

Typowym zadaniem, które muszą rozwiązać studenci kierunków ścisłych jest analiza danych zebranych w toku zajęć na pracowniach: fizycznej, elektronicznej czy innej. Zwykle wyniki pomiarów mają postać zbioru liczb. Coraz częściej wyniki te są zbierane automatycznie w postaci plików tekstowych. W przypadku niewielkich zbiorów danych można je po prostu przepisać ręcznie. Na ogół jednak, musimy wczytać je z pliku. Jednym z podstawowych kroków w analizie danych jest dopasowywanie krzywych (funkcji) najlepiej „odtworzących” wyniki pomiarów lub wynikających z teorii.

Rozważmy hipotetyczną sytuację:

- W wyniku pomiarów dostajemy plik tekstowy zawierający trzy kolumny: zadaną z dużą dokładnością wielkość X , mierzoną wielkość Y oraz błąd pomiarowy δY .
- Z teorii spodziewamy się, że dane są opisywane nieliniową zależnością:

$$Y = aX^b e^{-cX}. \quad (1)$$

Mamy znaleźć parametry a, b, c , oszacować ich błąd oraz sprawdzić czy wzór poprawnie odtwarza wyniki pomiarów.

- Wyniki mają być przedstawione w elegancki i przejrzysty sposób.

Dopasowanie wielomianu jest zadaniem typowym, natomiast fitowanie funkcji nieliniowych wymaga na ogół specjalistycznego oprogramowania.

MAPLE

... todo ...

MATHEMATICA

Rozpoczynamy od ustalenia bieżącego katalogu:

```
In[1]:= Directory[]  
Out[1]:= /home/andrzej
```

Dane są w podkatalogu "dane/Si_data.txt". Wczytujemy je komendą:

```
In[2]:= dane = Import["dane/Si_data.txt", "Table"];  
Out[2] :=
```

lub, ponieważ wiemy że są to 3 kolumny liczb rzeczywistych:

```
In[2]:= dane = ReadList["dane/Si_data.txt", Real, Real, Real];  
Out[2] :=
```

Otrzymujemy tablicę $3 \times N$ liczb zapisaną w postaci listy N 3-elementowych list. Średnik na końcu komendy powoduje, że tablica nie jest wypisywana na ekranie, co jest zalecane w przypadku dużych zbiorów danych: unikamy „zaśmieciania” ekranu. MATHEMATICA radzi sobie doskonale nawet z wielomegabajtowymi zbiorami, ale działanie interfejsu użytkownika może ulec drastycznemu spowolnieniu, jeżeli będziemy próbować¹ wyświetlić je na ekranie.

Do elementów tablicy danych odwołujemy się standardowo (por. Rozdział ??), np. pierwszy wiersz danych:

```
In[3]:= dane[[1]]
Out[3] := {0., 0., 3.021555 × 10-14}
```

a drugi element piątego wiersza to:

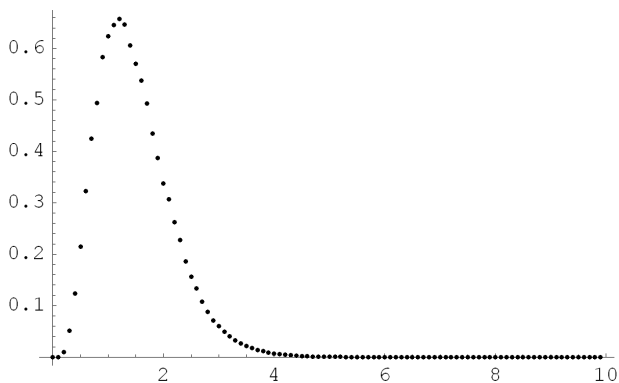
```
In[4]:= dane[[5]][[2]]
Out[4] := 0.123371
```

Pierwszym naszym krokiem będzie przedstawienie punktów pomiarowych na wykresie. W tym celu przepisujemy kolumny 1 (X) i 2 (Y) do tablicy „pomiar”:

```
In[5]:= pomiary = Table[{dane[[i]][[1]], dane[[i]][[2]]}, {i, 2, 100}];
Out[5] :=
```

Dla tablicy o dwóch kolumnach możemy użyć po prostu:

```
In[6]:= ListPlot[pomiary]
```



```
Out[6] := Graphics
```

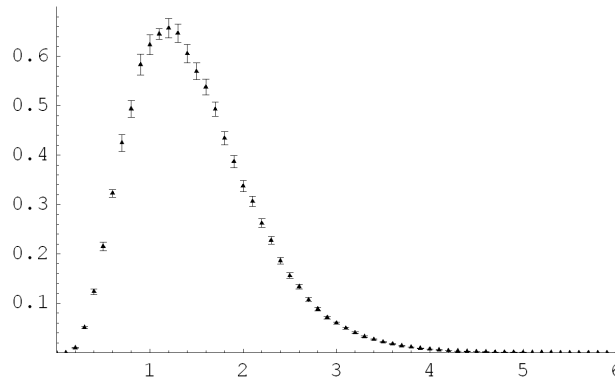
Aby dodać słupki błędów można użyć komendy „**ErrorBar**” w połączeniu z „**MultipleListPlot**”. Najpierw ładujemy pakiet „**Graphics**”:

```
In[7]:= «Graphics»
Out[7] :=
```

¹Lub nastąpi to w wyniku błędu składniowego. MATHEMATICA zwraca wtedy na wyjściu dane wejściowe. Dlatego *przed* rozpoczęciem obróbki bardzo dużych danych warto przetestować kod na „okrojonych” plikach.

a następnie zapisujemy do zmiennej „**dane1**” punkty pomiarowe wraz ze słupkami błędów i rysujemy wykres:

```
In[8]:= dane1 = Table[{{dane[[i]][[1]], dane[[i]][[2]], ErrorBar[dane[[i]][[3]]]}, {i, 1, 100}];  
Out[8] :=  
In[9]:= wykres2 = MultipleListPlot[dane1, PlotRange -> {{0, 6}, {0, 0.7}}]
```



```
Out[9] := Graphics
```

Przystępujemy teraz do znalezienia parametrów funkcji (1). W tym celu ładujemy pakiet „**Statistics**” zawierający interesującą nas funkcję „**NonlinearFit**”:

```
In[10]:= «Statistics»  
Out[10] :=
```

Funkcja „**NonlinearFit**” jest wywoływana z conajmniej czterema parametrami:

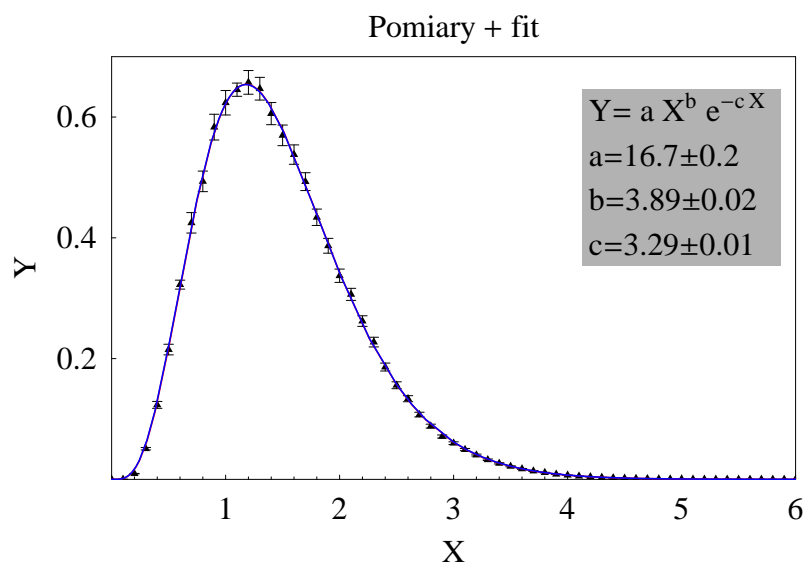
1. tablica danych
2. równanie dopasowywanej funkcji, np. (1)
3. zmienną niezależną (np. x)
4. lista szukanych parametrów (np. $\{a, b, c\}$)

Dla rozważanego przykładu:

```
In[11]:= wykres3 = NonlinearFit[pomiary, a x^b Exp[-c x], x, {a, b, c}]  
Out[11] := 16.7275 x3.88674 e-3.292321985004924 x
```

Jeżeli jesteśmy zainteresowani bardziej szczegółowymi informacjami dotyczącymi wyników procedury fitującej możemy użyć siostrzanej funkcji „**NonlinearRegress**” wywoływanej z identycznymi parametrami, ale dającej na wyjściu bardzo szczegółowe informacje, m. in. na temat błędów dopasowania. Wykorzystując te dane oraz możliwości graficzne możemy sporządzić ładny wykres prezentujący uzyskane wyniki (Rys. 1).

Notatnik zawierający obliczenia jest dostępny pod adresem <http://ribes.if.uj.edu.pl/alsymb/>



Rysunek 1: Wykres prezentujący dane pomiarowe z błędami na tle dopasowanej krzywej. Pokazano również dopasowane parametry oraz ich odchylenia standardowe.