššie uvedených vzťahov, vypočítané merné aktivity ^{90}Sr v analyzovaných vzorkách.

2. Úloha

Kalibrácia kvapalinového scintilačného spektrometra, stanovenie detekčnej účinnosti ytria 90.

Na výpočet detekčnej účinnosti sa zostrojila kalibračná krivka so štandardnými roztokmi ^{90}Sr s aktivitou 4545,5Bq a stúpajúcim množstvom Fe^{3+} . Z nameraných hodnôt sa na základe kalibračnej krivky závislosti detekčnej účinnosti a SIS (spektrálny index vzorky). Kalibračná krivka slúži na výpočet detekčnej účinnosti dcérskeho produktu stroncia- yria 90 v závislosti SIS vzorky. Po stanovení detekčnej účinnosti sa vypočíta pomocou vzťahov (1-3) merná aktivita stroncia v kontaminovaných vzorkách.

V programe excel sa zostrojil graf závislosti (1) spektrálneho indexu vzorky SIS od hodnoty detekčnej účinnosti získanej meraním štandardu ^{90}Sr .



Öbr. 1 Závislosť detekčnej účinnosti od spektrálneho indexu vzorky SIS

Tabuľka 1

| | 1-30kev | | 5-25kev | | | |
|-------------------------------------|--------------|-------------------|--------------|-------------------|------------|---|
| Hmotnosť ⁹⁰Sr | CPM-A | efficiency | CPM-B | efficiency | SIS | vzorka-Fe m(Fe³⁺) |
| 0,0999 | 16550,3 | 0,6074 | 10979,4 | 0,4030 | 26,3 | 0 |
| 0,0998 | 15145,4 | 0,5564 | 9195 | 0,3378 | 22,7 | 20 |
| 0,0996 | 14607,8 | 0,5378 | 7860,1 | 0,2894 | 19,8 | 50 |
| 0,1005 | 14262,4 | 0,5203 | 7302,7 | 0,2664 | 19 | 75 |
| 0,1011 | 14222,7 | 0,5158 | 7077,8 | 0,2567 | 18,5 | 100 |
| 0,1013 | 13597,8 | 0,4922 | 6306,4 | 0,2283 | 17,5 | 150 |
| 0,0997 | 15872,4 | 0,5837 | 10088,2 | 0,3710 | 24,4 | 5 |
| 0,1012 | 13099,8 | 0,4746 | 5677 | 0,2057 | 16,8 | 250 |
| 0,101 | 12895 | 0,4681 | 5428,9 | 0,1971 | 16,5 | 300 |
| 0,0972 | 12105,1 | 0,4566 | 4847,8 | 0,1829 | 16 | 400 |
| 0,1014 | 11988,8 | 0,4335 | 4486,2 | 0,1622 | 15,4 | 500 |
| 0,1006 | 15583 | 0,5680 | 9121 | 0,3324 | 21,7 | 20 |
| 0,1005 | 14911 | 0,5440 | 8215 | 0,2997 | 20,4 | 30 |

Záver Na základe získanej kalibračnej krivky je možné určiť na základe SIS (hodnota vo výsledkoch v LSC) detekčnú účinnosť ⁹⁰Y a vypočítať mernú aktivitu stroncia v analyzovaných vzorkách.

4. Úloha

Porovnanie vybraných separačných metód v kontaminovaných vzorkách sledovaním radiačno-chemického výťažku a stanovenie aktivity ^{90}Sr

a) Vzorka kontaminovanej vody

Vzorka RS pochádza z areálu vyradenej jadrovej elektrárne A1. Odobratá a dodaná bola pracovníkmi JE. Po jej odbere bolo na mieste upravené pH s HNO_3 . Celý objem kontaminovanej vody bol pred analýzou prefiltrovaný. Na jednotlivú analýzu sa odoberalo objem uvedený v pracovnom postupe jednotlivých separačných metód.

| RS vzorka 30 ml | N_0 vzorky | N vzorky | R |
|-----------------|--------------|----------|--------|
| Analig | 2879 | 2622 | 0,9107 |
| Analig | 2879 | 2555 | 0,8875 |
| Analig | 2366 | 2100 | 0,8876 |
| Analig | 2366 | 1494 | 0,6314 |
| Empore | 1245 | 532 | 0,4273 |
| Empore | 1245 | 368 | 0,2956 |
| Empore | 1892 | 527 | 0,2785 |
| Empore | 1892 | 588 | 0,3108 |
| Empore | 1945 | 1072 | 0,5512 |
| Empore | 1945 | 725 | 0,3728 |
| Empore | 2668 | 1009 | 0,3782 |
| Empore | 2668 | 2641 | 0,9899 |
| Sr resin | 3337 | 2093 | 0,6272 |
| Sr resin | 3337 | 2737 | 0,8202 |
| Sr resin | 3084 | 2418 | 0,7840 |
| Sr resin | 3084 | 2319 | 0,7519 |
| Sr resin | 2823 | 2377 | 0,8420 |
| Sr resin | 2756 | 2495 | 0,9053 |
| Sr resin | 2736 | 2318 | 0,8472 |
| AnaLig | 2736 | 2484 | 0,9079 |
| Empore | 2736 | 907 | 0,3315 |
| AnaLig | 4089 | 2365 | 0,5784 |
| AnaLig | 2718 | 256 | 0,0942 |
| AnaLig | 3348 | 2693 | 0,8044 |
| AnaLig | 3586 | 3075 | 0,8575 |
| AnaLig | 2457 | 2473 | 1,0065 |
| AnaLig | 2457 | 2398 | 0,9760 |
| Sr resin | 2753 | 0 | 0,0000 |
| Sr resin | 2753 | 42 | 0,0153 |
| Sr resin | 2753 | 700 | 0,2543 |

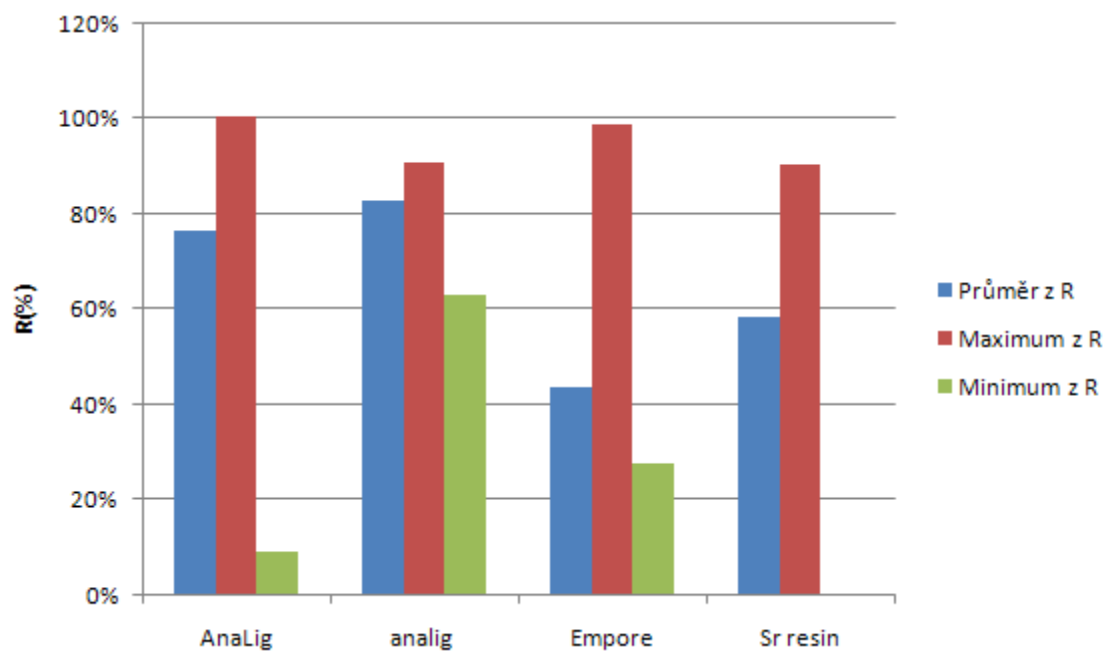
| | | | |
|--------|------|------|--------|
| AnaLig | 2960 | 2495 | 0,8429 |
| AnaLig | 2960 | 2441 | 0,8247 |
| AnaLig | 2960 | 2729 | 0,9220 |
| AnaLig | 2960 | 2114 | 0,7142 |
| AnaLig | 2960 | 2011 | 0,6794 |

Tabuľka 2 Výsledky kontaminovanej vody RS, tabuľka v programe Excel.

| | Data | | |
|-----------------|------------|-------------|-------------|
| RS vzorka 30 ml | Průměr z R | Maximum z R | Minimum z R |
| AnaLig | 76,73% | 100,65% | 9,4% |
| analig | 82,93% | 91,07% | 63,1% |
| Empore | 43,73% | 98,99% | 27,9% |
| Sr resin | 58,47% | 90,53% | 0,0% |
| Celkový součet | 63,74% | 100,65% | 0 |

Obr.2 Kontingenčná tabuľka vody RS, tabuľka v programe Excel.

V kontingenčnej tabuľke sa nachádzajú hodnoty priemerného rádiochemického výťažku použitých extrakčno-chromatografických metód vybranej vzorky kontaminovanej vody RS.



Obr.3 Závislost' radiačno-chemického výt'azku od použitých separačných metod.(program Excel)

| Metoda | Data | |
|----------------|-------------------|------------|
| | Průměr z aktivita | Průměr z R |
| AnaLig | 383,0764196 | 92,66% |
| empore | 387,8318572 | 45,05% |
| Sr resin | 431,3663282 | 76,51% |
| Celkový součet | 397,7865798 | 68,37% |

Seznam polí kontingenční tabulky

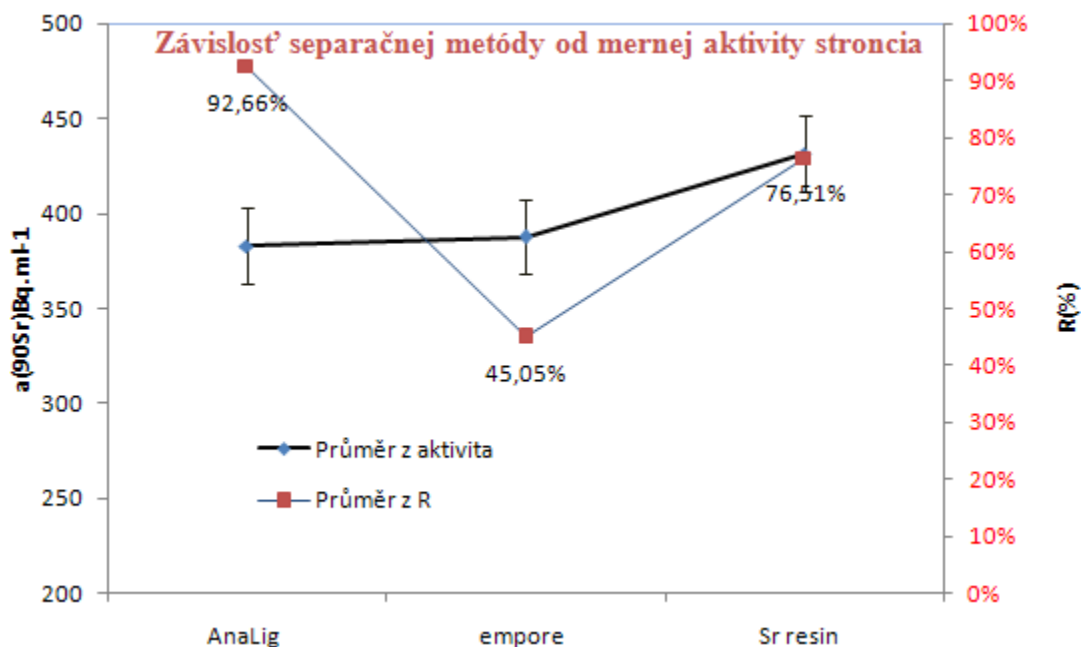
Zvolte pole, které chcete přidat do sestavy:

- Metoda
- N
- NF
- N-85 vzorka
- t v h
- R
- I
- narast Y
- aktivita
- N85 100
- V,m
- ucinnost
- Np
- uř. bez št.

Přetáhnout pole mezi následujícími oblastmi:

Filtr sestavy Pole legendy (...)
 Pole osy (kate... Hodnoty

Odložit aktualizaci rozlo... Aktualizovat



Obr. 4 Graf závislosti mernej aktivity a radiačnochemického výťažku od použitého sorbentu

Záver

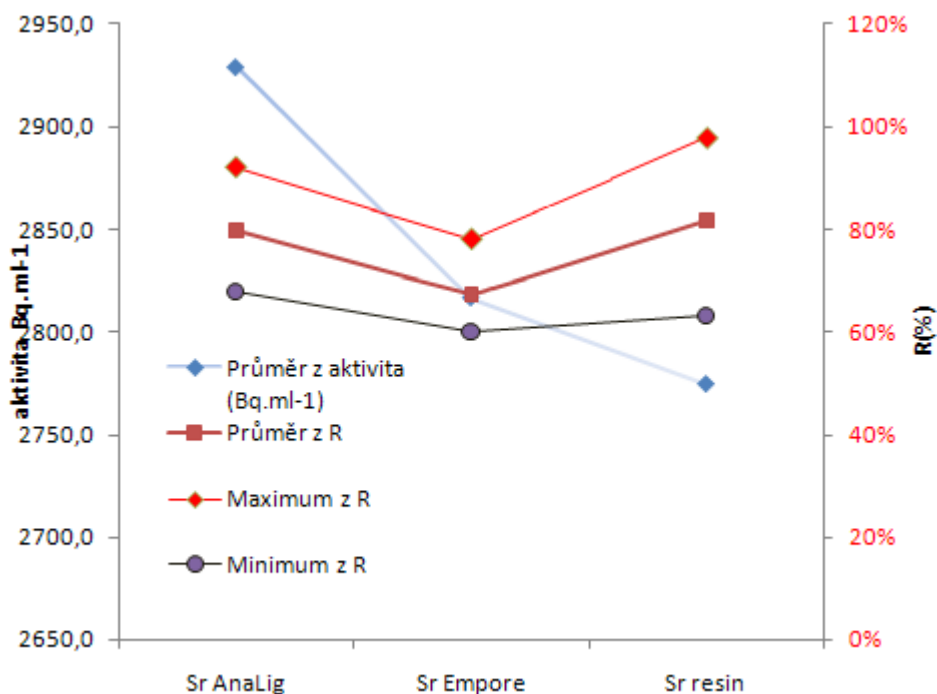
Merná aktivita vzorky RS z areálu vyradenej jadrovej elektrárne A1 bola stanovená tromi SPE sorbentami. Priemerná aktivita $a = 397,78 \text{ Bq.ml}^{-1}$. Najvyššie radiačnochemické výťažky sa dosiahli sorpciou na SPE sorbente AnaLig Sr (IBC Company) a Sr resin (Eichrom) (obr. 4).

b) Vzorka Sr 90

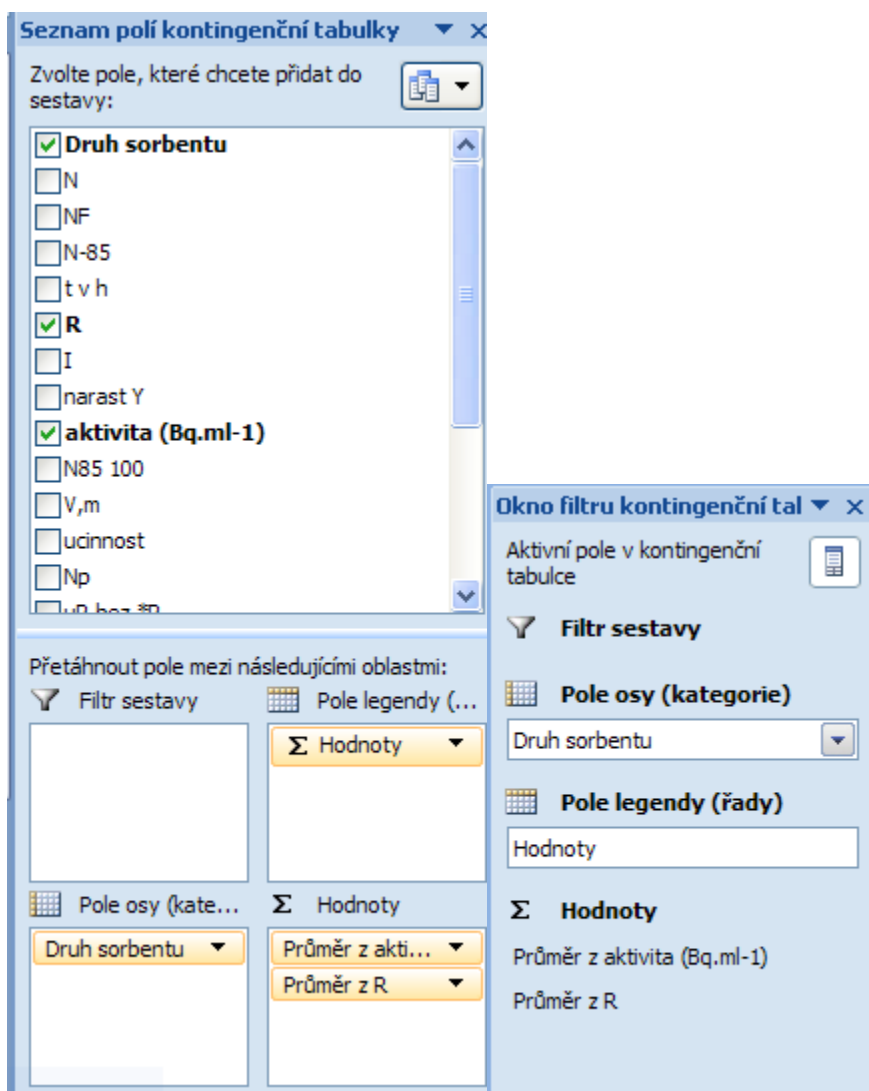
Vzorka Sr 90 pochádza z *Referenčného chemického laboratória vojenského útvaru v Čereňanoch*. Najprv sa uskutočnili mechanické otery pomocou tampónov a nasledovne otery navlhčené v organických rozpúšťadlách (nebolo uvedené aké). Tampóny boli následne lúhované počas 48 h v $8 \text{ mol.dm}^{-3} \text{ HNO}_3$ pri teplote 110°C . Vzorka Libela bola dodaná na KJCh v 100 ml odmernej banke v prostredí $8 \text{ mol.dm}^{-3} \text{ HNO}_3$. Referenčné laboratórium odporučilo na analýzu plutónia odobrať množstvo uvedené v pracovnom postupe.

| | Data | | | |
|----------------|-----------------------------|------------|-------------|-------------|
| Druh sorbentu | Průměr z aktivita (Bq.ml-1) | Průměr z R | Maximum z R | Minimum z R |
| Sr AnaLig | 2929,4 | 79,66% | 92% | 68% |
| Sr Empore | 2816,6 | 67,16% | 78% | 60% |
| Sr resin | 2774,3 | 81,64% | 98% | 63% |
| Celkový součet | 2840,1 | 76,16% | 98% | 60% |

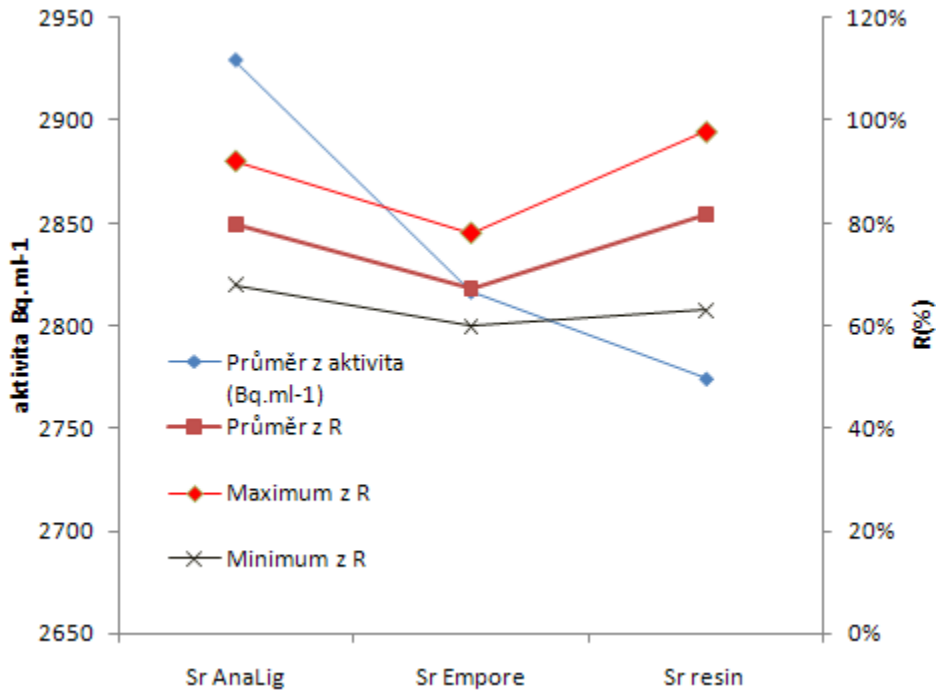
Tabuľka 3 Kontingenčná tabuľka vzorky Sr 90 obsahuje hodnoty mernej aktivity ^{90}Sr , priemerné hodnoty radiačno-chemického výťažku, max a min. hodnoty R zo všetkých použitých sorbentov.



Obr.5 Graf závislosti mernej aktivity a radiačnochemického výťažku od použitého sorbentu



Obr. 6 Kontingenční tabulka vzorky Sr 90, tabulka v programe Excel.



Obr. 7 Graf závislosti mernej aktivity a radiačnochemického výt'azku od použitého sorbentu

| Druh sorbent | Data | |
|----------------|-----------------------------|------------|
| | Průměr z aktivity (Bq.ml-1) | Průměr z R |
| Sr AnaLig | 2929,360528 | 79,66% |
| Sr Empore | 2816,578675 | 67,16% |
| Sr resin | 2774,274872 | 81,64% |
| Celkový součet | 2840,071358 | 76,16% |

Obr. 8 Výsledky mernej aktivity a priemerná hodnota výt'azku.

Záver

Priemerná aktivita vzorky z VU Čereňany je $2840,07 \text{ Bq.ml}^{-1}$, priemerný rádiochemický výt'azok pre jednotlivé separačné metódy sú uvedené v obr.8. Najvyššie radiačnochemické výt'azky sa dosiahli použitím sorbentu Sr resin od firmy Eichrom, následne SPE sorbentu AnaLig Sr (IBC Company).

5. Úloha

Porovnanie regresnej analýzy v programe Excel a AdStat

Výstupná oblasť v programe Excel obsahuje:

Obsah výslednej súhrnnej tabuľky obsahuje: **Anova, koeficienty, chyba strednej hodnoty, R^2 , počet pozorovaní, štandardnú chybu koeficientov.**

Do výslednej tabuľky sa ďalej môžu zvoliť políčka ako: **Rezídua, Štandardné rezídua, Graf s rezíduí, Graf regresnej priamky, Graf pravdepodobností**

1) Základné štatistické charakteristiky

Tabuľka 4 Štatistické hodnoty regresie bazénu DS, program **AdStat**

| | |
|--|---------------|
| Viacnásobný korelačný koeficient: R | 0,4988 |
| Koeficient determinácie: D | 0,2488 |
| Predikovaný koeficient determinácie: R^2_p | 0,4369 |
| Stredná kvadratická chyba predikcie: MEP | 3,276 E+08 |
| Akaikovo informačné kritérium: AIC | 8,6334E+02 |

Tabuľka 5 Štatistické hodnoty regresie bazénu DS, program **Excel**

| <i>Regresní statistika</i> | |
|-----------------------------------|---------------|
| Násobné R | 0,4932 |
| Hodnota spoľehlivosti R | 0,2432 |
| Nastavená hodnota spoľehlivosti R | 0,2248 |
| Chyba st. hodnoty | 18066,9562 |
| Pozorování | 43,0000 |

Párový korelačný koeficient R ukazuje štatistickú významnosť modelu. Hodnota spoľahlivosti R (*Excel*) je totožná s pojmom „koeficient determinácie D^2 “ (AdStat) predstavuje približne 24% bodov, ktoré vyhovujú regresnému modelu.

Kritika modelu

S kritikou dát tiež súvisí Studentov test štatistickej významnosti obidvoch sledovaných parametrov lineárneho regresného modelu, tu úseku b_0 a smernice priamky b_1 .

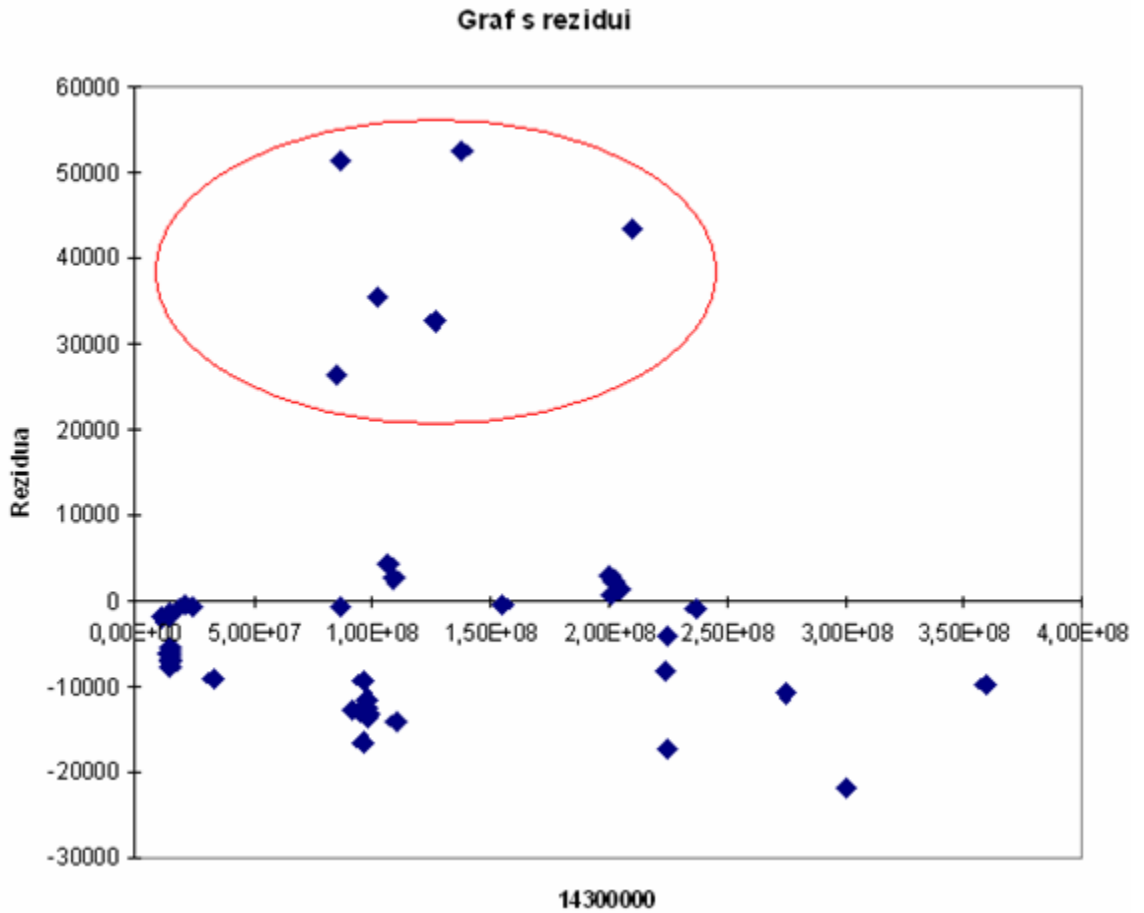
Odhady parametrov b_0 a b_1 a ich testy štatistickej významnosti u výberu bazénu DS, kde kritická hodnota $t_{1-\alpha/2}(N-2) = 2,018$.

Tabuľka 6 AdStat

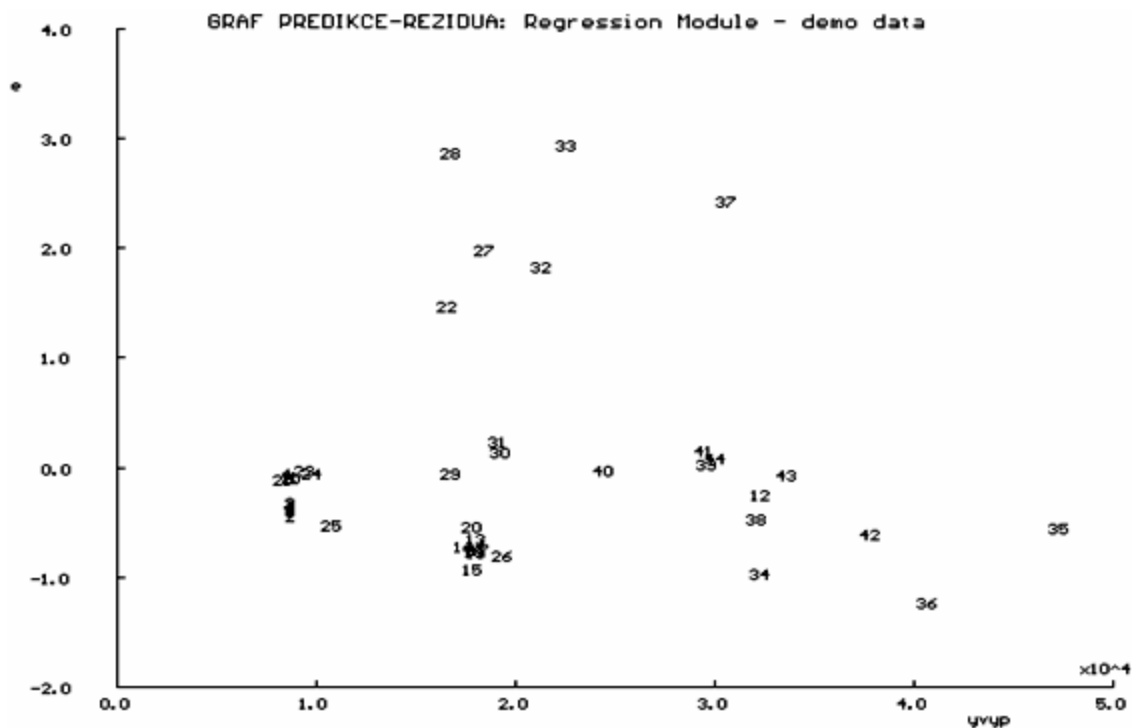
| Parameter | Odhad | Smerodatná odchýlka | Test $H_0: b_j = 0$ vs. $H_A: b_j \neq 0$ t - kritérium Hypotéza H_0 | | Hladina významnosti |
|-----------|------------|---------------------|---|--------------------|---------------------|
| b_0 | 7,0119E+03 | 4,234E+03 | 1,656 | Akceptovaná | 0,105 |
| b_1 | 1,1195E-04 | 3,00E-05 | 3,7293 | Zamietnutá | 0,001 |

Tabuľka 7 Excel

| | Koeficienty | Chyba stř. hodnoty | t stat | Hodnota P | Dolní 95% | Horní 95% |
|----------|-------------|--------------------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Hranice | 7050,7292 | 4391,7012 | 1,6055 | 0,1161 | -1818,49 | 15919,95 |
| 14300000 | 0,0001 | 0,0000 | 3,6301 | 0,0008 | 0,00 | 0,00 |



Obr. 9 Graf reziduí, Excel. Reziduálne odchýlky nie sú náhodne rozmiestnené okolo nuly Ide o model s nekonštantným rozptylom



Obr.10 Graf predikcie – rezídua. AdStat. Graf rezidua vs. redikcia ukazujú mrak bodov. Je indikovaná heteroscedasticita.

Tabuľka 8 Excel

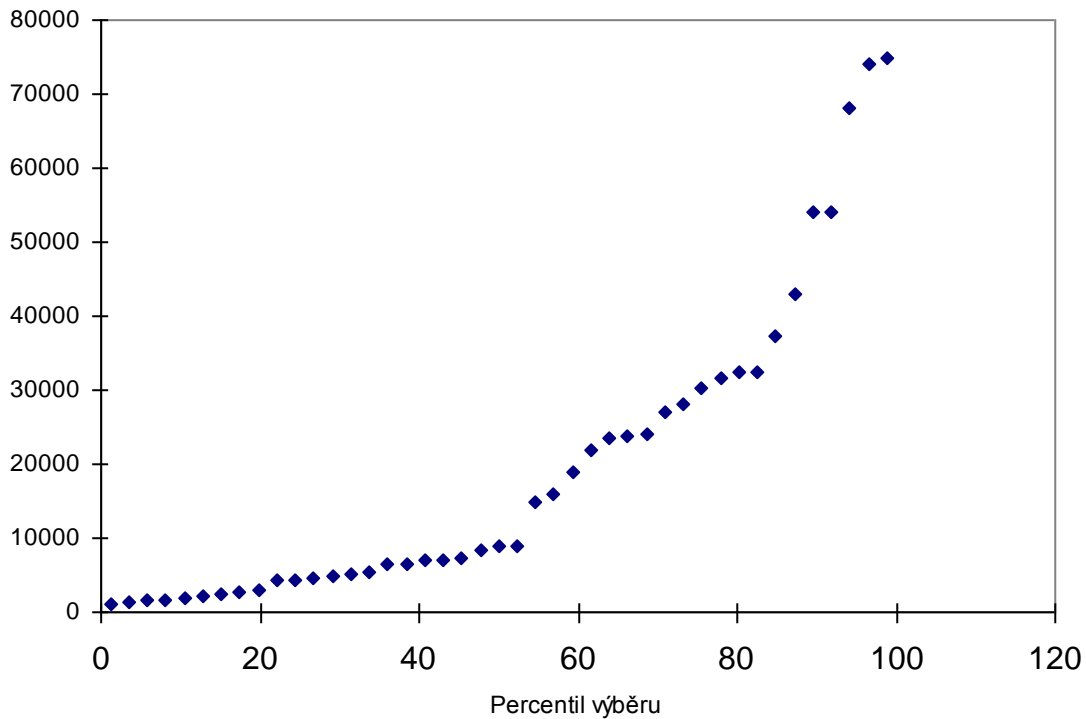
ANOVA

| | <i>Rozdíl</i> | <i>SS</i> | <i>MS</i> | <i>F</i> | <i>Významnost F</i> |
|---------|---------------|----------------|---------------|----------|---------------------|
| Regrese | 1,00 | 4301460258,00 | 4301460258,00 | 13,18 | 0,00 |
| Rezidua | 41,00 | 13383011202,47 | 326414907,38 | | |
| Celkem | 42,00 | 17684471460,47 | | | |

Interpretácia analýzy rozpylu Excelu

Keďže vypočítaná hodnota pomeru variancií 13,18 je väčšia ako kritická hodnota 4,07, môžeme odmietnuť nulovú hypotézu o neprítomnosti lineárneho vzťahu medzi nezávislou a závislou premennou, teda môžeme potvrdiť existenciu lineárneho vzťahu medzi premennými na úrovni 0.95.

Graf s rozdelením pravdepodobnosti



Obr. 11 Analýza reziduálov (Excel) nám ukazuje, že predpoklad lineárnej závislosti bol chybný. Ich rozdelenie nie je náhodné a ich usporiadanie vykazuje trend, keď ich spojnice tvoria parabolu.

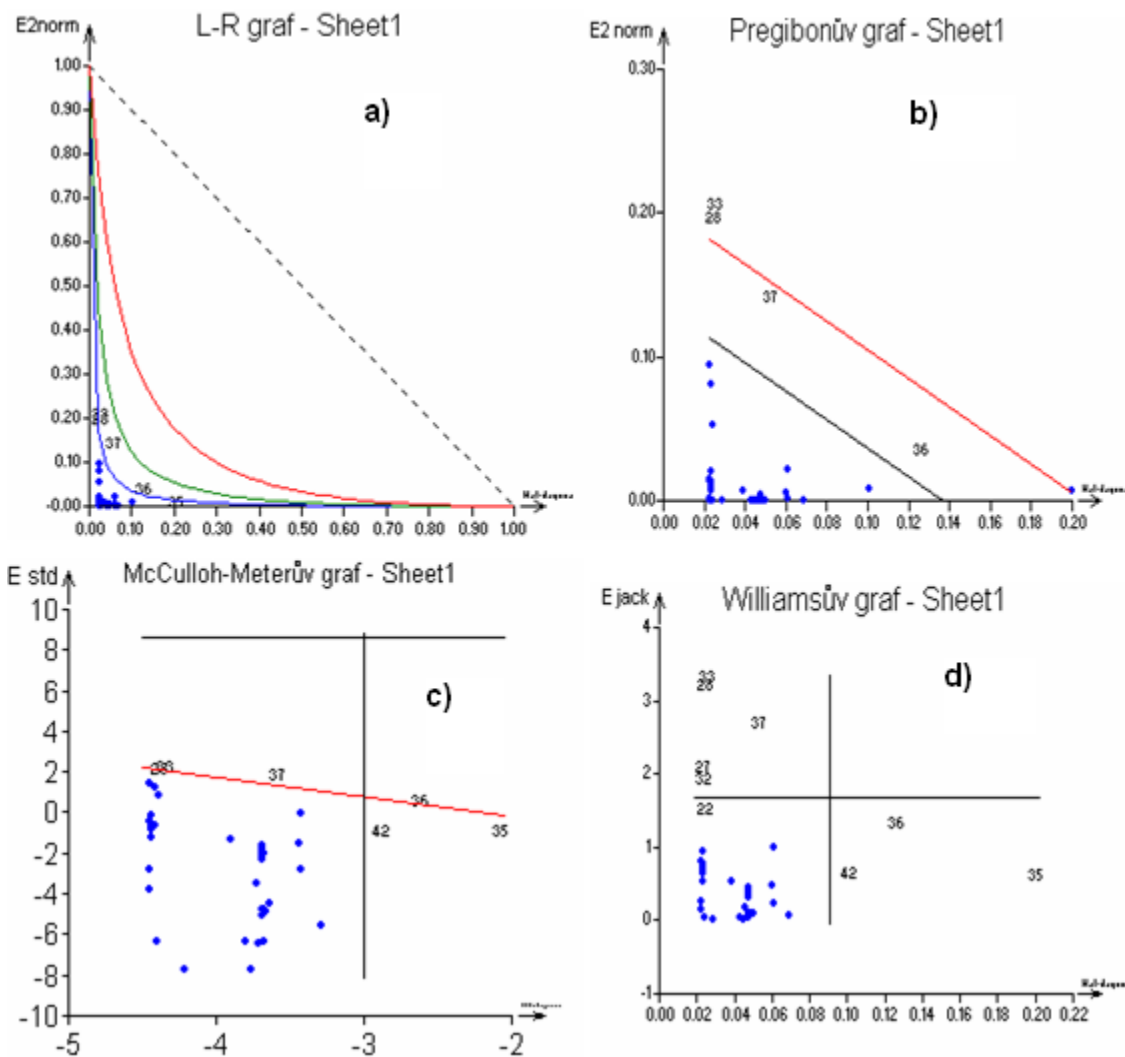
Tabuľka 9 Test štatistickej významnosti odhadov parametrov b_0 a b_1 a nájdené odhady pred kritikou dát, modelu a metódy (horný riadok) a po kritike (dolný riadok)

| Parameter | Odhad | Smerodatná odchýlka | Test $H_0: b_j=0$ vs. $H_A: b_j \neq 0$ | | Hladina významnosti |
|-----------|---------------------------------|-------------------------------|---|----------------|------------------------|
| | | | t - kritérium | Hypotéza H_0 | |
| b_0 | 7,012E+03 3,993E+ 03 | 4,234E+03 2,450E+03 | 1,656 1,6297 | Akceptovaná | 0,111 |
| b_1 | 1,1195E-04 9,7341E-05 | 3,00E-05 1,7388E-05 | 3,7293 5,5982 | Zamietnutá | 0,000 |

Regresná diagnostika, v programe AdStat

Identifikácia vplyvných bodov je uskutočnená piatimi rozličnými grafmi *AIC* sa používajú k rozlíšeniu medzi niekoľkými navrhnutými modelmi. Za optimálny sa považuje model, pre ktorý dosahuje *MEP* a *AIC* minimálnu hodnotu.

Regresná diagnostika (QC Expert) Identifikácia vplyvných bodov bola uskutočnená piatimi rozličnými grafmi a to *Williamsovým*, *Pregibonovým*, *McCullohov-Meeterovým*, *L-R* a *grafom predikovaných rezíduí*



Obr. 12 Diagnostický L-R (a) graf indikuje body 35 a 36 ako odľahlé a aj ako extrémny a body 37, 27, 28, 33 ako odľahlé. Williamsov graf (d) indikuje bod 33, 28, 37,

27 ako odľahlé a body 36, 42, 35 ako extrémny. McCulloch Meeterov (c) graf indikuje body 27, 28, 33, 37 ako odľahlé a 36, 35, 42 sú indikované ako extrémny. Pregibonov (d) graf indikuje body 33, 28, 35 ako silne vplyvné zatiaľ čo body 37, 36 ako stredne vplyvné

TESTOVÁNÍ REGRESNÍHO TRIPLETU (DATA + MODEL + METODA):

Fisher-Snedecorův test významnosti regrese, F : 1.3907E+01
 Tabulkový kvantil, $F(1-\alpha, m-1, n-m)$: 4.0727E+00
 Závěr: Navržený model je přijat jako významný.
 Spočtená hladina významnosti : 0.001

Scottovo kritérium multikolinearity, M : -1.6653E-16
 Závěr: Navržený model je korektní.

Cook-Weisbergův test heteroskedasticity, Sf : 4.3962E+02
 Tabulkový kvantil, $\chi^2(1-\alpha, 1)$: 3.8415E+00
 Závěr: Rezidua vykazují heteroskedasticitu.
 Spočtená hladina významnosti : 0.000

Jarque-Berraův test normality reziduí, L(e) : 3.4283E+01
 Tabulkový kvantil, $\chi^2(1-\alpha, 2)$: 5.9915E+00
 Závěr: Normalita není přijata.
 Spočtená hladina významnosti : 0.000

Waldův test autokorelace, Wa : 2.1898E+00
 Tabulkový kvantil, $\chi^2(1-\alpha, 1)$: 3.8415E+00
 Závěr: Rezidua nejsou autokorelována.
 Spočtená hladina významnosti : 0.139

Znaménkový test, Dt : -5.6741E-01
 Tabulkový kvantil, $N(1-\alpha/2)$: 1.6449E+00
 Závěr: Rezidua nevykazují trend.
 Spočtená hladina významnosti : 0.285

Obr.13 Testovanie regresného tripletu , ADSTAT

Kritika metódy (AdStat)

Fisherov-Snedecorovým testom významnosti regresie potvrdil, že navrhnutý model je prijatý ako významný, závislá premenná a nezávislá premenná sú lineárne závislé. Závery štatistických testov ukazujú, že všetky predpoklady metódy najmenší štvorcov nie sú splnené, predovšetkým Jeargue-Beerov test normality reziduí ukazuje, že klasické rezíduá nevykazujú normálne rozdelenie a Cook-Weisbergov test heteroskedasticity preukázal nekonštantný rozptyl reziduí, čiže heteroskedasticitu .

Záver

Regresná analýza bola uskutočnená pre porovnanie programom Excel a AdStat. V programe Excel chýba :

1. Regresná diagnostika. Regresná diagnostika obsahuje postupy k identifikácii :

- vhodnosť dát pre navrhnutý regresný model (zložka dáta) tzv. *kritika dát*
- vhodnosť modelu pre dané dáta (zložka model) tzv. *kritika modelu*
- vhodnosť základných predpokladov *MNS* (zložka metóda) tzv. *kritika metódy*

Kvalita dát úzko súvisí s užitým regresného modelu. Pri posudzovaní sa sleduje predovšetkým výskyt *vplyvných bodov*, ktoré môžu byť hlavným zdrojom rady problémov, ako je skreslenie odhadov a rast rozptylov až k celkovej nepoužiteľnosti regresných modelov. Pokiaľ tieto hodnoty nebudú nájdené, regresný model v niektorých prípadoch je „neúplný“.

2. Diagnostické grafy

Tabuľka 10 Prvý riadok predstavuje hodnoty vyjadrené programom Excel a druhý riadok predstavuje hodnoty po regresnej diagnostike a odstránení vplyvných bodov.

| | |
|--|--|
| Viacnásobný korelačný koeficient: R | 0,4988 0,6723 |
| Koeficient determinácie: D | 0,2488 0,4519 |
| Predikovaný koeficient determinácie: R^2_P | 0,4369 0,6396 |
| Stredná kvadratická chyba predikcie: MEP | 1,056E+08 (len program AdStat) |
| Akaikovo informačné kritérium: AIC | 7,04E+02 (len program AdStat) |

Pri vyhodnocovaní získaných dát, je dôležité uvedomiť si jednu dôležitú vec. Nestačí dáta „vložiť“ do programu, ktorý je pre používateľa „najjednoduchší“, ale je dôležité správne posúdiť, či tento software poskytne používateľovi optimálne a hlavne správne výsledky. Zle vyhodnotenú analýzu tak často vedú k nesprávne deklarovaným výsledkom!

