

Aplikace Port-Royalské logiky pro interferenční validaci alifatických karboxylových kyselin ve forezních vědách

Bc. Veronika Rosíková

Diplomová práce
2016



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky
akademický rok: 2015/2016

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Bc. Veronika Rosíková**
Osobní číslo: **A14379**
Studijní program: **N3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor: **Bezpečnostní technologie, systémy a management**
Forma studia: **kombinovaná**

Téma práce: **Aplikace Port-Royalské logiky pro interferenční validaci alifatických karboxylových kyselin ve forenzních vědách**

Téma anglicky: **Applying Port-Royal Logic for the Interference Validation of Aliphatic Carboxylic Acids in the Forensic Sciences**

Zásady pro vypracování:

1. Formou literární rešerže zpracujte obecný přehled pro aplikaci Port-Royalské logiky s využitím formální konceptuální analýzy.
2. Proveďte identifikaci vzorků nenasycených kyselin se zaměřením na hexanoic, octanoic, decanoic, dodecanoic, methyl tetradecanoate, hexadecanoic a cyclopropaneoctanoic acid a uvolněného tepla.
3. Identifikaci vzorků zpracujte ve spolupráci s odborným pracovištěm Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně.
4. S využitím reprezentace svazů kontextů, atributových implikací a systému řezů fuzzy množin a stanovením suprema a infima v oblasti analýzy vzorků vyjádřete uvedenou problematiku zpracováním softwarových výpočtů svazu kontextů a škálováním atributů hodnot.
5. Získané údaje z použité metody uveďte v 3D prostředí s využitím programu Matlab.

Rozsah diplomové práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování diplomové práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

1. BĚLOHLÁVEK, Radim. Konceptuální svazy a formální konceptuální analýza [online]. Dostupné z WWW: http://belohlavek.inf.upol.cz/publications/Bel_Ksfka.pdf.
2. KLŮJOVÁ, Jana. Formální konceptuální analýza v zobrazování 3D živočišných ostatků v půdě. Zlín, 2010. 78 s. Bakalářská práce. UTB, Fakulta aplikované informatiky.
3. KŮHR, Tomáš. Formální konceptuální analýza [online]. Dostupné z WWW: <http://www.inf.upol.cz/downloads/ruzne/FCAproSS.pdf>.
4. NAVARA, Mirko a OLŠÁK, Petr. Základy fuzzy množin. Vyd. 1. Praha: Vydavatelství ČVUT, 2002, 136 s. ISBN 80-01-02585-3.
5. ŠMEJKAL, Ladislav. PLC a automatizace. 1. vyd. Praha: BEN – technická literatura, 2005, 207 s. ISBN 80-7300-087-3.

Vedoucí diplomové práce:

Ing. Ján Ivanka

Ústav bezpečnostního inženýrství

Datum zadání diplomové práce:

5. února 2016

Termín odevzdání diplomové práce:

16. května 2016

Ve Zlíně dne 5. února 2016



doc. Mgr. Milan Adámek, Ph.D.
děkan



doc. RNDr. Vojtěch Křesálek, CSc.
ředitel ústavu


Prohlašuji, že

- beru na vědomí, že odevzdáním diplomové/bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších právních předpisů, bez ohledu na výsledek obhajoby;
- beru na vědomí, že diplomová/bakalářská práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému dostupná k prezenčnímu nahlédnutí, že jeden výtisk diplomové/bakalářské práce bude uložen v příruční knihovně Fakulty aplikované informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně a jeden výtisk bude uložen u vedoucího práce;
- byl/a jsem seznámen/a s tím, že na moji diplomovou/bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 1 autorského zákona má UTB ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 2 a 3 autorského zákona mohu užít své dílo – diplomovou/bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen s příjím-li tak licenční smlouva uzavřená mezi mnou a Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně s tím, že vyrovnání případného přiměřeného příspěvku na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše) bude rovněž předmětem této licenční smlouvy;
- beru na vědomí, že pokud bylo k vypracování diplomové/bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tedy pouze k nekomerčnímu využití), nelze výsledky diplomové/bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- beru na vědomí, že pokud je výstupem diplomové/bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá. Neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji,

- že jsem na diplomové/bakalářské práci pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval. V případě publikace výsledků budu uveden jako spoluautor.
- že odevzdaná verze diplomové práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

Ve Zlíně, dne 11. 5. 16


.....
podpis diplomanta

ABSTRAKT

Diplomová práce prezentuje aplikaci Port-Royalské logiky s využitím formální konceptuální analýzy pro použití v oblasti forenzních věd. V teoretické části je zpracován obecný přehled Port-Royalské logiky a formální konceptuální analýzy popisující základní algebraické definice a věty. V úvodu praktické části jsou identifikovány jednotlivé vzorky karboxylových kyselin, popsány jejich vlastnosti a zobrazeny získané hodnoty. Dále je uvedeno zpracování dat programem založeným na formální konceptuální analýze a následné zobrazení grafů v 3D prostředí programu MATLAB.

Klíčová slova: Port-Royalská logika, karboxylové kyseliny, formální konceptuální analýza, koncept, kontext, vícehodnotový kontext, konceptuální škálování, konceptuální svaz, objekty, atributy, atributové implikace, bivalentní logické hodnoty.

ABSTRACT

The diploma thesis presents the application of Port-Royal logic using formal concept analysis for use in forensic science. The theoretical part contains a general overview of Port-Royal logic and formal concept analysis describing the basic algebraic definitions and theorems. The introduction of practical part is identified by individual samples of carboxylic acids, described their characteristics and the values displayed. Further, the data processing program based on formal concept analysis and subsequent display graphs in 3D environment MATLAB.

Keywords: Port-Royal logic, carboxylic acids, formal concept analysis, concept, context, multivalued context, scaling conceptual, conceptual cluster, objects, attributes, attribute implications, bivalent logic values.

Na tomto místě chci poděkovat vedoucímu mé diplomové práce Ing. Jánů Ivankovi za trpělivost a za celkovou podporu.

Prohlašuji, že odevzdaná verze bakalářské/diplomové práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

OBSAH

ÚVOD	9
I TEORETICKÁ ČÁST	10
1 PORT-ROYALSKÁ LOGIKA	11
2 FORMÁLNÍ KONCEPTUÁLNÍ ANALÝZA	12
2.1 ÚVOD A TEORIE	12
2.2 POČÁTKY A VÝVOJ	13
2.3 VYMEZENÍ POJMŮ.....	13
2.3.1 Formální kontext, indukované Galoisovy konexe	14
2.3.2 Formální koncept, konceptuální svaz.....	15
2.3.3 Atributové implikace.....	17
2.4 ALGORITMY	18
2.4.1 Generování konceptů daného kontextu.....	18
2.4.1.1 Algoritmus Next Closure	18
2.4.1.2 Algoritmus založený na generování horních sousedů	19
2.4.2 Generování implikací daného kontextu	19
2.5 VÍCEHODNOTOVÉ KONTEXTY A KONCEPTUÁLNÍ ŠKÁLOVÁNÍ	20
3 FUZZY LOGIKA	22
3.1 VÍCEHODNOTOVÁ LOGIKA.....	22
3.2 LINGVISTICKÁ LOGIKA	23
3.3 (FORMÁLNÍ) FUZZY KONTEXT A KONCEPT	23
3.4 FUZZY MNOŽINY	25
3.5 ŘEZY FUZZY MNOŽIN.....	25
3.6 SUPREMUM A INFIMUM.....	26
3.6.1 Supremum	26
3.6.2 Infimum.....	26
II PRAKTICKÁ ČÁST	27
4 IDENTIFIKACE A VERIFIKACE VZORKŮ	28
4.1 PLYNOVÁ CHROMATOGRRAFIE.....	28
4.1.1 Charakteristika	28
4.1.2 Základní princip GC.....	28
4.1.3 Měřicí přístroj – plynový chromatograf.....	29
4.1.3.1 Chromatogram	30
4.2 INTERFERENCEČNÍ VALIDACE.....	30
4.3 ANALYZOVANÉ ALIFATICKÉ KARBOXYLOVÉ KYSELINY	30
4.4 CHARAKTERISTIKA ANALYZOVANÝCH KYSELIN.....	31
4.4.1 Hexanoic Acid.....	31
4.4.1.1 Výskyt.....	31
4.4.1.2 Použití	31
4.4.2 Octanoic Acid.....	31
4.4.2.1 Výskyt.....	32
4.4.2.2 Použití	32
4.4.3 Decanoic Acid.....	32

4.4.3.1	Výskyt.....	32
4.4.3.2	Použití.....	32
4.4.4	Dodecanoic Acid.....	32
4.4.4.1	Výskyt.....	33
4.4.4.2	Použití.....	33
4.4.5	Methyl Tetradecanoate Acid.....	33
4.4.5.1	Výskyt.....	33
4.4.5.2	Použití.....	33
4.4.6	Hexadecanoic Acid.....	33
4.4.6.1	Výskyt.....	34
4.4.6.2	Použití.....	34
4.4.7	Octadecanoic Acid.....	34
4.4.7.1	Výskyt.....	34
4.4.7.2	Použití.....	34
4.4.8	9-octadecenoic Acid.....	34
4.4.8.1	Výskyt.....	34
4.4.8.2	Použití.....	35
4.4.9	Cyclopropaneoctanoic Acid.....	35
4.4.9.1	Výskyt.....	35
4.4.9.2	Použití.....	35
4.5	IDENTIFIKACE KARBOXYLOVÝCH KYSELIN VE VZORKU A.....	35
4.6	IDENTIFIKACE KARBOXYLOVÝCH KYSELIN VE VZORKU B.....	38
4.7	IDENTIFIKACE KARBOXYLOVÝCH KYSELIN VE VZORKU C.....	41
4.8	SHRNUTÍ.....	44
5	APLIKACE FORMÁLNÍ KONCEPTUÁLNÍ ANALÝZY.....	45
5.1	PROGRAM CONCEPT EXPLORER.....	45
5.1.1	Podmínky pro instalaci.....	45
5.1.2	Uživatelské rozhraní – prostředí programu Concept Explorer.....	45
5.2	APLIKACE DAT DO PROGRAMU CONCEPT EXPLORER.....	48
5.2.1	Karboxylové kyseliny.....	49
5.2.2	Vzorky A, B, C.....	60
5.2.3	Shrnutí.....	66
6	3D MODEL ZOBRAZENÍ MATLAB.....	67
6.1	KARBOXYLOVÉ KYSELINY.....	67
6.2	VZORKY A, B, C.....	72
6.3	SHRNUTÍ.....	77
	ZÁVĚR.....	79
	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY.....	80
	SEZNAM OBRÁZKŮ.....	83
	SEZNAM TABULEK.....	83
	SEZNAM PŘÍLOH.....	86

ÚVOD

Předložená diplomová práce je zaměřena na problematiku Port-Royalské logiky s využitím formální konceptuální analýzy ve forenzních vědách. Forenzní vědy jsou vědy, které se využívají při vyšetřování a dokazování v trestních i civilních řízeních před státními orgány. Jde o postupy vedoucí k prokázání identity osob, pravosti listin apod. Tyto vědy se často zkráceně označují jako „forenzika“. V českém pojetí je pojem „forenzní“ velmi často nahrazován pojmem „soudní“. Forenzní vědy je tedy možné označit za vědy, které se zabývají vývojem a aplikací specifických metod na vědeckém základě.

Práce je rozdělena na část teoretickou a praktickou. Teoretická část charakterizuje Port-Royalskou logiku a formální konceptuální analýzu, její matematický základ a základní pojmy. Praktická část je zaměřena na identifikaci karboxylových kyselin ze získaných vzorků a aplikaci formální konceptuální analýzy, softwarové zobrazení výpočtů svazu kontextů a škálování vlastností hodnot pro karboxylové kyseliny a vzorky, ve kterých se kyseliny nacházely. Získané hodnoty jsou zpracovány a zobrazeny ve 3D zobrazení grafů v programu MATLAB.

Obsahem práce je aplikace Port-Royalské logiky s využitím formální konceptuální analýzy v rámci identifikovaných karboxylových kyselin ve vzorcích, které byly uloženy v půdě v předem určených hloubkách, zobrazení konceptuálních svazů i atributových implikací těchto kyselin a vzorků a možnost použití ve forenzních vědách, především ve forenzní kriminalistice, s uplatněním ve forenzní toxikologické analýze.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 PORT-ROYALSKÁ LOGIKA

Logika z Port-Royal, také "Logika čili umění myslet" je název významného díla o logice vydaného nejprve anonymně v roce 1662 v Paříži, jehož autory byli Antoine Arnauld a Pierre Nicole. Oba byli představiteli tzv. Port-Royalské školy ovlivněné směrem morálně přísného katolicismu, jejímž centrem byl klášter v Port-Royal. Toto dílo úzce navazuje na předchozí jazykovědný spis známý jako „Gramatika z Port-Royal“ z roku 1660 od Arnaulda a Lancelota. Metodologie díla vychází z Descartova spisu „Pravidla pro vedení rozumu“, především však reaguje na nároky, které na logiku kladl Pascal. Pod jeho vlivem byli autoři přesvědčeni, že formální logika je sama o sobě bezcenná, resp. nabývá na významu až vztahem k praxi, když se podřizuje cíli prosadit rozum a spravedlnost. Jejich pojem logiky je proto velmi široký. [1]

Jeden z nejdůležitějších příspěvků Logiky z Port-Royal spočívá v jasném rozlišení rozsahu a obsahu pojmů. Termín „pojem“, uveden v souladu s Port-Royalskou logikou, je chápán svým rozsahem a obsahem, kdy rozsah pojmu je seskupení všech objektů patřících pod tento pojem a obsahem se rozumí seskupení všech atributů, které pod pojem patří. Rozsahem určitého pojmu potom autoři rozuměli nejen třídu individuí spadajících pod určitý pojem, ale také druhy podřazené pod pojem rodu. Dílo Arnaulda a Nicoleho si získalo velkou popularitu a bylo až do 19. století užíváno jako standardní učebnice tradiční logiky. [1]

Port-Royalská logika rozlišuje rozsah a obsah pojmů, stejně jako formální konceptuální analýza se zabývá objekty a jejich atributy.

2 FORMÁLNÍ KONCEPTUÁLNÍ ANALÝZA

Formální konceptuální analýza (dále jen FCA) se zabývá atributy (vlastnostmi) objektů okolního světa, je jednou z metod analýzy tabulkových dat. Namísto termínu „formální konceptuální analýza“ se také velmi často používá termín „metoda konceptuálních svazů“. Jedná se o metodu analýzy dat, která umožňuje jiný pohled na data. Vstupem pro formální konceptuální analýzu jsou tabulková data, vztah mezi objekty a atributy bývá tedy nejčastěji reprezentován tabulkou (maticí), ve které řádky odpovídají objektům, sloupce atributům a položka tabulky odpovídající objektu x a atributu y obsahuje informaci o tom, zda a jakou hodnotu má objekt x k atributu y . Z tabulky s binárními daty je vytvořena množina tzv. konceptů, které lze přirozeně uspořádat. Tabulková data představují základní formu reprezentace dat pro různé metody analýzy a zpracování dat. [2]

V teoretické části práce je uveden následující jednoduchý příklad. V níže uvedené tabulce jsou objekty uvedeny v řádcích, k nim patřící atributy (vlastnosti) ve sloupcích. Atributy v tabulce dat mohou nabývat různých hodnot. Mohou být jedinými možnými hodnotami 0 a 1, kde hodnota 0 značí „nepravdu“ a hodnota 1 označuje „pravdu“. Pro každý atribut y a každý posuzovaný objekt x tedy platí, že x má y nebo x nemá y . [3]

Tab. 1. Objekty x_1, x_2, x_3 a bivalentní logické atributy y_1, y_2, y_3 . [1]

	y_1	y_2	y_3
x_1	1	1	0
x_2	0	1	1
x_3	0	0	1

2.1 Úvod a teorie

FCA je metodou průzkumové analýzy dat, je jednou z metod zkoumání tabulkových dat. Nabízí uživateli netriviální informace o vstupních datech, které mohou být využitelné přímo (jako nové poznatky o vstupních datech, které nejsou při pouhém pohledu na vstupní data zřejmé) nebo je možné je využít při dalším zpracování dat. FCA poskytuje dva základní výstupy: „konceptuální svaz“, což je hierarchicky uspořádaná množina jistých shluků čili

formálních konceptů, které jsou přítomny ve vstupní tabulce dat a dále „atributové implikace“, které popisují jisté závislosti mezi atributy tabulky dat. [2]

Využití FCA je v obecném případě jako jiný pohled na veškerá data a dále také v případě vyhledávání i analyzování informací. V současné době je možné tato data čerpat z rozsáhlých databází, nebo je ručně zadávat pomocí menších souborů. [2]

2.2 Počátky a vývoj

Základní teoretické pojmy používané ve formální konceptuální analýze studovali G. Birkhoff, O. Ore a další již v 60. letech minulého století. Už Birkhoff viděl v těchto pojmech prostředky užitečné nejen pro samotnou matematiku. Mezi první práce o použití uvedených struktur v analýze dat patří práce Monjardeta a Barduta. Je nutné uvést, že hlavně ve francouzsky mluvících oblastech se místo názvu konceptuální svaz používá často název Galoisův svaz. Při případném vyhledávání informací o tomto moderním oboru toto hodně usnadní práci. [2]

Za hlavního tvůrce formální konceptuální analýzy je považován Rudolf Wille, který byl v letech 1970 - 2003 profesorem vyučujícím obecnou algebru na Technické univerzitě v Darmstadtu, který v oblasti teoretických a metodických základů formální konceptuální analýzy a konceptuálních svazů pracoval více než 20 let. Wille se zabýval konceptuálními svazy v rámci svého programu tzv. restrukturalizace teorie svazu.

V České republice se oborem formální konceptuální analýzy a jeho využitím podrobně zabývá například na Univerzitě Palackého v Olomouci prof. RNDr. Radim Bělohlávek, DSc. [2]

2.3 Vymezení pojmů

Vytváření pojmů je základním způsobem, díky němuž je člověk schopen vyznat se ve světě plném obrovského množství jednotlivých věcí a faktů. Vytváření a práce s různě obecnými pojmy umožňuje člověku popisovat obecné zákonitosti, které se týkají velkého množství jednotlivostí. Intuitivně je pojem něco, co vymezuje jisté seskupení nějakých objektů, tedy jakýsi shluk objektů, které z nějakého důvodu „patří k sobě“. Tato snaha najít v datech důležité shluky neboli pojmy má dlouhou tradici a zásadní roli hraje to, co rozumíme termínem „důležitý shluk“ či „pojem“. [2]

Ve FCA je termín „pojem“ uveden v souladu s tzv. Port-Royalskou logikou, která je zmíněna v úvodu práce, podle které je pojem chápán svým rozsahem a obsahem, kdy rozsah

pojmu je seskupení všech objektů patřících pod tento pojem a obsahem se rozumí seskupení všech atributů, které pod pojem patří. Pojem lze tedy chápat jako dvojici (A, B) , kde A je množina objektů a B je množina atributů patřící pod pojem. Není však možné považovat každou dvojici (A, B) za pojem, protože aby tomu tak bylo, je nutné, aby A byla právě množinou všech objektů sdílejících všechny atributy z B a naopak, a to, aby B byla právě množinou všech atributů společných všem objektům z A , což je také definice pojmu použitá v FCA. Pojem ve smyslu FCA, tzn. dvojici (A, B) splňující zmíněné požadavky, je možné nazvat „konceptem“ (formálním konceptem). Tyto koncepty vzájemně jednoznačně odpovídají v tabulkových datech maximálním obdélníkům vyplněným jedničkami. [2]

Pojmy používané člověkem jsou hierarchicky uspořádány vztahem podpojem-nadpojem, kdy tento pojem může být méně nebo více obecný než ostatní pojmy. Tento vztah je v FCA modelován takto: koncept (A_1, B_1) je podpojemem konceptu (A_2, B_2) – tzn., že první koncept je nejvýše tak obecný jako druhý; duálně, druhý je nadpojemem prvního, popř. minimálně tak obecný jako první, pokud platí, že každý objekt z A_1 patří do A_2 nebo, což je ekvivalentní, že každý atribut z B_2 patří do B_1 . Tato podmínka, která se značí $(A_1, B_1) \leq (A_2, B_2)$, odpovídá intuici. Vztah podpojem-nadpojem umožňuje množinu všech konceptů uspořádat podle jejich obecnosti. Takto uspořádaná množina všech konceptů se nazývá konceptuální svaz. [2]

2.3.1 Formální kontext, indukované Galoisovy konexe

Níže je uvedeno několik definic, poznámek a vět sloužících k pochopení problematiky formálního kontextu.

Definice 1. *Formální kontext je trojice $\langle X, Y, I \rangle$, kde I je binární relace mezi množinami X a Y . Prvky množiny X , resp. Y , se nazývají objekty – atributy. Tento fakt $\langle x, y \rangle \in I$ lze interpretovat tak, že objekt x má atribut y . Každý kontext $\langle X, Y, I \rangle$ indukuje zobrazení $\uparrow: 2^X \rightarrow 2^Y$ a $\downarrow: 2^Y \rightarrow 2^X$ předpisem, kde:*

$$A^\uparrow = \{y \in Y; \forall x \in A: [x, y] \in I\} \text{ platí pro } A \subseteq X. \quad (1)$$

$$B^\downarrow = \{x \in X; \forall y \in B: [x, y] \in I\} \text{ platí pro } B \subseteq Y. \quad (2)$$

Místo A^\uparrow je možné psát také $A^{\uparrow I}$, popř. A^I , podobně pro B^\downarrow .

Poznámka 1. A^\uparrow je tedy množina všech atributů společných všem objektům z A a B^\downarrow je množina všech objektů, které sdílejí všechny atributy z B . [2]

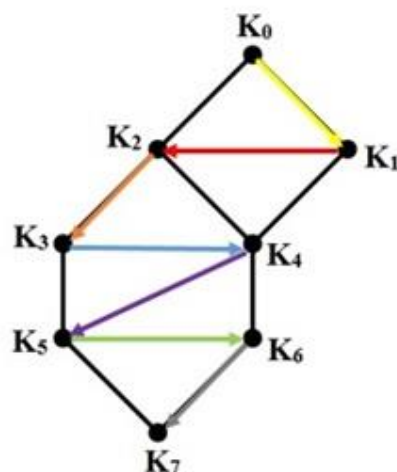
Definice 2. Zobrazení $f : 2^X \rightarrow 2^Y$ a $g : 2^Y \rightarrow 2^X$ tvoří tzv. Galoisovu konexi mezi množinami X a Y , pokud pro $A, A_1, A_2 \subseteq X$ a $B, B_1, B_2 \subseteq Y$ platí $A_1 \subseteq A_2$ implikuje $f(A_2) \subseteq f(A_1)$; $B_1 \subseteq B_2$ implikuje $g(B_2) \subseteq g(B_1)$; $A \subseteq g(f(A))$; $B \subseteq f(g(B))$. [2]

Věta 1. Pro binární relaci $I \subseteq X \times Y$ tvoří indukovaná zobrazení \uparrow^I a \downarrow^I Galoisovu konexi mezi X a Y . Naopak, tvoří-li f a g Galoisovu konexi mezi X a Y , existuje binární relace $I \subseteq X \times Y$ tak, že $f = \uparrow^I$ a $g = \downarrow^I$. Tím je dán vzájemně jednoznačný vztah mezi Galoisovými konexemi mezi X a Y a binárními relacemi mezi X a Y . [2]

Poznámka 2. Definiční podmínky Galoisových konexí jsou přirozené a i v běžném životě známé. Např. podmínka „ $A_1 \subseteq A_2$ implikuje $A_1^\uparrow \subseteq A_2^\uparrow$ “ byla v Port-Royalské škole známá jako zákon obráceného poměru rozsahů a obsahů (čím více objektů, tím méně společných vlastností). [2]

2.3.2 Formální koncept, konceptuální svaz

Konceptuální svaz tvoří uspořádaná množina konceptů. Tento konceptuální svaz může být znázorněn graficky pomocí Hasseova diagramu, kde jsou jednotlivé koncepty znázorněny uzly. V následujícím obrázku níže lze vidět, že koncepty K_i a K_j jsou v diagramu spojeny, pokud $K_i < K_j$, přičemž K_j je umístěn výše než K_i . [4]



Obr. 1. Konceptuální svaz. [4]

Definice 3. Formální koncept v kontextu $\langle X, Y, I \rangle$ je dvojice (A, B) , kde $A \subseteq X$ a $B \subseteq Y$ jsou takové, že $A^\uparrow = B$ a $B^\downarrow = A$. [2]

Poznámka 3. Uspořádaná dvojice (A, B) se nazývá formálním konceptem za podmínky, že A je množinou všech objektů, které sdílí všechny atributy z B , a zároveň B je množinou všech atributů společných všem objektům z A . Formální koncept, vyjádřen matematicky, je pevným bodem Galoisovy konexe dané \uparrow a \downarrow . [2]

Množina všech formálních konceptů v $\langle X, Y, I \rangle$ se značí $B(X, Y, I)$, tzn.

$$B(X, Y, I) = \{(A, B) \mid A \subseteq X, B \subseteq Y, A^\uparrow = B \text{ a } B^\downarrow = A\} \quad (3)$$

Definice 4. *Konceptuální svaz je množina $B(X, Y, I)$ spolu s relací \leq definovanou na $B(X, Y, I)$ předpisem $(A_1, B_1) \leq (A_2, B_2)$ právě když $A_1 \subseteq A_2$ (či ekvivalentně $B_2 \subseteq B_1$).*

Pro další účely se bude značit $\text{Int}(I) = \{B \subseteq Y \mid \langle A, B \rangle \in I\} \in \mathcal{B}(X, Y, I)$ pro nějakou $A \subseteq X$, tzn. $\text{Int}(I)$ je množinou obsahů všech konceptů z $B(X, Y, I)$. Dále platí, že $B \subseteq Y$ je obsahem nějakého konceptu z $B(X, Y, I)$. Podobně se značí $\text{Ext}(I)$ rozsahy konceptů z $B(X, Y, I)$. [2]

Poznámka č. 4: Relace \leq je v takovém případě relací podpojem-nadpojem. [2]

Následující věta, což je hlavní věta o konceptuálních svazech popisuje strukturu $B(X, Y, I)$ a mimo jiné i zdůvodňuje název konceptuální svaz. [2]

Věta 2. Hlavní věta o konceptuálních svazech.

Mějme formální kontext $\langle X, Y, I \rangle$. (1) $B(X, Y, I)$ je vzhledem k \leq úplný svaz, ve kterém jsou infima a suprema dána předpisy, kde J je množina indexů, průnik a sjednocení podmnožin je přes index j :

$$\bigwedge_{j \in J} \langle A_j, B_j \rangle = \left\langle \bigcap_{j \in J} A_j, \left(\bigcap_{j \in J} A_j \right)^\uparrow \right\rangle = \left\langle \bigcap_{j \in J} A_j, \left(\bigcup_{j \in J} B_j \right)^{\downarrow\uparrow} \right\rangle,$$

$$\bigvee_{j \in J} \langle A_j, B_j \rangle = \left\langle \left(\bigcap_{j \in J} B_j \right)^\downarrow, \bigcap_{j \in J} B_j \right\rangle = \left\langle \left(\bigcup_{j \in J} A_j \right)^{\uparrow\downarrow}, \bigcap_{j \in J} B_j \right\rangle. [2]$$

(2) Daný úplný svaz $V = \langle V, \sqsubseteq \rangle$ je izomorfní s $B(X, Y, I)$, právě když existují zobrazení $\gamma : X \rightarrow V$, $\mu : Y \rightarrow V$, pro která je $\gamma(X)$ supremálně hustá v V , $\mu(Y)$ infimálně hustá v V a $\langle x, y \rangle \in I$ platí právě když $\gamma(x) \leq \mu(y)$ (pro každé $x \in X$, $y \in Y$). [2]

2.3.3 Atributové implikace

Atributová implikace (nad množinou Y atributů) je výraz tvaru $A \Rightarrow B$, kde $A, B \subseteq Y$. V následujících definicích a na nich navazujících větách jsou atributové implikace vysvětleny.

Definice 5. Pro implikaci $A \Rightarrow B$ a množinu $C \subseteq Y$ se říká, že $A \Rightarrow B$ platí v C , popř. že C je modelem $A \Rightarrow B$, jestliže platí, že pokud $A \subseteq C$, pak i $B \subseteq C$. Obecněji, pro množinu $M \subseteq 2^Y$ množin atributů a množinu $T = \{A_j \Rightarrow B_j \mid j \in J\}$ implikací říkáme, že T platí v M , popř. že M je modelem T , jestliže $A_j \Rightarrow B_j$ platí v C pro každé $C \in M$ a $A_j \Rightarrow B_j \in T$.

Poznámka 5. To, že T platí v M , se запиše tak, že $M \models T$ (je-li $M = \{C\}$, popř. $T = \{A \Rightarrow B\}$, piše se pouze $C \models T$, popř. $M \models A \Rightarrow B$). [2]

Říká se tedy, že implikace platí v kontextu $\langle X, Y, I \rangle$ (popř., že se jedná o implikaci kontextu $\langle X, Y, I \rangle$), pokud platí v systému $M = \{\{x\}^\uparrow \mid x \in X\}$ obsahů všech objekt-konceptů (tzn. obsahů konceptů tvaru $\{\{x\}^\uparrow, \{x\}^\downarrow\}$). Dále se říká, že implikace platí v konceptuálním svazu $B(X, Y, I)$, pokud platí v systému $\text{Int}(I)$ všech obsahů. [2]

Věta 3. Atributová implikace platí v $\langle X, Y, I \rangle$, právě když platí v $B(X, Y, I)$. [2]

Definice 6. Implikace $A \Rightarrow B$ (sémanticky) plyne z množiny T implikací (zapiše se $T \models A \Rightarrow B$), jestliže $A \Rightarrow B$ platí v každé $C \subseteq Y$, ve které platí T . Tato množina T implikací se nazývá:

- uzavřená, jestliže obsahuje každou implikaci, která z ní plyne;
- neredundantní, jestliže žádná implikace z T neplyne z ostatních (tzn. nikdy není $T - \{A \Rightarrow B\} \models A \Rightarrow B$).

Množina T implikací kontextu $\langle X, Y, I \rangle$, se nazývá úplná, jestliže z ní plyne každá implikace kontextu $\langle X, Y, I \rangle$. Báze je úplná a neredundantní množina implikací daného kontextu.

Poznámka 6. Zde platí, že nás nemusí nutně zajímat všechny implikace platící v kontextu (vstupních datech). Je možné vynechat triviální implikace typu, např. $A \Rightarrow B$, kde $B \subseteq A$. Také je možné vynechat ty, které vyplývají z ostatních. Je však nutné mít na mysli, že aktuální množina musí být stále kompletní, tzn., že všechny implikace z kontextu z ní plynou a nesmí být redundantní. [2]

Věta 4. Množina T implikací je uzavřená právě tehdy, když pro každé $A, B, C, D \subseteq Y$ platí:

1. $A \Rightarrow A \in T$;
2. pokud $A \Rightarrow B \in T$, pak $A \cup C \Rightarrow B \in T$;
3. pokud $A \Rightarrow B \in T$ a $B \cup C \Rightarrow D \in T$, pak $A \cup C \Rightarrow D \in T$. [2]

Definice 7. Pseudointent kontextu $\langle X, Y, I \rangle$ je množina $A \subseteq Y$, pro kterou platí, že $A \neq A^{\uparrow\downarrow}$ a že $B^{\uparrow\downarrow} \subseteq A$ pro každý pseudointent $B \subset A$. [2]

Věta 5. Množina implikací je úplná a neredundantní, tj. báze:

$$\{A \Rightarrow A^{\uparrow\downarrow} \mid A \text{ je pseudointent } \langle X, Y, I \rangle\}. [2]$$

2.4 Algoritmy

Ve formální konceptuální analýze jsou dva zásadní problémy, jejichž efektivní algoritmická řešitelnost je klíčová pro možnost použití FCA na rozsáhlejší data. První je problém generování všech konceptů daného kontextu a druhý problém generování implikací daného kontextu. [2]

2.4.1 Generování konceptů daného kontextu

Algoritmus, který vygeneruje všechny koncepty daného kontextu, se nabízí přímo z definice: Procházíme všechny podmnožiny A množiny X a pro každou z nich vytvoříme $\langle A^{\uparrow\downarrow}, A^{\uparrow} \rangle$, což je koncept - tak sice vytvoříme všechny koncepty (řada z nich však vznikne vícekrát), ale algoritmus má exponenciální časovou složitost (procházíme $2^{|X|}$ podmnožin množiny X). [2]

2.4.1.1 Algoritmus Next Closure

Asi nejznámějším algoritmem na generování všech konceptů daného kontextu je algoritmus označovaný jako Next Closure. Je to algoritmus na generování všech uzavřených množin uzávěrového operátoru c na konečné množině X . Ten je pak použit na problém generování všech problémů daného algoritmu. [2]

Pro popis algoritmu Next Closure předpokládejme, že c je uzávěrový operátor na konečné množině $X = \{1, \dots, n\}$. Pro $A, B \subseteq X$ a $i \in \{1, \dots, n\}$ položme:

$$A <_i B \text{ právě když } i \in B - A \text{ a } A \cap \{1, \dots, i - 1\} = B \cap \{1, \dots, i - 1\}.$$

Dále položme:

$$A < B \text{ právě když } A <_i B \text{ pro nějaké } i.$$

Relace $<$ je tedy obvyklé lexikografické uspořádání podmnožin množiny X . Pro algoritmus je klíčové následující tvrzení Lemma 1. [2]

Lemma 1. *Nejmenší uzavřená podmnožina A^+ množiny X , která je větší než daná $A \subseteq X$ (vzhledem k $<$) je množina:*

$$A^+ = A \oplus i,$$

kde $A \oplus i := c((A \cap \{1, \dots, i-1\}) \cup \{i\})$ a i je největší takový, že $A <_i A \oplus i$. [2]

Algoritmus Next Closure začíná s nejmenší uzavřenou podmnožinou X , kterou je $c(\emptyset)$. Dále postupuje tak, že k naposledy vytvořené uzavřené podmnožině $A \subseteq X$ vytvoří na základě Lemma 1 jejího následovníka A^+ , dokud není $A = X$. Tak vzniknou všechny uzavřené podmnožiny X . [2]

Next Closure má minimální paměťovou náročnost, s jeho pomocí je možné získat všechny koncepty kontextu, ale není již možné získat informace o struktuře konceptuálního svazu, např. informaci o horních a dolních sousedech konceptů. [2]

2.4.1.2 Algoritmus založený na generování horních sousedů

Tento algoritmus začíná nejmenším konceptem. Dále pokračuje tak, že ke každému konceptu generuje jeho horní sousedy v konceptuálním svazu. Toto generování je založeno na následujícím tvrzení Lemma 2:

Lemma 2. *Necht' $(A, B) \in B(X, Y, I)$ není největší koncept. Pak $(A \cup \{x\})^{\uparrow\downarrow}$, kde $x \in X - A$, je rozsahem horního souseda (A, B) , právě když pro každý $z \in (A \cup \{x\})^{\uparrow\downarrow} - A$ je $(A \cup \{x\})^{\uparrow\downarrow} = (A \cup \{z\})^{\uparrow\downarrow}$. [2]*

Algoritmus je založen na generování horních sousedů. Na rozdíl od Next Closure dokáže vytvořit i strukturu konceptuálního svazu. Na počátku je nejmenší koncept, což je dvojice $(\emptyset^{\uparrow\downarrow}, \emptyset^{\uparrow})$. Horní sused k nejmenšímu členu je generován na základě Lemmatu 2. [2]

2.4.2 Generování implikací daného kontextu

Následující Lemma 3 uvádí do problematiky generování implikací daného kontextu:

Lemma 3. *Množina všech podmnožin množiny Y , které jsou obsahy nebo pseudointenty v $\langle X, Y, I \rangle$, tvoří uzávěrový systém.*

S použitím výše uvedeného Lemmatu 3 je možné generovat bázi implikací, což je množina $\{A \Rightarrow A^{\uparrow\downarrow}; A \text{ je pseudointent } \langle X, Y, I \rangle\}$. Příslušný uzávěrový operátor c je dán předpisem:

$$c(A) = A^* \cup A^{**} \cup A^{***} \cup \dots,$$

kde $A^* = \cup \cup \{C / B \Rightarrow C \in T, B \subseteq A, B \neq A\}$ a T je množina všech implikací kontextu $\langle X, Y, I \rangle$. [2]

K výpočtu všech pseudointentů je možné použít algoritmus Next Closure, který generuje všechny obsahy a pseudointenty. Obsahy se vynechají, jelikož nejsou pro implikace potřeba. Problémem se může zdát vygenerování množiny T všech implikací, které jsou v daném kontextu platné. I zde je však možné postupovat vzestupně; nejprve bude T prázdná množina, která bude postupně rozšiřována, a to tak, že vypočte-li se pseudointent D , přidaná implikace do T bude $D \Rightarrow D^{\uparrow}$. [2]

2.5 Vícehodnotové kontexty a konceptuální škálování

Vícehodnotové kontexty jsou rozšířením formálních kontextů, které umožňuje reprezentovat vstupní data i s jinými atributy než jen s bivalentními logickými atributy, viz následující definice (Definice 8):

Definice 8. *Vícehodnotový kontext je čtveřice $\langle X, Y, W, I \rangle$, kde $I \subseteq X \times Y \times W$ je ternární (vznikající ze tří částí) relace taková, že pokud $\langle x, y, v \rangle \in I$ a $\langle x, y, w \rangle \in I$, pak $v = w$.* [2]

Prvky množiny X se nazývají objekty, prvky množiny Y vícehodnotové atributy a prvky množiny W jsou hodnoty atributů. Pokud objekt x má vlastnost y s hodnotou w , daný fakt zapíšeme jako $\langle x, y, v \rangle \in I$ nebo $y(x) = w$. Každý vícehodnotový kontext, musí být převeden na základní kontext, aby mohl být analyzován v FCA. Uvedená operace se provádí pomocí tzv. konceptuálního škálování. [2]

Tab. 2. Příklad vícehodnotových kontextů.

[3]

	y1	y2	y3
x1	1	1	4
x2	0	1	8
x3	9	0	1

Z tabulky (Tab. 2) lze vidět, že atribut y_2 nabývá jen hodnot 1 a 0, tzn. bivalentních logických hodnot. Atributy y_1 a y_3 nabývají kromě 1 a 0 také dalších hodnot (4, 8, 9). V tomto případě

se již jedná o vícehodnotové kontexty, které se dají přehledněji zapsat pomocí konceptuálního škálování. Jedná se o jejich převedení na základní kontext. [2]

Definice 9. Škála (Scale) pro atribut y vícehodnotového kontextu je kontext $S_y = \langle X_y, Y_y, I_y \rangle$, pro který $y(X) \subseteq X$, (kde $y(X) = \{y(x) \mid x \in X\}$). Prvky množin X_y a Y_y se nazývají škálové hodnoty a škálové atributy.

Za škálu lze zvolit libovolný kontext, který splňuje podmínky definice. Často je však některý kontext vhodnější než jiný, jelikož lépe odráží význam daného atributu. Existuje řada standardních škál, ze kterých je možné vybrat nejvhodnější: nominální, ordinální, biordinální, apod. [2]

S využitím konceptuálního škálování je možné přepsat tabulku uvedenou výše (Tab. 2) následujícím způsobem – jak je zobrazeno níže (Tab. 3).

Tab. 3. Konceptuální škálování. [3]

	$y_{1(0-3)}$	$y_{1(4-6)}$	$y_{1(7-9)}$	y_2	$y_{3(0-3)}$	$y_{3(4-6)}$	$y_{3(7-9)}$
x_1	1	0	0	1	0	1	0
x_2	0	0	0	1	0	0	1
x_3	0	0	1	0	1	0	0

Definice 10. Je-li $\langle X, Y, W, I \rangle$ vícehodnotový kontext a jsou-li S_y ($y \in Y$) škály, pak kontext odvozený jednoduchým škálováním je kontext $\langle X, Z, J \rangle$, kde:

- $N = \bigcup_{y \in Y} Y_y$ ($Y_y = \{y\} \times Y_y$);
- $\langle x, \langle y, z \rangle \rangle \in J$ právě když $y(x) = w$ a $\langle w, z \rangle \in I_y$

Objekty vícehodnotového a základního kontextu jsou shodné, zatímco atributy základního kontextu se získají jako disjunktí sjednocení atributů jednotlivých škál. [2]

3 FUZZY LOGIKA

Mezi nejvýznamnější rozšíření FCA je rozšíření inspirované fuzzy logikou. Jejím základním cílem je modelování vágnosti jako jisté neurčitosti přítomné v popisu světa člověkem. Základní předpoklad pro použití fuzzy logiky je takový, že řada přirozených situací vede k objekt-atributovým datům s fuzzy atributy. To vede k zobecnění pojmu kontext. [2]

Pod pojmem fuzzy logika se rozumí dvě různé logiky ovlivněné pojmem fuzzy množiny:

- vícehodnotová logika, tzn. logika s více než dvěma pravdivostními hodnotami (obecně nespočetně mnoha) zpravidla z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$,
- lingvistická logika, tj. logika, jejíž pravdivostní hodnoty jsou jazykově vyjádřeny, např. slovy „pravda, více méně pravda, částečně nepravda“ aj. Význam těchto pravdivostních hodnot je modelován pomocí fuzzy množin v intervalu $\langle 0, 1 \rangle$. [5]

Zatímco vícehodnotová logika je přímým zobecněním klasické dvouhodnotové logiky, lingvistická logika je velmi odvážným pokusem vytvořit teorii, která dalekosáhle zobecňuje logiku. Po matematické stránce není tak hluboce propracovaná jako vícehodnotová logika a je z velké části postavena na intuici a sémantické interpretaci zaváděných pojmů, z toho důvodu je velmi často podrobována kritice. [5]

Lidské myšlení je založeno na neurčitosti, stejně tak i vyjadřování je neurčité – vágní. Fuzzy logika je tedy způsobem, jak technickými prostředky realizovat (alespoň částečně) postup lidského uvažování. [6]

3.1 Vícehodnotová logika

Pojem vícehodnotové logiky se objevil dříve než pojem fuzzy množiny. Nejvýznamnější práce v této oblasti pochází od polského logika J. Łukasiewicze. Širší zájem však vzbudily, až když se objevil pojem fuzzy množiny, neboť je-li stupeň příslušnosti prvku x do fuzzy množiny A roven α , $x \in_{\alpha} A$, lze α interpretovat jako pravdivostní hodnotu vícehodnotového predikátu $x \in \alpha$. Vzájemná souvislost obou teorií je tedy ihned zřejmá. J. Łukasiewicz zpočátku vybudoval tří hodnotovou logiku, v níž třetí hodnota byla interpretována jako „nevím“ nebo „nesmysl“. Později tuto logiku rozšířil až na spočetně mnoho pravdivostních hodnot. Zpravidla se předpokládá, že vícehodnotová logika nabývá pravdivostních hodnot z intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, a tedy každé dvě pravdivostní hodnoty jsou srovnatelné. Obecně však tomu tak nemusí být a pravdivostní hodnoty mohou tvořit svaz, v němž existují vzájemně nesrovnatelné prvky. [5]

Výsledky ve fuzzy logice mají závažné důsledky. V první řadě je klasická logika speciálním příkladem fuzzy logiky. Tento fakt nám umožňuje vidět problémy v klasické logice v odlišném světle, což může mít dopad na její další vývoj. Dále, logické zákony jsou rozšířeny tak, aby zahrnovaly i situace, kdy přesnost je nežádoucí. Tak se dostáváme blíže ke způsobu myšlení člověka. Systém fuzzy logiky je postaven na pevných základech, je poměrně průhledný a navíc zahrnuje téměř všechny typy spojek, které byly uvažovány v jiných systémech. [5]

3.2 Lingvistická logika

Lingvistická logika je mnohem radikálnějším zobecněním klasické dvouhodnotové logiky, než je vícehodnotová logika. Vychází z předpokladu, že lidskému uvažování je přirozené vyjadřovat pravdivostní hodnoty jazykově pomocí slov jako pravda, víceméně pravda, částečná pravda apod. Přitom významy těchto slov nejsou individuální pravdivostní hodnoty vícehodnotové logiky, nýbrž fuzzy množiny v množině L pravdivostních hodnot. Struktura jazykových pravdivostních hodnot je složitější než u vícehodnotové logiky a navíc není uzavřená, tj. můžeme dospět k fuzzy množinám v L , k nimž neexistuje odpovídající jazykové vyjádření, a je tedy nutné používat lingvistickou aproximaci. Proto bývá lingvistická logika často podrobována kritice. [5]

3.3 (Formální) fuzzy kontext a koncept

Z pohledu fuzzy logiky nejsou pojmy formální kontext a formální koncept dostatečné. A to z toho důvodu, že nezohledňují, že daný objekt může mít daný atribut v nějakém stupni obecně různém od 0 a 1, ani to, že pojmy jsou obvykle vágní, tj. např. objekt patří do extentu daného pojmu v nějakém stupni ne nutně 0 nebo 1. Např. atribut „těžký“ je typický fuzzy atribut, což znamená, že daný objekt může být těžký např. ve stupni 0.8. Podobně např. pojem „drahá kniha“ je pojem, jehož rozsah je vágní a je tedy přirozené ho modelovat fuzzy množinou. Následující definice (Definice 11) vysvětluje, co je fuzzy kontext. [2]

Definice 11. (Formální) fuzzy kontext je trojice $\langle X, Y, I \rangle$, kde X a Y jsou množiny (objektů a atributů) a I je fuzzy relace mezi X a Y .

Stupeň $I(x, y)$ je interpretován jako stupeň, ve kterém objekt x má atribut y . Ve fuzzy logice je třeba zvolit strukturu pravdivostních hodnot, se kterou budeme pracovat čili zvolit množinu pravdivostních hodnot a logických operací. Obecnou strukturou je tzv. úplný reziduovaný svaz, který je jednou ze základních struktur fuzzy logiky. Úplný reziduovaný svaz je

struktura $L = \langle L, \otimes, \rightarrow, \wedge, \vee, 0, 1 \rangle$, jejímž nositelem je vhodná množina L pravdivostních hodnot (např. $[0, 1]$ nebo konečný řetězec) a která obsahuje spojku implikace \rightarrow (např. Lukasiewiczova implikace $a \rightarrow b = \min(1, 1 - a + b)$, Gödelova implikace $a \rightarrow b = 1$ pro $a \leq b$; $= b$ pro $a > b$).

Pro daný fuzzy kontext $\langle X, Y, I \rangle$, fuzzy množinu A v X a fuzzy množinu B v Y definujeme fuzzy množinu A^\uparrow v Y a B^\downarrow v X předpisy:

$$A^\uparrow(y) = \bigwedge_{x \in X} A(x) \rightarrow I(x, y)$$

a

$$B^\downarrow(x) = \bigwedge_{y \in Y} B(y) \rightarrow I(x, y).$$

Tyto definice velmi dobře zobecňují klasický případ (který dostaneme, pokud za L vezmeme dvouprvkový reziduovaný svaz – ten je Booleovou algebrou klasické logiky): $A^\uparrow(y)$ je pravdivostní hodnota tvrzení „ y je sdílen všemi objekty z A “, podobně pro $B^\downarrow(x)$. [2]

Definice 12. (Formální) fuzzy koncept ve fuzzy kontextu $\langle X, Y, I \rangle$ je dvojice (A, B) , kde A je fuzzy množina objektů, B je fuzzy množina atributů, a to takových, že $A^\uparrow = B$ a $B^\downarrow = A$.

Rozsah A i obsah B fuzzy konceptu může být tedy obecně fuzzy množina, což je ve shodě s intuicí. Označíme-li $B(X, Y, I)$ množinu všech fuzzy konceptů v $\langle X, Y, I \rangle$ a vybavíme-li ji relací \leq (podpojem-nadpojem) definovanou jako v klasickém případě, tj.

$(A_1, B_1) \leq (A_2, B_2)$ právě když $A_1 \subseteq A_2$ (nebo, ekvivalentně, $B_2 \subseteq B_1$), (zde ovšem $A_1 \subseteq A_2$ znamená, že $A_1(x) \leq A_2(x)$ pro každý $x \in X$) dostaneme tzv. Fuzzy konceptuální svaz. Strukturu fuzzy konceptuálních svazů popisuje následující věta, která zobecňuje hlavní větu o konceptuálních svazech z fuzzy pohledu. [2]

Věta 6. Mějme formální fuzzy kontext $\langle X, Y, I \rangle$. $B(X, Y, I)$ je vzhledem k \leq úplný svaz, ve kterém jsou infima a suprema dána jako ve Větě 2. Daný úplný svaz $V = \langle V, \subseteq \rangle$ je izomorfní s $B(X, Y, I)$, právě když existují zobrazení $\gamma : X \times L \rightarrow V$, $\mu : Y \times L \rightarrow V$, pro která je $\gamma(X \times L)$ supremálně hustá v V , $\mu(Y \times L)$ infimálně hustá v V a $a \otimes b \leq I(x, y)$ platí právě když $\gamma(x, a) \leq \mu(y, b)$ (pro každé $x \in X, y \in Y, a, b \in L$). [2]

Ve fuzzy logice je třeba definovat strukturu pravdivostních hodnot, se kterou budeme pracovat. Nejčastěji se za tuto strukturu volí úplný reziduovaný svaz. [2]

3.4 Fuzzy množiny

Pojem fuzzy množiny je motivován snahou lépe postihnout třídu prvků vymezených určitou vlastností, neboť v praxi jsme zřídka schopni jednoznačně rozhodnout, zda určitý prvek má danou vlastnost nebo ne. Tentýž problém lze však také formulovat jako otázku „do jaké míry je pravda, že daný objekt má určitou vlastnost“. Například do jaké míry je pravda, že daný kus nábytku je židlí, že osoba A je vynikající student, že daný barevný odstín je červená barva apod. Podobně řekneme-li „teď prší“, můžeme být na rozpacích o pravdivosti tohoto výroku při pouhém mrhnutí. Tak se lze přirozeně dostat od klasické logiky k vícehodnotové logice. [5]

Pro lepší pochopení problematiky budeme U třídu nazývat pojmem „univerzum“. Může to být univerzální třída všech množin, lze však v závislosti na kontextu uvažovat pouze její část, popř. to může být množina. Při některých úvahách o fuzzy množinách by předpoklad, že U je vlastní třída, velmi komplikoval celou situaci. [5]

Fuzzy množiny jsou základním pojmem, kdy fuzzy množina v univerzu U je zobrazení $A : U \rightarrow L$ (nejčastěji $L = [0, 1]$) přiřazující každému prvku $u \in U$ stupeň $A(u) \in L$, ve kterém prvek u patří do A . Podobně fuzzy relace mezi U a V je zobrazení $R : U \times V \rightarrow L$, které prvkům $u \in U$ a $v \in V$ přiřazuje stupeň $R(u, v)$, ve kterém jsou prvky v relaci. [2]

Obecně nemusí být svaz L řetězcem, protože ve složitějších případech mohou existovat nesrovnatelné stupně příslušnosti. Například je-li míra příslušnosti hodnocena podle více kritérií, pak celkový stupeň příslušnosti daného prvku je vektorem čísel. Ve většině praktických aplikací se však předpokládá, že $L = \langle 0, 1 \rangle$, neboť měření v tomto intervalu je velmi pohodlné a není závislé na zvolených jednotkách. [5]

3.5 Řezy fuzzy množin

Fuzzy množinu je možné popsat i jiným způsobem než prostřednictvím její funkce příslušnosti, a to pomocí řezu fuzzy množin, jak je popsáno v definici níže (Definice 13). [7]

Definice 13. *Nechť $A \in F(X)$, $\alpha \in \langle 0, 1 \rangle$. Pak α -hladina fuzzy množiny A je ostrá množina:*

$$\mu_A^{-1}(\alpha) = \{x \in X : \mu_A(x) = \alpha\}$$

System řezů fuzzy množiny A je zobrazení:

$$R_A : \langle 0, 1 \rangle \rightarrow P(X),$$

které každému zobrazení $\alpha \in \langle 0, 1 \rangle$ přiřazuje tzv. α -řez

$$R_A(\alpha) = \mu_A^{-1}(\langle \alpha, 1 \rangle) = \{x \in X : \mu_A(x) = \alpha\}. [2]$$

Věta o reprezentaci pomocí řezů zajišťuje, že každá fuzzy množina je jednoznačně určena svým systémem řezů. Popis fuzzy množiny pomocí systému řezů se nazývá horizontální reprezentace, popis pomocí funkce příslušnosti se nazývá vertikální reprezentace. Tyto reprezentace lze na základě dalších definic navzájem převádět. [2]

Metoda formální konceptuální analýzy, rozšířená o logiku fuzzy množin, usnadňuje volbu při konečném rozhodnutí. Sestavení dat pro analýzu je odrazem požadavků, kterými jsou upřesněna ohodnocení jednotlivých vstupních prvků v množině pro následné zvolení nejvhodnějšího zástupce v množině. [2]

3.6 Supremum a infimum

Stanovení suprema a infima je důležité pro oblast analýzy vzorků. Je tedy vhodné jednotlivé jevy stručně popsat a vysvětlit.

3.6.1 Supremum

Supremum je zaváděno jako alternativa k pojmu největší prvek, oproti největšímu prvku je však dohledatelné u více množin – například omezené otevřené intervaly reálných čísel nemají největší prvek, ale mají supremum.

Předpokládejme, že množina X je uspořádána relací R . O prvku $a \in X$ řekneme, že je supremum podmnožiny $Y \subseteq X$, pokud je to nejmenší prvek množiny všech horních závor množiny Y . Tuto skutečnost značíme:

$$a = \mathit{sup}_R(Y). [2]$$

3.6.2 Infimum

Infimum (někdy též průsek) je matematický pojem z oboru teorie uspořádání, který je často používán především při zkoumání vlastností reálných čísel. Infimum je zaváděno jako alternativa k pojmu nejmenší prvek.

Předpokládejme, že množina X je uspořádána relací R . O prvku $a \in X$ řekneme, že je infimum podmnožiny $Y \subseteq X$, pokud je to největší prvek množiny všech dolních závor množiny Y . Tuto skutečnost značíme:

$$a = \mathit{inf}_R(Y). [2]$$

II. PRAKTICKÁ ČÁST

4 IDENTIFIKACE A VERIFIKACE VZORKŮ

Pro diplomovou práci byla k dispozici data z biologického materiálu. Biologický materiál byl uložen v půdě v hloubkách 20 cm (vzorek A), 40 cm (vzorek B) a 60 cm (vzorek C). Po uplynutí 10 měsíců byly vzorky analyzovány metodou plynové chromatografie a následná analýza umožnila identifikovat obsažené karboxylové kyseliny. Jednalo se především o vzorky kyselin Hexanoic Acid, Octanoic Acid, Decanoic Acid, Dodecanoic Acid, Methyl Tetradecanoate Acid, Hexadecanoic Acid, Cyclopropaneoctanoic Acid a dále Octadecanoic Acid a 9-octadecenoic Acid. Identifikace vzorků kyselin proběhla ve spolupráci s odborným pracovištěm Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, získané hodnoty jsou uvedeny v příloze. V rámci diplomové práce se jedná o jednofaktorovou autentizaci, která vyžaduje pouze jeden systematický proces ověření.

4.1 Plynová chromatografie

Metoda plynové chromatografie je velmi rozšířenou metodou pro stanovení karboxylových kyselin. Je tedy na místě metodu představit a stručně popsat, jelikož byla použita v rámci diplomové práce.

4.1.1 Charakteristika

Plynová chromatografie (dále jen GC) má významné postavení v analýze těkavých látek, jedná se o separační a analytickou fyzikálně chemickou metodu, která slouží pro separaci a analýzu směsí látek, jejímž základním principem je rozdělování složek směsi mezi mobilní a stacionární fázi. [8]

Mezi hlavní výhody separační fyzikálně-chemické metody patří jednoduché a rychlé provedení analýzy, účinná separace látek, vysoká citlivost a malé množství vzorku potřebného k analýze. [9]

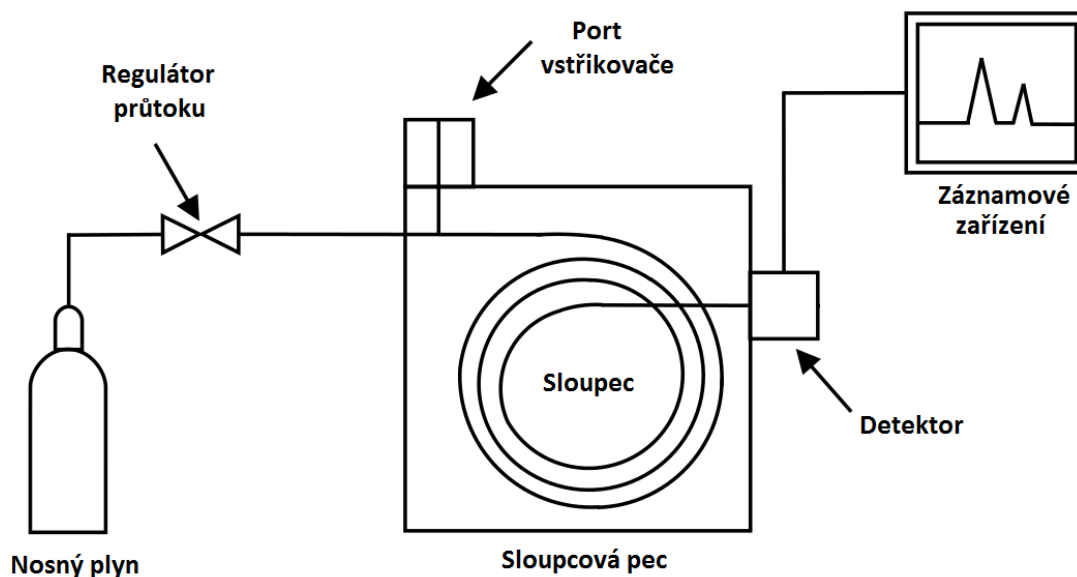
4.1.2 Základní princip GC

Cílem chromatografie je zjistit, z kolika a jakých složek je zkoumaná směs složena, k čemuž je nutné jednotlivé složky od sebe nejprve oddělit (separovat). Princip separace látek pomocí GC je takový, že kolonou stacionární fáze prochází nosný plyn, pohybující se skrz nebo podél stacionární fáze, která je umístěna v koloně. Plynová chromatografie je založena na mechanismu adsorpce, vylučování nebo rozdělování. Chromatografie je schopná analyzovat směsi složené z fyzikálně a chemicky podobných sloučenin – v tom je její jedinečnost v

porovnání s jinými metodami. Kvalitativní analýza sloučeniny řekne, jaké složky jsou ve směsi obsaženy, a kvantitativní analýza popisuje koncentraci těchto složek. [8]

4.1.3 Měřicí přístroj – plynový chromatograf

Pro plynovou chromatografii se využívá plynového chromatografu.



Obr. 2. Zjednodušené schéma plynového chromatografu. [10]

Na obrázku (Obr. 2) je znázorněn plynový chromatograf. Skládá se z následujících částí: regulátor průtoku nosného plynu, port vstřikovače, sloupec – separační kolona, sloupcová pec (termostat) a detektor, který je připojen k výstupnímu záznamovému zařízení – nejčastěji počítači s tiskárnou. Na regulátor průtoku je napojen zdroj nosného plynu.

Pro mobilní fázi jsou vybírány plyny, které neinteragují se zkoumanou směsí ani se stacionární fází. V průběhu procesu je nutné udržení konstantní průtokové rychlosti nebo tlaku, k čemuž slouží regulátor průtoku. V nástřikovém portu dojde ke vpravení testované směsi do separační kolony. Vzorek je následně proudem nosného plynu zaveden do kolony, kde dojde k separaci jednotlivých složek. V některých případech je nutné nejprve provést derivatizaci tehdy, kdy vpravený vzorek není přímo v plynném stavu a nastává problém s jeho odpařením. Derivatizací je převeden do jiné formy, která se odpařuje snadněji.

V separační (často kapilární) koloně je obsažena kapilára z taveného křemene, jejíž vnitřní strana je potažena filmem kapaliny. Ke koloně je připojen termostat, který v průběhu analýzy udržuje konstantní teplotu nebo ji plynule mění podle předem zvoleného plánu. [3]

4.1.3.1 Chromatogram

Grafickým výstupem z detektoru, který vzniká během chromatografického procesu, je chromatogram. V závěru práce jsou uvedeny přílohy, které obsahují hodnoty pro výše zmiňované chemické sloučeniny (karboxylové kyseliny) a k nim navazující chromatogramy.

4.2 Interferenční validace

Interferencí lze označit vzájemné ovlivňování, prolínání nebo střetání jevů či hmoty. Validace je potvrzení získané prostřednictvím poskytnutí objektivních důkazů, že požadavky na specifické zamýšlené použití nebo specifickou aplikaci byly splněny. Validace dále potvrzuje, že měřicí postup/měřicí systém/výrobek je schopen plnit požadavky na ně kladené. Jinak řečeno, že úroveň měření je dostatečná, postupy měření korektní a s řádně provedenou kalibrací. Validace poskytuje naprosto nezbytně potřebná data o nejistotě (respektive intervalu spolehlivosti) výsledků měření. Za validaci je možné označit plánovaný a dokumentovaný postup pro stanovení výkonnostních charakteristik (validačních parametrů) s cílem posouzení vhodnosti pro daný účel. Validacími parametry se kromě jiných rozumí i selektivita metody, která udává rozsah, do kterého může být analyt stanoven v komplexní směsi, aniž by došlo k interferenci s ostatními složkami směsi. Selektivita metody je taková vlastnost měřicího systému používajícího specifikovaný postup měření, pomocí něhož poskytuje naměřené hodnoty veličiny pro jednu nebo více měřených veličin, udávající, že hodnoty každé měřené veličiny jsou nezávislé na jiných měřených veličinách nebo jiných veličinách v rámci zkoumaného jevu, tělesa nebo látky. [11]

4.3 Analyzované alifatické karboxylové kyseliny

Karboxylové kyseliny (dále CA) jsou organické sloučeniny, které jsou charakteristické přítomností karboxylové funkční skupiny, jejíž vzorec je $-C(=O)-OH$. Tvoří velmi významnou skupinu organických sloučenin v rostlinné i živočišné říši. Podílejí se na buněčném metabolismu, ale slouží také jako výchozí látky pro přípravu řady derivátů. Karboxylové kyseliny mohou mít ve své molekule jednu nebo více karboxylových skupin. Podle počtu karboxylových skupin se organické kyseliny rozdělují na:

- jednosytné (monokarboxylové) obsahující jednu karboxylovou skupinu,
- vícesytné (di-/tri karboxylové) obsahující dvě a více karboxylových skupin.

Dle druhu uhlovodíkového zbytku je možno karboxylové kyseliny rozdělit na alifatické (nasyčené, nenasyčené) a aromatické. [12]

4.4 Charakteristika analyzovaných kyselin

Po provedení plynové chromatografie byly ve vzorcích nalezeny kyseliny Hexanoic Acid, Octanoic Acid, Decanoic Acid, Dodecanoic Acid, Methyl Tetradecanoate Acid, Hexadecanoic Acid, Cyclopropanoic Acid, a dále 9-octadecenoic Acid a Octadecanoic Acid. Vlastnosti jednotlivých kyselin, jejich výskyt a použití jsou uvedeny níže.

4.4.1 Hexanoic Acid

Triviální název kyseliny je kyselina kapronová, systematický název je kyselina hexanová. Sumární vzorec této kyseliny je $C_6H_{12}O_2$ a funkční vzorec $(CH_3(CH_2)_4COOH)$. Hexanoic Acid je organická sloučenina patřící mezi nasycené monokarboxylové kyseliny. Její soli a estery se nazývají kapronany nebo kapronáty (systematicky hexanoáty). [13]

4.4.1.1 Výskyt

Jedná se o mastnou kyselinu a jako taková je poměrně běžnou součástí tuků. Společně s kyselinou kaprylovou a kaprinovou tvoří asi 15 % tuku v kozím mléce. Je to olejovitá kapalina nepříjemného zápachu, která je málo rozpustná ve vodě, je rozpustná v alkoholu a etheru. [13]

4.4.1.2 Použití

Používá se ve voňavkářství a v chemickém průmyslu - jako prekurzor jejich esterů, které se používají na výrobu vůní a také k dochucení návnad při sportovním rybolovu jako atraktor. [13]

4.4.2 Octanoic Acid

Kyselina kaprylová – takový je triviální název pro tuto mastnou kyselinu s molekulou s osmi atomy uhlíku. Systematický název je kyselina oktanová. Sumární vzorec této kyseliny je $C_8H_{16}O_2$. Octanoic acid je druhá nejjednodušší organická karboxylová kyselina. Je to za normálních podmínek bezbarvá olejovitá kapalina ostrého zápachu, dokonale mísitelná s vodou, ethanolem i dimethyletherem. Čistá bezvodá kyselina tuhne za nižších teplot na bezbarvou až bílou krystalickou látku, připomínající led, které byl proto dán název „Ledová kyselina

octová“. Je hygroskopická, takže pohlcuje vzdušnou vlhkost. Její vodný roztok o koncentraci od 8 % se nazývá ocet. [13]

4.4.2.1 Výskyt

Přirozeně se vyskytuje v kokosovém ořechu a mateřském mléce. Jde o olejovitou kapalinu nepatrně rozpustnou ve vodě, se slabým nažluklým pachem. [13]

4.4.2.2 Použití

Kyselina kaprylová se komerčně používá k výrobě esterů pro parfumerii a též pro výrobu barviv. Nachází užití také při léčbě některých bakteriálních infekcí. Díky poměrně krátkému řetězci snadno prochází membránami tukových buněk, je proto účinná proti některým bakteriím potaženým lipidovým filmem. [13]

4.4.3 Decanoic Acid

Kyselina kaprinová, jejíž systematický název je kyselina dekanová, je karboxylová kyselina patřící mezi mastné kyseliny. Její soli a estery se nazývají dekanoáty nebo kaprináty. Triviální název je odvozen od jejího výskytu v kozím mléku z latinského „capra“ čili „koza“. Jedná se o bezbarvý krystalický prášek. [13]

4.4.3.1 Výskyt

Kyselina kaprinová se vyskytuje v kokosovém oleji (kolem 10 %) a palmojádrovém oleji (4 %), v běžných olejích ze semen je vzácná. Také se nachází v mléku různých savců a v menší míře v ostatních živočišných tucích. Společně s dalšími dvěma kyselinami pojmenovanými podle výskytu v kozím mléku, kapronovou a kyselinou kaprylovou, tvoří asi 15 % tuku kozího mléka. [13]

4.4.3.2 Použití

Používá se na výrobu esterů, které slouží jako umělá aromata a parfémy. [13]

4.4.4 Dodecanoic Acid

Kyselina laurová, systematickým názvem kyselina dodekanová, je mastná kyselina s funkčním vzorcem $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$ a sumárním vzorcem $\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_2$. [13]

4.4.4.1 Výskyt

Je hlavní složkou palmojadrového a kokosového oleje, v ostatních rostlinných tucích je obsažena v podstatně menším množství. Je též obsažena v mléčném tuku (5,8 % v tuku lidského mléka, 2,2 % v kravském a 4,5 % v kozím). V čistém stavu je to bezbarvý krystalický prášek, pachem připomínající mýdlo. [13]

4.4.4.2 Použití

Z kyseliny laurové jsou vyráběny saponáty používané ve většině šamponů a tekutých mýdel. Je známá tím, že urychluje metabolismus. Tradičním použitím tohoto efektu je podávání mletého kokosu osobám, které potřebují přibrat váhu. [13]

4.4.5 Methyl Tetradecanoate Acid

Kyselina myristová, jejíž systematický název je kyselina tetradekanová, má funkční vzorec $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{COOH}$ a sumární vzorec $\text{C}_{14}\text{H}_{28}\text{O}_2$. Její soli a estery se nazývají myristáty, systematicky tetradekanoáty. Kyselina je pojmenována podle svého výskytu v muškátovém oříšku. Jedná se o bezbarvý krystalický prášek. [13]

4.4.5.1 Výskyt

V „máse“ z muškátového oříšku je obsaženo asi 75 % trimyristinu - triglyceridu kyseliny myristové. Tato mastná kyselina je rovněž přítomna v palmojadrovém oleji, kokosovém oleji, v máse a v menším množství také v mnoha živočišných tucích. [13]

4.4.5.2 Použití

Isopropylmyristát, ester kyseliny myristové, s isopropylalkoholem se používá v kosmetických přípravcích, kde se očekává dobrá absorpce kůží. Redukcí této kyseliny vzniká myristylaldehyd a myristylalkohol. [13]

4.4.6 Hexadecanoic Acid

Triviální název kyseliny Hexadecanoic Acid je kyselina palmitová, systematickým názvem kyselina hexadekanová. Jedná se o karboxylovou kyselinu, jejíž funkční vzorec je $\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COOH}$, sumární $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$. Co se týče skupenství, jde o bezbarvý krystalický prášek. [13]

4.4.6.1 Výskyt

Je to vyšší mastná kyselina, je tudíž obsažena v tucích. Jak její název napovídá, vyskytuje se v palmovém oleji. Je obsažena také v másle, sýrech, mléku a mase. [13]

4.4.6.2 Použití

Za druhé světové války se její deriváty začaly používat k výrobě napalmu. Velký význam má její směs s kyselinou stearovou, která se nazývá stearin. Používá se k výrobě svíček, kosmetických krémů a leštících past, dále i na výrobu mýdel. [13]

4.4.7 Octadecanoic Acid

Kyselina stearová – tak se nazývá triviální název kyseliny Octadecanoic Acid, systematický název je kyselina oktadekanová. Je to karboxylová kyselina, jejíž sumární vzorec je $C_{19}H_{34}O_2$ a funkční vzorec $C_{17}H_{35}COOH$. Jedná se o pevnou bílou látku. [13]

4.4.7.1 Výskyt

Kyselina stearová je obsažena v přirozených tucích. [13]

4.4.7.2 Použití

Její soli – stearany se používají k výrobě mýdel a pracích prostředků. Kyselina stearová tvoří směs s kyselinou palmitovou. Tato směs se nazývá stearin, je to látka podobná vosku a používá se k výrobě mýdla a svíček. [13]

4.4.8 9-octadecenoic Acid

Triviální název kyseliny 9-octadecanoic Acid je kyselina olejová. Jedná se o karboxylovou kyselinu, jejíž funkční vzorec je $C_{17}H_{33}COOH$ a sumární vzorec $C_{19}H_{34}O_2$. Co se týče vzhledu, je to bledě žlutá až hnědá kapalina s charakteristickým zápachem, která není rozpustná ve vodě. Její soli a estery se nazývají oleáty. [13]

4.4.8.1 Výskyt

Je to vyšší mononenasycená (ve své molekule obsahuje násobnou vazbu) mastná kyselina obsažená v různých živočišných a rostlinných tucích. Kyselina olejová tvoří 55-80 % olivového oleje a 15-20 % hroznového oleje. [13]

4.4.8.2 *Použití*

Používá se v tukovém průmyslu, při výrobě mýdel a v kosmetice. [13]

4.4.9 **Cyclopropaneoctanoic Acid**

Triviální název kyseliny Cyclopropaneoctanoic Acid je kyselina sterkulová. Jedná se o karboxylovou kyselinu, jejíž sumární vzorec je $C_{19}H_{34}O_2$. [13]

4.4.9.1 *Výskyt*

Kyselina sterkulová je přirozeně se vyskytující mastná kyselina. Jako její triglycerid je přítomna mimo jiné i v oleji z bavlníkových semen. [13]

4.4.9.2 *Použití*

Snižuje hladiny enzymu stearyl. [13]

4.5 **Identifikace karboxylových kyselin ve vzorku A**

Identifikace a analýza vzorku A uloženého v půdě v hloubce 20 cm ukázala hodnoty výše zmiňovaných kyselin. V tabulkách (Tab. 4 až Tab. 6) jsou uvedeny vzorky A_01, A_02 a A_03. Označení 01, 02 a 03 popisují čísla vzorků.

Tab. 4. Hodnoty vzorku A_01.

A_01		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	559 020	1,61438
Octanoic Acid	387 435	1,11886
Decanoic Acid	1 030 898	2,97710
Dodecanoic Acid	1 955 871	5,64830
Methyl Tetradecanoate Acid	6 573 163	18,98243
Hexadecanoic Acid	14 938 850	43,14143
Octadecanoic Acid	2 936 631	8,48060
9-octadecenoic Acid	5 763 729	16,64489
Cyclopropaneoctanoic Acid	482 022	1,39202

Tab. 5. Hodnoty vzorku A_02.

A_02		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	585 751	1,67278
Octanoic Acid	403 565	1,15250
Decanoic Acid	1 070 287	3,05652
Dodecanoic Acid	1 955 572	5,58470
Methyl Tetradecanoate Acid	6 562 475	18,74106
Hexadecanoic Acid	15 088 078	43,08840
Octadecanoic Acid	3 056 894	8,72985
9-octadecenoic Acid	5 802 733	16,57139
Cyclopropaneoctanoic Acid	491 214	1,40280

Tab. 6. Hodnoty vzorku A_03.

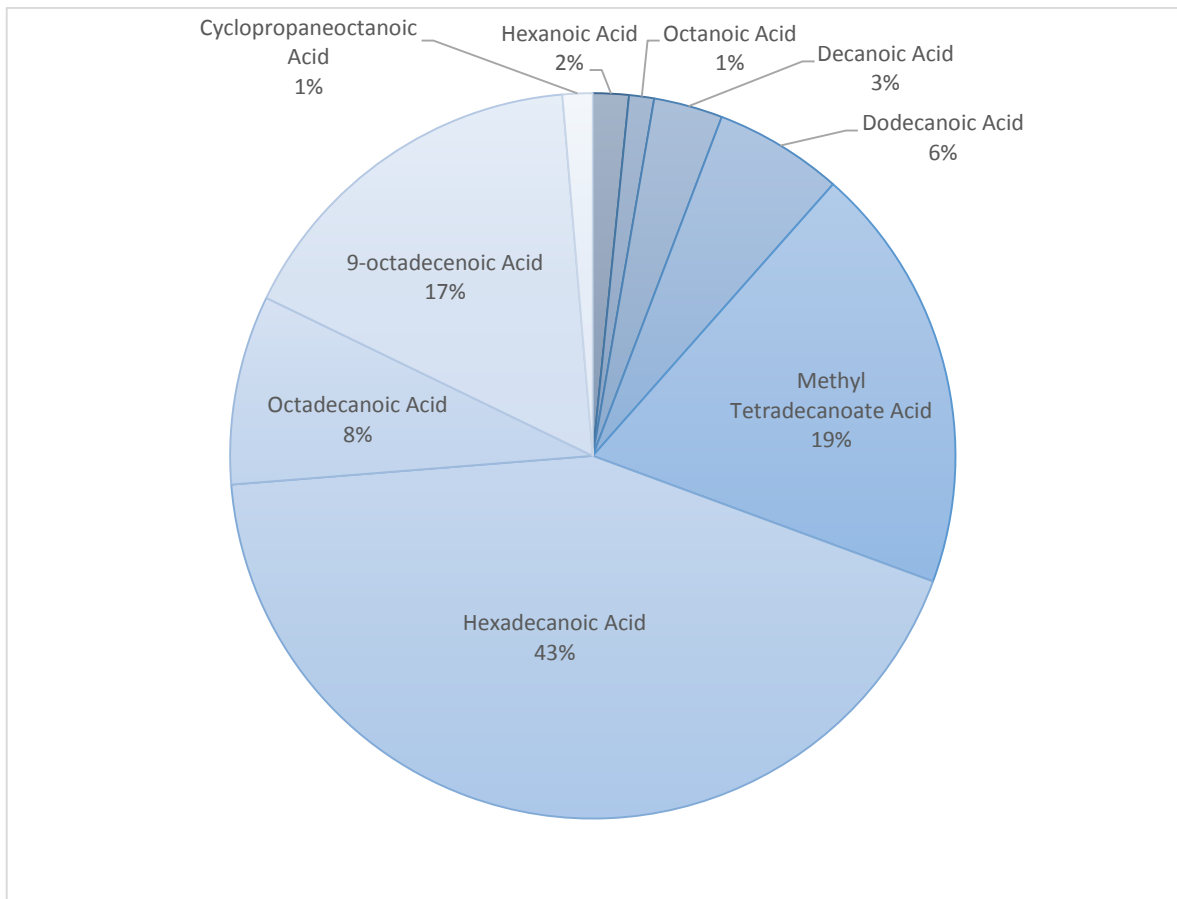
A_03		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	553 663	1,50326
Octanoic Acid	395 740	1,07448
Decanoic Acid	1 176 832	3,19523
Dodecanoic Acid	2 202 651	5,98045
Methyl Tetradecanoate Acid	7 215 295	19,59036
Hexadecanoic Acid	15 869 478	43,08746
Octadecanoic Acid	2 982 243	8,09713
9-octadecenoic Acid	5 984 438	16,24844
Cyclopropaneoctanoic Acid	450 509	1,22318

Ze získaných hodnot A_01, A_02 a A_03 výše uvedených tabulek (Tab. 4 až Tab. 6) je zpracován průměr, který je uveden v následující tabulce (Tab. 7).

Tab. 7. Průměrná hodnota vzorků A_01, A_02, A_03.

Průměr A_01, A_02, A_03		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	566 145	1,59681
Octanoic Acid	395 580	1,11528
Decanoic Acid	1 092 672	3,07628
Dodecanoic Acid	2 038 031	5,73782
Methyl Tetradecanoate Acid	6 783 644	19,10461
Hexadecanoic Acid	15 298 802	43,10576
Octadecanoic Acid	2 991 923	8,43586
9-octadecenoic Acid	5 850 300	16,48824
Cyclopropaneoctanoic Acid	474582	1,33933

Jelikož byly hodnoty u vzorku A téměř totožné, byl vytvořen průměr všech hodnot měření. Na základě zpracovaných průměrných hodnot ze vzorků A_01, A_02 a A_03 byl dále vytvořen graf (Obr. 3), který zobrazuje zastoupení karboxylových kyselin a jejich množství uvolňovaného tepla v procentech. Největší zastoupení ve vzorku C má Hexadecanoic Acid – 43%, dále Methyl Tetradecanoate Acid – 19% a 9-octadecenoic Acid – 17%. Dalšími kyselinami v sestupném pořadí jsou Octadecanoic Acid – 8%, Dodecanoic Acid – 6%, Decanoic Acid – 3%, Hexanoic Acid – 2%, Cyclopropaneoctanoic Acid – 1% a Octanoic Acid – 1%.



Obr. 3. Procentuální vyjádření průměrných hodnot karboxylových kyselin ve vzorku A.

4.6 Identifikace karboxylových kyselin ve vzorku B

Jedná se o analýzu vzorku B uloženého v půdě v hloubce 40 cm. V tabulkách níže (Tab. 8 až Tab. 10) jsou uvedeny vzorky B_01, B_02 a B_03, kdy číselná označení 01, 02 a 03 popisují čísla měření.

Tab. 8. Hodnoty vzorku B_01.

B_01		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	725 335	1,79997
Octanoic Acid	475 501	1,17999
Decanoic Acid	1 257 872	3,12150
Dodecanoic Acid	2 400 492	5,95700
Methyl Tetradecanoate Acid	7 921 167	19,65697
Hexadecanoic Acid	16 904 118	41,94883
Octadecanoic Acid	3 121 883	7,74719
9-octadecenoic Acid	7 013 576	17,40471
Cyclopropaneoctanoic Acid	477 050	1,18384

Tab. 9. Hodnoty vzorku B_02.

B_02		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	729 010	1,81791
Octanoic Acid	462 823	1,15413
Decanoic Acid	1 336 512	3,33282
Dodecanoic Acid	2 465 983	6,14934
Methyl Tetradecanoate Acid	7 909 320	19,72322
Hexadecanoic Acid	16 866 363	42,05912
Octadecanoic Acid	3 064 754	7,64248
9-octadecenoic Acid	6 762 983	16,86464
Cyclopropaneoctanoic Acid	503 816	1,25635

Tab. 10. Hodnoty vzorku B_03.

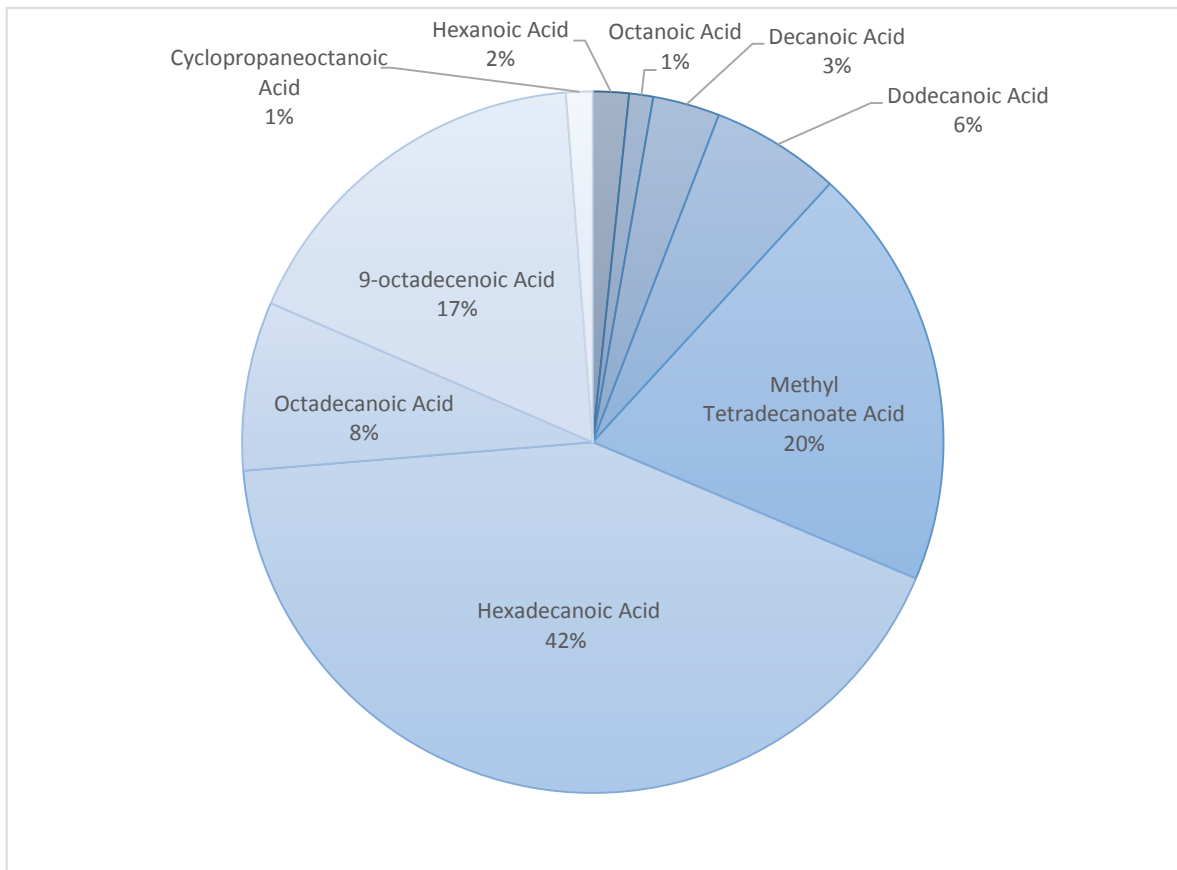
B_03		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	635 639	1,35883
Octanoic Acid	463 890	0,99168
Decanoic Acid	1 316 844	2,81507
Dodecanoic Acid	2 707 209	5,78731
Methyl Tetradecanoate Acid	8 999 561	19,23872
Hexadecanoic Acid	20 118 197	43,00746
Octadecanoic Acid	3 730 572	7,97499
9-octadecenoic Acid	8 226 178	17,58543
Cyclopropaneoctanoic Acid	580 294	1,24052

Ze získaných hodnot B_01, B_02 , B_03 z výše uvedených tabulek (Tab. 8 až Tab. 10) byl i v tomto případě zpracován průměr všech hodnot, který je uveden v následující tabulce (Tab. 11).

Tab. 11. Průměrná hodnota vzorků B_01, B_02, B_03.

Průměr B_01, B_02, B_03		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	696 661	1,65890
Octanoic Acid	467 405	1,10860
Decanoic Acid	1 303 743	3,08980
Dodecanoic Acid	2 524 561	5,96455
Methyl Tetradecanoate Acid	8 276 683	19,53964
Hexadecanoic Acid	17 962 893	42,33847
Octadecanoic Acid	3 305 736	7,78822
9-octadecenoic Acid	7 334 246	17,28492
Cyclopropaneoctanoic Acid	520 387	1,22690

I u vzorku B byly hodnoty téměř totožné a byl vytvořen průměr těchto hodnot. Na základě zpracovaných průměrných hodnot ze vzorků B_01, B_02 a B_03 byl následně vytvořen graf (Obr. 4), který zobrazuje zastoupení karboxylových kyselin a jejich množství uvolňovaného tepla v procentech. Největší zastoupení má opět Hexadecanoic Acid – 42%, dále Methyl Tetradecanoate Acid – 20% a 9-octadecenoic Acid – 17%. Dalšími kyselinami v sestupném pořadí jsou Octadecanoic Acid – 8%, Dodecanoic Acid – 6%, Decanoic Acid – 3%, Hexanoic Acid – 2%, Cyclopropaneoctanoic Acid – 1% a Octanoic Acid – 1%.



Obr. 4. Procentuální vyjádření průměrných hodnot karboxylových kyselin ve vzorku B.

4.7 Identifikace karboxylových kyselin ve vzorku C

V tomto případě se jedná o analýzu vzorku C uloženého v půdě v hloubce 60 cm. V tabulkách (Tab. 12 až Tab. 14) jsou uvedeny vzorky C_01, C_02 a C_03 a označení 01, 02 a 03 opět popisují čísla měření.

Tab. 12. Hodnoty vzorku C_01.

C_01		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	792 997	1,90657
Octanoic Acid	543 232	1,30607
Decanoic Acid	1 314 033	3,15927
Dodecanoic Acid	2 405 749	5,78404
Methyl Tetradecanoate Acid	7 792 895	18,73613
Hexadecanoic Acid	17 544 233	42,18086
Octadecanoic Acid	3 370 056	8,10248
9-octadecenoic Acid	7 299 615	17,55015
Cyclopropaneoctanoic Acid	530 071	1,27443

Tab. 13. Hodnoty vzorku C_02.

C_02		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	767 773	1,65829
Octanoic Acid	546 447	1,18026
Decanoic Acid	1 403 253	3,03085
Dodecanoic Acid	2 791 593	6,02949
Methyl Tetradecanoate Acid	9 090 652	19,63467
Hexadecanoic Acid	19 450 272	42,01015
Octadecanoic Acid	3 678 777	7,94570
9-octadecenoic Acid	7 982 018	17,24016
Cyclopropaneoctanoic Acid	588 196	1,27043

Tab. 14. Hodnoty vzorku C_03.

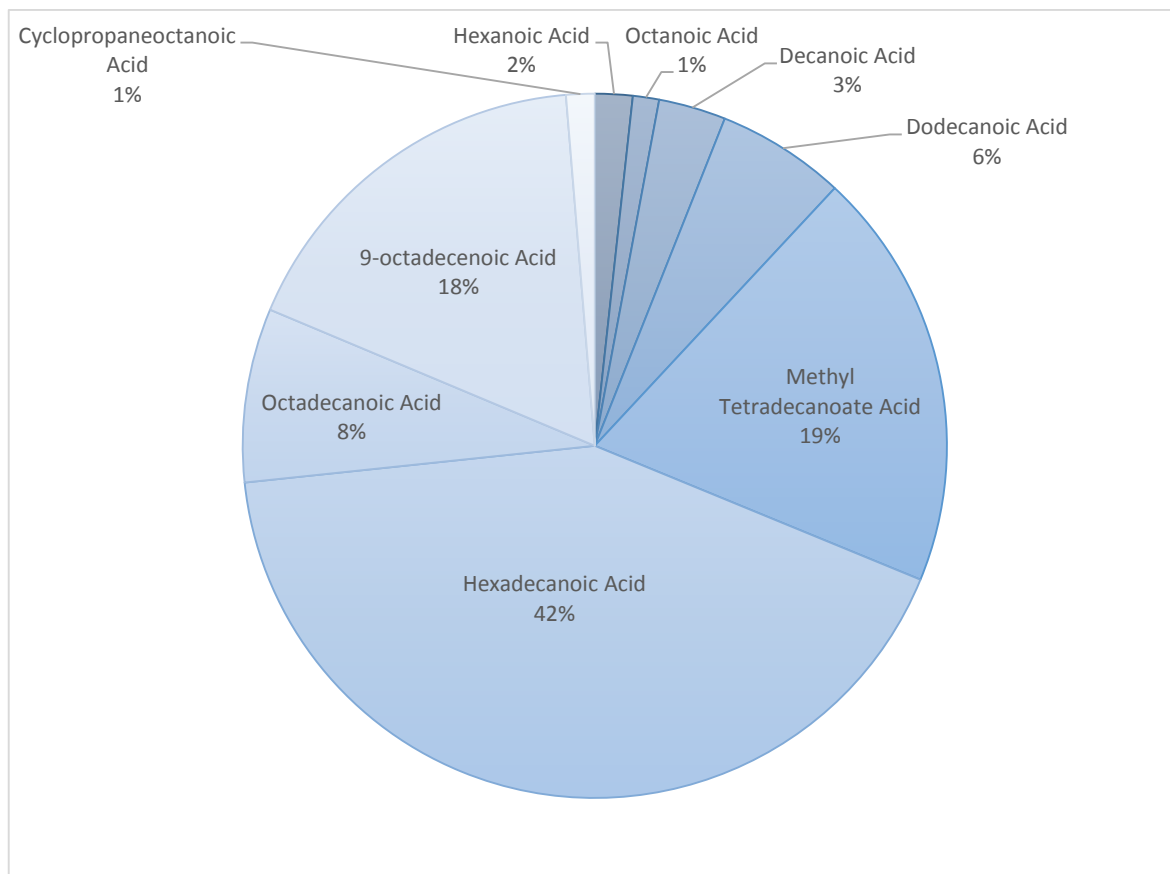
C_03		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	775 047	1,61747
Octanoic Acid	539 719	1,12636
Decanoic Acid	1 474 904	3,07803
Dodecanoic Acid	2 840 889	5,92875
Methyl Tetradecanoate Acid	9 320 771	19,45183
Hexadecanoic Acid	20 211 932	42,18097
Octadecanoic Acid	3 786 996	7,90321
9-octadecenoic Acid	8 307 018	17,33620
Cyclopropaneoctanoic Acid	659 911	1,37719

Z hodnot C_01, C_02 a C_03 z tabulek (Tab. 12 až Tab. 14) byl i u vzorku C zpracován průměr, který je uveden v tabulce (Tab. 15).

Tab. 15. Průměrná hodnota vzorků C_01, C_02, C_03.

Průměr C_01, C_02, C_03		
Kyselina	Hodnota	Procenta
Hexanoic Acid	778 606	1,72744
Octanoic Acid	543 133	1,20423
Decanoic Acid	1 397 397	3,08938
Dodecanoic Acid	2 679 410	5,91409
Methyl Tetradecanoate Acid	8 734 773	19,27421
Hexadecanoic Acid	19 068 812	42,12399
Octadecanoic Acid	3 611 943	7,98380
9-octadecenoic Acid	7 862 884	17,37550
Cyclopropaneoctanoic Acid	592 726	1,30735

I u vzorku C byl vytvořen průměr všech hodnot měření. Na základě zpracovaných průměrných hodnot vzorků C_01, C_02 a C_03 je níže zobrazen graf (Obr. 5), který zobrazuje zastoupení karboxylových kyselin a jejich množství uvolňovaného tepla v procentech. Největší zastoupení ve vzorku C má stále Hexadecanoic Acid – 42%, dále Methyl Tetradecanoate Acid – 19% a 9-octadecenoic Acid – 18%. Dalšími kyselinami v sestupném pořadí jsou Octadecanoic Acid – 8%, Dodecanoic Acid – 6%, Decanoic Acid – 3%, Hexanoic Acid – 2%, Cyclopropaneoctanoic Acid – 1% a Octanoic Acid – 1%.



Obr. 5. Procentuální vyjádření průměrných hodnot karboxylových kyselin ve vzorku C.

4.8 Shrnutí

Shrnutí identifikace karboxylových kyselin a jejich hodnot získaných ze vzorků A, B, C je zobrazeno v tabulce (Tab. 16). Jedná se o průměr hodnot karboxylových kyselin z měření A, B, C se zaokrouhlením na celé číslo.

Tab. 16. Shrnutí průměrných hodnot kyselin ve vzorcích A, B, C.

Kyselina	Vzorek A	Vzorek B	Vzorek C
Hexanoic Acid	566 145	696 661	778 606
Octanoic Acid	395 580	467 405	543 133
Decanoic Acid	1 092 672	1 303 743	1 397 397
Dodecanoic Acid	2 038 031	2 524 561	2 679 410
Methyl Tetradecanoate Acid	6 783 644	8 276 683	8 734 773
Hexadecanoic Acid	15 298 802	17 962 893	19 068 812
Octadecanoic Acid	2 991 923	3 305 736	3 611 943
9-octadecenoic Acid	5 850 300	7 334 246	7 862 884
Cyclopropaneoctanoic Acid	474 582	520 387	592 726

5 APLIKACE FORMÁLNÍ KONCEPTUÁLNÍ ANALÝZY

Po chromatografické analýze vzorků byly získány informace o množství uvolněného tepla již zmíněných karboxylových kyselin Hexanoic Acid, Octanoic Acid, Decanoic Acid, Dodecanoic Acid, Methyl Tetradecanoate Acid, Hexadecanoic Acid, Cyclopropaneoctanoic Acid a také Octadecanoic Acid a 9-octadecenoic Acid. Z volně dostupných programů na Internetu byl pro potřeby této diplomové práce zvolen software Concept Explorer, který z připravených tabulek vygeneroval snadno čitelné konceptuální svazy.

5.1 Program Concept Explorer

Autorem i vývojářem programu Concept Explorer (ConExp) je Serhiy A. Yevtushenko. V průběhu několika let byl program několikrát rozšířen do konkrétní podoby a dnes je volně dostupný. [14]

5.1.1 Podmínky pro instalaci

Po stažení programu je nutné program rozbalit, jelikož se nachází v zip souboru. Pro jeho spuštění je vyžadován programovací jazyk Java – nejlépe nejaktuálnější verze. Po nainstalování nejaktuálnější verze Java je třeba otevřít skript, který se nazývá conexp.bat a program se spustí. [14]

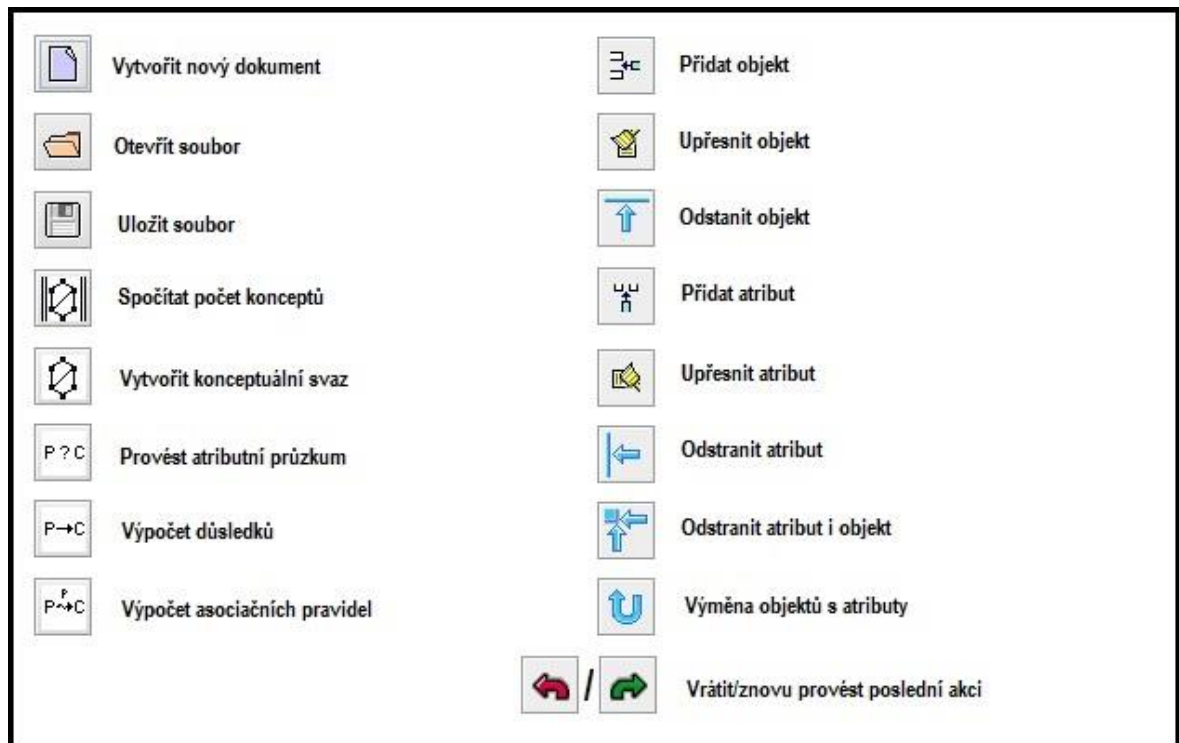
5.1.2 Uživatelské rozhraní – prostředí programu Concept Explorer

Po otevření programu Concept Explorer, je třeba nejprve vytvořit tabulku, kde jsou v záhlaví sloupců názvy příslušných atributů a v záhlaví řádků názvy jednotlivých objektů. Skutečnost, že určitý atribut patří danému objektu, se v tabulce zobrazuje symbolem křížku, a zastupuje hodnotu „1“ z tabulky konceptuálního škálování. Prázdné políčko značí hodnotu „0“, což znamená, že určitý atribut nenáleží danému objektu.

Program nabízí uživatelům několik možností práce s daty:

- editace kontextu,
- vytvoření konceptuálního svazu,
- nalezení implikací, které platí ve formálním kontextu,
- nalezení asociačních pravidel, která platí ve formálním kontextu.

V následujícím obrázku (Obr. 6) jsou zobrazeny ikony operací, se kterými je možné v programu ConExp pracovat, jakož i vysvětlivky k obsahu ikon.



Obr. 6. Uživatelské rozhraní programu ConExp – ikony operací.

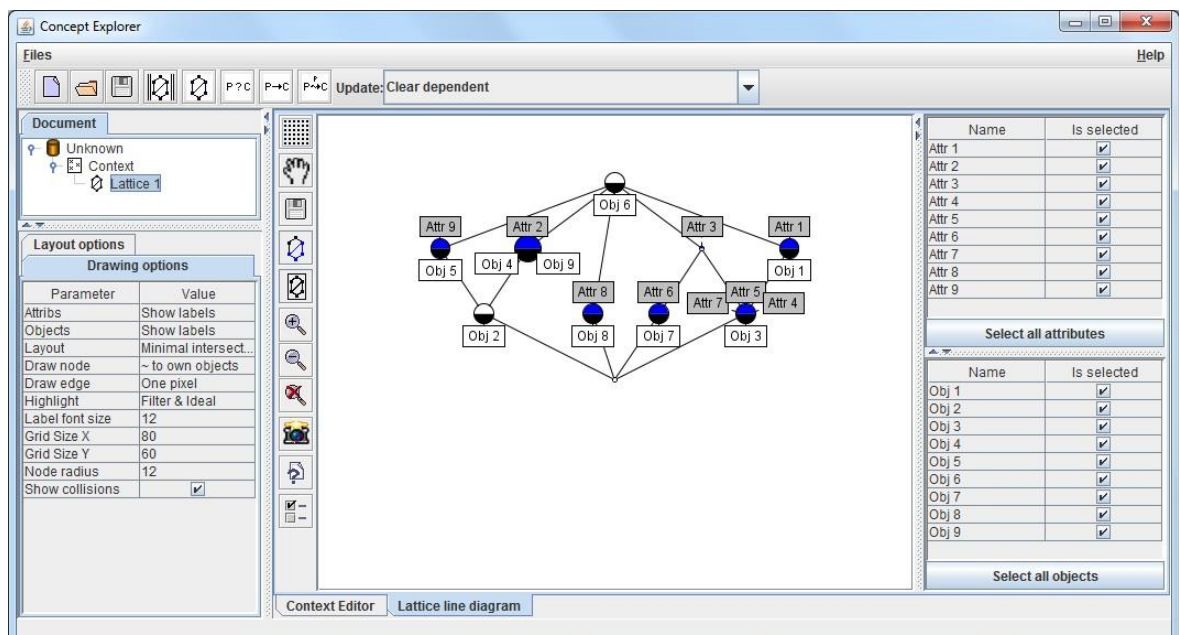
Pro snadné vkládání hodnot označených křížkem se jednoduše napíše písmeno „x“ a pro prázdné políčko znak tečky „.“, po zapsání každé hodnoty se kurzor přemístí vpravo do dalšího volného políčka.

Mějme tedy příklad v následujícím obrázku (Obr. 7), kde levý sloupec A obsahuje objekty Obj 1 až Obj 9) a sloupce B až J označují jejich atributy (Atr 1 až Atr 9).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
Obj 1	Attr 1	X	Attr 2	Attr 3	Attr 4	Attr 5	Attr 6	Attr 7	Attr 8	Attr 9
Obj 2		X								X
Obj 3		X		X	X	X		X		
Obj 4			X							
Obj 5										X
Obj 6				X			X			
Obj 7										
Obj 8									X	
Obj 9			X							

Obr. 7. Náhled programu ConExp – kontextová tabulka.

Z takto vytvořené tabulky programu ConExp (Obr. 7) je možné následně vytvořit grafický obraz konceptuálního svazu, kde jsou objekty a atributy navzájem propojeny, a který lze upravovat a zobrazovat dle potřeb (Obr. 8).



Obr. 8. Náhled programu ConExp – konceptuální svaz.

Co se týče symboliky obrazu zobrazeného konceptuálního svazu, lze ji popsat takto:

- šedý obdélník značí atributy,
- bílý obdélník značí objekty,
- tmavě modrý půlkruh značí spojení s atributem,
- černý půlkruh značí spojení s objektem.

S následně vytvořeným konceptuálním svazem je možné manipulovat těmito způsoby:

- přiřadit k objektům a atributům názvy,
- zobrazit pouze vybrané hodnoty,
- nastavit svaz do požadovaného tvaru,
- nastavit různou velikost hran a uzlů svazu,
- pořídit kopii svazu.

5.2 Aplikace dat do programu Concept Explorer

Aby bylo možné zjištěné hodnoty karboxylových kyselin a vzorků zaznamenat do programu ConExp, nejprve bylo třeba vytvořit tabulku (Tab. 17), kde je zaznamenáno všech devět identifikovaných kyselin Hexanoic Acid, Octanoic Acid, Decanoic Acid, Dodecanoic Acid, Methyl Tetradecanoate Acid, Hexadecanoic Acid, Octadecanoic Acid, 9-octadecenoic Acid a Cyclopropaneoctanoic Acid a jejich hodnoty uvolněného tepla ve vzorcích A, B, C.

Tab. 17. Hodnoty karboxylových kyselin ve vzorcích – vícehodnotový kontext.

		Hexanoic Acid	Octanoic Acid	Decanoic Acid	Dodecanoic Acid	Methyl Tetradecanoate Acid	Hexadecanoic Acid	Octadecanoic Acid	9-octadecenoic Acid	Cyclopropanoic Acid
A	A_01	559 020	387 435	1 030 898	1 955 871	6 573 163	14 938 850	2 936 631	5 763 729	482 022
	A_02	585 751	403 565	1 070 287	1 955 572	6 562 475	15 088 078	3 056 894	5 802 733	491 214
	A_03	553 663	395 740	1 176 832	2 202 651	7 215 295	15 869 478	2 982 243	5 984 438	450 509
B	B_01	725 335	475 501	1 257 872	2 400 492	7 921 167	16 904 118	3 121 883	7 013 576	477 050
	B_02	729 010	462 823	1 336 512	2 465 983	7 909 320	16 866 363	3 064 754	6 762 983	503 816
	B_03	635 639	463 890	1 316 844	2 707 209	8 999 561	20 118 197	3 730 572	8 226 178	580 294
C	C_01	792 977	543 232	1 314 033	2 405 749	7 792 895	17 544 233	3 370 056	7 299 615	530 071
	C_02	767 773	546 447	1 403 253	2 791 593	9 090 652	19 450 272	3 678 777	7 982 018	588 196
	C_03	775 047	539 719	1 474 904	2 840 889	9 320 771	20 211 932	3 786 996	8 307 018	659 911

Tabulka je však pro vložení do programu ConExp nevhodná, nejprve bylo tedy třeba zaměřit se na kyseliny jako objekty a jejich atributy čili vlastnosti a poté za objekty dosadit vzorek a i zde se zaměřit na jejich atributy (vlastnosti).

5.2.1 Karboxylové kyseliny

Jak bylo zmíněno výše, je třeba se nejprve zaměřit na karboxylové kyseliny a jejich vlastnosti. Vybranými vlastnostmi jsou: triviální název, skupenství a typ, hodnoty uvedené v intervalu, umístění intervalu nejvyšších hodnot (supremum) a umístění intervalu nejnižších hodnot (infimum) podle označení a čísla vzorku, ve kterém se interval nejvyšších a nejnižších hodnot kyselin nacházel. Co se týče hodnot, byl proveden převod vícehodnotového kontextu na kontext základní, kdy byl dle naměřených hodnot určen interval, ve kterém se vzorky nacházely (Tab. 18). Tabulka zaměřená na karboxylové kyseliny je uvedena níže (Tab. 19).

Tab. 18. Převedení vícehodnotového kontextu na základní kontext.

Vícehodnotový kontext	Základní kontext
Hodnoty kyselin	<350 000 – 550 000>
	<450 000 – 700 000>
	<550 000 – 800 000>
	<1 000 000 – 1 500 000>
	<1 800 000 – 3 000 000>
	<2 900 000 – 3 800 000>
	<5 000 000 – 9 000 000>
	<6 500 000 – 9 500 000>
	<14 000 000 – 21 000 000>

Tab. 19. Karboxylové kyseliny – vybrané vlastnosti.

Karboxylové kyseliny	Triviální název	Skupenství a typ			Interval hodnot		Supremum			Infimum		
		Olejovitá	Kapalína	Bezbarvý krystalický prášek			C_01	C_02	C_03	A_01	A_02	A_03
Hexanoic Acid	Kyselina kapronová	X	X		<550 001 - 800 000>		X					X
Octanoic Acid	Kyselina kaprylová	X	X		<350 000 - 550 000>			X		X		
Decanoic Acid	Kyselina kaprinová			X	<800 001 - 1 500 000>				X	X		
Dodecanoic Acid	Kyselina laurová			X	<1 500 001 - 2 900 000>				X	X		
Methyl Tetradecanoate Acid	Kyselina myristová			X	<6 000 001 - 9 500 000>				X		X	
Hexadecanoic Acid	Kyselina palmitová			X	<9 500 001 - 14 000 000>	<14 000 001 - 21 000 000>			X	X		
Octadecanoic Acid	Kyselina stearová			X	<2 900 001 - 3 800 000>				X	X		
9-octadecenoic Acid	Kyselina olejová		X		<3 800 001 - 6 000 000>	<6 000 001 - 9 500 000>			X	X		
Cyclopropanoic Acid	Kyselina sterkulová	X	X		<350 000 - 500 000>	<550 001 - 800 000>			X			X

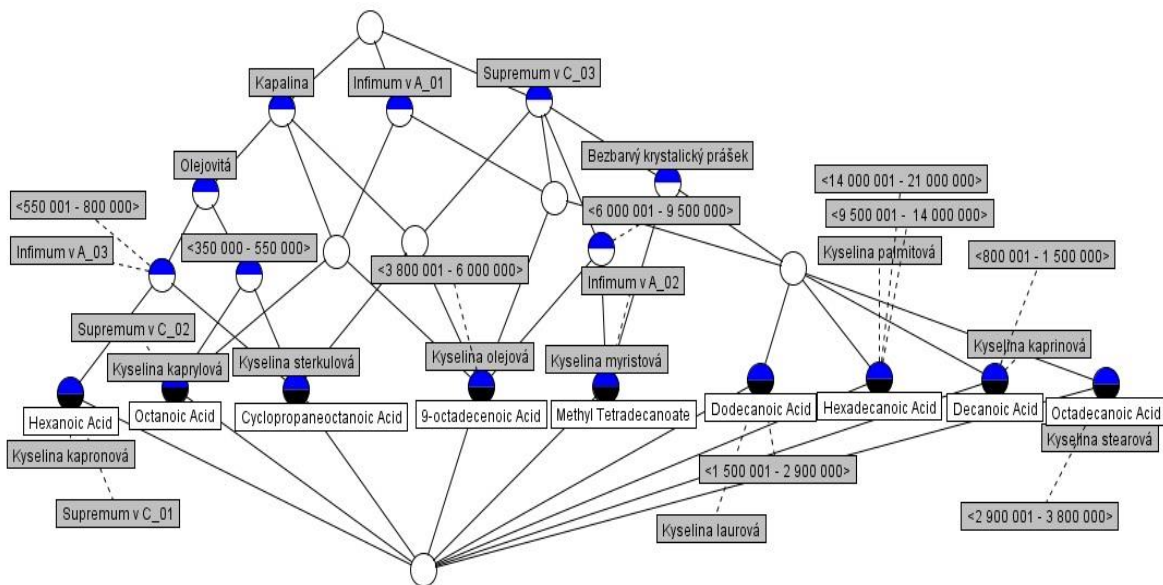
Pro formální konceptuální analýzu je ovšem nutná tabulka pouze s bivalentními hodnotami, a proto je třeba přistoupit k dalšímu kroku, a tím je konceptuální škálování. Z tohoto důvodu je třeba jednotlivé triviální názvy, skupenství a typ kyselin uvést jako atribut,

stejně tak, jako je i interval je přidělen ke každé karboxylové kyselině. Do takto vytvořené tabulky (Tab. 20) pak jednoduše zapíšeme pomocí 1 nebo 0 skutečnost, že k danému objektu (kyselině) příslušný atribut (vlastnost) náleží. Pro lepší přehlednost jsou nuly vynechány a uváděny pouze jedničky.

Tab. 20. Karboxylové kyseliny – konceptuální škálování.

Karboxylové kyseliny	Kyselina kapronová	Kyselina kaprylová	Kyselina kaprinová	Kyselina laurová	Kyselina myristová	Kyselina palmitová	Kyselina stearová	Kyselina olejová	Kyselina stearikulová	Olejevitá	Kapalina	Bezbarvý krystalický prášek	350 000 – 550 000	550 001 – 800 000	800 001 – 1 500 000	1 500 001 – 2 900 000	2 900 001 – 3 800 000	3 800 001 – 6 000 000	6 000 001 – 9 500 000	9 500 001 – 14 000 000	14 000 001 – 21 000 000	Supremum v C_01	Supremum v C_02	Supremum v C_03	Infimum v A_01	Infimum v A_02	Infimum v A_03	
	Hexanoic Acid	1									1	1		1								1						
Octanoic Acid		1								1	1	1										1			1			
Decanoic Acid			1									1		1										1	1			
Dodecanoic Acid				1								1			1									1	1			
Methyl Tetradecanoate					1							1						1						1		1		
Hexadecanoic Acid						1						1							1	1				1	1			
Octadecanoic Acid							1					1				1								1	1			
9-octadecenoic Acid								1			1						1	1						1	1			
Cyclopropanoic Acid									1	1	1		1	1										1				1

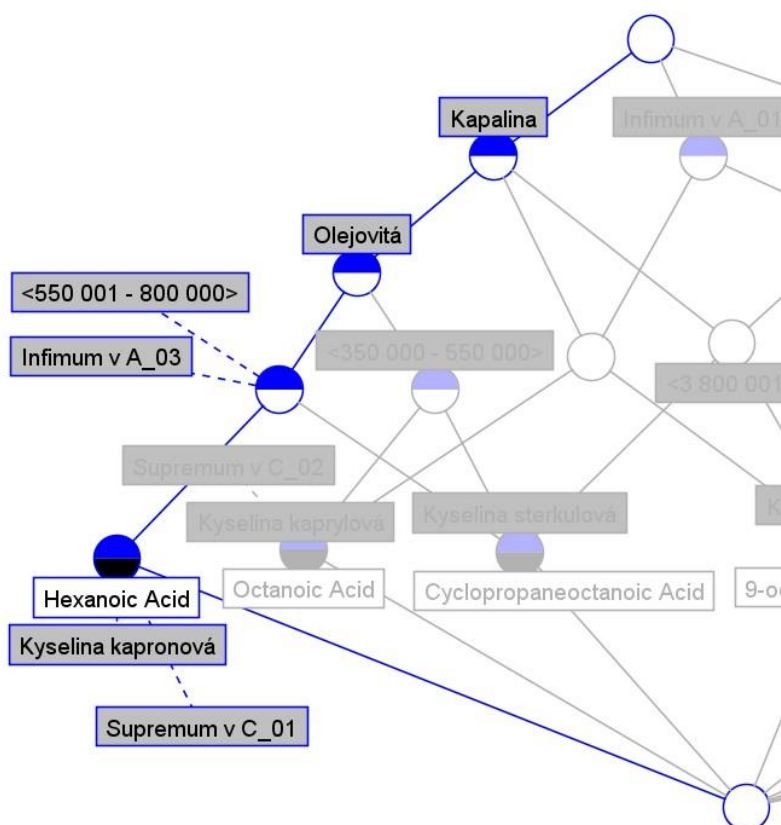
Po vložení tabulky (Tab. 20) do programu ConExp program vykreslí konceptuální svaz, viz obrázek (Obr. 9). V FCA většinou hledáme nějakou množinu implikací, které nejsou nadbytečné, tzn. nejsou triviální a na první pohled zřejmé. Z těchto implikací lze všechny ostatní logicky odvodit.



Obr. 9. Konceptuální svaz pro karboxylové kyseliny.

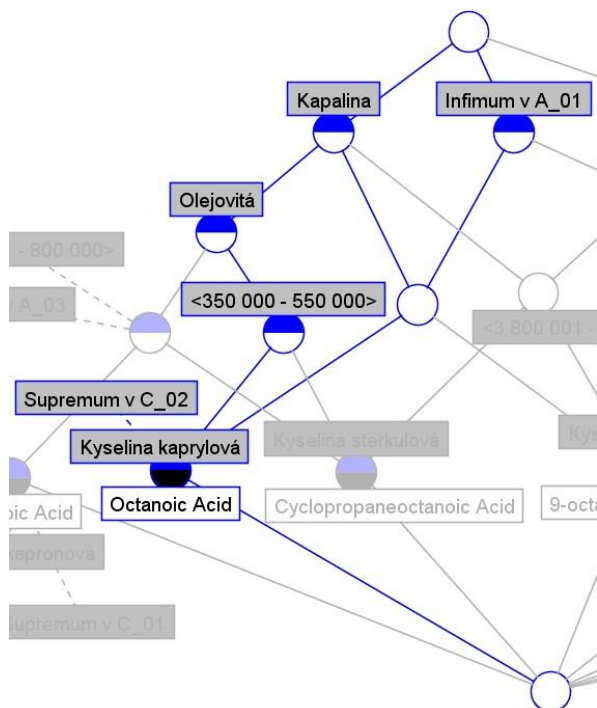
Program ConExp dokáže zobrazit i atributové implikace. Ty jsou výhodné pro hledání zajímavých závislostí (Obr. 10).

Program ConExp umožňuje zvýraznění vybraných svazů objektů a k nim patřících atributů. V obrázcích (Obr. 11 až Obr. 19) se zaměříme na jednotlivé karboxylové kyseliny a jejich konceptuální svazy.



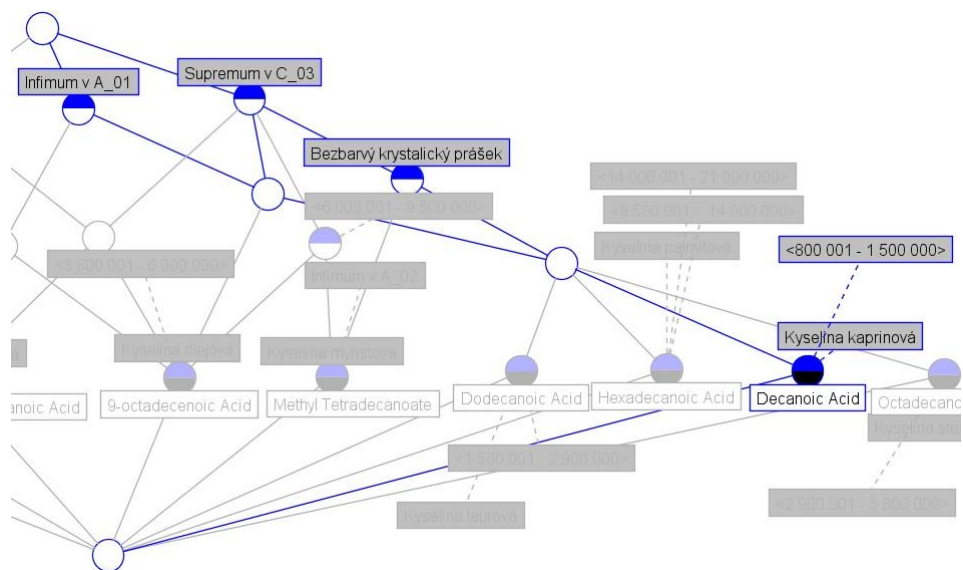
Obr. 11. Konceptuální svaz pro Hexanoic Acid.

Obrázek (Obr. 11) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Hexanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina kapronová a označení umístění suprema, čili intervalu nejvyšších hodnot, ve vzorku C_01. K atributům se váže hodnotový interval kyseliny $<550\,001 - 800\,000>$, dále umístění infima, čili intervalu nejnižších hodnot, ve vzorku A_01 a označení, že se jedná o olejovitou kapalinu.



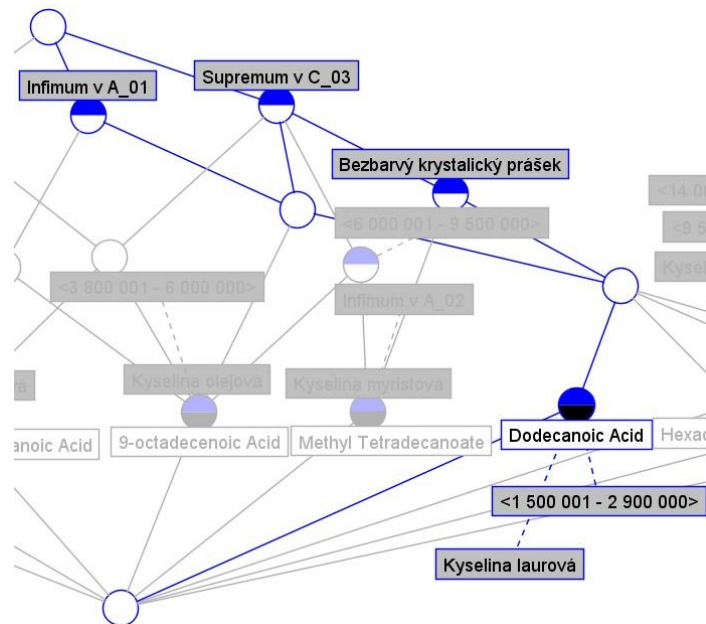
Obr. 12. Konceptuální svaz pro Octanoic Acid.

Obrázek výše (Obr. 12) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Octanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina kaprylová a označení umístění suprema, čili intervalu nejvyšších hodnot, ve vzorku C_02. K atributům se váže hodnotový interval kyseliny <350 000 – 550 000>, dále umístění infima, čili intervalu nejnižších hodnot ve vzorku A_01 a označení, že se jedná o olejovitou kapalinu.



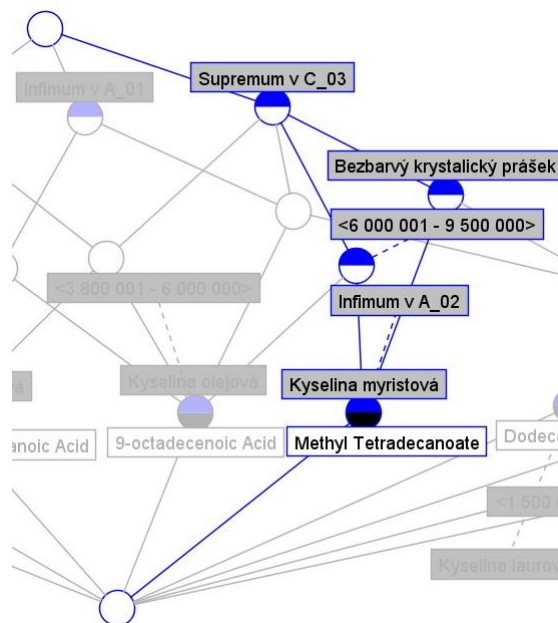
Obr. 13. Konceptuální svaz pro Decanoic Acid.

Obrázek (Obr. 13) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Decanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina kaprinová a hodnotový interval kyseliny <800 001 – 1 500 000>. K atributům se váže umístění suprema ve vzorku C_03 a infima ve vzorku A_01, dále označení, že se jedná o bezbarvý krystalický prášek.



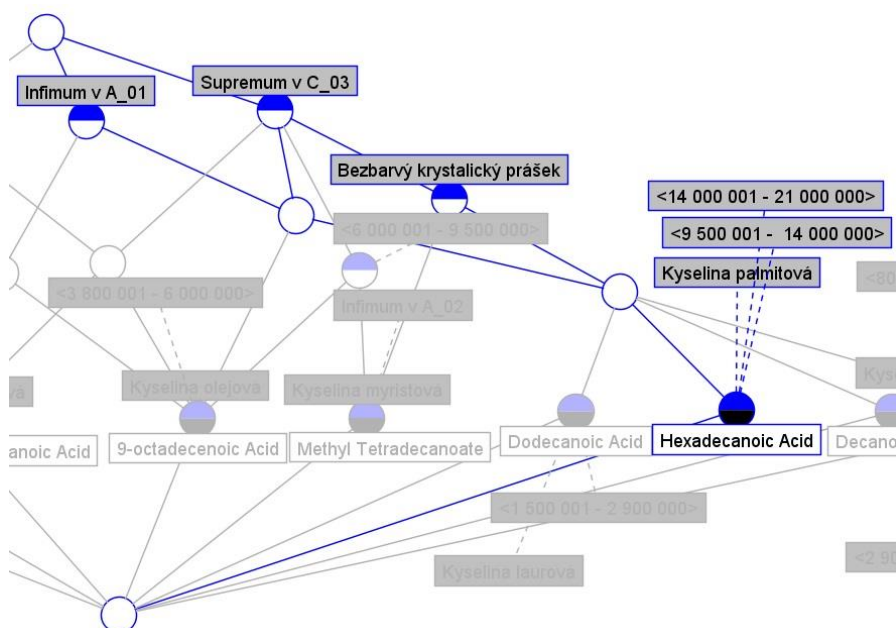
Obr. 14. Konceptuální svaz pro Dodecanoic Acid.

Obrázek výše (Obr. 14) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Dodecanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina laurová a hodnotový interval kyseliny <1 500 001 – 2 900 000>. K atributům se váže umístění suprema ve vzorku C_03 a infima ve vzorku A_01, dále označení, že se jedná o bezbarvý krystalický prášek.



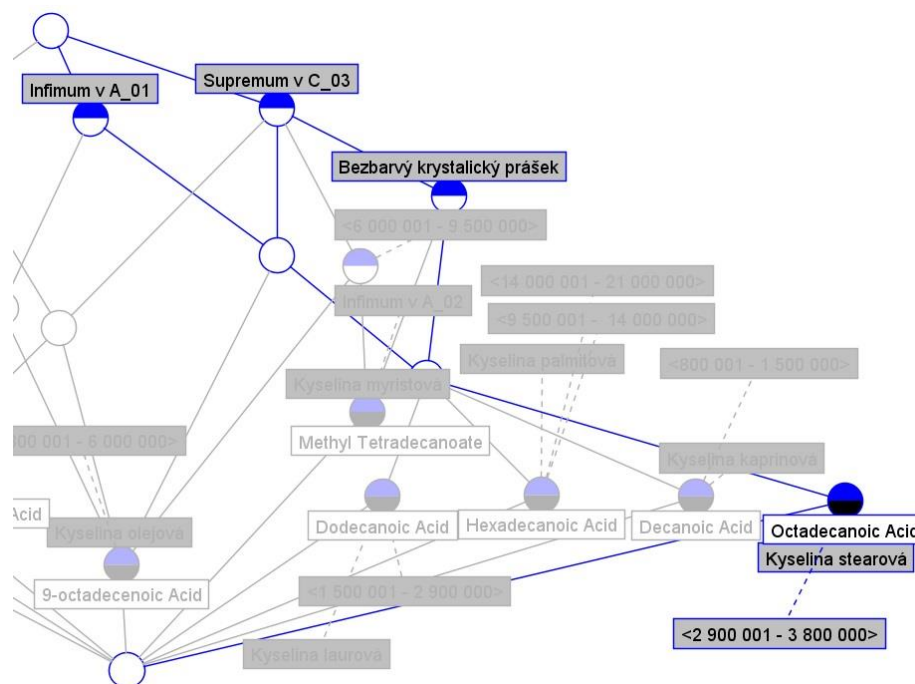
Obr. 15. Konceptuální svaz pro Methyl Tetradecanoate Acid.

Obrázek (Obr. 15) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Methyl Tetradecanoate Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina myristová. K atributům se váže umístění suprema ve vzorku C_03 a infima ve vzorku A_02, dále označení, že se jedná o bezbarvý krystalický prášek a hodnotový interval kyseliny <6 000 001 – 9 500 000>.



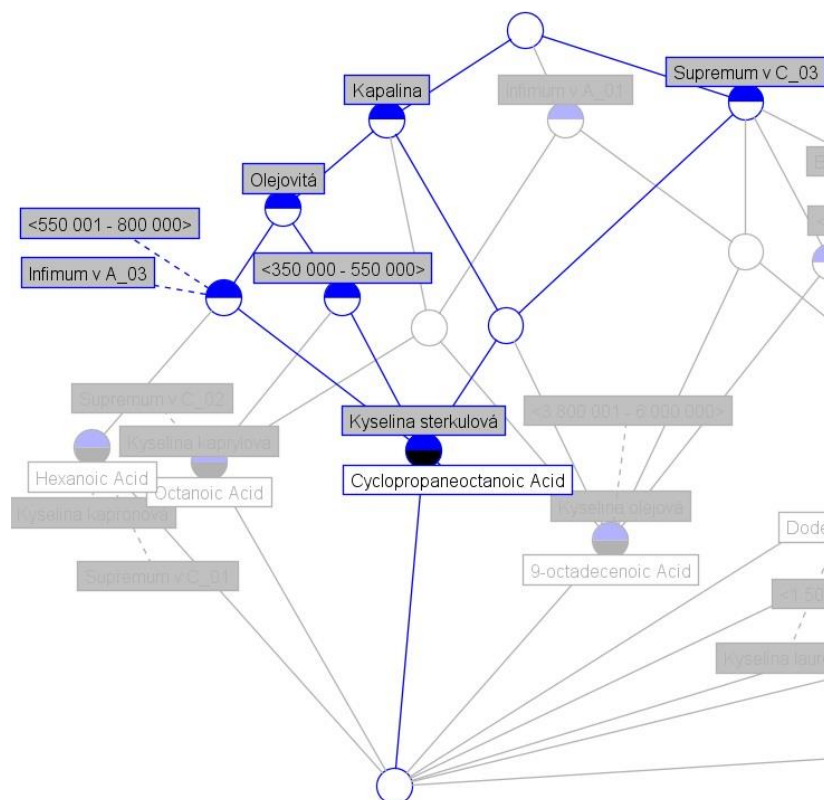
Obr. 16. Konceptuální svaz pro Hexadecanoic Acid.

Obrázek (Obr. 16) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Hexadecanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina palmitová a intervaly hodnot $\langle 9\ 500\ 001 - 14\ 000\ 000 \rangle$ a $\langle 14\ 000\ 001 - 21\ 000\ 000 \rangle$. K atributům se váže označení, že se jedná o bezbarvý krystalický prášek a umístění suprema kyseliny ve vzorku C_03 a infima ve vzorku A_01.



Obr. 17. Konceptuální svaz pro Octadecanoic Acid.

Obrázek (Obr. 17) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Octadecanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina stearová a hodnotový interval $\langle 2\ 900\ 001 - 3\ 800\ 000 \rangle$. K atributům se váže označení, že se jedná o bezbarvý krystalický prášek a umístění suprema kyseliny ve vzorku C_03 a infima ve vzorku A_01.



Obr. 19. Konceptuální svaz pro Cyclopropaneoctanoic Acid.

Obrázek výše (Obr. 19) zobrazuje konceptuální svaz pro kyselinu Cyclopropaneoctanoic Acid. Ke kyselině (objektu) patří atributy (vlastnosti), a to triviální název – kyselina sterkulová. K atributům se vážou hodnotové intervaly $\langle 350\ 000 - 550\ 000 \rangle$ a $\langle 550\ 001 - 800\ 000 \rangle$, umístění suprema kyseliny ve vzorku C_03 a infima ve vzorku A_03 a označení, že se jedná o olejovitou kapalinu.

5.2.2 Vzorky A, B, C

V tomto případě jsou objekty vzorky A_01 až C_03 a jejich atributy (vlastnosti) jsou hloubka, hodnota suprema a infima, dále také suprema a infima (označené S a I) všech kyselin a jejich umístění ve vzorcích A_01 až C_03. Vybrané vlastnosti jsou zobrazeny v tabulce (Tab. 21).

Tab. 21. Vzorky A, B, C – vybrané vlastnosti.

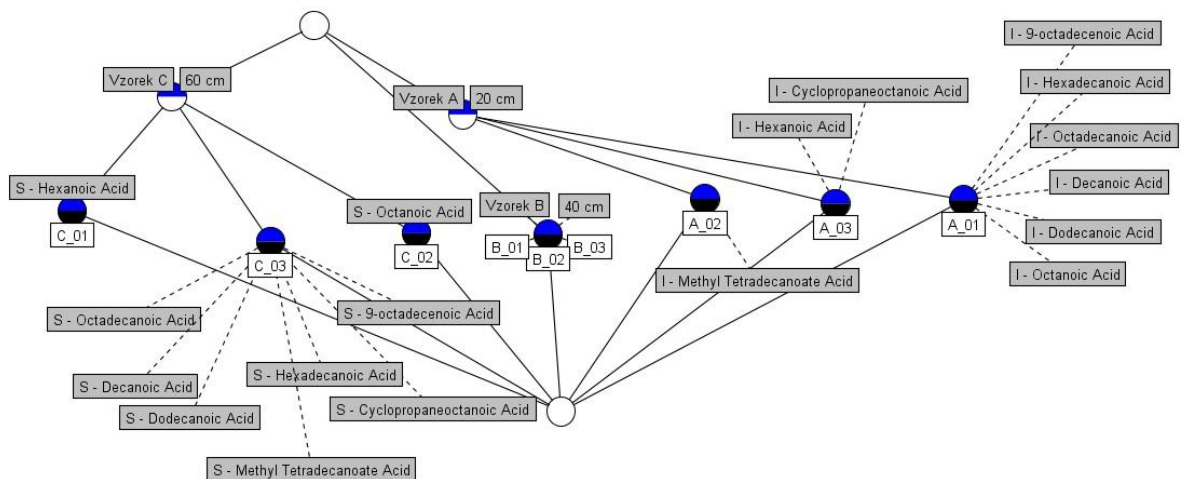
Vzorky		Hloubka			Hexanoic Acid		Octanoic Acid		Decanoic Acid		Dodecanoic Acid		Methyl Tetradecanoate Acid		Hexadecanoic Acid		Octadecanoic Acid		9-octadecenoic Acid		Cyclopropanoic Acid	
		20 cm	40 cm	60 cm	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I
A	A_01	X					X		X		X				X		X		X			
	A_02	X											X									
	A_03	X				X																X
B	B_01		X																			
	B_02		X																			
	B_03		X																			
C	C_01			X	X																	
	C_02			X			X															
	C_03			X				X		X		X		X		X		X		X		X

I u vzorků A, B, C je nutné použít tabulku s bivalentními hodnotami. Do tabulky vytvořené výše (Tab. 21) už pak jednoduše zapíšeme pomocí 1 nebo 0 skutečnost, že k danému objektu (vzorku) patří příslušný atribut (vlastnost). V tabulce jsou navíc vyznačeny i nuly a jedničky zdůrazněny barevným vykreslením (Tab. 22).

Tab. 22. Vzorky A, B, C – konceptuální škálování.

Vzorky	Vzorek A	Vzorek B	Vzorek C	20 cm	40 cm	60 cm	Hexanoic Acid		Octanoic Acid		Decanoic Acid		Dodecanoic Acid		Methyl tetradecanoate Acid		Hexadecanoic Acid		Octadecanoic Acid		9-octadecenoic Acid		Cyclopropaneoctanoic Acid					
							S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I	S	I
							A_01	1	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0	0	1	0	1	0	1
A_02	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0				
A_03	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1				
B_01	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
B_02	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
B_03	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
C_01	0	0	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
C_02	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
C_03	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0				

Konceptuální svaz pro tabulku (Tab. 22) je zobrazen v obrázku níže (Obr. 20). Program ConExp i v tomto případě vykreslil konceptuální svaz pro všechny vzorky.



Obr. 20. Konceptuální svaz pro vzorky A, B, C.

V případě, že chceme hledat v datech zajímavé závislosti, je pro nás i v tomto případě vhodné zobrazení atributových implikací, které program ConExp umožňuje. Abychom však omezili velké množství atributových implikací, které se v datech běžně nachází, musíme

hledat takovou množinu implikací, která je co nejmenší, avšak stále popisuje všechny závislosti nacházející se v datech, viz obrázek (Obr. 21).

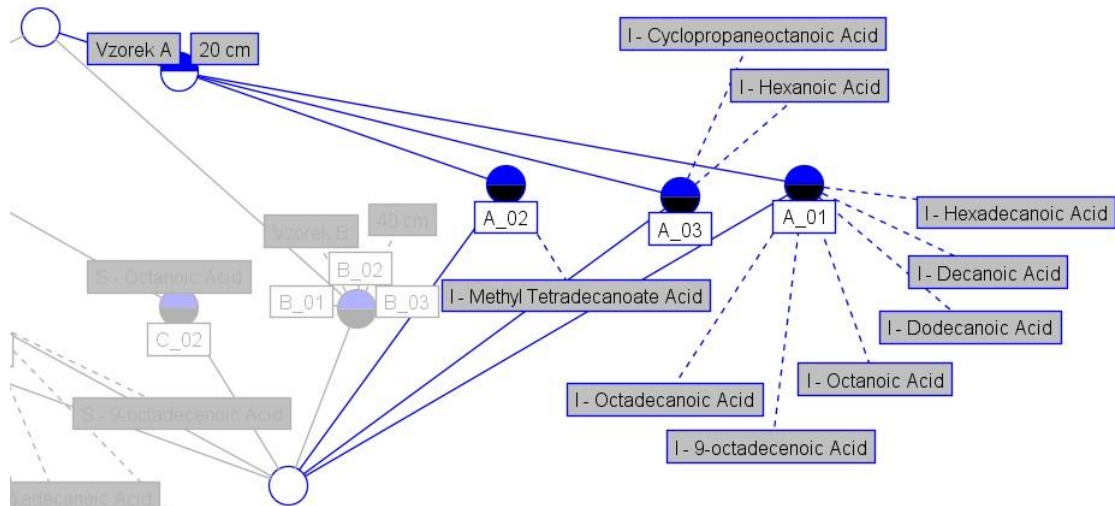
```

1 < 3 > 20 cm = [100%] => < 3 > Vzorek A;
2 < 3 > 40 cm = [100%] => < 3 > Vzorek B;
3 < 3 > 60 cm = [100%] => < 3 > Vzorek C;
4 < 3 > Vzorek A = [100%] => < 3 > 20 cm;
5 < 3 > Vzorek B = [100%] => < 3 > 40 cm;
6 < 3 > Vzorek C = [100%] => < 3 > 60 cm;
7 < 1 > S - Hexanoic Acid = [100%] => < 1 > 60 cm Vzorek C;
8 < 1 > I - Hexanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm Vzorek A;
9 < 1 > S - Octanoic Acid = [100%] => < 1 > 60 cm Vzorek C;
10 < 1 > I - Octanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid 20 cm Vzorek A;
11 < 1 > S - Decanoic Acid = [100%] => < 1 > S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
12 < 1 > I - Decanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Octanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid 20 cm Vzorek A;
13 < 1 > S - Dodecanoic Acid = [100%] => < 1 > S - Decanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
14 < 1 > I - Dodecanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid 20 cm Vzorek A;
15 < 1 > S - Methyl Tetradecanoate Acid = [100%] => < 1 > S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
16 < 1 > I - Methyl Tetradecanoate Acid = [100%] => < 1 > 20 cm Vzorek A;
17 < 1 > S - Hexadecanoic Acid = [100%] => < 1 > S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
18 < 1 > I - Hexadecanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid 20 cm Vzorek A;
19 < 1 > S - Octadecanoic Acid = [100%] => < 1 > S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
20 < 1 > I - Octadecanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid 20 cm Vzorek A;
21 < 1 > S - 9-octadecenoic Acid = [100%] => < 1 > S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
22 < 1 > I - 9-octadecenoic Acid = [100%] => < 1 > I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid 20 cm Vzorek A;
23 < 1 > S - Cyclopropaneoctanoic Acid = [100%] => < 1 > S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid 60 cm Vzorek C;
24 < 1 > I - Cyclopropaneoctanoic Acid = [100%] => < 1 > I - Hexanoic Acid 20 cm Vzorek A;
25 < 0 > S - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid 60 cm Vzorek C = [100%] => < 0 > I - Hexanoic Acid I - Octanoic Acid S - Decanoic Acid I - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid I - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid I - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm 40 cm Vzorek A Vzorek B;
26 < 0 > S - Hexanoic Acid S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C = [100%] => < 0 > I - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm 40 cm Vzorek A Vzorek B;
27 < 0 > I - Hexanoic Acid I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm Vzorek A = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 40 cm 60 cm Vzorek B Vzorek C;
28 < 0 > I - Hexanoic Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm Vzorek A = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid I - Octanoic Acid S - Decanoic Acid I - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid I - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid I - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 40 cm 60 cm Vzorek B Vzorek C;
29 < 0 > S - Octanoic Acid S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid I - Hexanoic Acid I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm 40 cm Vzorek A Vzorek B;
30 < 0 > I - Octanoic Acid I - Decanoic Acid I - Dodecanoic Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid I - Hexadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid I - 9-octadecenoic Acid 20 cm Vzorek A = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid I - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid S - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 40 cm 60 cm Vzorek B Vzorek C;
31 < 0 > 20 cm 40 cm Vzorek A Vzorek B = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid I - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid I - Octanoic Acid S - Decanoic Acid I - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid I - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid I - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 60 cm Vzorek C;
32 < 0 > 20 cm 60 cm Vzorek A Vzorek C = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid I - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid I - Octanoic Acid S - Decanoic Acid I - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid I - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid I - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 40 cm Vzorek B;
33 < 0 > 40 cm 60 cm Vzorek B Vzorek C = [100%] => < 0 > S - Hexanoic Acid I - Hexanoic Acid S - Octanoic Acid I - Octanoic Acid S - Decanoic Acid I - Decanoic Acid S - Dodecanoic Acid I - Dodecanoic Acid S - Methyl Tetradecanoate Acid I - Methyl Tetradecanoate Acid S - Hexadecanoic Acid I - Hexadecanoic Acid S - Octadecanoic Acid I - Octadecanoic Acid S - 9-octadecenoic Acid I - 9-octadecenoic Acid S - Cyclopropaneoctanoic Acid I - Cyclopropaneoctanoic Acid 20 cm Vzorek A;

```

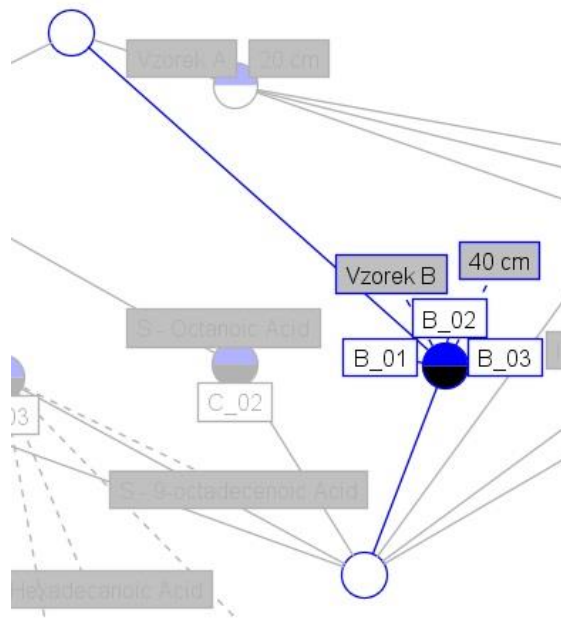
Obr. 21. Atributové implikace pro vzorky A, B, C - výpis z programu ConExp.

V následujících obrázcích (Obr. 22 až Obr. 24) se zaměříme na jednotlivé konceptuální svazy vzorků A, B, C.



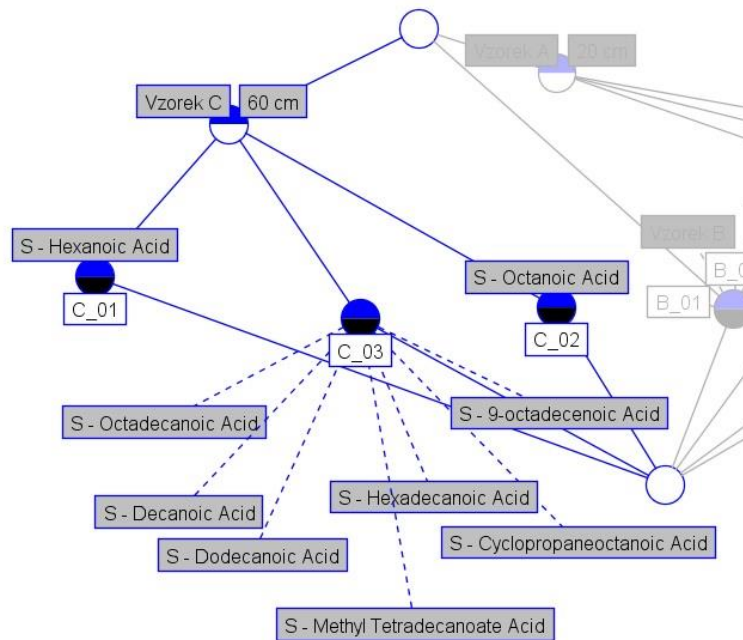
Obr. 22. Konceptuální svaz pro vzorek A.

Na obrázku (Obr. 22) je zobrazen svaz pro vzorek A, který obsahuje vzorky A_01, A_02, A_03, čili objekty. Objektům A_01, A_02, A_03 patří další vlastnosti, jako například, že se jedná o vzorky uložené v hloubce 20 cm. Pokud se zaměříme na jednotlivé vzorky, můžeme si všimnout, že ke vzorku A_01 náleží nejvyšší počet nejnižších intervalových hodnot (infima), a to u kyselin Octadecanoic Acid, 9-octadecenoic Acid, Octanoic Acid, Dodecanoic Acid, Decanoic Acid a Hexadecanoic Acid. U vzorku A_02 je pouze infimum kyseliny Methyl Tetradecanoate Acid a vzorek A_03 zobrazuje infima u kyselin Hexanoic Acid a Cyclopropanoic Acid.



Obr. 23. Konceptuální svaz pro vzorek B.

Vzorek B (Obr. 23) zobrazuje objekty B_01, B_02 a B_03 a k těmto objektům náležící atributy, jimiž jsou hloubka 40 cm a vzorek B.



Obr. 24. Konceptuální svaz pro vzorek C.

Vzorek C (Obr. 24) obsahuje vzorky C_01, C_02 a C_03. Tyto vzorky jsou objekty, ke kterým náleží atributy, a to hloubka 60 cm a označení, že se jedná o vzorek C. Ve vzorku C se vyskytovaly nejvyšší intervalové hodnoty kyselin, čili suprema. Vzorku C_01 náleží supremum kyseliny Hexanoic Acid, vzorku C_02 supremum kyselin Octanoic Acid a 9-octadecenoic Acid a vzorku C_03 supremum kyselin Octadecanoic Acid, Decanoic Acid, Dodecanoic Acid, Methyl Tetradecanoate Acid, Hexadecanoic Acid, Cyclopropaneoctanoic Acid a 9-octadecenoic Acid.

5.2.3 Shrnutí

Pomocí FCA a programu ConExp jsme v případě zobrazení konceptuálních svazů kyselin (objektů) a jejich vlastností (atributů) zjistili, že supremum, čili nejvyšší intervalová hodnota, se váže ke kyselině Hexadecanoic Acid s intervalem hodnot $\langle 14\,000\,000 - 21\,000\,000 \rangle$. Jedná se tedy o kyselinu, která uvolňuje největší množství tepla. Co se týče infima, tzn. nejnižší intervalové hodnoty, váže se ke kyselině Octanoic Acid, jejíž intervaly hodnot byly $\langle 350\,000 - 550\,000 \rangle$. Kyselina Octanoic Acid tedy uvolňuje nejmenší množství tepla.

V druhém případě jsme se zaměřili na vzorky jako objekty a jejich vlastnosti, tzn. atributy. Zjistili jsme pomocí zobrazení konceptuálního svazu, že vzorek C_03 obsahoval nejvíce nejvyšších intervalových hodnot kyselin, a to v hloubce 60 cm. Naopak vzorek s nejnižšími intervalovými hodnotami byl vzorek A_01, uložený v hloubce 20 cm. Vzorek B neobsahoval žádné nejvyšší ani nejnižší hodnoty, dá se tedy říci, že se jedná o vzorek s průměrnými hodnotami. Můžeme tedy říci, že v čím větší hloubce se identifikované kyseliny nacházely, tím vyšší bylo množství uvolňovaného tepla u těchto kyselin.

6 3D MODEL ZOBRAZENÍ MATLAB

Získané hodnoty karboxylových kyselin jsou uvedeny v 3D zobrazení s využitím programu MATLAB. Nejprve jsou zobrazeny obrázky grafů karboxylových kyselin, dále obrázky grafů vzorků a jako poslední obrázky grafů obsahující celkové shrnutí výsledků. Základní výpisy zdrojového kódu pro vykreslení dat jsou uvedeny v příloze.

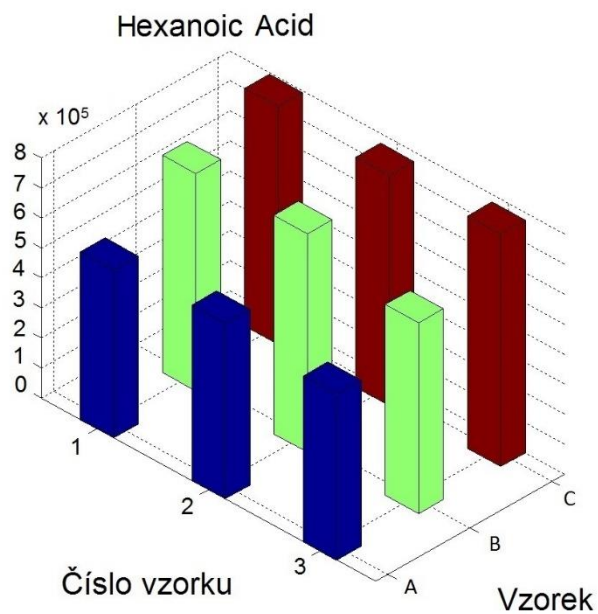
6.1 Karboxylové kyseliny

Obrázky grafů karboxylových kyselin (Obr. 25 Až Obr. 33) jsou zobrazeny v pořadí:

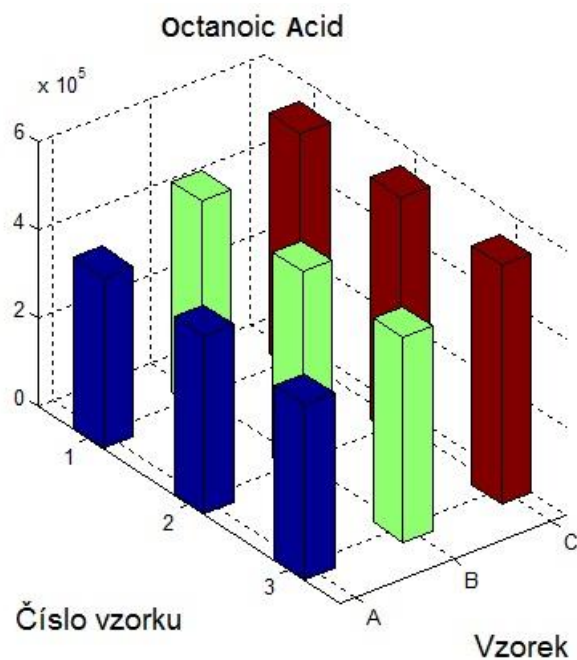
1. Hexanoic Acid,
2. Octanoic Acid,
3. Decanoic Acid,
4. Dodecanoic Acid,
5. Methyl Tetadecanoate Acid,
6. Hexadecanoic Acid,
7. Octadecanoic Acid,
8. 9-octadecenoic Acid,
9. Cyclopropaneoctanoic Acid.

U každého obrázku grafu jednotlivých kyselin je na ose x uveden vzorek (A, B, C), na ose y číslo vzorku (1, 2, 3) a osa z zobrazuje hodnotu kyseliny vyjádřenou v 10^x , kde exponent x označuje řád, ve kterém je hodnota uvedena.

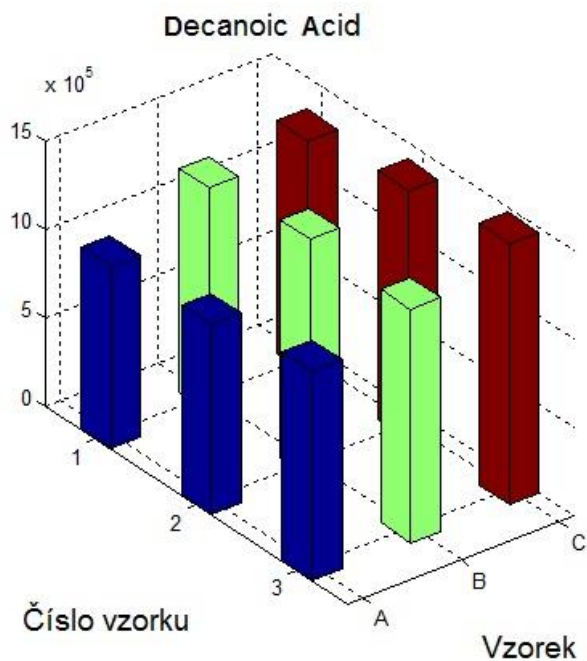
U všech identifikovaných kyselin je dle následujících obrázků grafů (Obr. 25 až Obr. 33) možné vidět, že s rostoucí hloubkou (osa x) se zvyšovala i hodnota uvolňovaného tepla u jednotlivých kyselin, tzn., že vzorek A obsahoval nejnižší hodnoty, vzorek B se dá označit za vzorek s průměrnými hodnotami a u vzorku C byly hodnoty nejvyšší.



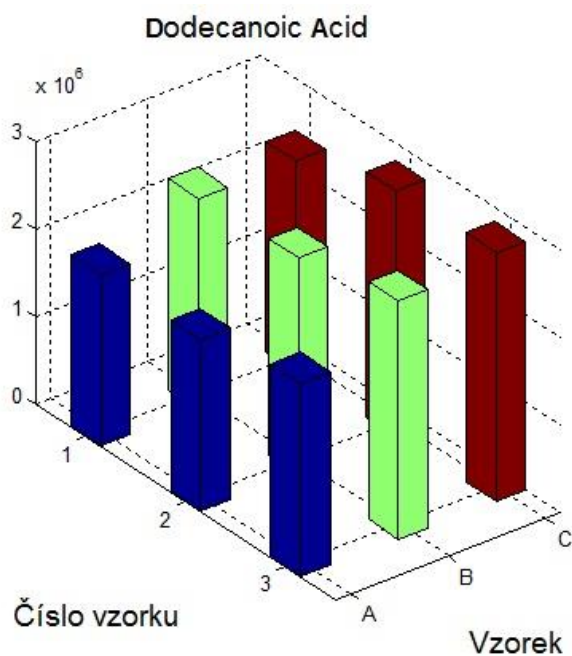
Obr. 25. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Hexanoic Acid.



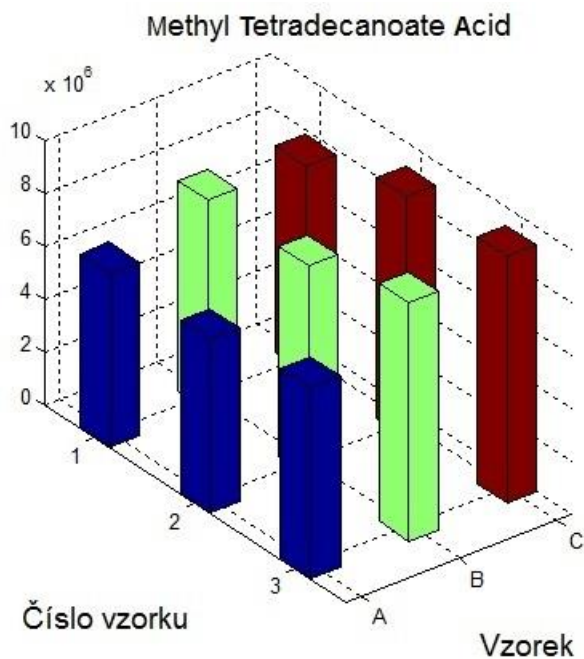
Obr. 26. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Octanoic Acid.



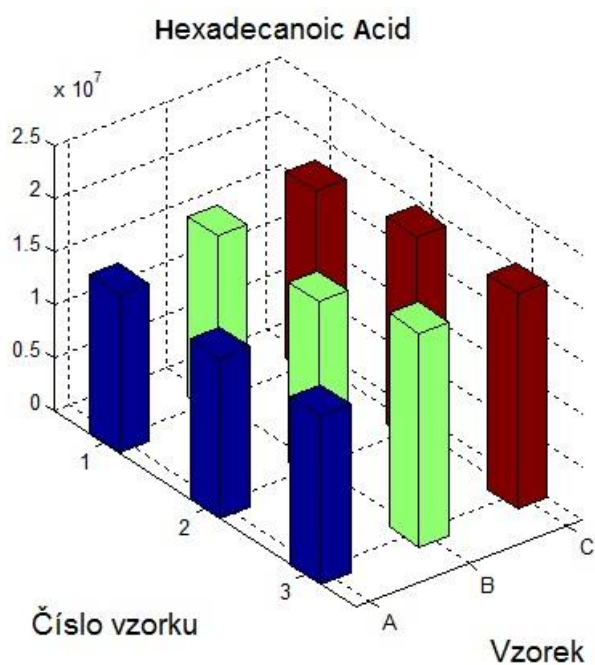
Obr. 27. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Decanoic Acid.



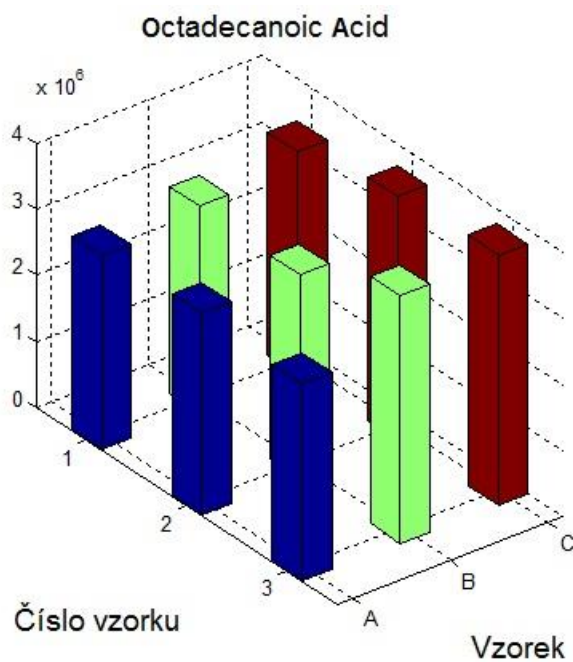
Obr. 28. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Dodecanoic Acid.



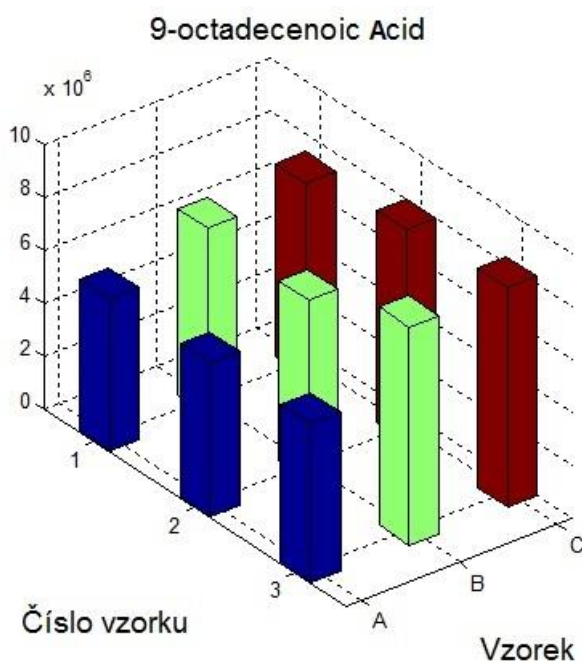
Obr. 29. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Methyl Tetradecanoate Acid.



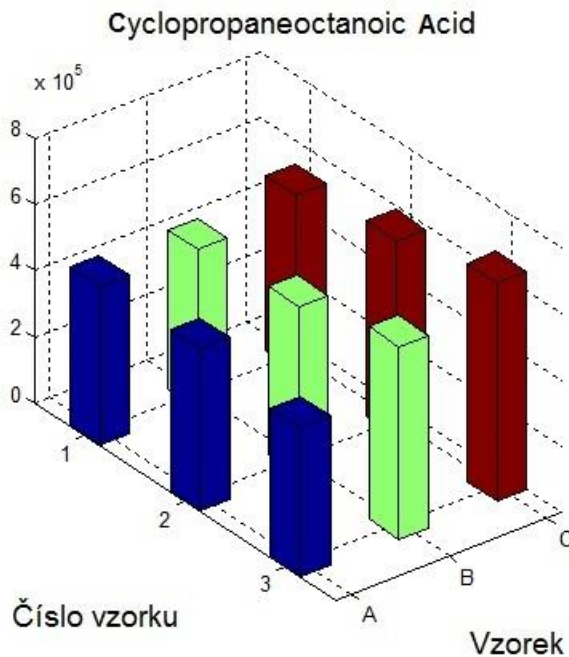
Obr. 30. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Hexadecanoic Acid.



Obr. 31. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Octadecanoic Acid.



Obr. 32. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu 9-octadecenoic Acid.



Obr. 33. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Cyclopropaneoctanoic Acid.

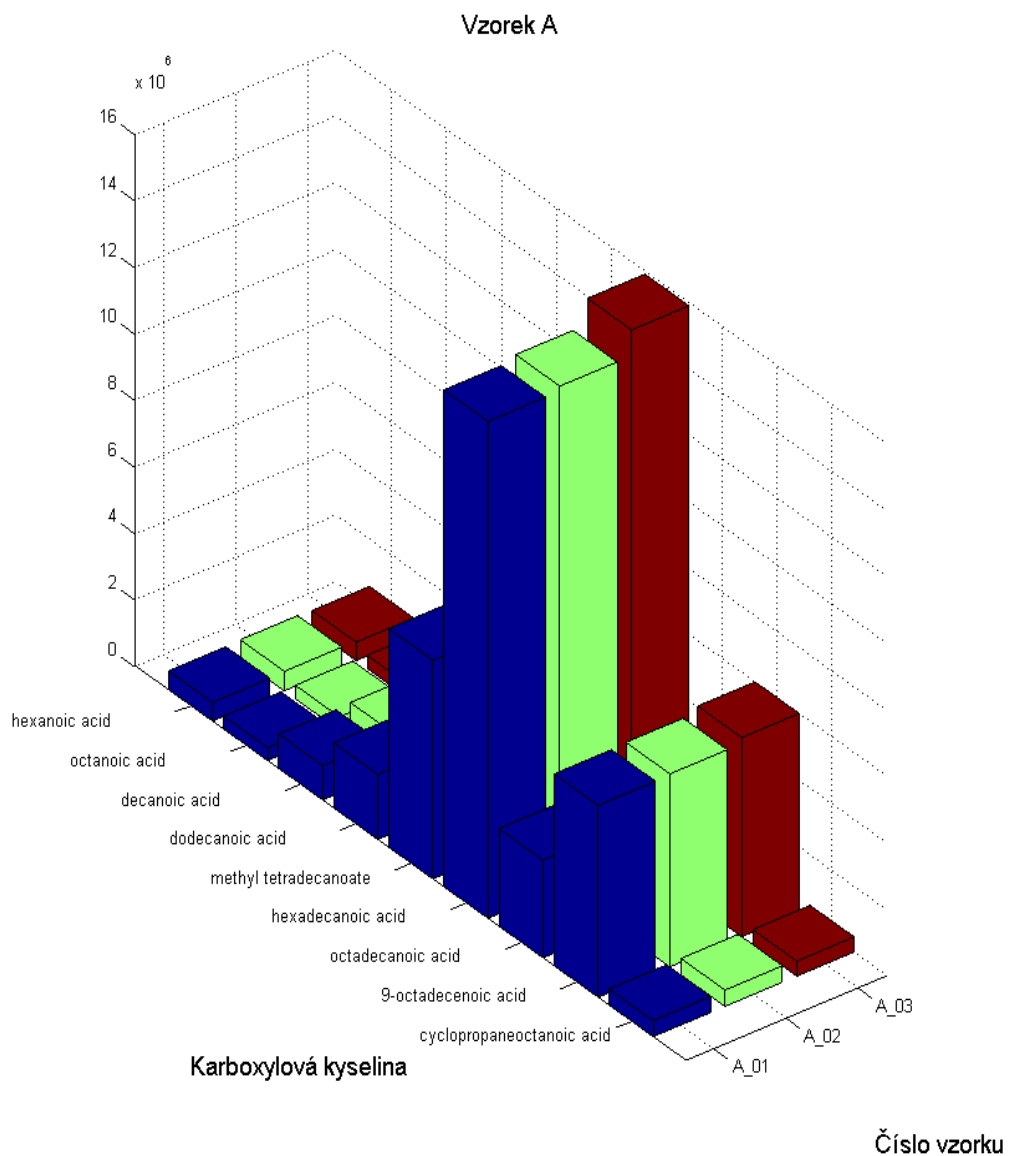
6.2 Vzorky A, B, C

U vzorků A, B, C jsou zobrazeny obrázky grafů jednotlivých vzorků (Obr. 34 až Obr. 36) a průměrná hodnota vzorků A, B, C zobrazená v jednom obrázku grafu (Obr. 37). Na obrázcích grafu jednotlivých vzorků (A, B, C) je na ose x zobrazen název vzorku s číselným označením (01, 02, 03), na ose y jsou uvedeny názvy karboxylových kyselin a osa z značí hodnotu uvolňovaného tepla u jednotlivých kyselin vyjádřenou v 10^x , kde exponent x označuje řád, ve kterém je hodnota uvedena. Co se týče pořadí kyselin na ose y , je uvedeno následovně:

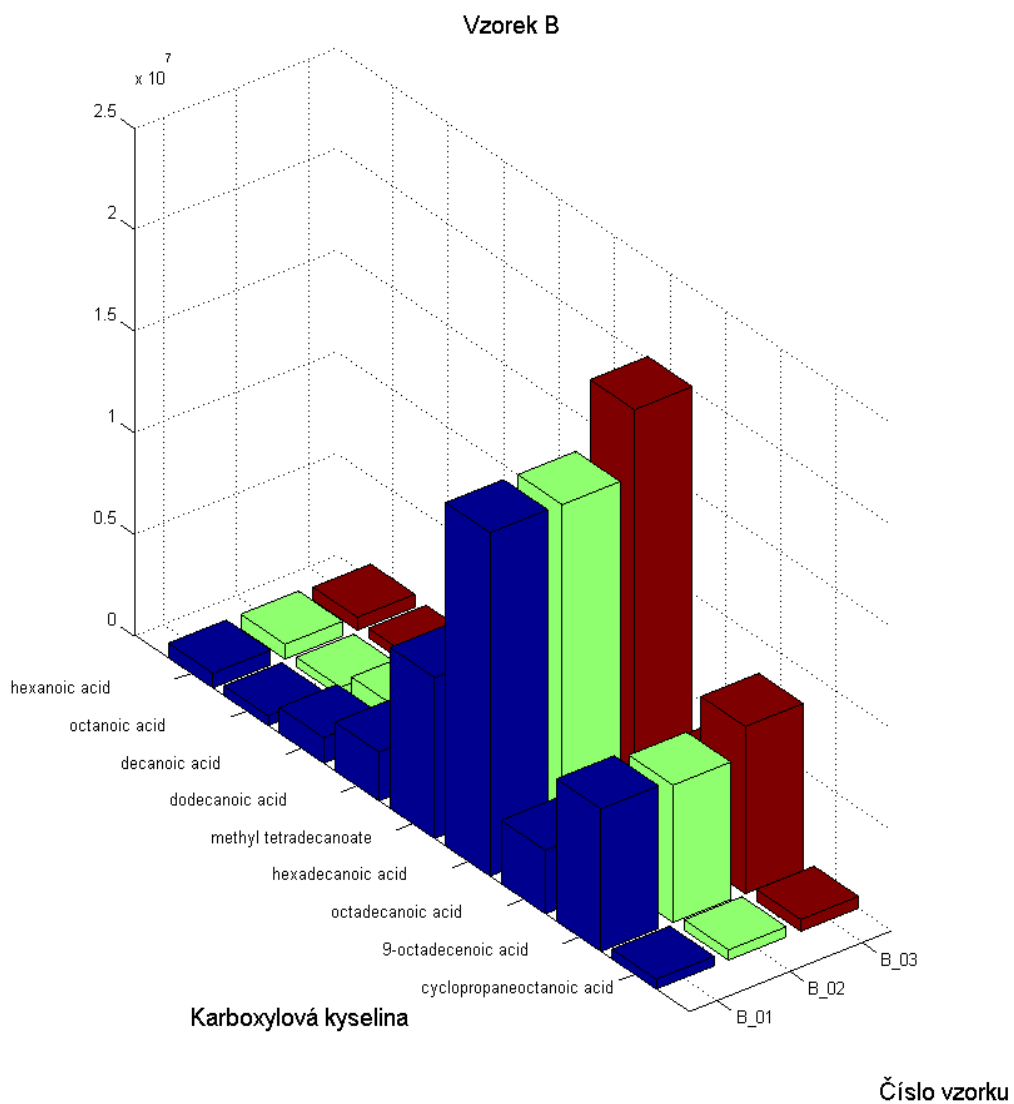
1. Hexanoic Acid,
2. Octanoic Acid,
3. Decanoic Acid,
4. Dodecanoic Acid,
5. Methyl Tetradecanoate Acid,
6. Hexadecanoic Acid,
7. Octadecanoic Acid,
8. 9-octadecenoic Acid,

9. Cyclopropaneoctanoic Acid.

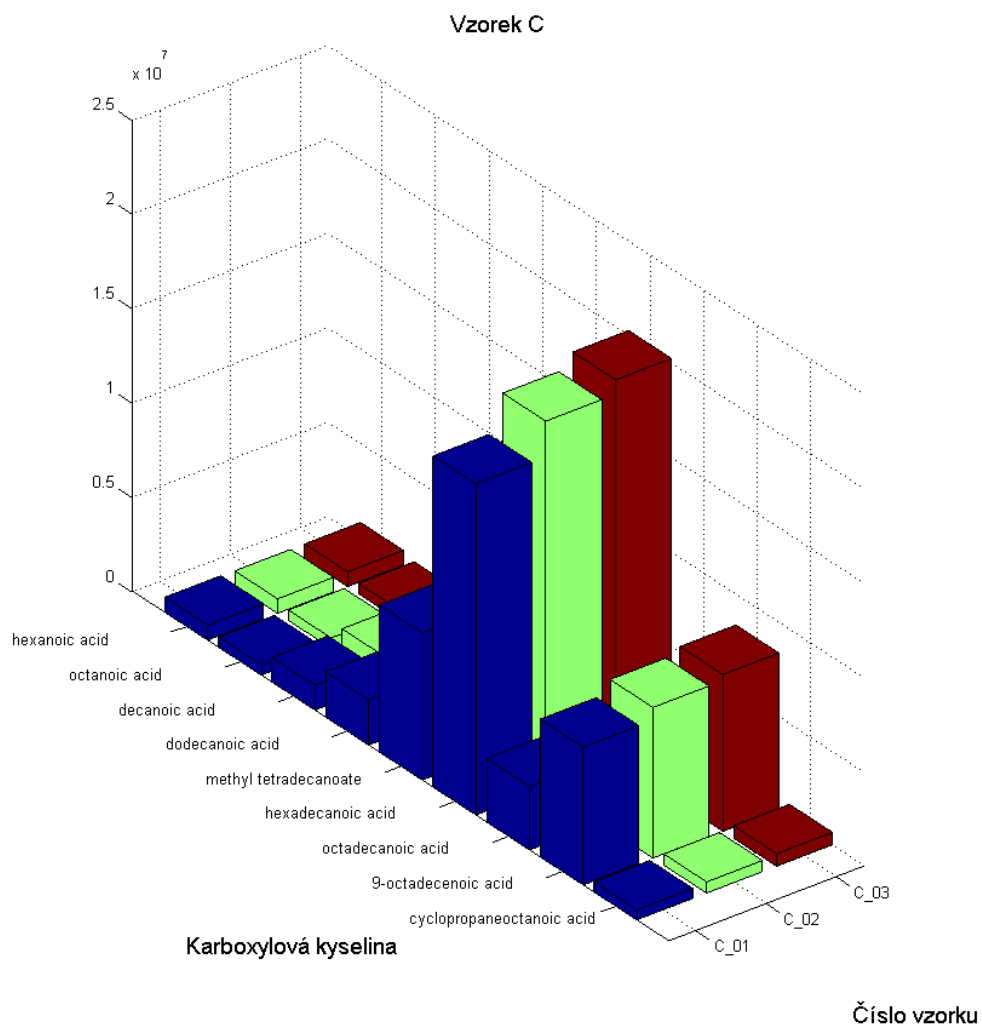
U grafů vzorků A, B, C je i v tomto případě možné zaznamenat, že s rostoucím číselným označením vzorků (osa x) narůstá i hodnota uvolňovaného tepla u jednotlivých kyselin, tzn., že nejvyšších hodnot ve vzorcích A_01 až C_03 dosahovala kyselina Hexadecanoic Acid, umístěná na ose y jako 6. v pořadí. Nejnižších hodnot dosahovala kyselina Octanoic Acid, na ose y zobrazená jako 2. v pořadí.



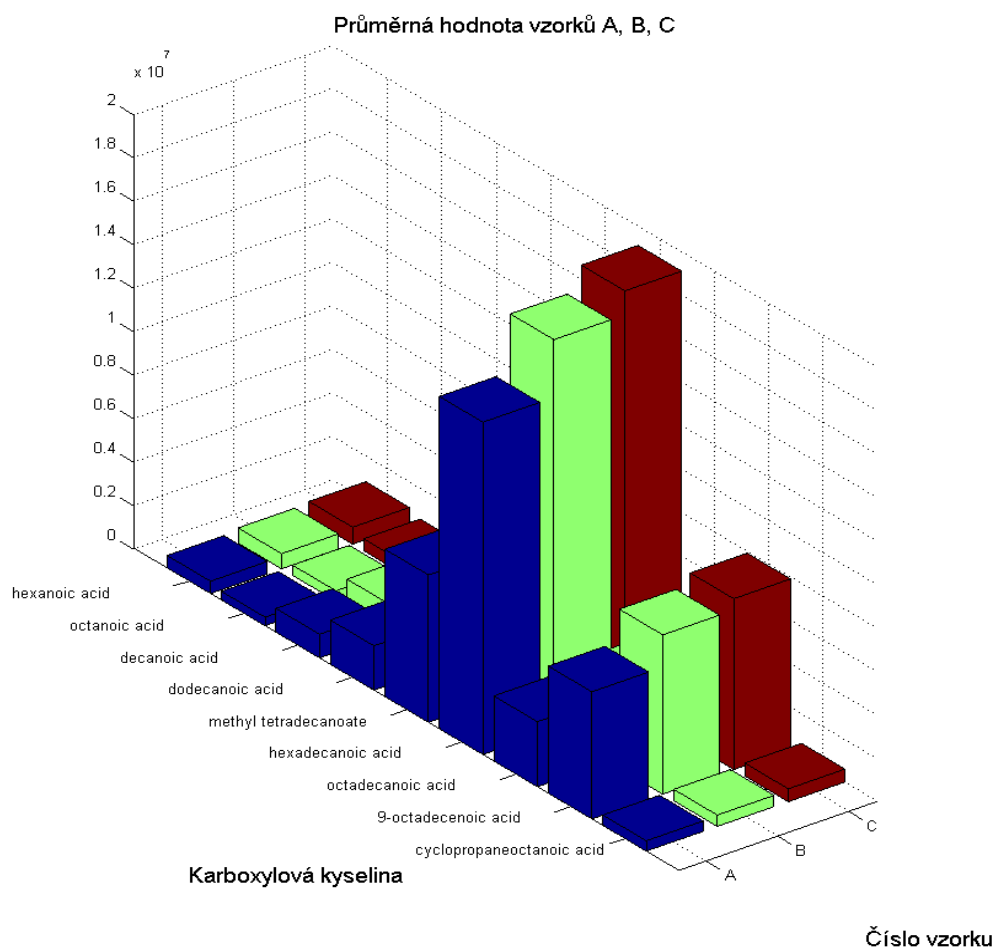
Obr. 34. Graf závislosti hodnotových dat kyselin na vzorcích A_01, A_02, A_03.



Obr. 35. Graf závislosti hodnotových dat kyselin na vzorcích B_01, B_02, B_03.



Obr. 36. Graf závislosti hodnotových dat kyselin na vzorcích C_01, C_02, C_03.



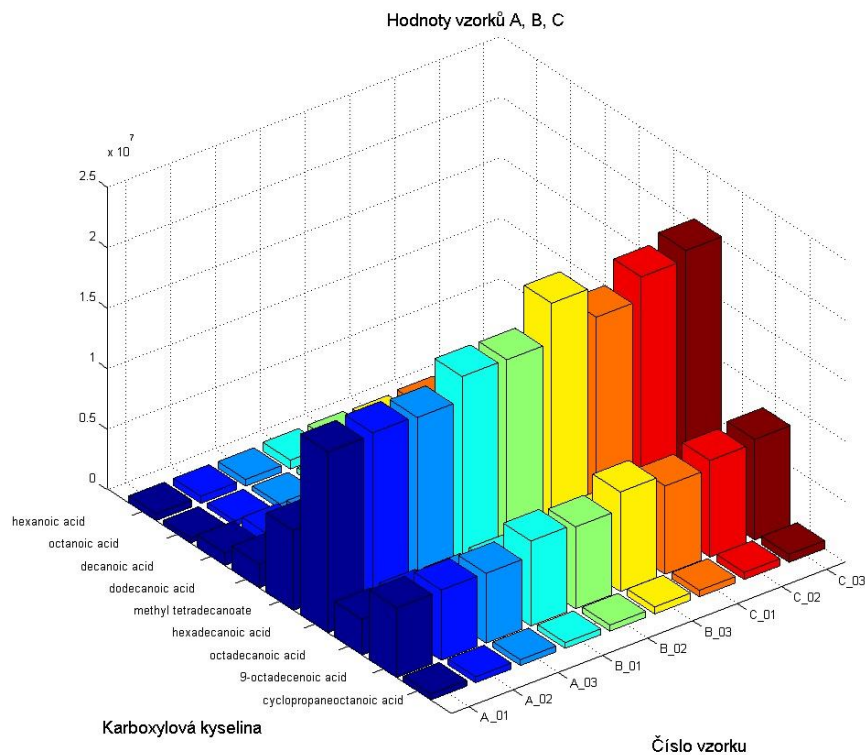
Obr. 37. Graf průměrných hodnot kyselin ve vzorcích A, B, C.

6.3 Shrnutí

Následující obrázek grafu (Obr. 38) zobrazuje na ose x označení a číslo vzorku (A_01 až C_03), na ose y název jednotlivých karboxylových kyselin (Hexanoic Acid, Octanoic Acid, Decanoic Acid, Dodecanoic Acid, Methyl Tetadecanoate Acid, Hexadecanoic Acid, Octadecanoic Acid, 9-octadecenoic Acid, Cyclopropaneoctanoic Acid) a na ose z hodnotu vzorků vyjádřenou v 10^x , kde exponent x označuje řád, ve kterém je hodnota uvedena

Co se týče pořadí kyselin na ose y , je uvedeno následovně:

1. Hexanoic Acid,
2. Octanoic Acid,
3. Decanoic Acid,
4. Dodecanoic Acid,
5. Methyl Tetadecanoate Acid,
6. Hexadecanoic Acid,
7. Octadecanoic Acid,
8. 9-octadecenoic Acid,
9. Cyclopropaneoctanoic Acid.



Obr. 38. Graf hodnot kyselin ve vzorcích A, B, C.

Z obrázku (Obr. 38) je možné porovnat jednotlivé kyseliny a jejich hodnoty v závislosti na vzorcích, ve kterých se nacházely. Na základě dodaných a následně analyzovaných vzorků kyselin je tedy možné říci, že kyselina Hexadecanoic Acid uvolňuje největší množství tepla, jelikož její hodnoty byly ve všech zkoumaných vzorcích nejvyšší. Zatímco hodnoty kyseliny Octanoic Acid byly ve všech zkoumaných vzorcích nejnižší, tzn., že uvolňuje nejmenší množství tepla. Dále je zřejmé, že v čím větší hloubce se vzorek nacházel, tím vyšší byly hodnoty uvolňovaného tepla jednotlivých kyselin. Vzorek C_03, uložený v hloubce 60 cm, obsahoval nejvyšší hodnoty kyselin. Naopak vzorek A_01, uložený v hloubce 20 cm, obsahoval nejnižší hodnoty. Vzorek B neobsahoval žádné nejvyšší ani nejnižší hodnoty, dalo by se tedy říci, že se jedná o vzorek s průměrnými hodnotami.

ZÁVĚR

V teoretické části diplomové práce bylo základním úkolem popsat logiku Port-Royal s využitím formální konceptuální analýzy rozšířenou o fuzzy množiny a vysvětlit její princip. Formální konceptuální analýza je založená na základech algebry, a proto je v teoretické části doložena rovněž i matematickými větami a definicemi.

Praktická část je zaměřena na oblast identifikace vzorků karboxylových kyselin a jejich hodnot uvolněného tepla podle bakteriálního rozkladu. Získané karboxylové kyseliny jsou stručně popsány a následně uvedeny jejich získané hodnoty. Pokračováním praktické části diplomové práce je aplikace formální konceptuální analýzy. Získaná data byla vložena do programu Concept Explorer, který vytvořil dle ověřených algoritmů konceptuální svazy. Jelikož byly k dispozici pouze vícehodnotové atributy, bylo nutné provést konceptuální škálování atributů hodnot, dále byly zobrazeny i atributové implikace pro karboxylové kyseliny i vzorky A, B, C. Získané údaje z použité metody byly uvedeny ve 3D prostředí s využitím programu MATLAB.

Cílem diplomové práce bylo poukázat na to, že využití metody formální konceptuální analýzy vede jednoznačně k urychlení procesu rozhodování. Po odebrání vzorků z půdy a jejich analyzování metodou plynové chromatografie je možné získat podrobné informace o kvantitativním zastoupení nejvíce se vyskytujících karboxylových kyselinách v půdě, které byly k dispozici pro předloženou diplomovou práci. Po zadání hodnot do programu ConExp lze po průchodu svazem zjistit, jaké se v půdě nachází karboxylové kyseliny a v jaké hloubce se tyto kyseliny nachází, což může usnadnit a urychlit proces zjišťování informací potřebných pro forenzní vědy. Na základě získaných hodnot je tedy možné provést analýzu kvantitativních dat vyšetřovaných vzorků karboxylových kyselin, které usnadní rozhodování a vyhledávání, rekognoskaci biologického materiálů v určité hloubce půdní struktury.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] Logika z Port-Royal. In: *Wikipedia: the free encyclopedia* [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2015 [cit. 2015-09-15]. Dostupné z: https://cs.wikipedia.org/wiki/Logika_z_Port-Royal.
- [2] BĚLOHLÁVEK, Radim. *Konceptuální svazy a formální konceptuální analýza* [online]. 2004 [cit. 2015-09-15]. Dostupné z WWW: http://belohlavek.inf.upol.cz/publications/Bel_Ksfka.pdf.
- [3] KLŮJOVÁ, Jana. *Formální konceptuální analýza v zobrazování 3D živočišných ostatků v půdě*. Zlín, 2010. 78 s. Bakalářská práce. UTB, Fakulta aplikované informatiky.
- [4] KÜHR, Tomáš. *Formální konceptuální analýza* [online]. 2011 [cit. 2015-09-15]. Dostupné z WWW <http://www.inf.upol.cz/downloads/ruzne/FCAprOSS.pdf>.
- [5] NOVÁK, Vilém. *Fuzzy množiny a jejich aplikace*. Praha: Nakladatelství technické literatury, 1990. ISBN 80-03-00325-3.
- [6] ŠMEJKAL, Ladislav. *PLC a automatizace*. 1. vyd. Praha: BEN - technická literatura, 2005, 207 s. ISBN 80-7300-087-3.
- [7] NAVARA, Mirko a OLŠÁK, Petr. *Základy fuzzy množin*. Vyd. 1. Praha: Vydavatelství ČVUT, 2002, 136 s. ISBN 80-01-02585-3.
- [8] Plynová chromatografie. *Cheminfo - server chemické sekce* [online]. [cit. 2016-04-14]. Dostupné z: http://cheminfo.chemi.muni.cz/chem_sekce/predmety/C7300/GC/uvod.pdf.
- [9] Chromatografie. *Oddělení lékařské chemie a biochemie 3. LF UK* [online]. [cit. 2016-04-16]. Dostupné z: old.lf3.cuni.cz/chemie/cesky/materialy_B/chromatografie.doc.
- [10] Gas Chromatography. In: *Wikipedia: the free encyclopedia* [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2016 [cit. 2016-04-16]. Dostupné z: https://en.wikipedia.org/wiki/Gas_chromatography.
- [11] MILDE, David. Volba metody validace. In: *Katedra analytické chemie - UP v Olomouci* [online]. [cit. 2016-04-16]. Dostupné z: <http://ach.upol.cz/user-files/intranet/04-volbametody-validace-2014-1413884795.pdf>.

- [12] McMURRY J. Organická chemie. 1. vyd. Praha: VŠCHT, 2007, 1270 s. ISBN 978-80-7080-637-1.
- [13] Karboxylové kyseliny. BŘÍŽDALA, Jan. *E-ChemBook* [online]. [cit. 2016-04-16]. Dostupné z: <http://www.e-chembook.eu/karboxylove-kyseliny>.
- [14] The Concept Explorer. Sourceforge [online]. USA, 2006 [cit. 2016-04-14]. Dostupné z: <http://conexp.sourceforge.net/>.

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

- CA Karboxylové kyseliny.
- ConExp Concept Explorer.
- FCA Formální konceptuální analýza.
- GC Plynová chromatografie.

SEZNAM OBRÁZKŮ

Obr. 1. Konceptuální svaz. [4].....	15
Obr. 2. Zjednodušené schéma plynového chromatografu. [10].....	29
Obr. 3. Procentuální vyjádření průměrných hodnot karboxylových kyselin ve vzorku A.....	38
Obr. 4. Procentuální vyjádření průměrných hodnot karboxylových kyselin ve vzorku B.....	41
Obr. 5. Procentuální vyjádření průměrných hodnot karboxylových kyselin ve vzorku C.....	44
Obr. 6. Uživatelské rozhraní programu ConExp - ikony operací.....	46
Obr. 7. Náhled programu ConExp - kontextová tabulka.....	47
Obr. 8. Náhled programu ConExp - konceptuální svaz.....	47
Obr. 9. Konceptuální svaz pro karboxylové kyseliny.....	52
Obr. 10. Atributové implikace pro karboxylové kyseliny - výpis z programu ConExp.....	53
Obr. 11. Konceptuální svaz pro Hexanoic Acid.....	54
Obr. 12. Konceptuální svaz pro Octanoic Acid.....	55
Obr. 13. Konceptuální svaz pro Decanoic Acid.....	55
Obr. 14. Konceptuální svaz pro Dodecanoic Acid.....	56
Obr. 15. Konceptuální svaz pro Methyl Tetradecanoate Acid.....	57
Obr. 16. Konceptuální svaz pro Hexadecanoic Acid.....	57
Obr. 17. Konceptuální svaz pro Octadecanoic Acid.....	58
Obr. 18. Konceptuální svaz pro 9-octadecenoic Acid.....	59
Obr. 19. Konceptuální svaz pro Cyclopropanoic Acid.....	60
Obr. 20. Konceptuální svaz pro vzorky A, B, C.....	62
Obr. 21. Atributové implikace pro vzorky A, B, C - výpis z programu ConExp.....	63
Obr. 22. Konceptuální svaz pro vzorek A.....	64
Obr. 23. Konceptuální svaz pro vzorek B.....	65
Obr. 24. Konceptuální svaz pro vzorek C.....	65
Obr. 25. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Hexanoic Acid.....	68
Obr. 26. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Octanoic Acid.....	68

Obr. 27. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Decanoic Acid	69
Obr. 28. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Dodecanoic Acid	69
Obr. 29. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Methyl Tetradecanoate Acid.....	70
Obr. 30. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Hexadecanoic Acid.....	70
Obr. 31. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Octadecanoic Acid	71
Obr. 32. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu 9-octadecenoic Acid	71
Obr. 33. Graf závislosti hodnotových dat na vzorcích A, B, C pro kyselinu Cyclopropaneoctanoic Acid	72
Obr. 34. Graf závislosti hodnotových dat kyselin na vzorcích A_01, A_02, A_03. ...	73
Obr. 35. Graf závislosti hodnotových dat kyselin na vzorcích B_01, B_02, B_03....	74
Obr. 36. Graf závislosti hodnotových dat kyselin na vzorcích C_01, C_02, C_03....	75
Obr. 37. Graf průměrných hodnot kyselin ve vzorcích A, B, C.	76
Obr. 38. Graf hodnot kyselin ve vzorcích A, B, C.	77

SEZNAM TABULEK

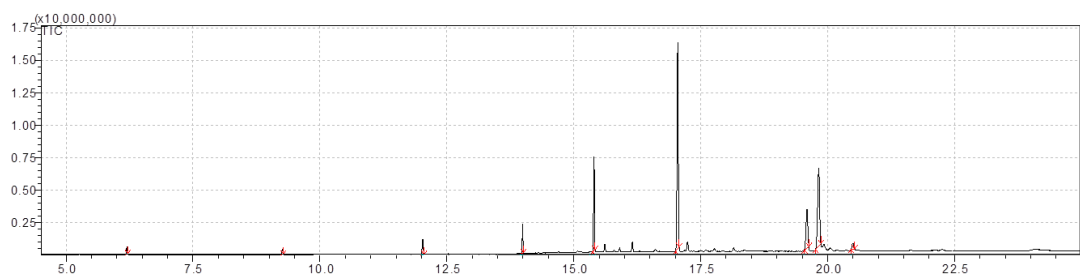
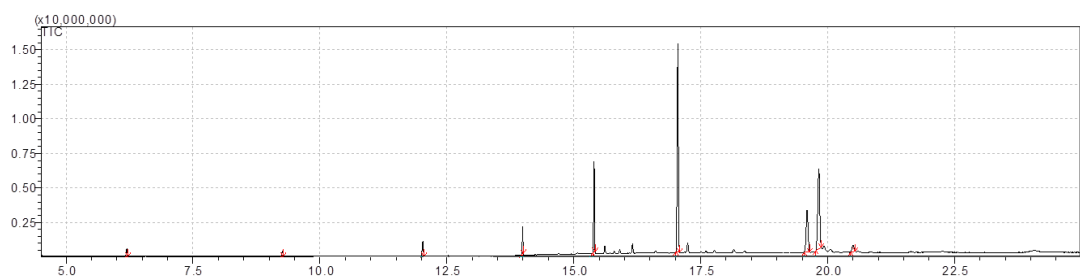
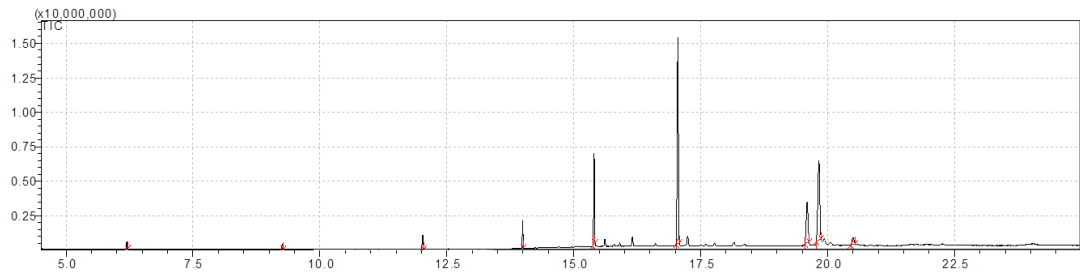
Tab. 1. Objekty x_1, x_2, x_3 a bivalentní logické atributy y_1, y_2, y_3 . [1].....	12
Tab. 2. Příklad vícehodnotových kontextů.	20
Tab. 3. Konceptuální škálování. [3].....	21
Tab. 4. Hodnoty vzorku A_01.	36
Tab. 5. Hodnoty vzorku A_02.	36
Tab. 6. Hodnoty vzorku A_03.	36
Tab. 7. Průměrná hodnota vzorků A_01, A_02, A_03.	37
Tab. 8. Hodnoty vzorku B_01.	39
Tab. 9. Hodnoty vzorku B_02.	39
Tab. 10. Hodnoty vzorku B_03.	39
Tab. 11. Průměrná hodnota vzorků B_01, B_02, B_03.....	40
Tab. 12. Hodnoty vzorku C_01.	42
Tab. 13. Hodnoty vzorku C_02.	42
Tab. 14. Hodnoty vzorku C_03.	42
Tab. 15. Průměrná hodnota vzorků C_01, C_02, C_03.....	43
Tab. 16. Shrnutí průměrných hodnot kyselin ve vzorcích A, B, C.....	44
Tab. 17. Hodnoty karboxylových kyselin ve vzorcích – vícehodnotový kontext.	49
Tab. 18. Převedení vícehodnotového kontextu na základní	50
Tab. 19. Karboxylové kyseliny – vybrané vlastnosti.....	50
Tab. 20. Karboxylové kyseliny – konceptuální škálování.....	51
Tab. 21. Vzorky A, B, C – vybrané vlastnosti.....	61
Tab. 22. Vzorky A, B, C – konceptuální škálování.	62

SEZNAM PŘÍLOH

- P I Vzorek A - hodnoty.
- P II Vzorek A - chromatogramy.
- P III Vzorek B - hodnoty.
- P IV Vzorek B - chromatogramy.
- P V Vzorek C - hodnoty.
- P VI Vzorek C - chromatogramy.
- P VII Zdrojový kód programu MATLAB - grafy - karboxylové kyseliny.
- P VIII Zdrojový kód programu MATLAB - grafy - vzorky A, B, C.
- P IX Zdrojový kód programu MATLAB - graf - průměrná hodnota vzorků A, B, C.
- P X Zdrojový kód programu MATLAB - graf - karboxylové kyseliny a vzorky A, B, C.

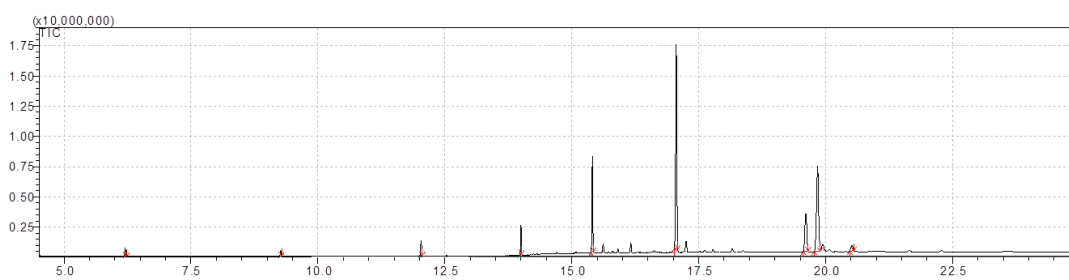
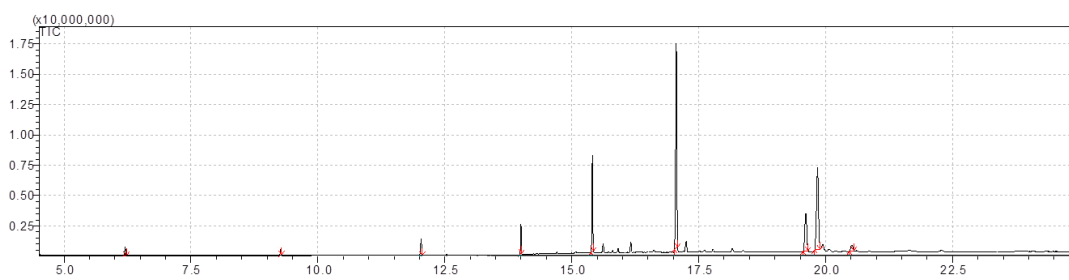
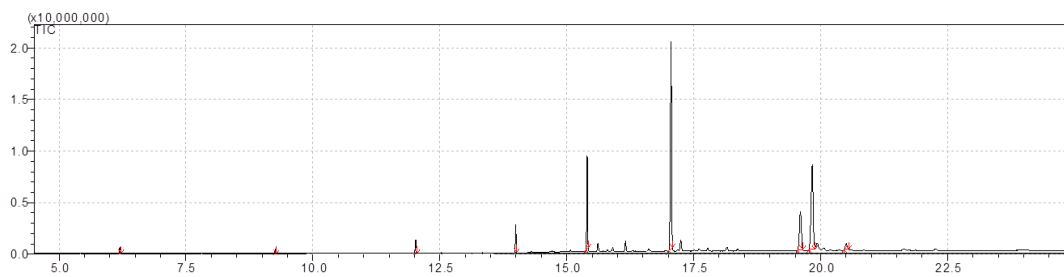
PŘÍLOHA P I: VZOREK A – HODNOTY.

A_01	Hodnota	Procenta	Chemická sloučenina
	559020	1,61438	Hexanoic Acid
	387435	1,11886	Octanoic Acid
	1030898	2,97710	Decanoic Acid
	1955871	5,64830	Dodecanoic Acid
	6573163	18,98243	Methyl Tetradecanoate Acid
	14938850	43,14143	Hexadecanoic Acid
	2936631	8,48060	Octadecanoic Acid
	5763729	16,64489	9-octadecenoic Acid
	482022	1,39202	Cyclopropaneoctanoic Acid
A_02			
	585751	1,67278	Hexanoic Acid
	403565	1,15250	Octanoic Acid
	1070287	3,05652	Decanoic Acid
	1955572	5,58470	Dodecanoic Acid
	6562475	18,74106	Methyl Tetradecanoate Acid
	15088078	43,08840	Hexadecanoic Acid
	3056894	8,72985	Octadecanoic Acid
	5802733	16,57139	9-octadecenoic Acid
	491214	1,40280	Cyclopropaneoctanoic Acid
A_03			
	553663	1,50326	Hexanoic Acid
	395740	1,07448	Octanoic Acid
	1176832	3,19523	Decanoic Acid
	2202651	5,98045	Dodecanoic Acid
	7215295	19,59036	Methyl Tetradecanoate Acid
	15869478	43,08746	Hexadecanoic Acid
	2982243	8,09713	Octadecanoic Acid
	5984438	16,24844	9-octadecenoic Acid
	450509	1,22318	Cyclopropaneoctanoic Acid

PŘÍLOHA P II: VZOREK A – CHROMATOGRAMY.

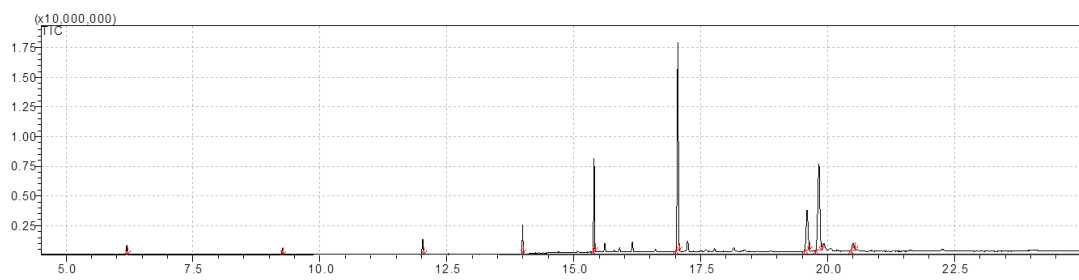
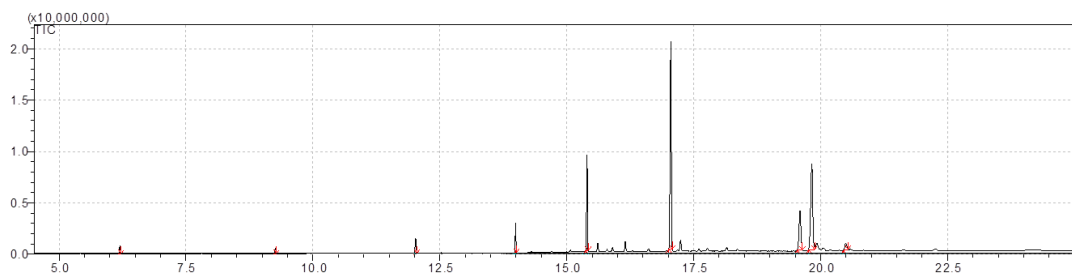
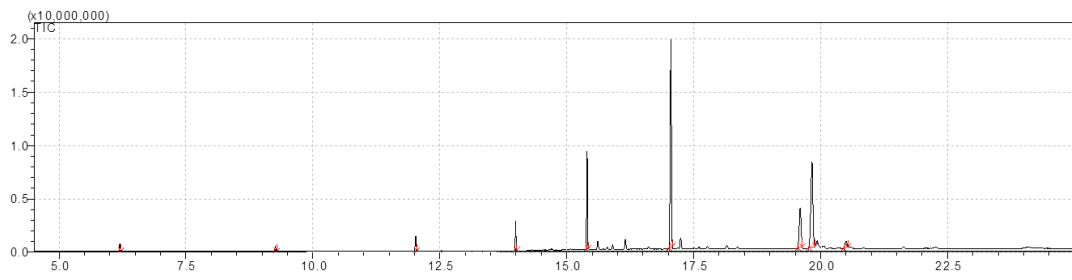
PŘÍLOHA P III: VZOREK B – HODNOTY.

B_01	Hodnota	Procenta	Chemická sloučenina
	725335	1,79997	Hexanoic Acid
	475501	1,17999	Octanoic Acid
	1257872	3,12150	Decanoic Acid
	2400492	5,95700	Dodecanoic Acid
	7921167	19,65697	Methyl Tetradecanoate Acid
	16904118	41,94883	Hexadecanoic Acid
	3121883	7,74719	Octadecanoic Acid
	7013576	17,40471	9-octadecenoic Acid
	477050	1,18384	Cyclopropaneoctanoic Acid
B_02			
	729010	1,81791	Hexanoic Acid
	462823	1,15413	Octanoic Acid
	1336512	3,33282	Decanoic Acid
	2465983	6,14934	Dodecanoic Acid
	7909320	19,72322	Methyl Tetradecanoate Acid
	16866363	42,05912	Hexadecanoic Acid
	3064754	7,64248	Octadecanoic Acid
	6762983	16,86464	9-octadecenoic Acid
	503816	1,25635	Cyclopropaneoctanoic Acid
B_03			
	635639	1,35883	Hexanoic Acid
	463890	0,99168	Octanoic Acid
	1316844	2,81507	Decanoic Acid
	2707209	5,78731	Dodecanoic Acid
	8999561	19,23872	Methyl Tetradecanoate Acid
	20118197	43,00746	Hexadecanoic Acid
	3730572	7,97499	Octadecanoic Acid
	8226178	17,58543	9-octadecenoic Acid
	580294	1,24052	Cyclopropaneoctanoic Acid

PŘÍLOHA P IV: VZOREK B – CHROMATOGRAMY.

PŘÍLOHA P V: VZOREK C – HODNOTY.

C_01	Hodnota	Procenta	Chemická sloučenina
	792997	1,90657	Hexanoic Acid
	543232	1,30607	Octanoic Acid
	1314033	3,15927	Decanoic Acid
	2405749	5,78404	Dodecanoic Acid
	7792895	18,73613	Methyl Tetradecanoate Acid
	17544233	42,18086	Hexadecanoic Acid
	3370056	8,10248	Octadecanoic Acid
	7299615	17,55015	9-Octadecenoic Acid
	530071	1,27443	Cyclopropaneoctanoic Acid
C_02			
	767773	1,65829	Hexanoic Acid
	546447	1,18026	Octanoic Acid
	1403253	3,03085	Decanoic Acid
	2791593	6,02949	Dodecanoic Acid
	9090652	19,63467	Methyl Tetradecanoate Acid
	19450272	42,01015	Hexadecanoic Acid
	3678777	7,94570	Octadecanoic Acid
	7982018	17,24016	9-octadecenoic Acid
	588196	1,27043	Cyclopropaneoctanoic Acid
C_03			
	775047	1,61747	Hexanoic Acid
	539719	1,12636	Octanoic Acid
	1474904	3,07803	Decanoic Acid
	2840889	5,92875	Dodecanoic Acid
	9320771	19,45183	Methyl Tetradecanoate Acid
	20211932	42,18097	Hexadecanoic Acid
	3786996	7,90321	Octadecanoic Acid
	8307018	17,33620	9-octadecenoic Acid
	659911	1,37719	Cyclopropaneoctanoic Acid

PŘÍLOHA P VI: VZOREK C – CHROMATOGRAMY.

PŘÍLOHA P VII: ZDROJOVÝ KÓD PROGRAMU MATLAB – GRAFY - KARBOXYLOVÉ KYSELINY.

Načtení dat

Načtení dat ze souboru

```
vzorek_A01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'A4:C12');  
vzorek_A02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'A15:C23');  
vzorek_A03= xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'A26:C34');  
  
vzorek_B01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'A4:C12');  
vzorek_B02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'A15:C23');  
vzorek_B03= xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'A26:C34');  
  
vzorek_C01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'A4:C12');  
vzorek_C02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'A15:C23');  
vzorek_C03= xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'A26:C34');
```

Vykreslení grafů

acids

```
kys = char('hexanoic acid','octanoic acid','decanoic acid','dodecanoic acid','methyl tetradecanoate',...  
          'hexadecanoic acid','octadecanoic acid','9-octadecenic acid','cyclopropanedecanoic acid');
```

```
for row =2:1:9  
    rada = [[vzorek_A01(row,3),vzorek_A02(row,3),vzorek_A03(row,3)],...  
           [vzorek_B01(row,3),vzorek_B02(row,3),vzorek_B03(row,3)],...  
           [vzorek_C01(row,2),vzorek_C02(row,2),vzorek_C03(row,2)]];  
    figure(row);  
    hl=bar3(rada,0.3);  
    % nastavení popisku os x a y  
    osa_x = char('A','B','C');  
    set(gca,'XTickLabel',osa_x);  
    xlabel('Vzorek','FontName','Arial','FontSize', 14); ylabel('Číslo vzorku','FontName','Arial','FontSize', 14);  
    title(kys(row,:),'FontName','Arial','FontSize', 14)  
    saveas(gcf, kys(row,:), 'fig')  
    saveas(gcf, kys(row,:), 'emf')  
end
```

PŘÍLOHA P VIII: ZDROJOVÝ KÓD PROGRAMU MATLAB – GRAFY - VZORKY A, B, C.

Načtení dat

Načtení dat ze souboru

```
vzorek_A01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'A4:C12');  
vzorek_A02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'A15:C23');  
vzorek_A03 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'A26:C34');  
  
vzorek_B01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'A4:C12');  
vzorek_B02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'A15:C23');  
vzorek_B03 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'A26:C34');  
  
vzorek_C01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'A4:C12');  
vzorek_C02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'A15:C23');  
vzorek_C03 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'A26:C34');
```

Vykreslení grafů

Graf číslo 1 - vzorek A

Vzorek A

```
figure(1);  
rada = [vzorek_A01(:,3), vzorek_A02(:,3), vzorek_A03(:,3)];  
h1=bar3(rada);  
% nastavení popisku os x a y  
osa_y = char('hexanoic acid','octanoic acid','decanoic acid','dodecanoic acid','methyl tetradecanoate','hexadecanoic acid',...  
            'octadecanoic acid','9-octadecenoic acid','cyclopropanoic acid');  
osa_x = char('A_01','A_02','A_03');  
set(gca,'YTickLabel',osa_y); set(gca,'XTickLabel',osa_x);  
xlabel('Číslo vzorku','FontName','Arial','FontSize', 14); ylabel('Karboxylová kyselina','FontName','Arial','FontSize', 14);  
title('Vzorek A','FontName','Arial','FontSize', 14)
```

Graf číslo 2 - vzorek B

Vzorek B

```
figure(2);  
rada = [vzorek_B01(:,3), vzorek_B02(:,3), vzorek_B03(:,3)];  
h2=bar3(rada);  
% nastavení popisku os x a y  
osa_x = char('B_01','B_02','B_03');  
set(gca,'YTickLabel',osa_y); set(gca,'XTickLabel',osa_x);  
xlabel('Číslo vzorku','FontName','Arial','FontSize', 14); ylabel('Karboxylová kyselina','FontName','Arial','FontSize', 14);  
title('Vzorek B','FontName','Arial','FontSize', 14)
```

Graf číslo 3 - vzorek C

Vzorek C

```
figure(3);  
rada = [vzorek_C01(:,2), vzorek_C02(:,2), vzorek_C03(:,2)];  
h3=bar3(rada);  
% nastavení popisku os x a y  
osa_x = char('C_01','C_02','C_03');  
set(gca,'YTickLabel',osa_y); set(gca,'XTickLabel',osa_x);  
xlabel('Číslo vzorku','FontName','Arial','FontSize', 14); ylabel('Karboxylová kyselina','FontName','Arial','FontSize', 14);  
title('Vzorek C','FontName','Arial','FontSize', 14)
```

PŘÍLOHA P IX: ZDROJOVÝ KÓD PROGRAMU MATLAB – GRAF - PRŮMĚRNÁ HODNOTA VZORKŮ A, B, C.

Načtení dat

Načtení dat ze souboru

```
vzorek_A = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek A', 'H4:I12');  
vzorek_B = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek B', 'H4:I12');  
%vzorek_C = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'Vzorek C', 'J4:K12');  
vzorek_C = [0.0779;0.0543;0.1397;0.2679;;0.8735;1.9069;0.3612;0.7863;0.0593]*10^7;
```

Vykreslení grafu průměrných hodnot

Vzorek A, Vzorek B, Vzorek C

```
rada = [vzorek_A(:,2),vzorek_B(:,2),vzorek_C(:,1)];  
h1=bar3(rada);  
% nastavení popisku os x a y  
osa_y = char('hexanoic acid','octanoic acid','decanoic acid','dodecanoic acid','methyl tetradecanoate','hexadecanoic acid',...  
            'octadecanoic acid','9-octadecenoic acid','cyclopropanoic acid');  
osa_x = char('A','B','C');  
set(gca,'YTickLabel',osa_y); set(gca,'XTickLabel',osa_x);  
xlabel('Číslo vzorku','FontName','Arial','FontSize', 14); ylabel('Karbonylová kyselina','FontName','Arial','FontSize', 14);  
title('Průměrná hodnota vzorků A, B, C','FontName','Arial','FontSize', 14)
```

PŘÍLOHA P X: ZDROJOVÝ KÓD PROGRAMU MATLAB – GRAF - KARBOXYLOVÉ KYSELINY A VZORKY A, B, C.

Načtení dat

Načtení dat ze souboru

```
clear all;
vzorek_A01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'A_01', 'A1:B9');
vzorek_A02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'A_02', 'A1:B9');
vzorek_A03= xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'A_03', 'A1:B9');

vzorek_B01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'B_01', 'A1:B9');
vzorek_B02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'B_02', 'A1:B9');
vzorek_B03= xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'B_03', 'A1:B9');

vzorek_C01 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'C_01', 'A1:B9');
vzorek_C02 = xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'C_02', 'A1:B9');
vzorek_C03= xlsread('VERIFIKACE PLYN.CHROM - data pro Matlab.xls', 'C_03', 'A3:B11');
```

Vykreslení grafu hodnoty vzorků

Vzorek A(1-3), Vzorek B(1-3), Vzorek C(1-3)

```
rada = [vzorek_A01(:,1),vzorek_A02(:,1),vzorek_A01(:,1),vzorek_B01(:,1),vzorek_B02(:,1),vzorek_B03(:,1),...
        vzorek_C01(:,1),vzorek_C02(:,1),vzorek_C03(:,1)];
h1=bar3(rada);
% nastavení popisku os x a y
osa_y = char('hexanoic acid','octanoic acid','decanoic acid','dodecanoic acid','methyl tetradecanoate','hexadecanoic acid',...
            'octadecanoic acid','9-octadecenoic acid','cyclopropaneoctanoic acid');
osa_x = char('A01','A02','A03','B_01','B_02','B_03','C_01','C_02','C_03');
set(gca,'YTickLabel',osa_y); set(gca,'XTickLabel',osa_x);
xlabel('Číslo vzorku','FontName','Arial','FontSize', 14); ylabel('Karboxylová kyselina','FontName','Arial','FontSize', 14);
title('Hodnoty vzorků A, B, C','FontName','Arial','FontSize', 14)
```