Karlsruher Institut für Technologie

Erfassung, Auswertung und Präsentation von Messergebnissen

Moritz Klammler · Fachschaft f. Chemie u. Biowissenschaften · Institut f. Physikalische Chemie
Grundpraktikum Physikalische Chemie; Sommersemester 2011

Karlsruher Institut für Technologie

Copyright © 2011 Moritz Klammler

Permission is granted to copy, distribute and/or modify this document under the terms of the GNU Free Documentation License, Version 1.3 or any later version published by the Free Software Foundation; with no Invariant Sections, no Front-Cover Texts, and no Back-Cover Texts.

http://www.gnu.org/licenses/fdl.txt

Kolophon

Diese Präsentation wurde mit LaTeX und der **beamer** Klasse von Till Tantau, Joseph Wright und Vedran Miletić und einer modifizierten Variante des KIT-Themes erstellt. Mit Ausnahme der zu den Beispielen eingefügten Abbildungen – die jeweils mit dem entsprechenden Programm erstellt wurden – wurden die Grafiken / Plots mit **gnuplot** und **PSTricks** erstellt. Große Teile der Übungsdaten wurden mit **Mathematica** simuliert.

Die Grundschrift ist **Iwona** von Janusz M. Nowacki.

Das Bild auf der Titelfolie ist ein Ausschnitt aus dem Gemälde *Waldinneres mit kleiner Kuh- und Schafherde* von Cornelis J. de Vogel (1824–1879), Öl auf Holz, 70 cm × 55 cm, **1871**.

Die im Kapitel *Messdaten, Fehler und Statistik* abgebildete historische Schießscheibe aus dem Museum Senftenberg wurde von Andreas Praefcke fotografiert und für gemeinfrei erklärt.

Der LaTeX Quelltext ist auf Wunsch jederzeit vom Autor erhältlich:

`moritz.klammler@gmail.com`

Übersicht

1. Datenerfassung
2. Messdaten, Fehler und Statistik
   - Mittelwert und Standardabweichung
   - Konfidenzniveau und Konfidenzintervall
   - *opt-out:* Ausreißertests
   - Fehlerfortpflanzung
3. Regression
   - Lineare Modelle
   - *opt-out:* Nichtlineare Modelle
4. Numerische Integration und Differentiation empirischer Datensätze
   - Integration
   - *opt-in:* Differentiation
5. *opt-in:* Wissenschaftliche Präsentation von Ergebnissen
6. Anwendung von Origin

Organisatorisches

- Erster Teil: **Mathematica** und **gnuplot** $\Rightarrow$ **OpenSuse**
- Zweiter Teil: **Origin** $\Rightarrow$ **Windows**
- Anmelden unter **Windows** mit Rechenzentrumsaccount (Benutzer `u****` und persönliches Passwort) an Domäne `STUD`
- Anmelden unter **OpenSuse** mit Benutzer `******` und Passwort `*******`
- **OpenSuse** Accounts sind öffentlich. Nichts löschen, hinterlassen, umstellen!
- Falls möglich vom USB-Stick aus arbeiten.
- Seminarunterlagen von `http://klammler.eu/teaching.html` herunterladen und ggf. entpacken.
- Übungsmaterial befindet sich in `uebungen.zip`.

Einleitung

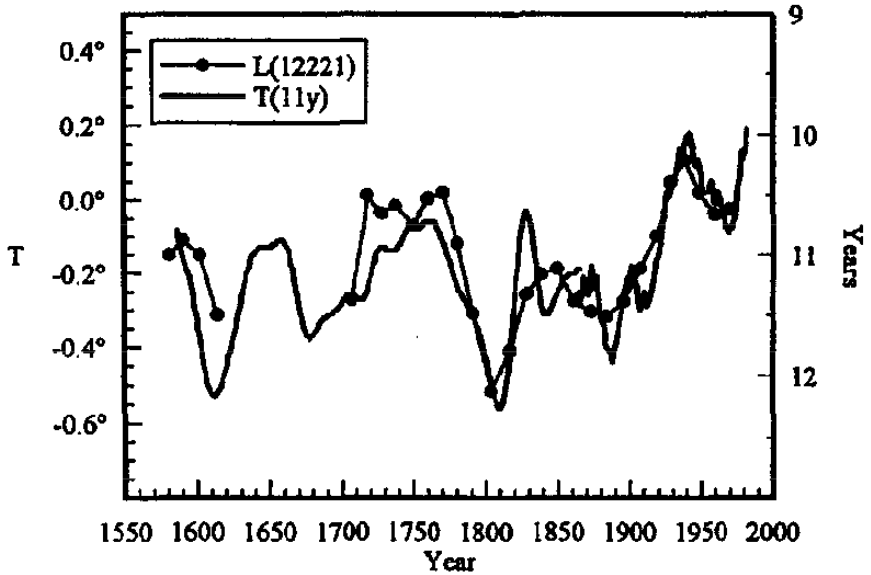


Fig. 6. Eleven-year running average of annual mean values of the northern hemisphere land air temperature 1579–1860 relative to the average temperature 1881–1975, reconstructed by Groveman and Landsberg (1979) together with corresponding values for 1851–1987 relative to 1951–1980 from Jones *et al.* (1986) and Jones (1988). Also plotted is the filtered value (1-2-2-2-1 filter) of the sunspot cycle length.

K. Lassen and E. Friis-Christensen, *Journal of Atmospheric and Terrestrial Physics*, **1995**, *57*(8), 835–845.

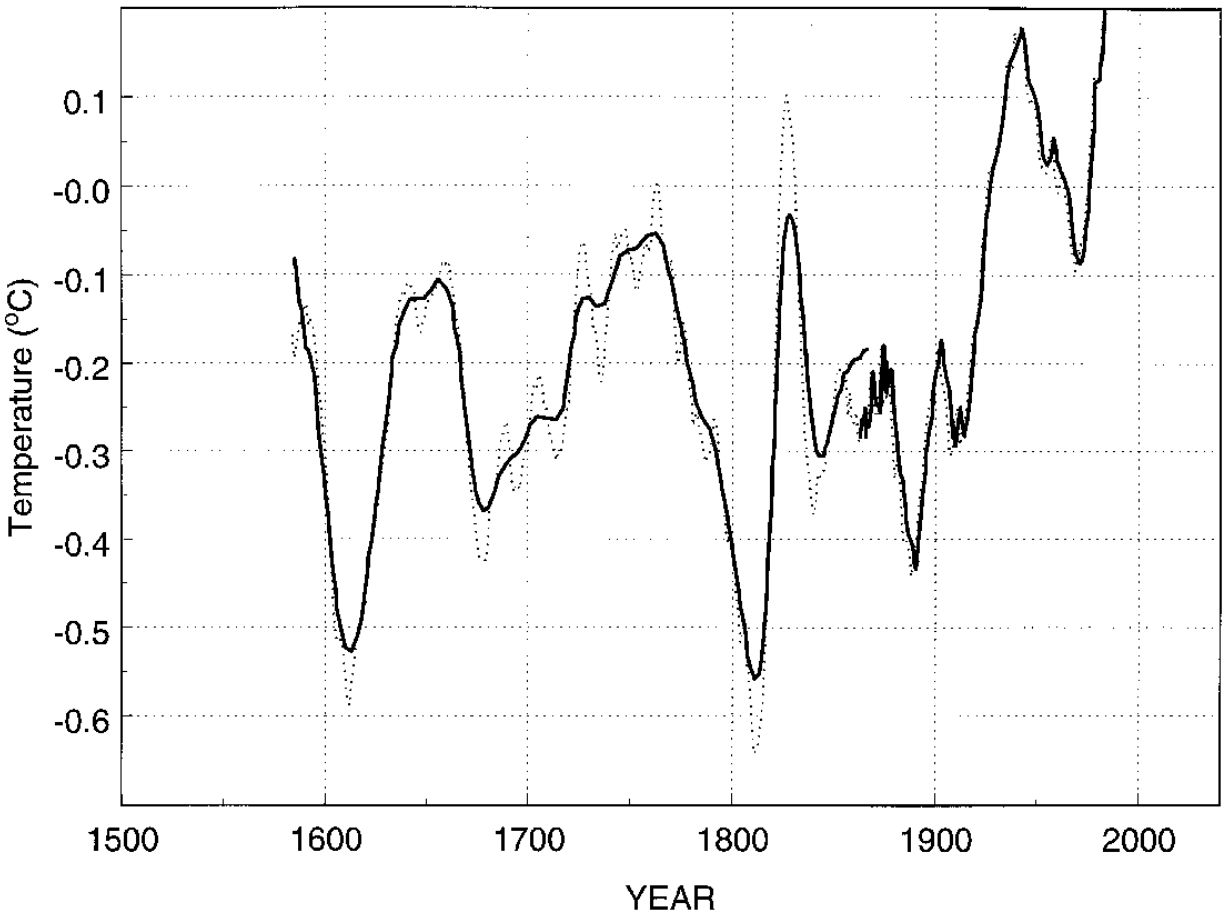


Fig. 4c. The temperature series from LFC-Fig. 6 (solid line) compared to the 11-year running average of the Groveman/Landsberg and Jones series (dotted line). All temperatures are *without zero point adjustment*, so no correction has been made to compensate for their difference in scale.

P. Laut and J. Gundermann, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, **1998**, *60*(18), 1719 – 1728.

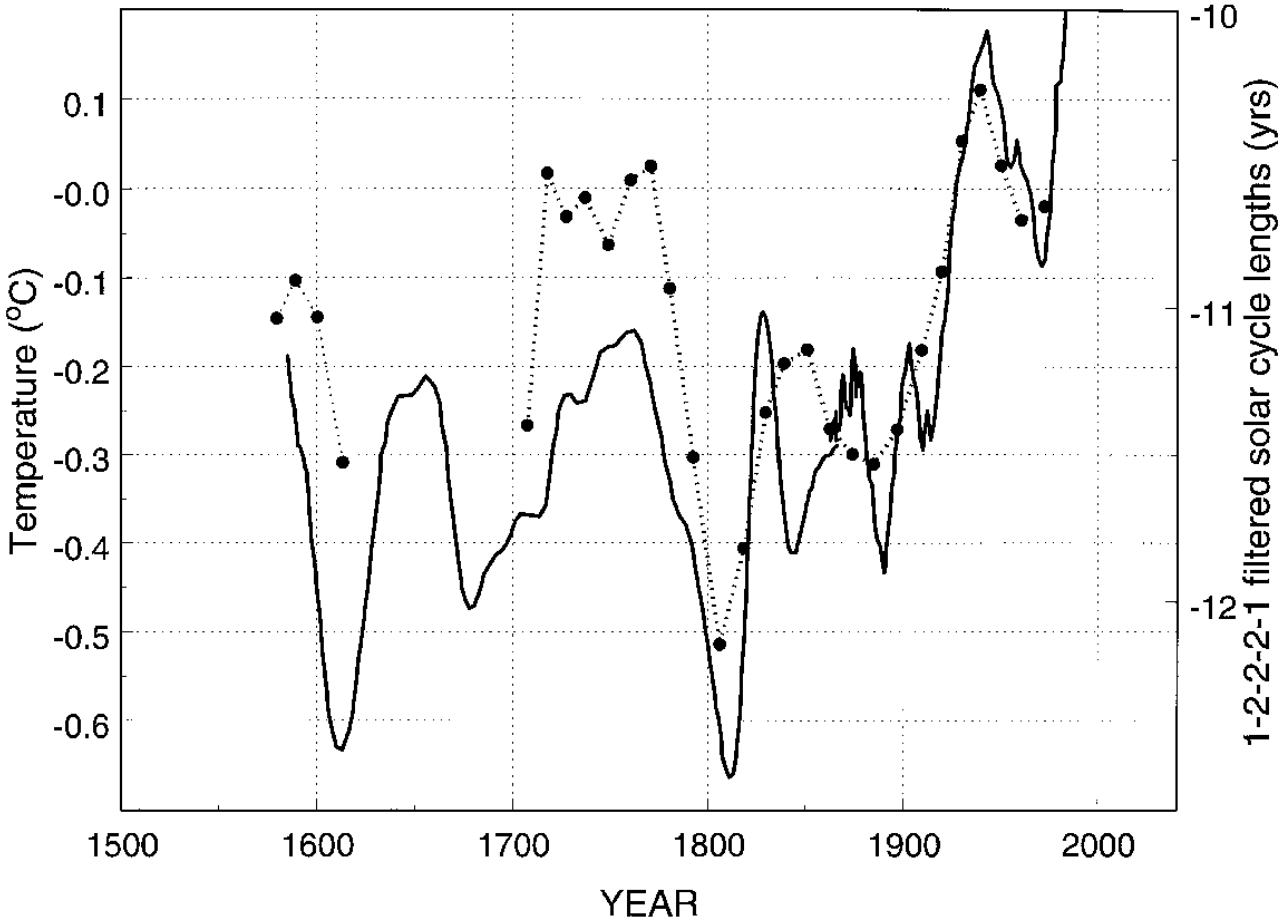


Fig. 4b. This figure is the same as Fig. 4a (and LFC-Fig. 6) apart from the introduction of a zero point correction for the pre-1860 temperatures. The left hand side of the temperature curve is lowered by 0.106°C. After this zero point correction all temperatures on the graph are expressed in the same scale. The fit between solar data and temperatures is not so good as on Fig. 4a.

P. Laut and J. Gundermann, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, **1998**, *60*(18), 1719 – 1728.

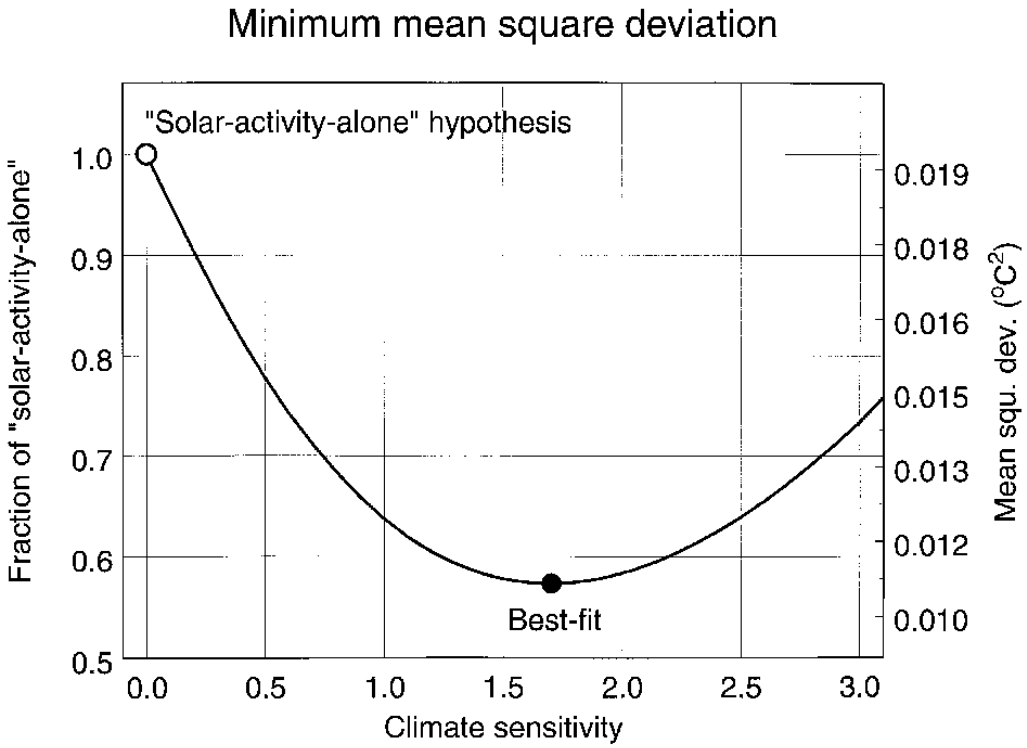


Fig. 2. The minimum mean square deviations as a function of the climate sensitivity ΔT_{2x} employed when calculating the human contribution to the NH land surface air anomalies. The historical temperatures have been 'corrected' by subtracting the human contribution. A climate sensitivity of 0°C corresponds to the 'solar-activity-alone' hypothesis (open circle), i.e., assumes an absence of man-made global warming. The graph shows that a climate sensitivity of 2.5°C—the central value of the IPCC—yields a much lower value. The lowest minimum value occurs for $\Delta T_{2x} = 1.7$°C (filled circle), which also gives the best graphical fit (Fig. 3b) of the 'corrected' temperature anomalies and the filtered solar cycle lengths.

P. Laut and J. Gundermann, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, **1998**, *60*(18), 1719 – 1728.

Datenerfassung

wasser1.dat

```
# Versuch: A5 - Verteilungsquotient
# Gruppe:  13 - Adam Lehmberger und Eva Klapper
# Datum:   2011-05-31
#
# Titration von 200 ml waesseriger Phase
# mit 0.02 M Na2S2O3
# Verbrauch / ml
#
  12.0
  12.5
  11.0
  ...
```

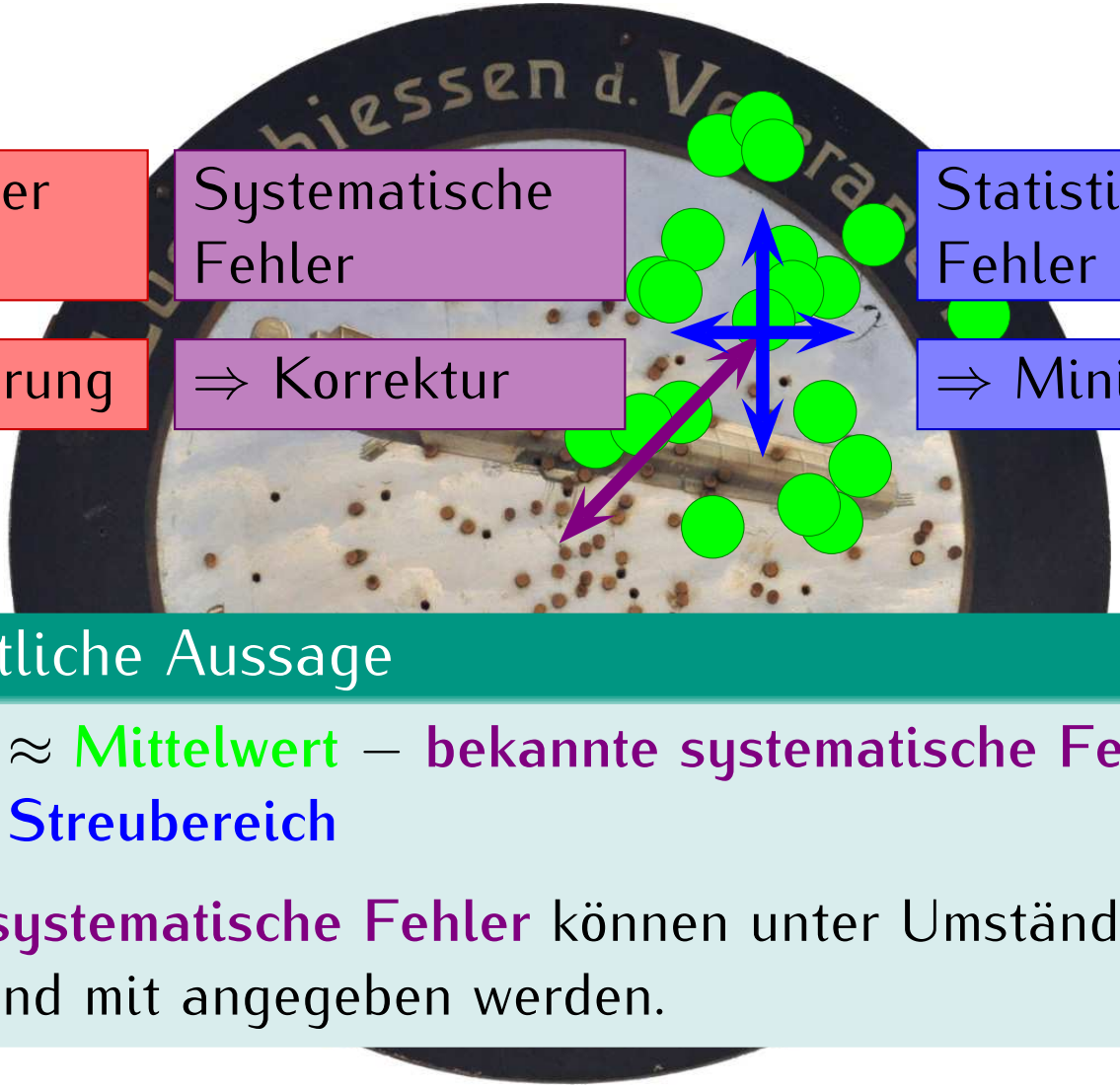
Messdaten und Fehler

Grobe Fehler

⇒ Eliminierung

Systematische Fehler

⇒ Korrektur



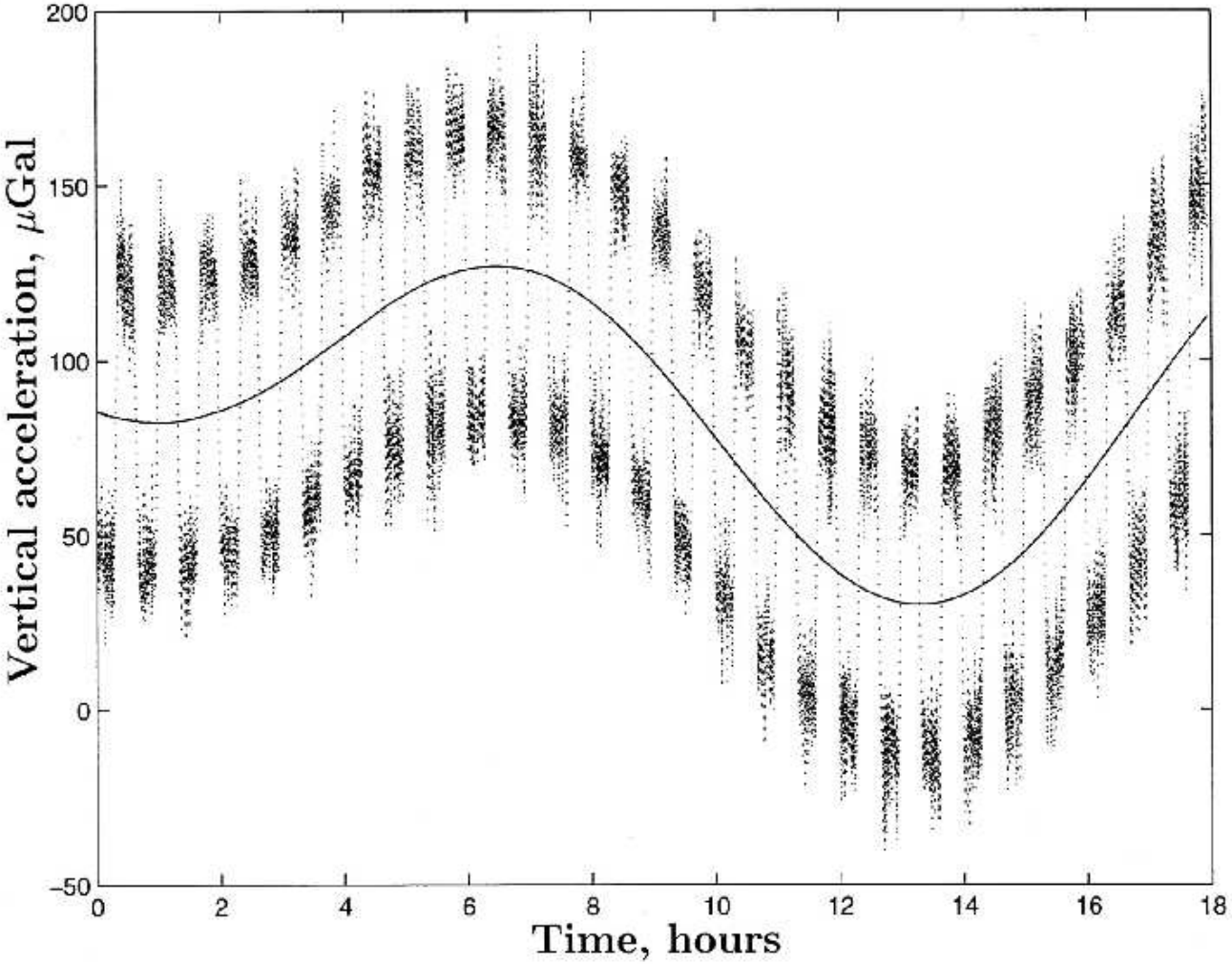
Statistische Fehler

⇒ Minimierung

Wissenschaftliche Aussage

Wahrer Wert ≈ **Mittelwert** − **bekannte systematische Fehler** ± **beobachteter Streubereich**

Unbekannte systematische Fehler können unter Umständen abgeschätzt und mit angegeben werden.

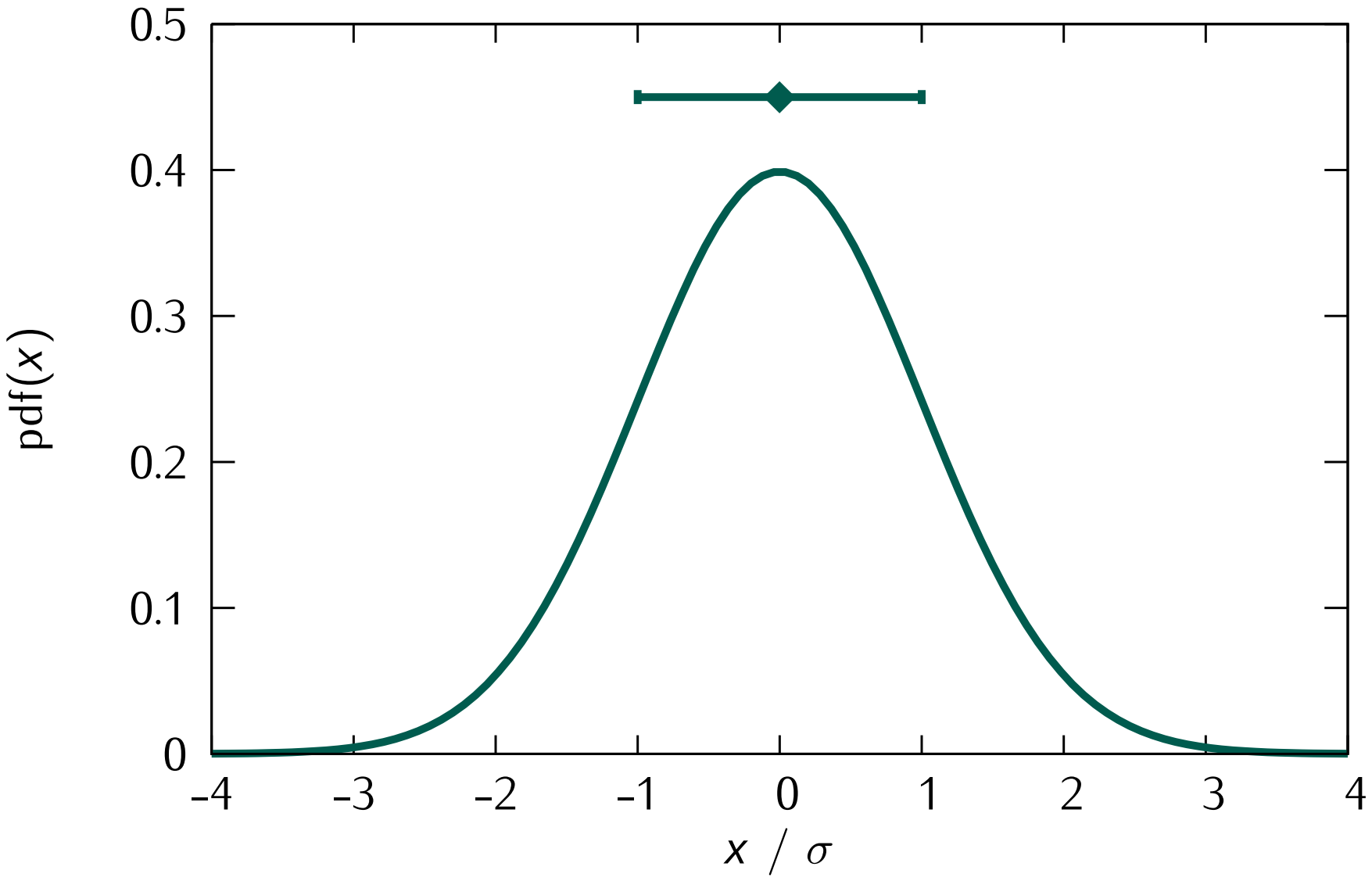


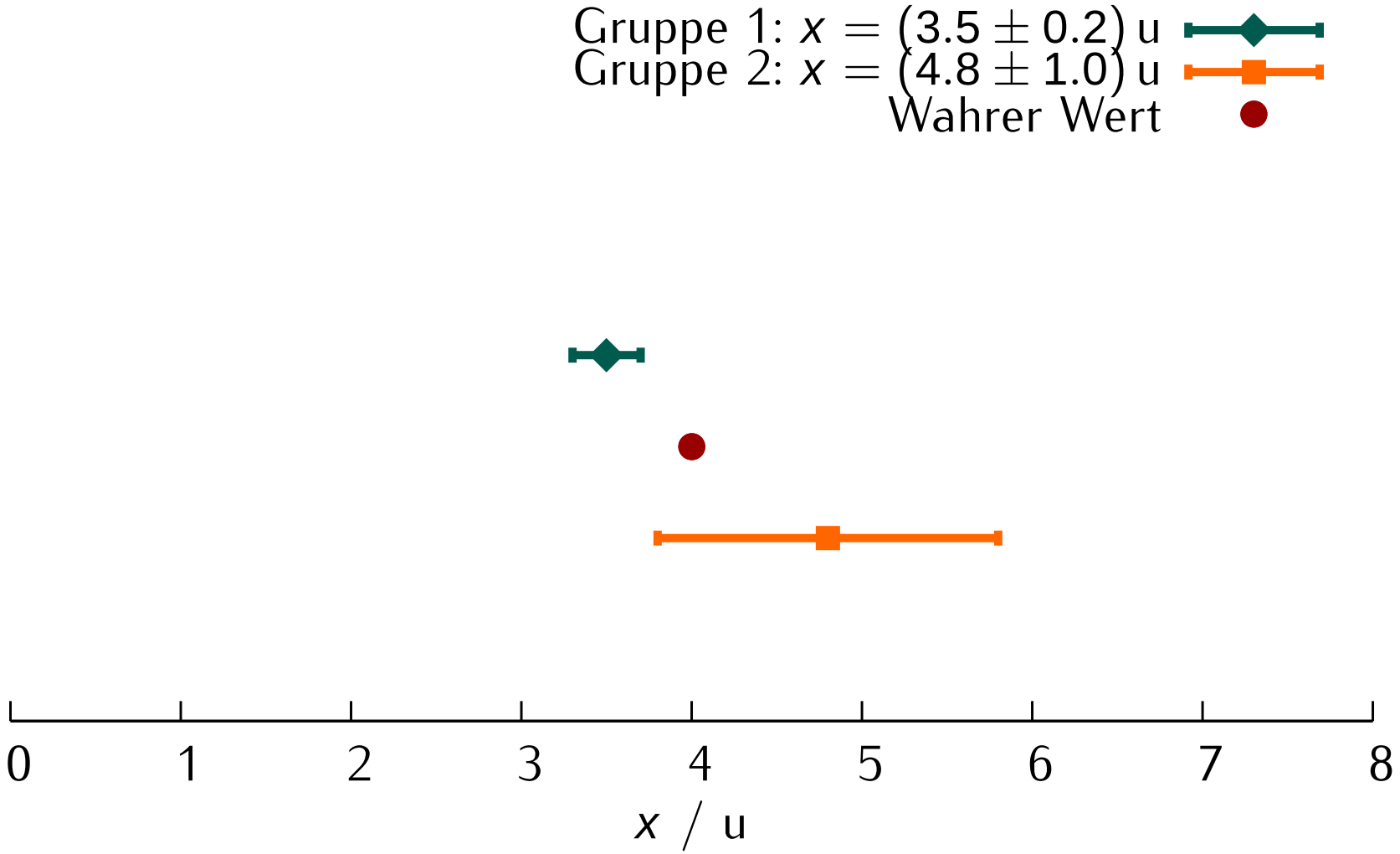
J. P. Schwarz, D. S. Robertson, T. M. Niebauer, and J. E. Faller, *Science*, **1998**, *282*(5397), 2230–2234.

Mittelwert und Standardabweichung

empirischer Mittelwert	**empirische Varianz**
E_X bzw. `MEAN`	V_X bzw. `VAR`
$E_X = \sum_{i=1}^{N} p_i x_i$	$V_X = \frac{N}{N-1} \sum_{i=1}^{N} p_i \left(x_i - M_X\right)^2$
$E_X = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i$	$V_X = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} \left(x_i - M_X\right)^2$
„Schwerpunkt“	„Trägheitsmoment“

empirische Standardabweichung: S_X (bzw. `STDEV`) $= \sqrt{V_X}$


0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
pdf(x)
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
x / σ


Gruppe 1: $x = (3.5 \pm 0.2)$ u
Gruppe 2: $x = (4.8 \pm 1.0)$ u
Wahrer Wert
0
1
2
3
4
5
6
7
8
x / u

Konfidenzniveau und Konfidenzintervall

$$U = (M_U \pm n\, S_U)\,\mathrm{u}$$

Konfidenz**intervall** $= 2\, n\, S_X$
(In der Physik) üblich: $n = 1$

$n = 1$	$\Rightarrow$	Konfidenz**niveau**	$\gtrsim 68\,\%$
$n = 2$	$\Rightarrow$		$\gtrsim 95\,\%$
$n = 3$	$\Rightarrow$		$\gtrsim 99\,\%$

opt-out: Ausreißertest nach Grubbs

$$G_i = \frac{|x_i - M_X|}{S_X}$$

- $G_i > G_{\text{crit},\,\alpha} \quad \Rightarrow \quad x_i$ ist Ausreißer
- Werte für $G_{\text{crit},\,\alpha}$ siehe Tabelle.

Mathematica in einer Nussschale

- Vordefinierte Namen immer in CamelCase (z.B. `ListPlot`).
- Funktionsargumente in eckigen Klammern (z.B. `Cos[x]`).
- Listen in geschwungenen Klammern (z.B. `l = {a, b, c}`).
- Gruppierung mit runden Klammern (z.B. `a / (b + c)`).
- Optionale Argumente mit Pfeil (z.B. `NIntegrate[Sin[x], {x, 0, π}, Method -> "Trapezoidal"]`).
- Sonderzeichen mit Esc ⟨*Name*⟩ Esc.
- Definieren von Funktionen: `f[x_, y_] := x^2 + y^2`

Operation	konventionelle Notation	Mathematica Input
Grundrechnungsarten	$+,\ -,\ \cdot,\ /$	`+, -, *, /`
Funktionen	$\sqrt{x},\ \cos(\phi)$	`Sqrt[x]`, `Cos[`ϕ`]`
Definition von Listen	$\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots)$	`x = {x1, x2, ...}`
	$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$	`A = {{a11, a12}, {a21, a22}}`
Zugriff auf Listen	x_i	`x[[i]]`
	A_{ij}	`A[[i]][[j]]`
Vektorrechnen	$\lambda\vec{r},\ \vec{a}\cdot\vec{b}$	λ `r, a . b`

Übung I: Mittelwert und Standardabweichung — Versuch A 5

Programm: **Mathematica** — Dauer: 10 Min.

Wasser $\leftrightarrow$ Iod $\leftrightarrow$ Ether

$$I_2 + 2\,S_2O_3^{2-} \longrightarrow 2\,I^- + S_4O_6^{2-}$$

$3 \times 2 \times 5$ Titrationen:

`wasser1.dat`	`ether1.dat`	(0.1 g Iod)
`wasser2.dat`	`ether2.dat`	(0.2 g Iod)
`wasser3.dat`	`ether3.dat`	(0.4 g Iod)

wird fortgesetzt...

Übung I: Mittelwert und Standardabweichung — Versuch A 5

Programm: **Mathematica** — Dauer: 10 Min.

```
(* vorher speichern! *)
SetDirectory[NotebookDirectory[]]
w1 = Flatten[Import["wasser1.dat", "Data"]];
e1 = Flatten[Import["ether1.dat", "Data"]];
...
w1mean = Mean[w1]
w1stdev = StandardDeviation[w1]
...
```

Fehlerfortpflanzung

Physikalische Größe U bestimmen über $U = f(\vec{x})$ und Messgrößen $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Def.: $\vec{x}_0 = (M_{x_i})_{i=1\ldots n}$

$$\Delta U \approx \Delta\vec{x} \cdot \nabla f(\vec{x}_0)$$

$$|\Delta U| \approx \sqrt{(\Delta\vec{x} \cdot \nabla f(\vec{x}_0))^2}$$

$$= \sqrt{\left(\sum_{i=1}^{n} \vec{e}_i \cdot \Delta\vec{x} \quad \vec{e}_i \cdot \nabla f(\vec{x}_0)\right)^2}$$

$$= \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(\Delta x_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(\vec{x}_0)\right)^2} \qquad \text{(falls } \vec{e}_{ij} \text{ alle orthogonal!)}$$

$$|\Delta U| = |\sum_{i=1}^{n} \Delta x_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(\vec{x}_0)| \leq \sum_{i=1}^{n} |\Delta x_i \frac{\partial f}{\partial x_i}(\vec{x}_0)| \quad \text{(Minkowski Ungleichung)}$$

Fehler des Mittelwerts bei wiederholter ($\Delta X_i = \Delta X_{\text{sgl}} = \textit{const.}$) Messung

$$M_X = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \qquad \frac{\partial}{\partial X_i} M_X = \frac{1}{n}$$

$$\Delta M_X = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\Delta X_i \frac{\partial}{\partial X_i} M_x\right)^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\Delta X_{\text{sgl}}}{n}\right)^2}$$

$$= \Delta X_{\text{sgl}} \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{n^2}} = \frac{\Delta X_{\text{sgl}}}{\sqrt{n}}$$

Übung II: Fehlerfortpflanzung — Versuch A 5

Programm: **Mathematica** — Dauer: 10 Min.

```
(* Gleiches Notebook wie zuvor. *)
VWasser = 0.2;    (* l *)
VEther  = 0.005;  (* l *)

k[vw1_, ve1_, vw2_, ve2_, vw3_, ve3_] :=
    (VWasser / VEther) *
    Mean[{ve1/vw1, ve2/vw2, ve3/vw3}];

k[w1mean, e1mean, w2mean, e2mean, w3mean, e3mean]

Δk = Sqrt[
    (w1stdev * D[k[vw1, ve1, vw2, ve2, vw3, ve3], vw1]
    /. {vw1 -> w1mean, ve1 -> e1mean, vw2 -> w2mean,
        ve2 -> e2mean, vw3 -> w3mean, ve3 -> e3mean})^2
    +...
]
```

Regression

- Messdaten: $(x_1, U_1), (x_2, U_2), \ldots, (x_n, U_n)$
- Theorie („Modell“): $U(x) = f_{\vec{\alpha}}(x)$
- Residuum ε: $U(x) = f_{\vec{\alpha}}(x) + \varepsilon(x)$
- Lineare Modelle: $f_{\vec{\alpha}}(\vec{x}) = \sum_i \alpha_i \phi_i(\vec{x})$

Lineare Modelle

Stützvektor $\vec{U} = (U_1, U_2, \ldots, U_n)^T$

Design-Matrix
$$X = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \cdots & \phi_p(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \cdots & \phi_p(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \phi_2(x_n) & \cdots & \phi_p(x_n) \end{pmatrix}$$

Matrixgleichung: $\vec{U} = X\vec{\alpha} + \vec{\varepsilon}$ bzw. $\vec{\varepsilon} = \vec{U} - X\vec{\alpha}$

Aufgabe: $\|\vec{\varepsilon}\| \to \min.$ d.h. $\nabla_{\vec{\alpha}}\vec{\varepsilon} = \vec{0} \xrightarrow{\text{lösen}} \vec{\alpha}$

Mit Gewichtung: $\|\vec{\gamma}^D\,\vec{\varepsilon}\| \to \min.$ Gewichte: $\gamma_i = 1/\Delta U_i$

Übung III: Lineare Regression — Versuch A 54

Programm: **Mathematica** — Dauer: 5 Min.

Bestimmung des Planck'schen Wirkungsquantums

$$\gamma + \mathrm{M} \longrightarrow \mathrm{M}^+ + \mathrm{e}^- \qquad \text{(Photoeffekt)}$$

$$h\nu = \Phi + E_{\mathrm{kin}} \qquad \text{(Energieerhalt)}$$

$$Q_e U_{\mathrm{sperr}} = E_{\mathrm{kin}}$$

$$\mathrm{d}U_{\mathrm{sperr}} \,/\, \mathrm{d}\nu = h \,/\, Q_e$$

wird fortgesetzt...

Übung III: Lineare Regression — Versuch A 54

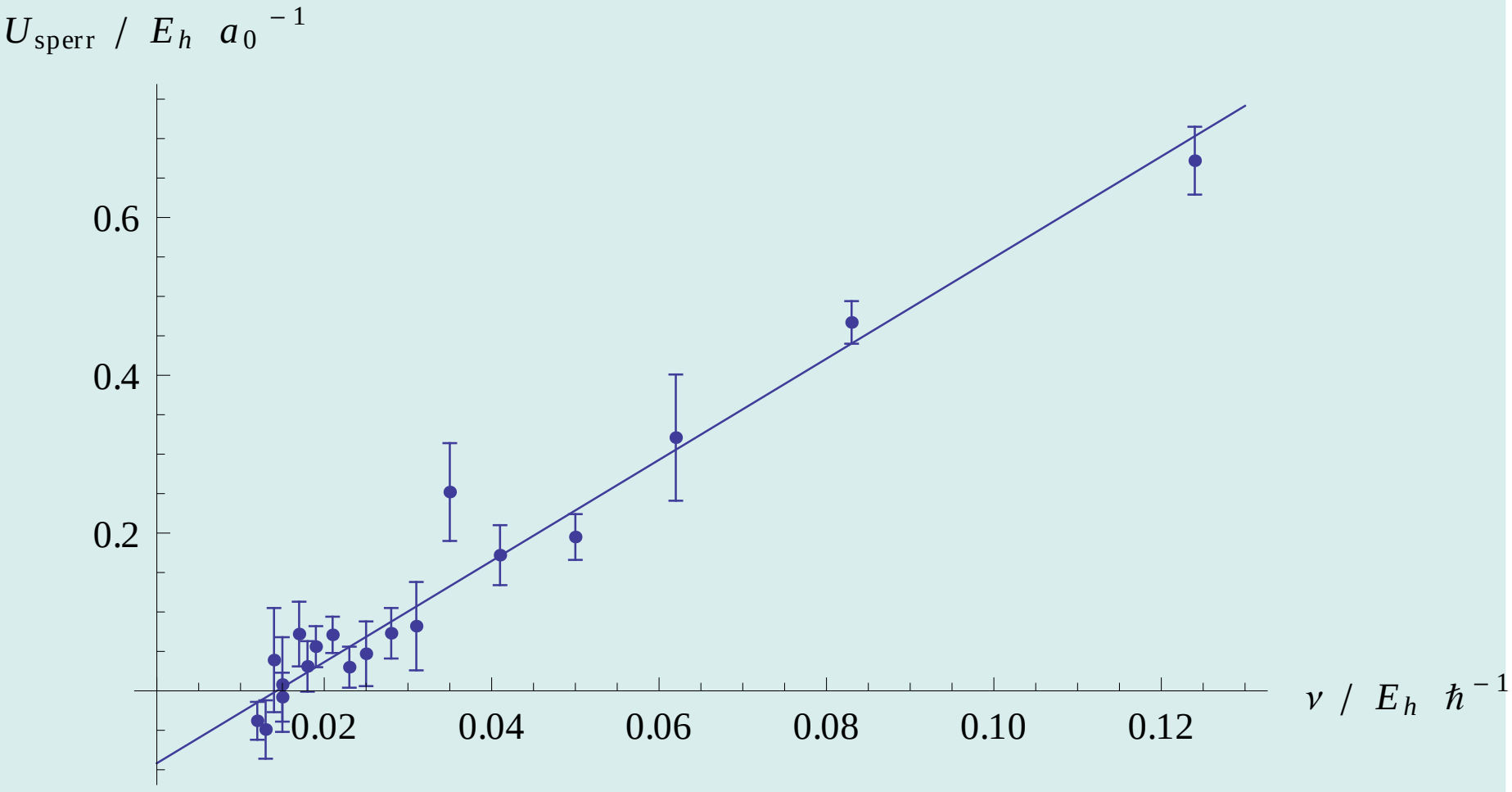
Programm: **Mathematica** — Dauer: 5 Min.

```
data = Import["photoeffekt.dat", "Data"];
data = Delete[data, 1]; (* 1. Zeile löschen. *)
xydata = Transpose[Delete[Transpose[data], 3]];
yerrdata = Transpose[data][[3]];
fit = LinearModelFit[xydata, x, x,
    Weights -> 1/yerrdata]
fit["RSquared"]
fit["ParameterConfidenceIntervals"]
Needs["ErrorBarPlots`"] (* Gravis nicht vergessen! *)
p1 = ErrorListPlot[data];
p2 = Plot[fit[x], x, 0, 0.13];
Show[{p1, p2}]
```

wird fortgesetzt...

Übung III: Lineare Regression — Versuch A 54

Programm: **Mathematica** — Dauer: 5 Min.



Übung IV: Lineare Regression — Versuch A 54

Programm: **gnuplot** — Dauer: 5 Min.

```
f(x) = A + B * x
A = 1.0
B = 1.0
fit f(x) "photoeffekt.dat" using 1:2:3 via A, B
set xlabel "Frequenz / Eh hb^-1"
set ylabel "Sperrspannung / Eh a0^-1"
plot "photoeffekt.dat" with yerrorbars title "Messung",
    f(x) with lines title "Lineare Regression"
```

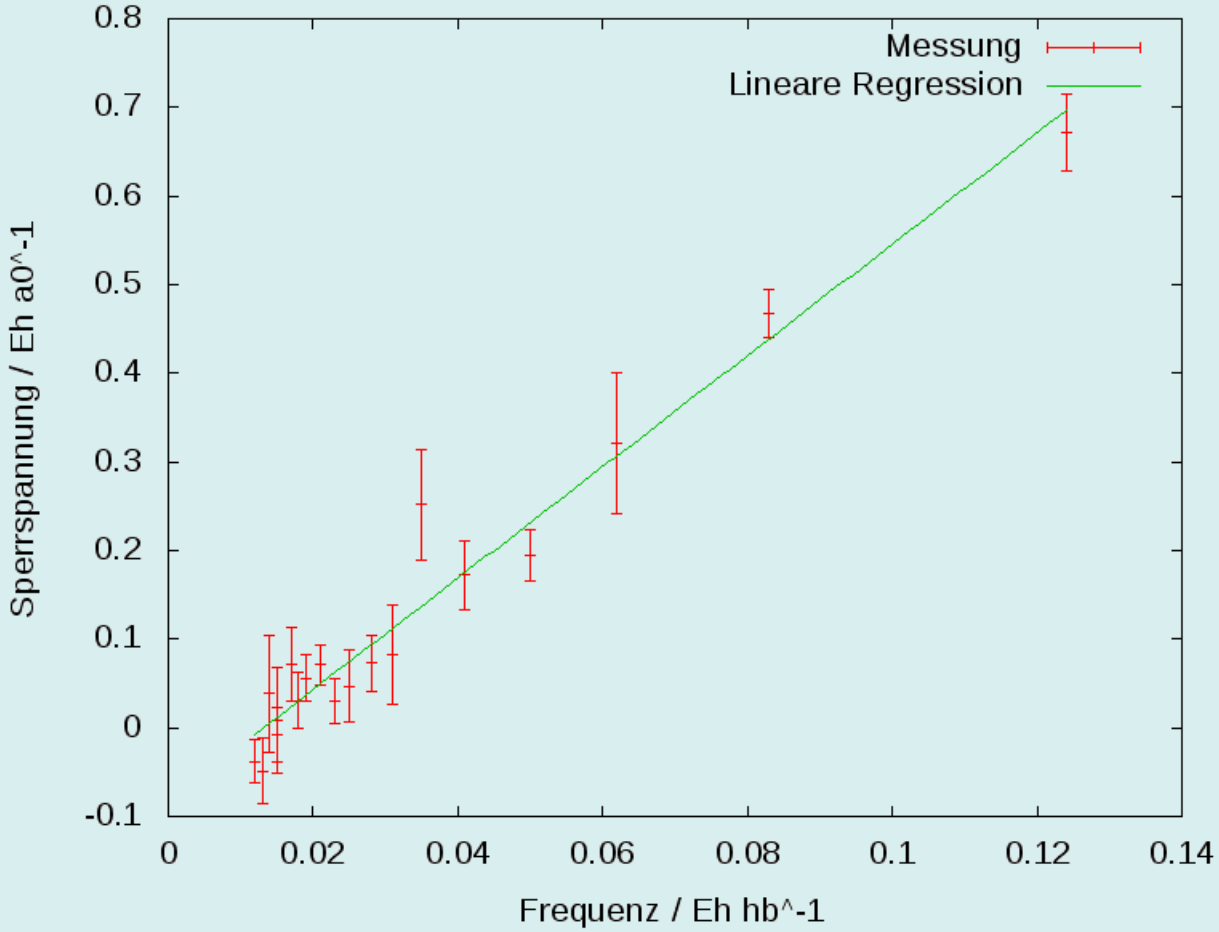
wird fortgesetzt...

Übung IV: Lineare Regression

Versuch A 54

Programm: **gnuplot**

Dauer: 5 Min.



opt-out: Nichtlineare Modelle

- Modell enthält die Fit-Parameter α_i in beliebiger (nicht linearer) Art und Weise z.B. $\sin(\alpha x)$.
- Im Allgemeinen nur iterativ lösbar.
- Konvergenz kann problematisch sein (Nebenminima).
- Datensatz und Fit optisch prüfen!
- Vernünftige Anfangswerte für die Fit-Parameter wählen.

Übung V: Nichtlineare Regression

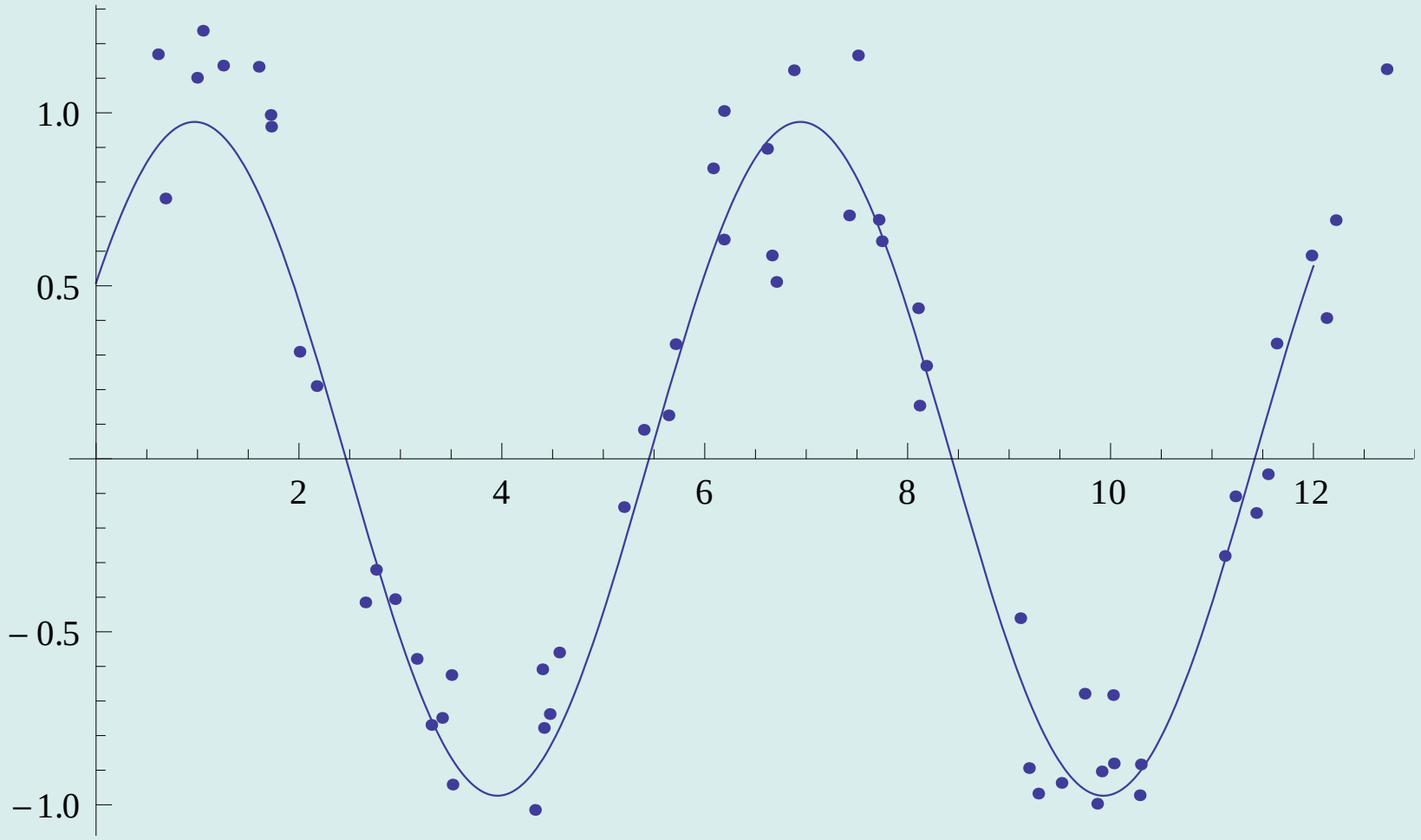
Programm: **Mathematica** Dauer: 5 Min.

```
SetDirectory[NotebookDirectory[]]
data = Import["nonlinear.dat", "Data"];
p1 = ListPlot[data]
fit = NonlinearModelFit[data, A Sin[ω (t + ϕ)],
    {A, ω, ϕ}, t]
p2 = Plot[fit[t], {t, 0, 12}];
plot = Show[{p1, p2}]
```

wird fortgesetzt...

Übung V: Nichtlineare Regression

Programm: **Mathematica** Dauer: 5 Min.



Übung VI: Nichtineare Regression

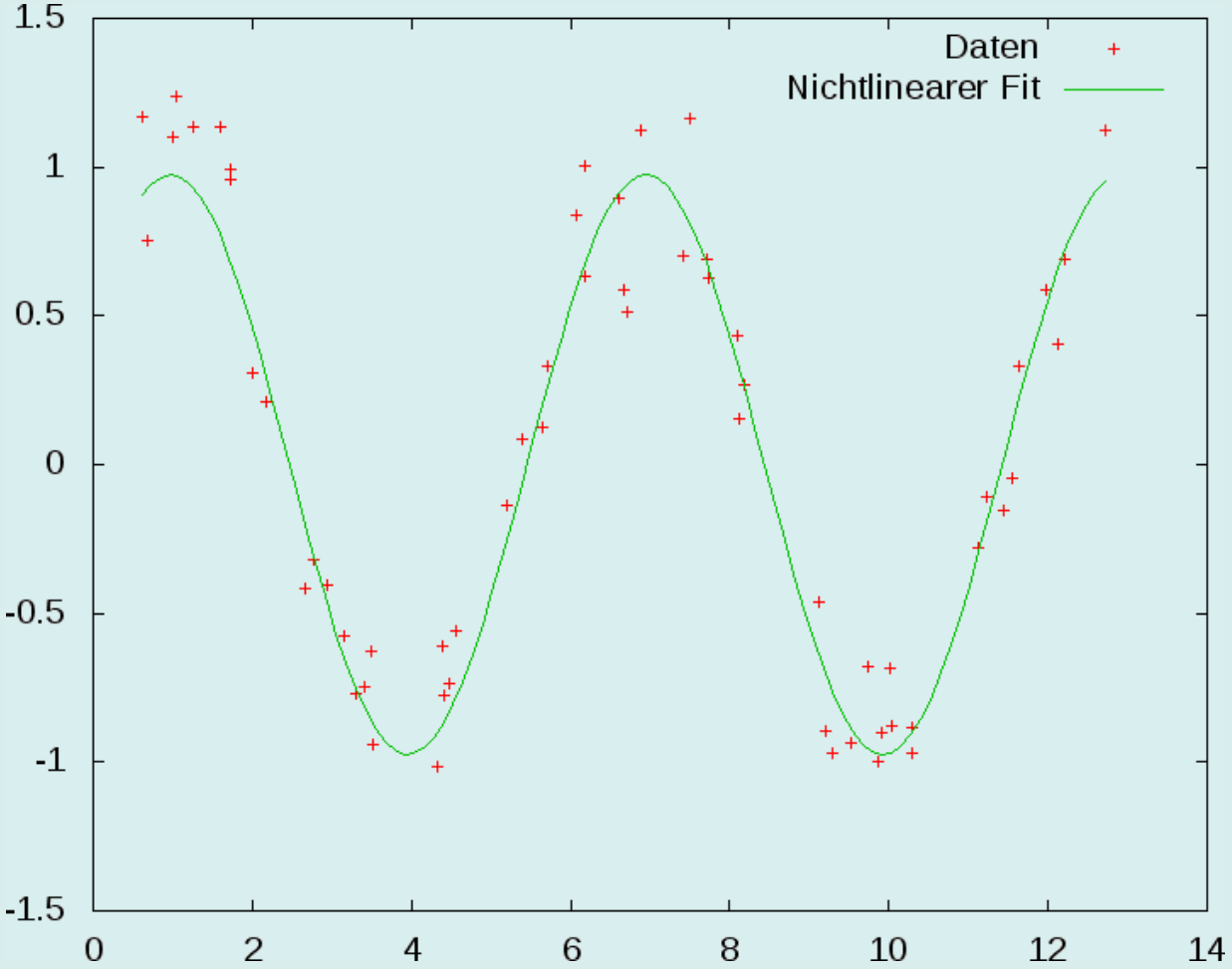
Programm: **gnuplot** Dauer: 5 Min.

```
plot "./nonlinear.dat"
f(x) = A * sin(B * x + C)
A = 1.0
B = 1.0
C = 0.5
fit f(x) "./nonlinear.dat" via A, B, C
plot "./nonlinear.dat" title "Daten",
    f(x) title "Nichtlinearer Fit"
```

wird fortgesetzt...

Übung VI: Nichtineare Regression

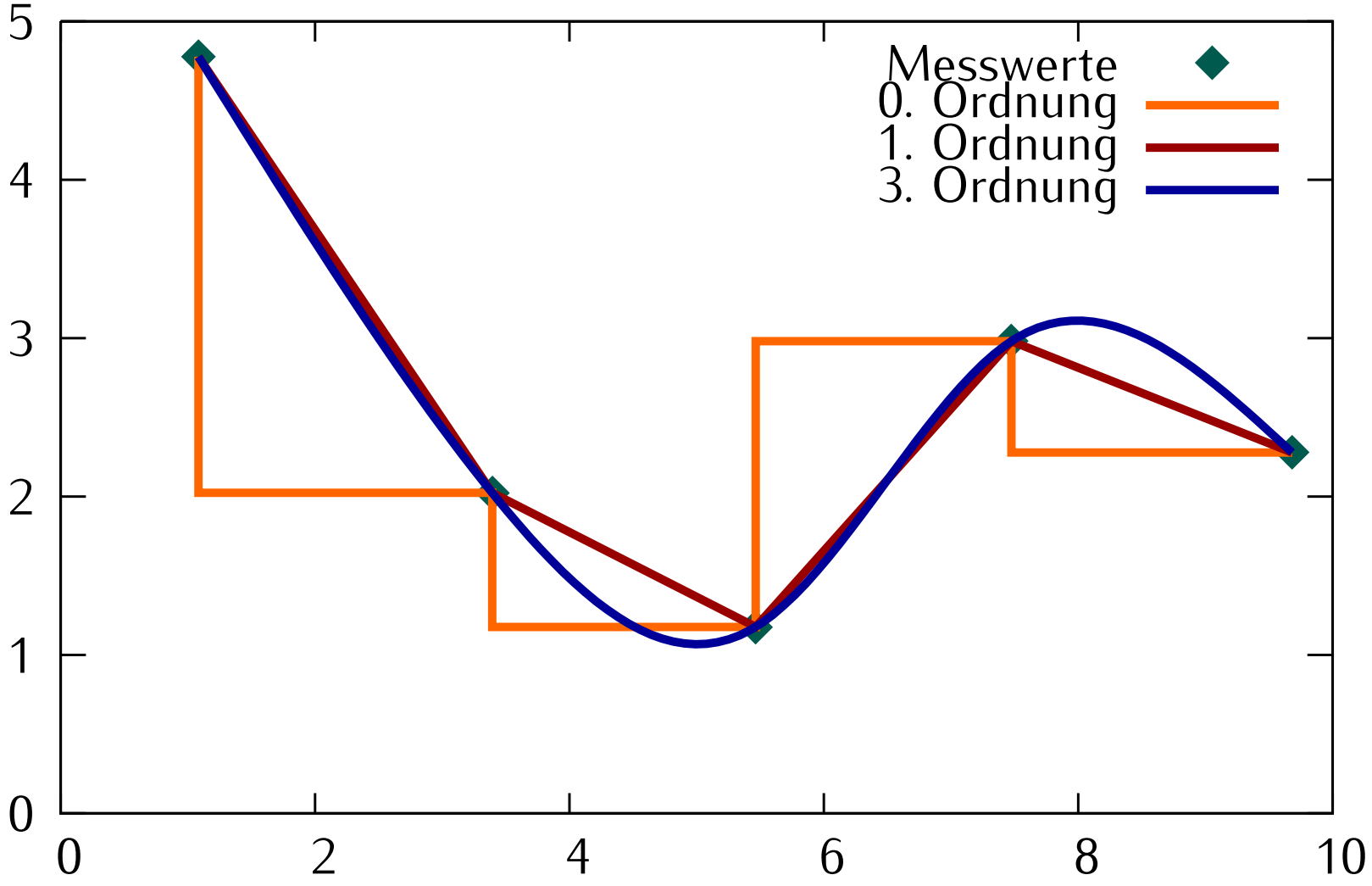
Programm: **gnuplot** Dauer: 5 Min.



Numerische Integration und Differentiation empirischer Datensätze

- Infinitesimalrechnung a priori nur für analytische Funktionen definiert.
- Analytischer Zusammenhang bekannt $\Rightarrow$ Fitten und integrieren / differenzieren.
- Geometrische Interpretation:
  - Integral $\widehat{=}$ Fläche unter der Kurve
  - Ableitung $\widehat{=}$ Steigung der Kurve
- Verwendung von Interpolationsfunktionen für Integrale.
- Gute Alternative: Gleitende Durchschnitte
- Zum Ableiten unbekannter Funktionen (problematisch) besser Polynome niedrigen Grades fitten.

Interpolationsfunktionen



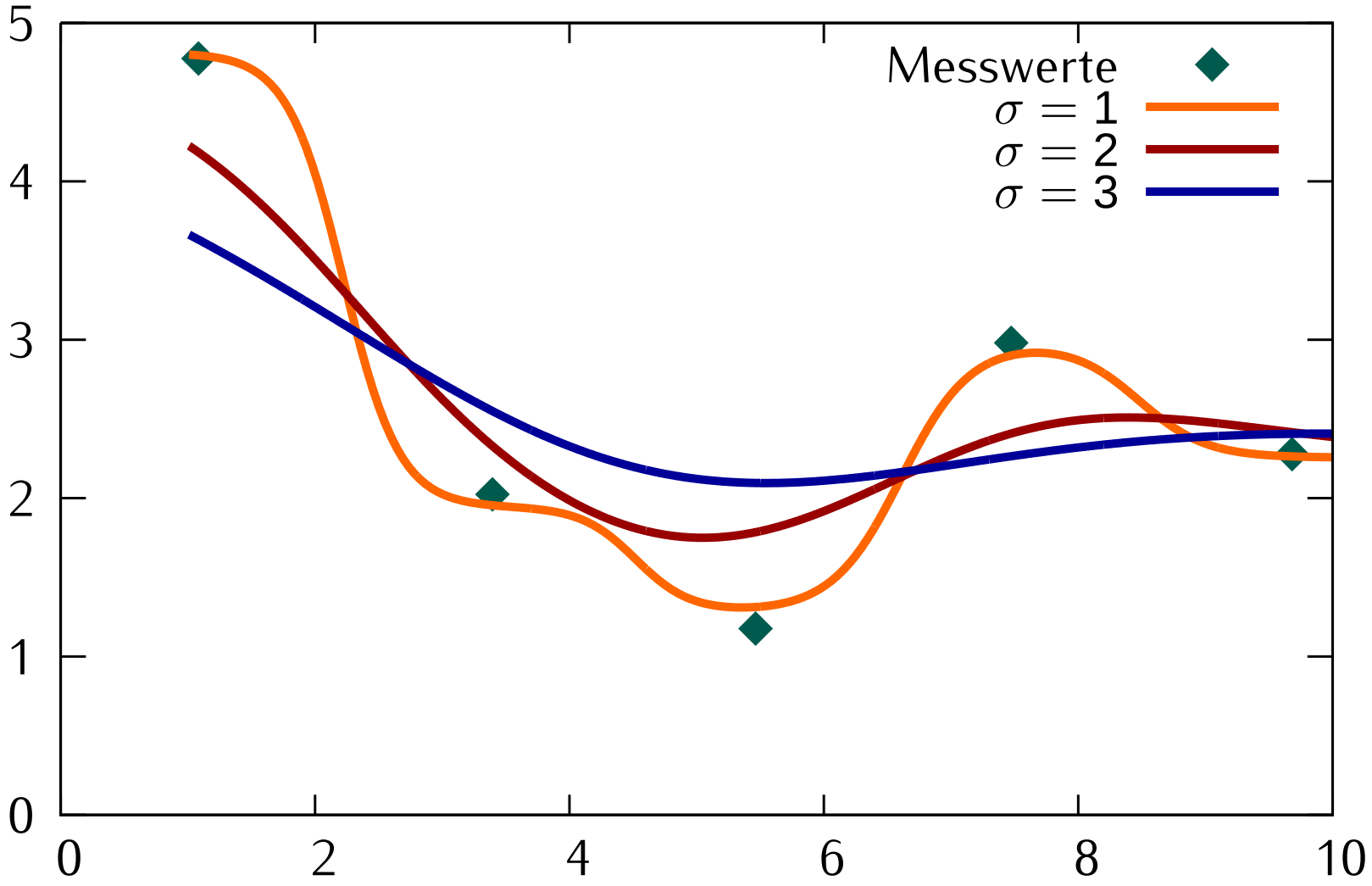
Gleitender Durchschnitt

- Mittelwert über alle Messdaten.
- Gewichtung umso stärker, je näher der Messwert an der betrachteten Stelle liegt.
- Gewünschtes Maß an Glättung durch Wahl des Parameters σ.

$$f(x) = \frac{\sum_i \gamma_i y_i}{\sum_i \gamma_i}$$

$$\gamma_i = \exp\left(-\left(\frac{x_i - x}{\sigma}\right)^2\right)$$

Gleitender Durchschnitt



Integration

Übung VII: Integration einer Teilchendichtefunktion Versuch A 53

Programm: **Mathematica** Dauer: 5 Min.

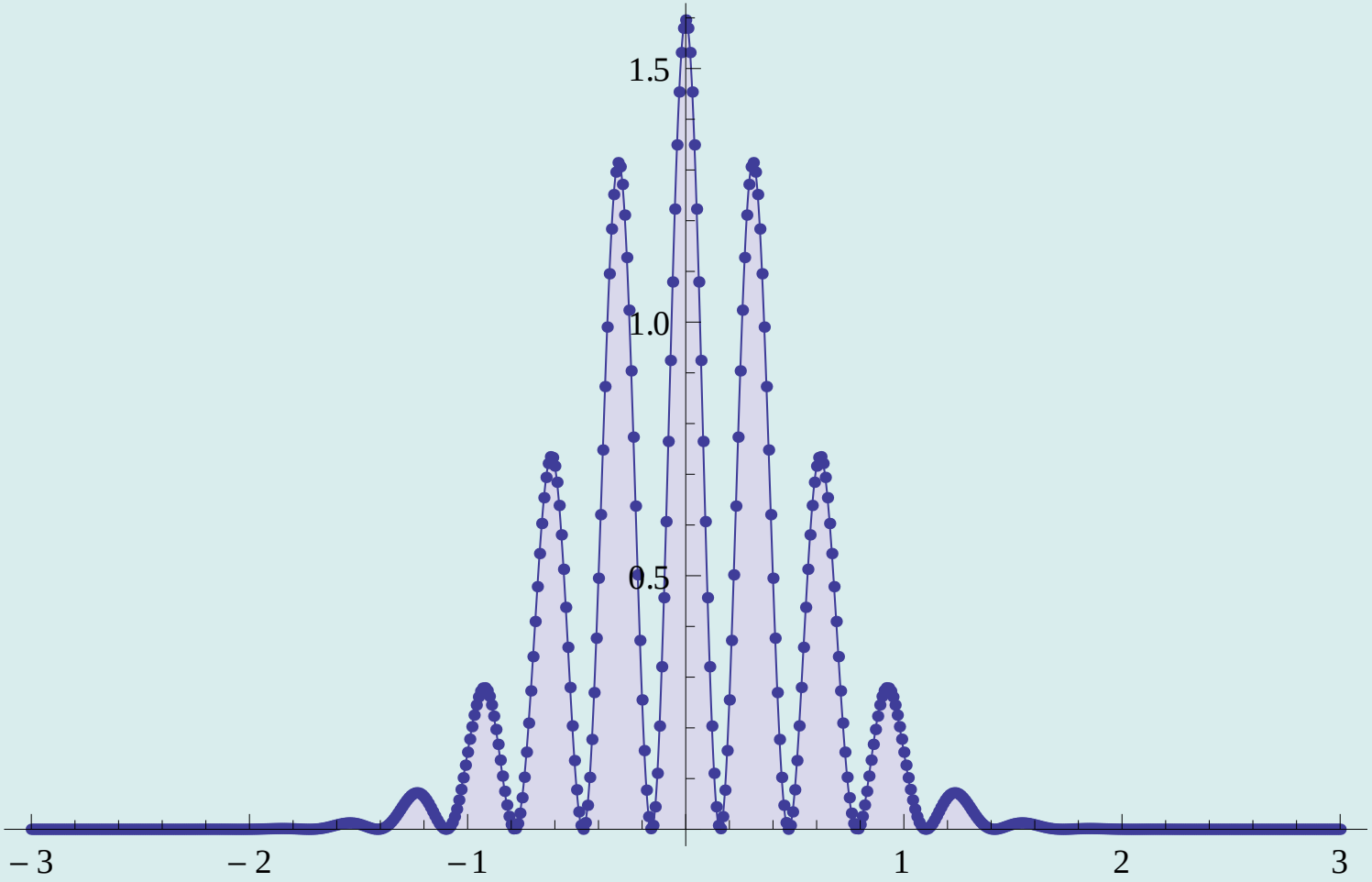
```
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
data = Import["pdf.dat", "Data"];
pdf[x_] := Interpolation[data][x]
p1 = ListPlot[data, PlotRange -> Full];
p2 = Plot[pdf[x], {x, -3, 3}, PlotRange -> Full];
Show[{p1, p2}]

NIntegrate[pdf[x], {x, -3, 3}]
```

wird fortgesetzt...

Übung VII: Integration einer Teilchendichtefunktion Versuch A 53

Programm: **Mathematica** Dauer: 5 Min.



opt-in: Differentiation

* gestrichen *

opt-in: Wissenschaftliche Präsentation von Ergebnissen

In der Physik üblich: Standardabweichung auf 2 signifikante Stellen.

$$\left.\begin{array}{rcl} M_U & = & 2.71828183\ldots\,\mathrm{u} \\ S_U & = & 0.00314159\ldots\,\mathrm{u} \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad U = (2.7183 \pm 0.0031)\,\mathrm{u}$$

Alternative Schreibweise („condensed form“): $U = 2.7183(31)\,\mathrm{u}$
(Wird häufig missverstanden!)

Professionell gestaltete Tabellen

Farbe	λ_{max} / nm	HWHM / nm
gelb	415	16
rosa	537	19
blau	634	21
hellblau	747	22

Tabelle 1: Gemessene Absorptionsmaxima der gefärbten Probelösungen mit Breitenparameter (HWHM) der gefitteten CAUCHY Funktionen.

„Publication Quality“-Plots mit gnuplot und LaTeX / PSTricks

Übung VIII: Plotten — Versuch A 54

Programm: gnuplot + LaTeX / PSTricks — Dauer: 15 Min.

In **gnuplot** (Datei `photoeffekt.plt`):

```
set terminal pstricks
set output "plot.tex"
# Fit wie in Übung IV.
# LaTeX Code in label; '\' verdoppeln!
set xlabel "$\\nu~/~E_h\\,\\hbar^{-1}$"
set ylabel "$U_\\text{sperr}~/~E_h\\,a_0^{-1}$"
plot "photoeffekt.dat" with yerrorbars title "Messung",
    f(x) with lines title "Lineare Regression"
```

wird fortgesetzt...

Übung VIII: Plotten

Versuch A 54

Programm: **gnuplot** + LaTeX / **PSTricks**

Dauer: 15 Min.

In LaTeX (Datei `photoeffekt.tex`):

```
\documentclass[a4paper]{article}
\usepackage[T1]{fontenc}
\usepackage[ngerman]{babel}
\usepackage{amsmath}
\usepackage{pstricks}
\begin{document}
    \begin{figure}
        \input{plot.tex}
        \caption{Sperrspannung $U_\text{sperr}$ eines
            K-Targets ...quantum $h = 2\pi\,\hbar$.}
    \end{figure}
\end{document}
```

wird fortgesetzt...

Übung VIII: Plotten — Versuch A 54

Programm: **gnuplot** + **LaTeX** / **PSTricks** — Dauer: 15 Min.

Verarbeiten der beiden soeben erstellten Dokumente mit:

```
gnuplot photoeffekt.plt
latex photoeffekt.tex
dvips photoeffekt.dvi
ps2pdf photoeffekt.ps
```

Man hat jetzt eine Datei `photoeffekt.pdf` mit einem professionellen Diagramm.

wird fortgesetzt...

Übung VIII: Plotten

Versuch A 54

Programm: **gnuplot + LaTeX / PSTricks**

Dauer: 15 Min.

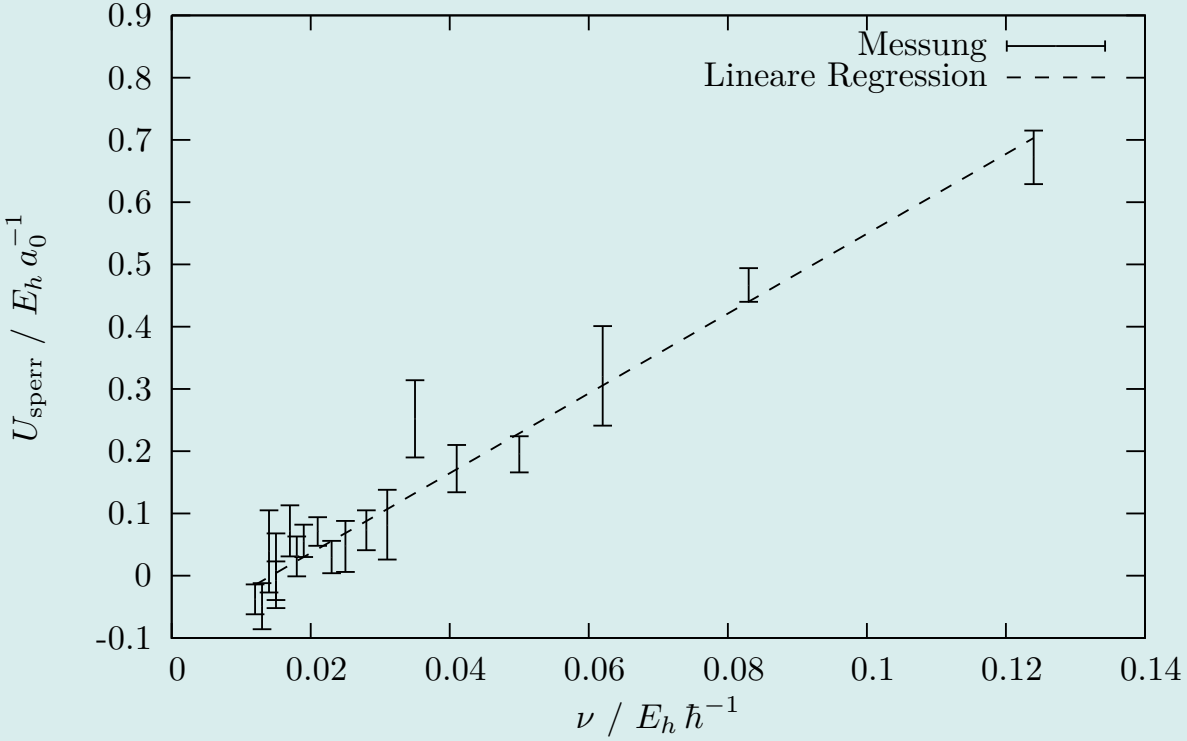


Abbildung 1: Sperrspannung U_{sperr} eines K-Targets bei unterschiedlichen Frequenzen ν. (Achsen in atomaren Einheiten.) Die Steigung von $(6.41 \pm 0.28)\,\hbar$ der Regressionsgerade entspricht im Rahmen der Messungenauigkeit dem PLANCK'schen Wirkungsquantum $h = 2\pi\,\hbar$.

Anmerkungen zum Plotten mit Mathematica

- Per Rechtsklick auf das Objekt können Grafiken in vielen Formaten exportiert werden.
- Alternative:

```
plt = Plot[Sin[x], {x, 0, 2π}]
Export["diagramm.pdf", plt]
```

- „Vernünftige“ Formate sind `PDF`, `EPS`, `SVG` oder ggf. auch `PNG`.
- „Publication Quality“-Plots sind mit **Mathematica** bisweilen nur mit einigem Aufwand zu bewerkstelligen...

Anwendung von **Origin**

- Rechner unter **Windows** starten.
- **Origin** stürzt häufig ab $\Rightarrow$ regelmäßig speichern!
- **Origin 8** ist etwas komfortabler als Version 7, allerdings ist die Anzahl der Lizenzen begrenzt und gespeicherte Dateien sind nicht abwärtskompatibel.
- „Publication Quality“-Plots sind möglich aber schwierig.

Übung IX: Lineare Regression — Versuch A 54

Programm: **Origin** — Dauer: 5 Min.

- Menü: *Datei* → *Import* → *ASCII Import...*
- Ggf. Dezimaltrennzeichen richtig einstellen.
- Spaltentypen auf `X`, `Y` und `yEr`± stellen.
- Bei markierten Daten im Kontextmenü: *Zeichnen* → *Spezielle Punkt-Liniendiagramme* → *Y-Fehlerbalken*
- Mit dem Diagramm als aktivem Fenster:
  Menü: *Analyse* → *Anpassen* → *Fit Linear*
- In **Origin 7** steht das Ergebnis rechts unten, **Origin 8** fügt eine Tabelle ein.
- Anpassen der Datenreihen- und Achsenbeschriftung durch Doppelklick.

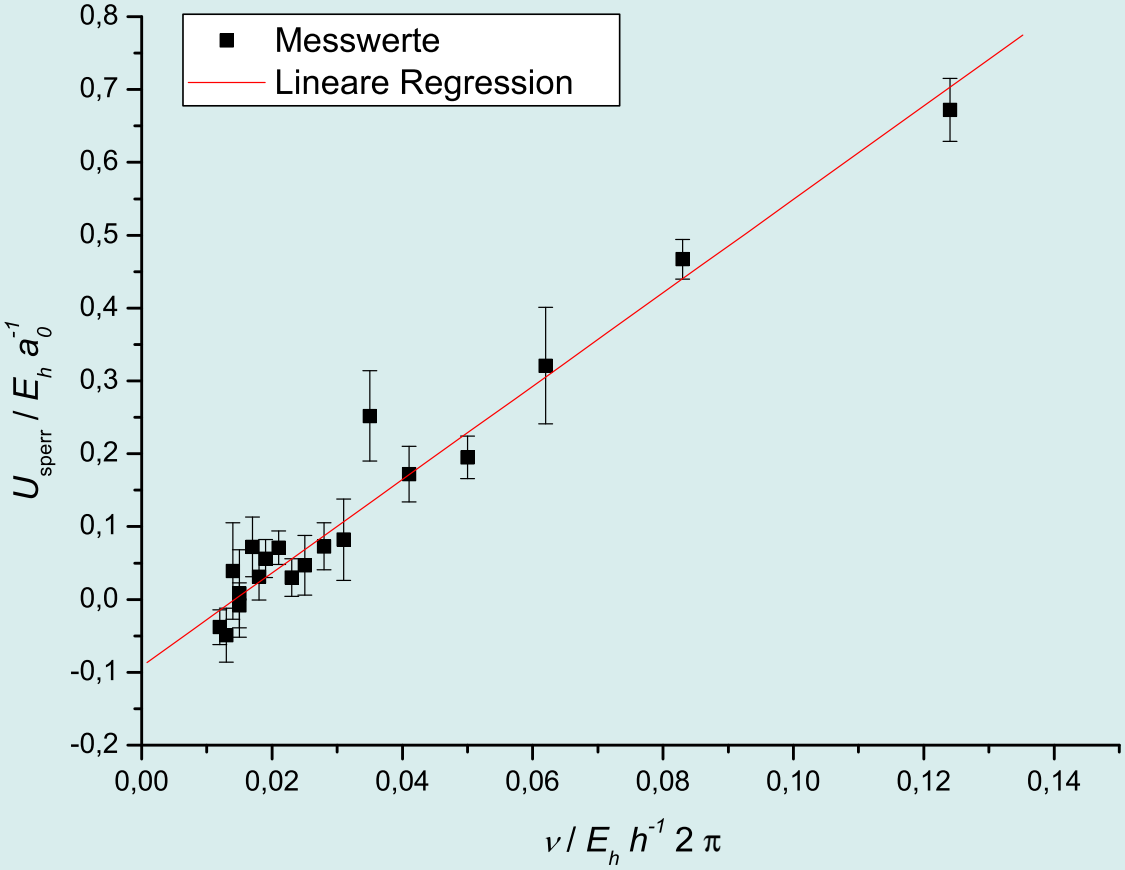
wird fortgesetzt...

Übung IX: Lineare Regression

Versuch A 54

Programm: **Origin**

Dauer: 5 Min.



Übung X: Nichtlineare Regression

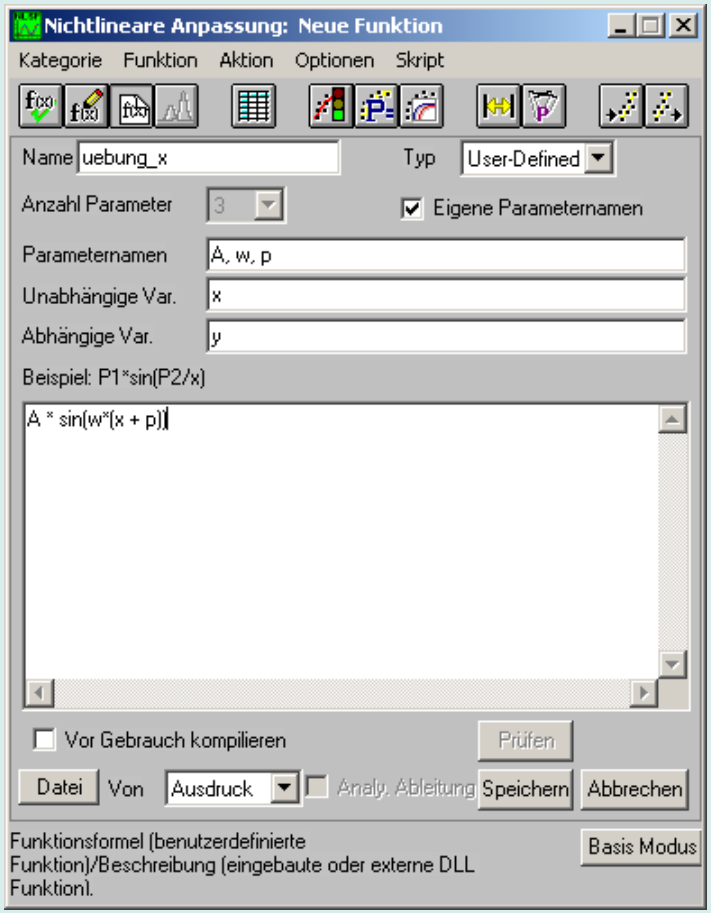
Programm: **Origin** Dauer: 10 Min.

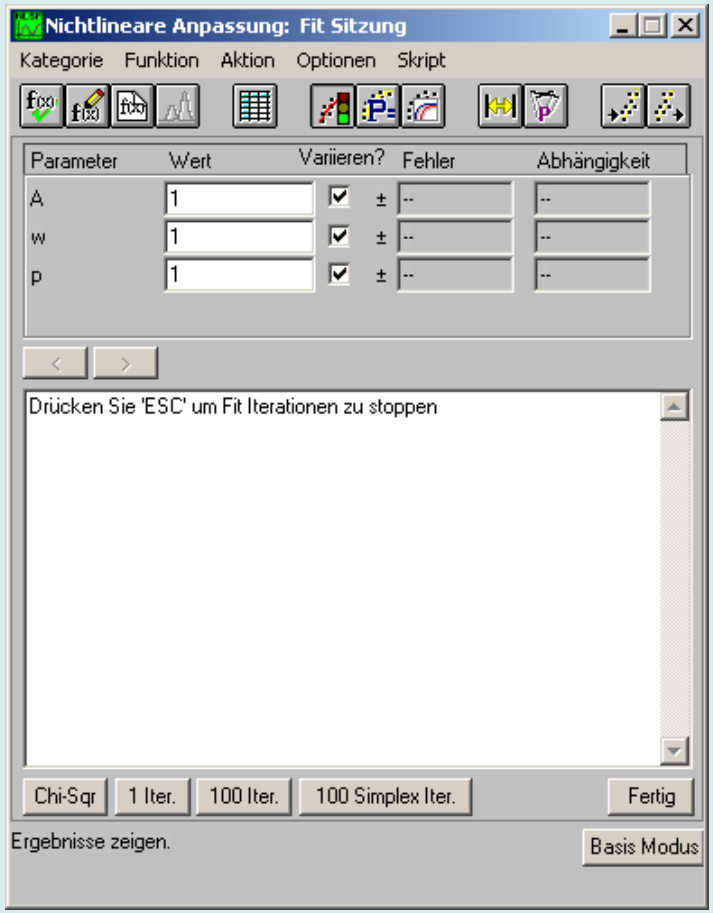
- Importieren und Graphen erstellen wie zuvor (*Punktdiagramm* zwechmäßig).
- *Nichtlinearen Fit Assistenten* mit Ctrl + Y starten und abarbeiten. (Funktioniert häufig nicht wie gewollt.)

wird fortgesetzt...

Übung X: Nichtlineare Regression

Programm: **Origin** Dauer: 10 Min.

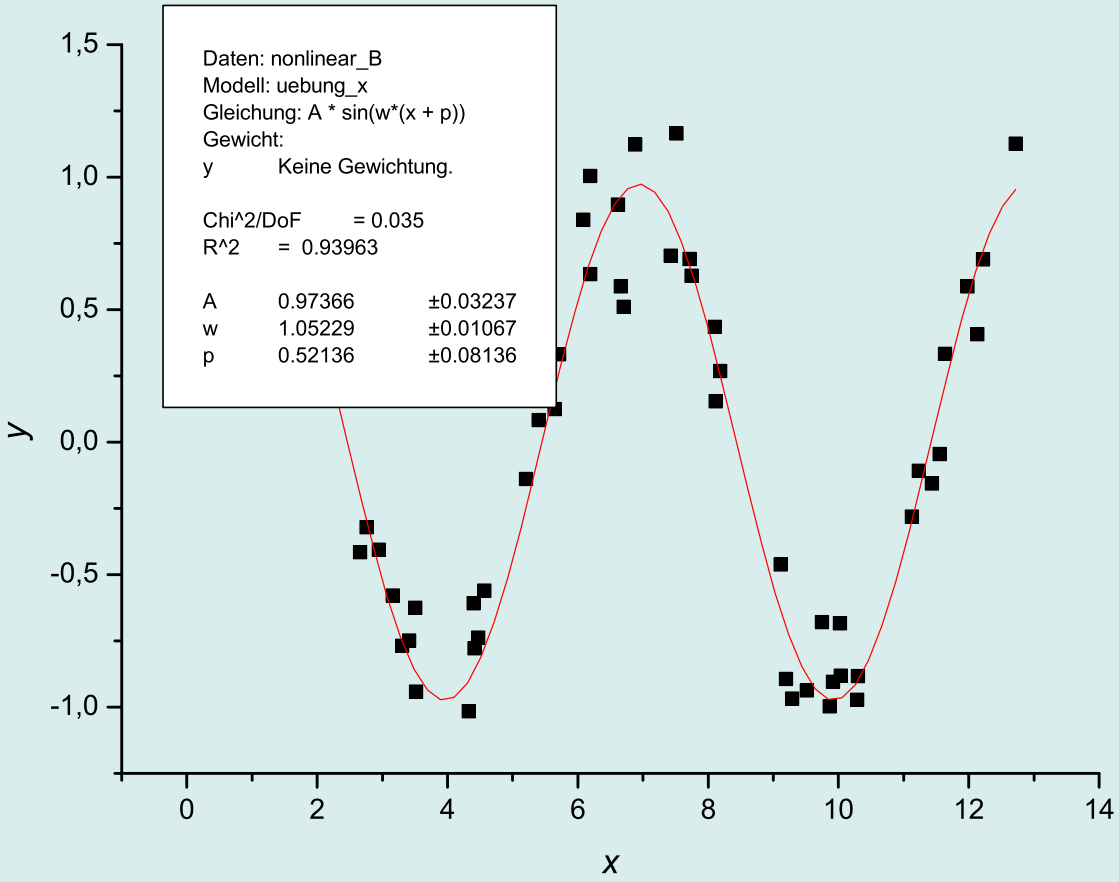




wird fortgesetzt...

Übung X: Nichtlineare Regression

Programm: **Origin** Dauer: 10 Min.



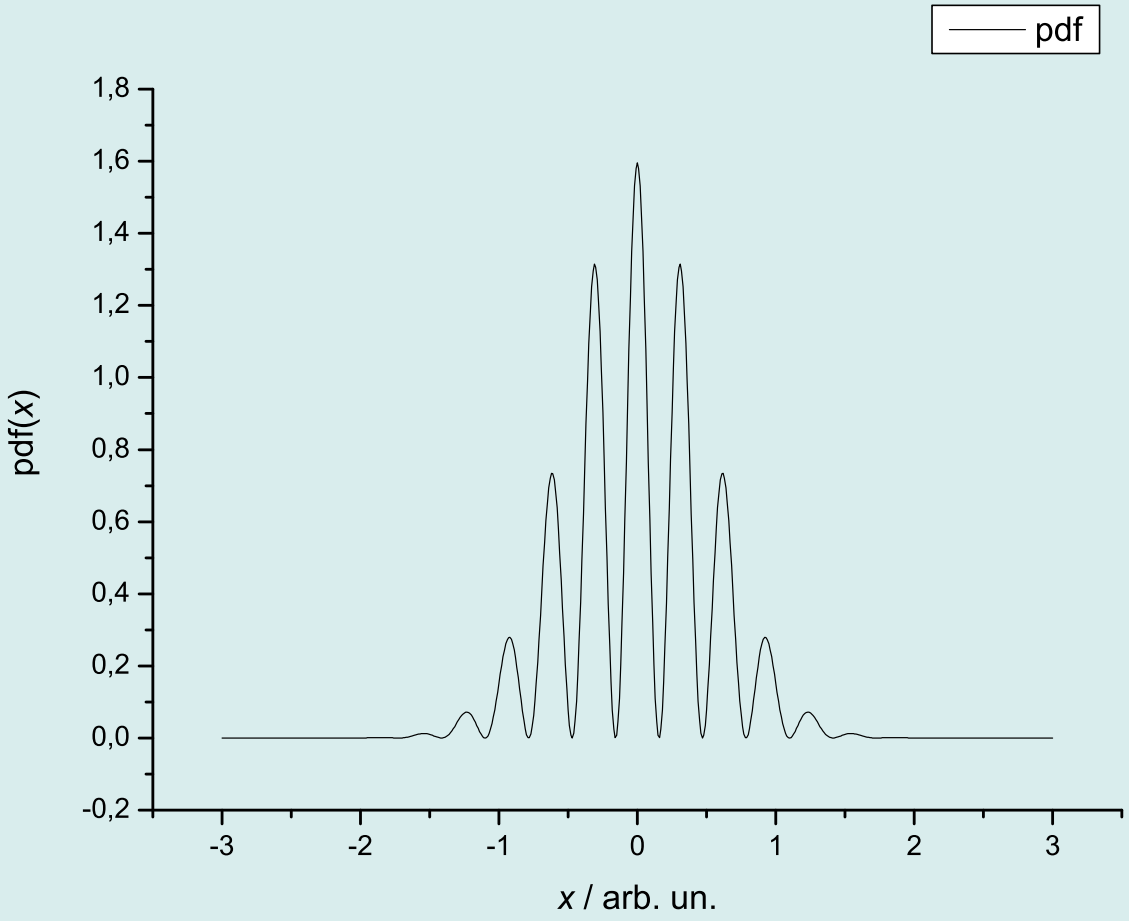
Übung XI: Numerische Integration

Programm: **Origin** Dauer: 5 Min.

- Importieren und Graphen erstellen wie zuvor (*Liniendiagramm* zwechmäßig).
- Im Menü: *Analysis* → *Integrieren*
- In **Origin 7** werden rechts unten die Fläche und einige weitere Informationen angezeigt.

Übung XI: Numerische Integration

Programm: **Origin** Dauer: 5 Min.



Software

	Mathemathica	Origin	gnuplot	LaTeX
Freie Software	nein	nein	ja	ja
Preis	*a)*	*a)*	kostenlos	kostenlos
Bezugsquelle	*a)*	*a)*	*b)*	*c)*
MS Windows	ja	ja	ja	ja
Mac OS	ja	nein	ja	ja
GNU/Linux	ja	nein	ja	ja

a) Für KIT-Studenten kostenlos im Softwareshop des Campus Süd erhältlich: `https://rzunika.asknet.de/`

b) `http://www.gnuplot.info/`

c) `http://www.latex-project.org/`

Unterlagen, Literatur und weitere Hilfe

- Präsentation und Kursunterlagen + Musterlösungen online: `http://klammler.eu/teaching.html`
- Tabelle für Ausreißertest nach Grubbs.
- Johannes Schneider, *Kurzeinfuhrung in gnuplot.* **2004**, `http://www.staff.uni-mainz.de/schneidj/kurse/ss06/gnuplot.pdf`.
- Bei Fragen und Problemen während des Praktikums stehe ich Euch gerne zur Verfügung: `moritz.klammler@gmail.com`
  bzw. im OC-F Labor (Mo: 13^{30}–18^{00}, Di+Do: 8^{00}–17^{00}, Mi: 8^{00}–18^{00}) bzw. in der Cafeteria (Mo–Do: 8^{30}–16^{00}, Fr: 8^{30}–15^{00}) bzw. auf dem Sonnendeck.

Danksagungen

- Der Praktikumsleitung für ihr Entgegenkommen und die gute Kooperation.
- Den Kollegen aus der Fachschaft für ihren Rat und ihre Hilfe.
- Den Mitgliedern der Freie Software Bewegung für ihre großartige Arbeit, ohne die ein Teil der gezeigten Programme nicht existieren würde.
- Euch für die Aufmerksamkeit.

Don't be Afraid

You'll Never Walk Alone