

Gagnavinnsla og framsetning

1 Inngangur

Gagnasöfnun fylgir almennt gagnavinnsla, þar sem mælistærðir eru settar á form sem hentar samanburði við líkan, sem lýsir samhengi mældu stærðanna. Þetta samhengi milli mældu stærðanna x_i og y_i gæti verið á ýmsa vegu, t.d.

1. línulegt; $y = ax + b$
2. veldisfall; $y = Ae^{-Bx}$
3. annað ólínulegt samband; $n_2 \sin y = n_1 \sin x$

Gildi stikanna a og b , A og B , eða n_1 og n_2 , lýsa eiginleikum melda kerfisins. Gagnavinnslunni lýkur með því að lesa þau gildi á stikunum sem best fella líkanið að gögnunum.

Fyrir línulegt samhengi er einfaldast að lesa stikurnar a og b sem hallatölu og hliðrunarstuðul af línuriti $y(x)$. Þá er reglustika felld að mælipunktum á línuritinu með augnmáli og besta lína dregin. Hallatala og hliðrunarstuðull þessarar línu eru þá lesin af línuritinu. Með stærðfræðilegri skilgreiningu á hugtakinu 'besta lína' getum við líka farið formlegri leiðir að ákvörðun stikanna. Þetta verður gert í kafla 2.

Veldisfallið í tilfelli 2 getum við sett fram á línulegan hátt með breytuskiptum;

$$z = \ln y, \quad z = \ln A - Bx$$

og teiknað grafið $z(x) = \ln y(x)$. Hér verður hallatala línunnar $a = -B$ og hliðrunarstuðullinn $b = \ln A$. Breytuskiptin kalla á yfirfærslu óvissu á nýju stærðina. Hér verður óvissan Δz á afleiddu stærðinni z ,

$$\Delta z = \frac{d \ln y}{dy} \Delta y = \Delta y / y$$

Þriðja tilvikið sem nefnt var hér að ofan má setja á línulegt form með breytuskiptunum;

$$r = \sin x \text{ og } s = \sin y, \quad s(r) = (n_1/n_2) r$$

og teiknað grafið $s(r) = \sin(y(\sin(x)))$. Hér verður hallatalan hlutfallið $a = n_1/n_2$ og hliðrunarstuðullinn er $b = 0$. Eins og áður kalla breytuskiptin á yfirfærslu á óvissum; $\Delta \sin y = \cos y \Delta y$ fyrir aðra breytuna og tilsvareandi fyrir hina. Hér skal minnt á að stærðina Δy þarf að tilgreina í einingunni radíanar, því diffurreglurnar sem notaðar voru við yfirfærsluna gilda aðeins í því einingakerfi.

2 Aðferð minnstu kvaðrat-frávika

Algengasta leið til að skilgreina besta feril af formi $y = f(x)$, sem fellur að gögnum x_i, y_i er að mynda frávikssummuna

$$S = \sum \{y_i - f(x_i)\}^2 w_i \quad (1)$$

Hver liður í summunni lýsir kvaðrati frávíks mæligildis y_i frá líkangildi $f(x_i)$. Stærðin w_i er vægi hvers mælipunkts. Ef allir mælipunktar eru taldir jafngildir er eðlilegast að setja $w_i = 1.0$, en gefa þeim mismunandi vægi ef gæðamunur er milli punkta. Algengt er að láta óvissu mælipunkts ráða vægi hans í summunni og setja

$$w_i = 1/\Delta y_i^2 \quad (2)$$

Þannig fá bestu mælipunktarnir að ráða mestu um gildi summunnar.

Líkanformið $y = f(x)$ ræðst af stikum A_n . Margliðulíkan tekur þannig formið

$$y = f(x) = \sum A_n x^n. \quad (3)$$

Sértilfellið $n_{max} = 1$ gefur okkur línu; $y = A_0 + A_1 x$.

Formið á $f(x)$ er þó engan veginn bundið við margliður. Dæmi um veldisfall væri

$$y = f(x) = A_0 e^{-A_1 x}.$$

Stærðin S er alltaf jákvæð eða núll. $S = 0$ svarar til að mæligögn falla alveg að líkaninu fyrir valið mengi af stikunum A_n , meðan $S > 0$ er merki um endanleg frávik mælinga og líkans. **Besta val á gildum stikanna telst það sem gefur minnsta gildi á S .** Við lítum því á frávikssummuna S sem fall af stikunum A_n og stillum upp skilyrðum fyrir lággildi á S ,

$$\frac{\partial S}{\partial A_n} = 0 \quad (4)$$

fyrir öll gildi á n .

Línulegt líkan gefur okkur frávikssummuna

$$S = \sum_{i=1}^N (y_i - A_0 - A_1 x_i)^2 w_i. \quad (5)$$

Hlutdiffnun með tilliti til A_0 og A_1 gefur skv. jöfnu 4

$$\frac{\partial S}{\partial A_0} = -2 \sum (y_i - A_0 - A_1 x_i) w_i = -2 \sum y_i w_i + 2A_0 \sum w_i + 2A_1 \sum x_i w_i = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial S}{\partial A_1} = -2 \sum (y_i - A_0 - A_1 x_i) x_i w_i = -2 \sum x_i y_i w_i + 2A_0 \sum x_i w_i + 2A_1 \sum x_i^2 w_i = 0 \quad (7)$$

Lausn á þessu jöfnuhneppi er

$$A_0 = \frac{\sum x_i w_i \sum x_i y_i w_i - \sum x_i^2 w_i \sum y_i w_i}{(\sum x_i w_i)^2 - \sum w_i \sum x_i^2 w_i} \quad (8)$$

$$A_1 = \frac{\sum x_i y_i w_i \sum w_i - \sum x_i w_i \sum y_i w_i}{\sum x_i^2 w_i \sum w_i - (\sum x_i w_i)^2} \quad (9)$$

Algengt er að línuleg líkön festi aðra hvora stikuna, hliðrunarstuðul eða hallatölu. Föst hallatala A_{01} gefur minnsta gildi á S með hliðrunarstuðli

$$A_0 = \frac{\sum y_i w_i - A_{01} \sum x_i w_i}{\sum w_i} \quad (10)$$

og fastur hliðrunarstuðull A_{00} gefur minnsta gildi á S með hallatölu

$$A_1 = \frac{\sum x_i y_i w_i - A_{00} \sum x_i w_i}{\sum x_i^2 w_i} \quad (11)$$

Mikið framboð er á hugbúnaði til að finna stuðla bestu línu sem fellur að mæligögnum þar sem allir mælipunktar fá sama vægi, en þrengra um kosti fyrir misvægi milli punkta eða ólínuleg líkön. Í flestum tilfellum eru stikurnar metnar með ítrunaraðferðum, þar sem tiltaka þarf byrjunargildi þeirra og kröfur um hvenær mál er að hætta ítrun.

Við notum frjálsa hugbúnaðinn **gnuplot** bæði til að teikna gröf og fella líkön að mæligögnum. Gnuplot, sem er til fyrir algengustu stýrikerfi; Linux, Unix, MacOS og Windows, verður lýst nánar í næsta kafla.

3 Framsetning gagna

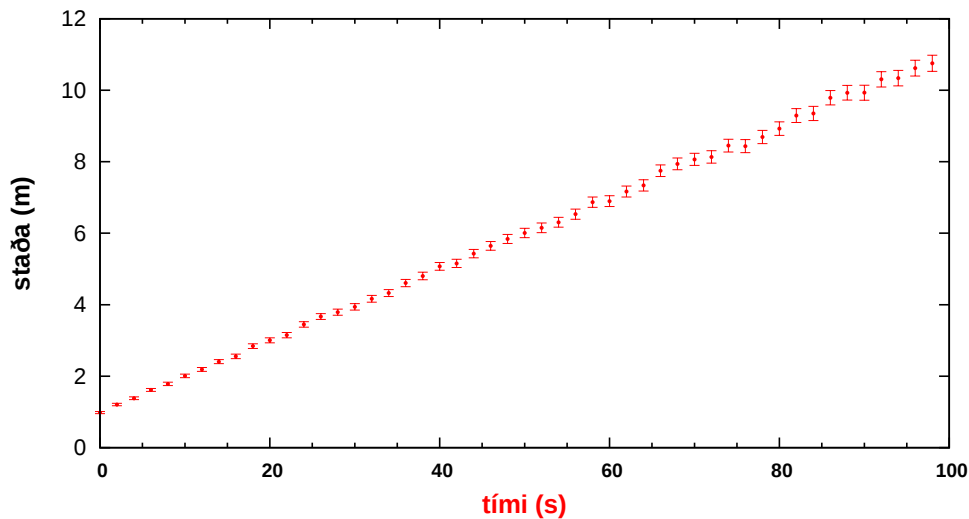
Myndræn framsetning er í flestum tilfellum skýrasta leiðin til að gefa yfirlit um mæligögn. Það fer síðan eftir eðli gagnanna hvort framsetningin er á formi línurits, súlurits eða kökurits. Hér tökum við aðeins fyrir fyrsta flokkinn.

Tvívíð línurit sýna tengsl tveggja stærða, þar sem hvor stærð fær einn ás og er ásunum stillt upp hornrétt hvorn á annan. Ásarnir eru merktir með nafni stærðarinnar sem þeir túlka, kvarða og einingum. Á ásana eru sett aðal-hök við jafndreifð gildi á kvarðanum og tölugildi kvarðans sýnd við þessi hök. Valinn fjöldi auka-haka má setja á milli aðal-haka til að gera kvarðann greinilegri. Auka-hökin eru minni og ekki merkt tölugildi á línuritinu. Stafastærð í nafni og kvarða þarf að vera læsileg í endanlegri notkunarstærð línuritsins. Fjöldi megin-haka ætti að halda í skefjum til að kvarðinn verði læsilegur, algengast er að nota á bilinu 4 til 10 megin-hök á ás.

Hvert gagnasett er síðan teiknað upp með einhverju tákni (t.d. punkti, hring, þríhyrningi eða kross) í hverjum mælipunkti á línuritinu. Það fer síðan eftir aðstæðum hverju sinni hvort dregin eru brúunarstrik milli mælipunkta eða bilin fái að standa.

3.1 Gnuplot

Við notum frjálsa hugbúnaðinn **gnuplot** bæði til að teikna gröf og fella líkön að mæligögnum. Gnuplot er uppsett á Linux-tölvunum í kennslustofunni. Heimasíða Gnuplot er www.gnuplot.info en dreifing á hugbúnaðinum er frá <http://sourceforge.net/projects/gnuplot/files/gnuplot/>. Þeir nemendur sem vilja aðstoð við að sækja og stilla gnuplot upp á fartölvum sínum skulu hafa þær tiltækar í verklega tímanum fyrir þessa æfingu.



Mynd 1: Sýnishorn af línuriti sem inniheldur nöfn á ásum, kvarða og einingar, aðalhök og aukahök, og gagnapunkta með lóðréttum óvissumörkum.

Gnuplot má keyra á tvo vegu. Annarsvegar með textaskipunum í skipanalínu sem birtist í gnuplot umhverfinu.

```
$ gnuplot
gnuplot> set xrange [ 0 : 100 ]
gnuplot> .....
```

eða raða skipunum saman í skrá sem gæti heitið dummy1.gnu, og er keyrð með skipuninni

```
$ gnuplot dummy1.gnu
```

Gnuplot kallar eftir gagnaskrá á textaformi (ASCII) þar sem breytistærðum er raðað í dálka með eyðu eða einhverju öðru aðskilnaðartákni á milli dálka. Hugbúnaðurinn les skrána línu eftir línu. Skýringum eða athugasemdum má koma fyrir í línunum sem byrja á táknuinu #

```
# dálkur 1 tími (s), dálkur 2 staða (m), dálkur 3 óvissa stöðu (m)
0 0.982 0.030
2 1.205 0.034
4 1.381 0.038
6 1.615 0.042
```

Í möppunni tilraun0 eru fjórar númeraðar gagnaskrár með endinguna .dat. Þær innihalda allar þrjá dálka. Sá fyrsti er tímasetning, annar staða eða útslag, og sá þriðji er óvissa á stærðinni í dálki 2. Sama mappa geymir líka grunn að Gnuplot skipanaskráum undir nöfnunum dummy*.gnu þar sem stjarnan tekur gildi frá 1 og upp í 4. Gagnaskrá og skipanaskrá með sama númer eiga saman.

Ykkar verkefni verður að laga þessar skipanaskrár til svo gnuplot myndi skýr gröf af gagnapunktum og tilsvareandi líkani ásamt tölulegum upplýsingum um stikur líkansins.

Tafla 1: Tenging gagnaskráa við gnuplot skipanaskrár og líkanform.

gagnaskrá	skipanaskrá	líkangerð
sample1.dat	dummy1.gnu	almennt línulegt samhengi
sample2.dat	dummy2.gnu	línulegt í gegnum origo
sample3.dat	dummy3.gnu	almennt parabolskt samhengi
sample4.dat	dummy1.gnu	deyfing með veldisfalli

3.1.1 Línurit af gögnum

Kennari aðstoðar ykkur við skráningu inn á vinnslusvæði í tölvunni. Þið færið ykkur í möppuna tilraun0 með skipuninni `cd tilraun0`. Þar þurfið þið að búa til ykkar eigin undirmöppu með skipuninni `mkdir`. Fyrir notendurna Jón og Gunna gæti þetta verið `mkdir jog eða mkdir JonogGunna`. Þá afritið þið gagnaskrár og skipanaskrár í ykkar möppu með `cp *.gnu ./JonogGunna/` og `cp *.dat ./JonogGunna/`, þar sem þið getið gert þær breytingar á skránum sem ykkur lystir. Eftirfarandi tafla tengir saman nöfn gagnaskráa, skipanaskráa og líkangerð fyrir samhengi tveggja fyrstu dálkanna.

Innihald skipanaskrárinnar `dummy1.gnu` er í upphafi æfingar eftirfarandi:

```

1  #set encoding iso_8859_1          # val á stafasetti
2  set encoding utf8
3  set term x11                      # val á skjáargerð
4  set size 0.85,0.65                # val á stærð ása við prentun, hlutfall af A4
                                     lengdum
5  set origin 0.02,0.15              # staðsetning upphafspunkts á A4 síðunni
6  set style line 1 lt 1 lw 2 pt 1 ps 1.2 # val á teiknistíl ferils nr. 1
7  #set style line 1 pt 7 ps 1        # circle
8  set style line 2 lt 2 lw 2 pt 2 ps 1.2 # val á teiknistíl ferils nr. 2
9  set style line 3 lt 3 lw 2 pt 3 ps 1.2 # val á teiknistíl ferils nr. 3
10 set xlabel 'tími (s)' tc lt 1 font # val á leturgerð, stærð og lit í nafni x-áss
    'Helvetica-Bold,16'
11 # set xlabel 'tími (s)' tc rgb 'red'
    font 'Helvetica-Bold,16'
12 set ylabel 'staða (m)' font        # val á leturgerð og stærð í nafni y-áss
    'Helvetica-Bold,16'
13 set label 'Bla bla' at 20,1.5E+1 font # Heiti línurits staðsett í hnitum ása
    'Helvetica-Bold,16'
14 set xrange [ 0 : 100 ]             # Val á kvarðabili x-áss
15 #set yrange [ 0.0 : 2.7E-8 ]
16 set xtics 20 font 'Helvetica-Bold,12' # Val á millibili aðal-haka og leturgerð kvarða
17 #set ytics 0.01 font 'Helvetica-Bold,12'
18 #set mytics 5                      # Val á fjölda aukahaka í hverju aðal-hakabili

```

```

19 set mxtics 4
20 #set logscale y
21 set nokey                                     # ferillitur tengdur/(ekki tengdur) gagnaskráar-
                                                nafni
22 a=1.0 ; b=0                                  # byrjunargildi stika
23 f(x)=a*x+b                                   # skilgreining á líkaninu f(x)
24 fit f(x) 'sample1.dat' u 1:2:3 via a,b        # Aðlögun líkans að gögnum, vægi mælipkt úr
                                                dálki 3

25 #fit f(x) 'sample1.dat' u 1:2:3 via a
26 p './sample1.dat' u 1:2:3 with
  yerrorbars pt 7 ps 0.4
27 #p './sample1.dat' u 1:2:3 with              # Gögn úr sample1 teiknuð upp á skjá ásamt lík-
  yerrorbars pt 7 ps 0.4, f(x)                 anferli f(x)
28 pause -1                                     # Hlé til að skoða línurit, hléi lýkur með 'Enter'
29 set term postscript eps enhanced color       # Val á skráargerð fyrir línurit
30 set output 'sample1.eps'                    # Val á nafni línuritsskráar
31 #set output '| ps2pdf - sample1.pdf'
32 #set terminal pdf enhanced color
33 #set output 'sample1.pdf'
34 replot                                       # Endanlegur frágangur á línuritsskrá

```

Fyrstu 2 línurnar tengjast vali á stafasetti. Hér skal valið í samræmi við almennar stillingar tölvu eða ritils. Skipunin term er stytting á terminal. Bæði formin eru jafngild. 3ja línan stillir gnuplot til að birta grafið í X-gluggakerfi.

4ða og 5ta lína stilla stærð ása og staðsetningu á A4 örk við prentun. Eining er hliðarlengd á A4 örk. **Hér er rétt að vekja athygli á að gnuplot notar punkt (.) til að skilja á milli heiltölugildis og aukastafa í tölum, og kommu (,) til að greina á milli hnitaása.** Sjötta til og með níuna lína stilla teiknistíl ferla; línubreidd, lit, slitinn/samfelldan feril, stærð og gerð teiknitákns. Taflan hér að neðan tengir saman fullt nafn og styttingar á nokkrum skipunum sem tengjast teiknistíl. Bæði formin eru jafngild. Tíunda til 13 lína tilgreina nöfn ása og einingar, og nafn línurits. Hér er líka valin

Tafla 2: Full nöfn og styttingar á nokkrum skipunum sem tengjast teiknistíl

fullt nafn	stytting
linetype	lt
linewidth	lw
pointtype	pt
pointsize	ps
textcolor	tc

leturgerð, stærð og litur. Staðsetningu textastrengja með at x, y, má tilgreina í nokkrum hnitakerfum (Leitarorð: gnuplot coordinates). Í línunum 14 og 15 eru kvarðabil ása tilgreind. Ef við sleppum þessum skipunum notar gnuplot dreifingu mælipunkta í gagnaskrá til að stilla þessar stærðir. Línur 16 til 19 stilla af millibil aðal-haka og fjölda auka-haka á hverju bili, ásamt leturgerð kvarða. Ef lína 20 er notuð verður lóðrétti ásinn logarithmiskur, þ.e. talan 10 lendir mitt á milli 1.0 og 100.

Í línu 21 er tilgreint hvort tengja skuli ferla við gagnaskrár á línuritinu. Með línunum 22 og 23 er línulega fallið $f(x)$ skilgreint og stikurnar a og b stilltar á byrjunargildi. Með línunum 24 og 25 er líkanið $y = f(x)$ felld að gögnum í skránni `sample1.dat` þar sem dálkar 1:2:3 fá merkinguna $x : y : 1/\sqrt{w}$ eins og þessar stærðir eru notaðar í kafla 2. Dálkur 3 í gagnaskránni inniheldur óvissu mælistærðarinnar í dálki 2. Skipunin `u` er stytting á `using`. Ef aðeins tveir dálkar eru tilgreindir með `using` fá allir punktar einingarvægi í útreikningunum.

Gnuplot notar svokallaða **Marquardt-Levenberg** ítrunaraðferð til að ákvarða stikur minnstu kvaðrat-frávika. Niðurstaða ítrunar birtist á skjánum og er geymd í skránni `fit.log`.

Með línunum 26 eða 27 eru gögnin teiknuð upp í línurit á skjánum og lína 28 gerir hlé á aðgerðum til að skoða grafið. `p` er stytting á skipuninni `plot`. Hléinu lýkur þegar ýtt er á `Enter` takkann.

Í línunum 28 til 33 er skráarform og skráarnafn fyrir endanlega útgáfu línurits tilgreind. Lína 34 endurteiknar grafið og vistar samkvæmt nýtilgreindum fyrirmælum. Grafið er svo skoðað í verkfærum á borð við `Ghostview` `gv`, `Okular` `okula` eða `ePDFView` `epdfview`.

Gnuplot getur líka búið til afleiddar stærðir úr innihaldi dálka og notað afleiddu stærðirnar í gröf. Í `dummy4.gnu` kemur fyrir skipanalína með formið

```
p './sample4.dat' u 1:(log($2)):(($3/$2) with errorbars
```

Ef við gefum dálkunum nöfnin $1 : 2 : 3 = x : y : \Delta y$, þá teiknar Gnuplot hér upp stærðina $\ln(y)$ sem fall af x með óvissumörkunum $\Delta \ln y = \Delta y / y$.

Með því að opna skipanaskrána (`*.gnu`) í ritli sem gæti verið `scite` eða `leafpad` má gera breytingar á gnuplot fyrirmælunum að vild. Ef ekki er ljóst hvaða möguleikar eru fyrir hendi varðandi einhverja skipun er einfaldast að nota leitarvél til að finna einhverja af mörgum hjálparsíðum fyrir Gnuplot með leitarorðunum `gnuplot 'skipun'`.

4 Verkefni

- Búið til ykkar eigið vinnusvæði (undirmöppu) í möppunni `../tilraun0/` með skipuninni `mkdir xxxx`.
- Afritið skránar `sample*.dat` og `dummy*.gnu` yfir á vinnusvæði ykkar með `cp sample*.dat ./xxxx/` og `cp dummy*.gnu ./xxxx/`.
- Færið ykkur á eigið vinnusvæði með `cd xxxx`.
- Opnið `dummy1.gnu` og `sample1.dat` í SciTE ritlinum `scite &`. (Með `&` tákninu fer ritillinn í bakgrunnsvinnslu svo vinnuglugginn ykkar getur sinnt nýjum verkefnum.) Keyrið skipanaskrána í Gnuplot með `gnuplot dummy1.gnu`. Þegar grafið er komið á skjáinn ýtið þið á `Enter` takkann og þá fer Gnuplot í gegnum síðasta hluta skipananna í `.gnu` skránni og býr til úttaksskrána sem í byrjun er PostScript skrá. Hana skoðið þið með `Okular` eða `ePDFView`. `okular sample1.eps &`.
- Skoðið áhrif af breytingum á sem flestum skipunum í `.gnu` skránni. Breytingarnar gætu verið í litavali, línubýkk, stafastærð, staðsetningu haka, vali á teiknitákni eða línugerð o.s.frv. Prentið endanlegt form af grafinu á pappír.

- Endurtakið tvo síðustu liði fyrir skipanaskrárnar `dummy2.gnu`, `dummy3.gnu` og `dummy4.gnu`. Í síðasta tilfellinu skuluð þið bæði teikna veldisfallið og óvissur þess eins og skráð er í `sample4.dat` skrána, og logga af dálki 2 með tilheyrandi óvissu. Skoðið hvaða mælipunktur hafa stærstu og minnstu óvissu í báðum tilfellum.