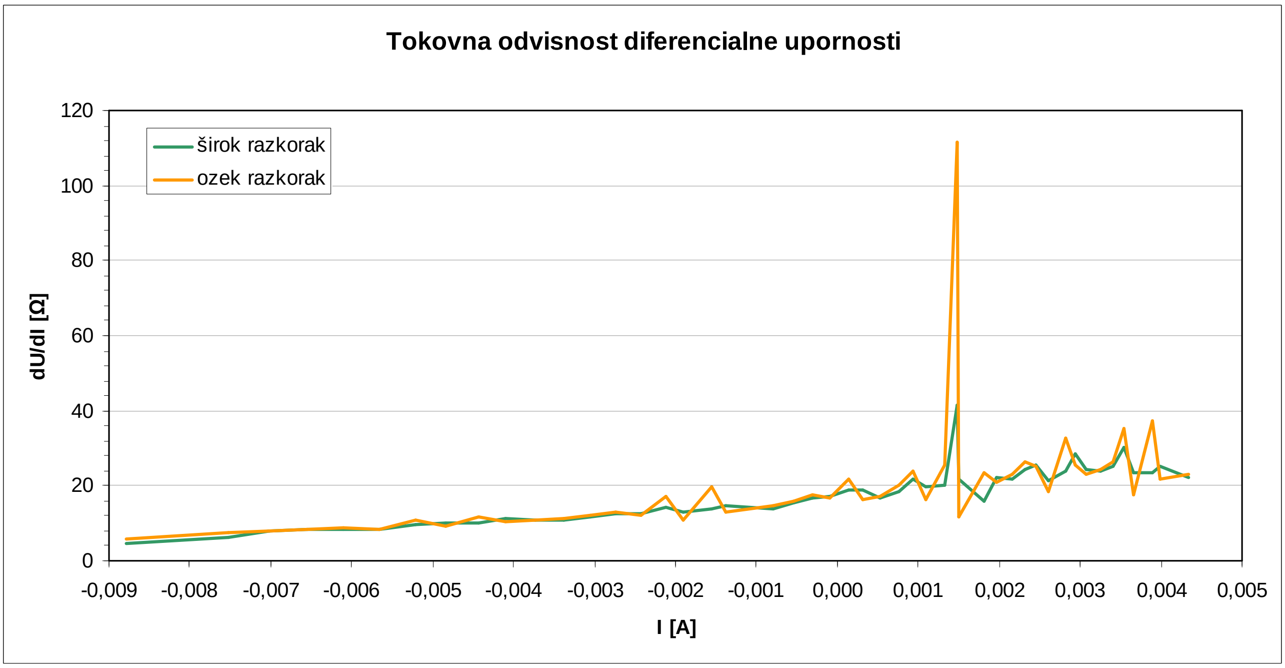
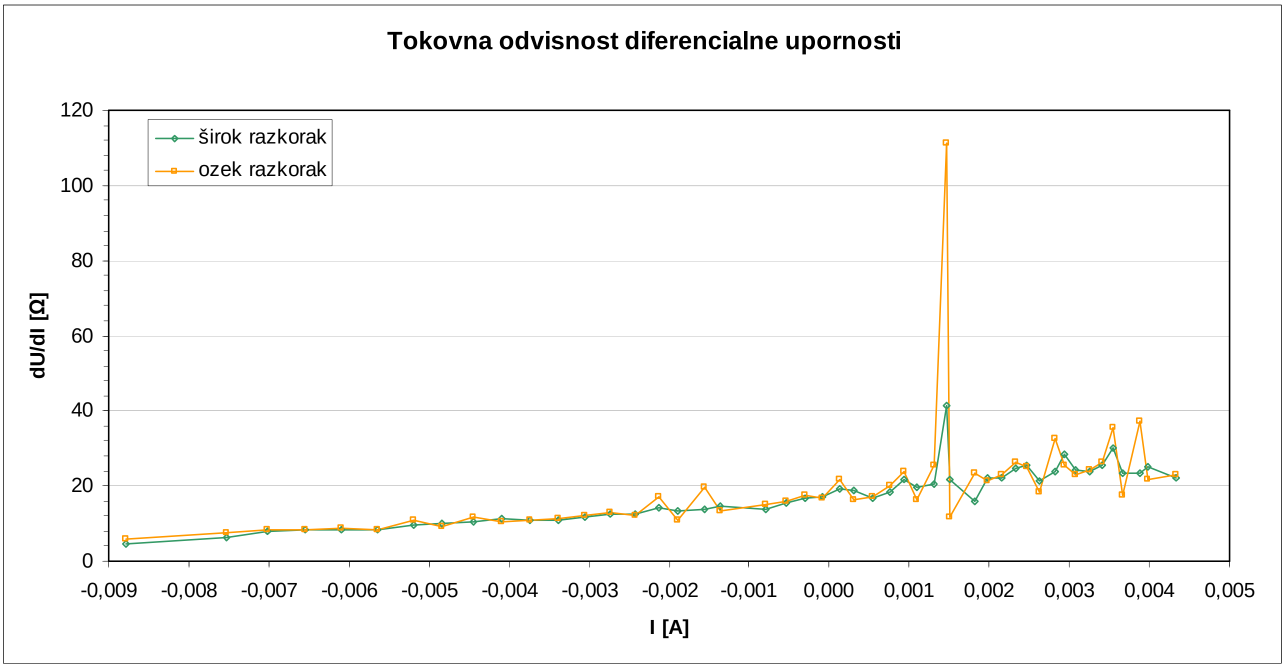
1.) Nariši graf diferencialne upornosti dU/dI za tokovno odvisnost v datoteki "Korozija.dat".



Graf 1.1

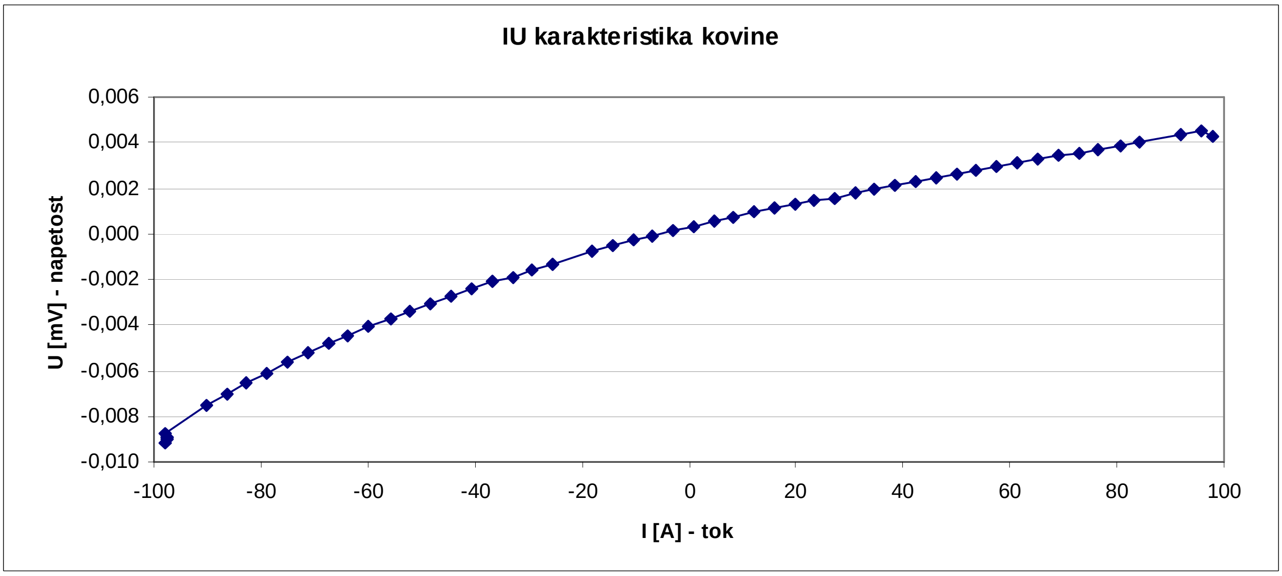


Graf 1.2

Zeleni krivulji predstavljata diferencirane vrednosti po prvi metodi in sicer:
`u[i]: = (y[i+1]-y[i])/(x[i+1]-x[i]),`
oranžni pa širši korak, kar pomeni simetrično aproksimacijo za odvod:
`u[i] = (y[i+1]-y[i-1])/(x[i+1]-x[i-1])`

Podatke obdelane podanih formulah (v Excelu) sem vnesla v graf na dva načina, zato, da se lažje primerja krivulje med seboj. Pri prvem je bolj očitno razlika v zašuljenosti, na drugem grafu pa je nekoliko lažje razbrati odstopanja zaradi različnih korakov pri aproksimaciji odvoda.

Razvidna je zašumljenost (zobatost) grafov v primerjavi z grafom izvirnih količin (graf na naslednji strani za primerjavo), a vseeno je graf večjega razkoraka (širšega intervala sosednjih vrednosti, tj. zelena krivulja) vidno bolj zglajen (prvi graf), torej manj zašumljen.

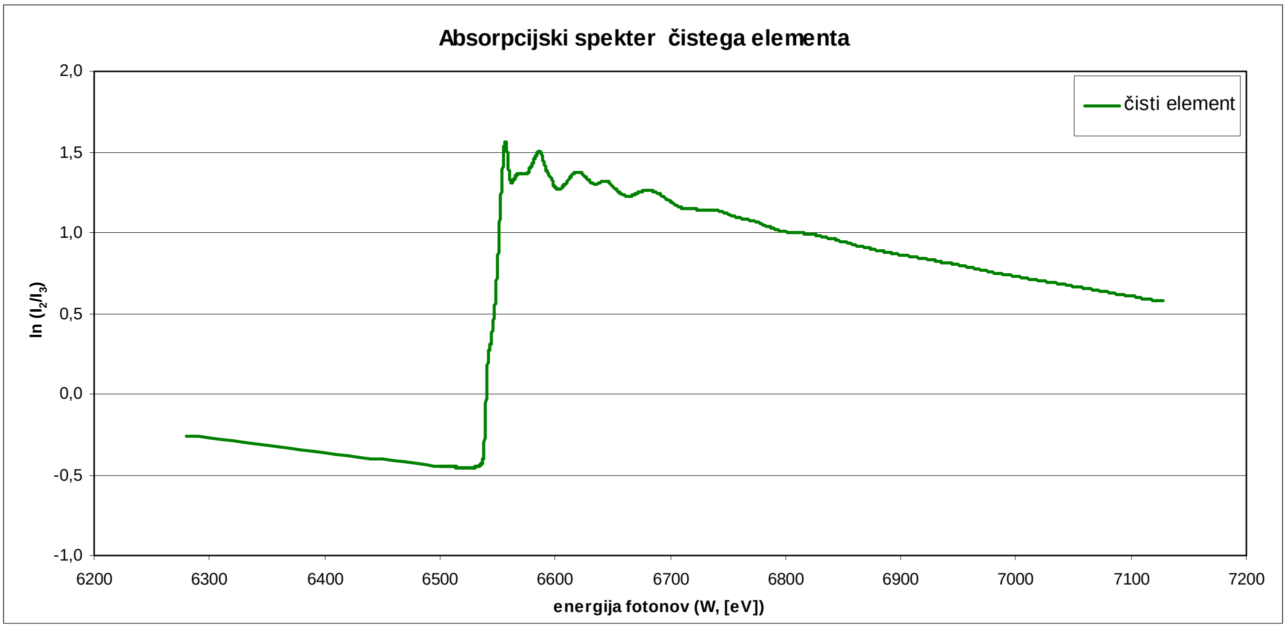


Graf 1.3 Graf izvirnih količin za primerjavo grafu odvodov glede 'zobatosti'.

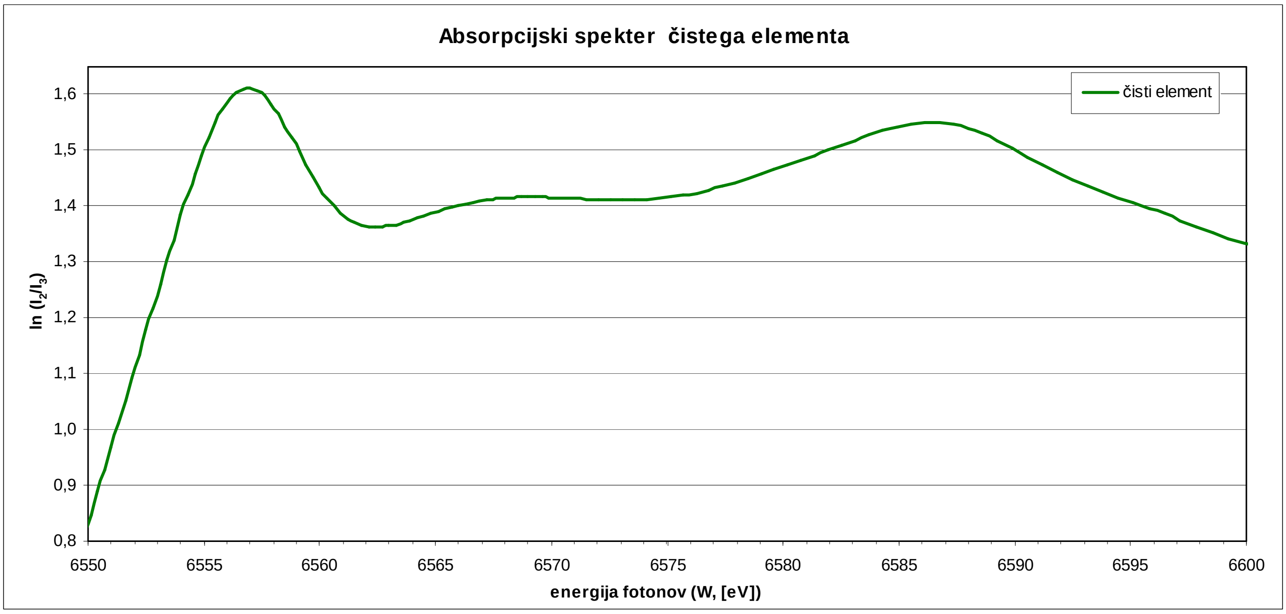
V vseh treh primerih je bil uporabljen isti tip grafov – v Excelu se namreč lahko izbira med različnimi tipi in pod-tipi grafov, ki prikažejo različne vrste podatkov na optimalen način (stolpci, vrstice, točke, povezane točke, zvezno povezane točke, zobato povezane točke, krožni diagrami etc.) – to pa zato, da se res lahko primerja razliko v zobatosti.

Uporabljen je tip XY Scater in sicer najbolj preprost način, ko sosednje točke poveže z ravno črto (zik-zak izgled). Podtip prvega grafa je brez vrisanih posameznih točk, podtip drugih dveh pa še z vrisanimi točkami.

2.) *Za kovine je energija rentgenskega absorpcijskega robu definirana kot energija točke, v kateri ima absorpcijski spekter največjo strmino. Poišči to energijo za kovinski mangan iz spektra "Md29mn_00001.fio" ($ln(I_2/I_3)$ iz naloge 4.3). Zadostuje, da določiš odvod v območju ~20 eV samega robu.*



Graf 2.1

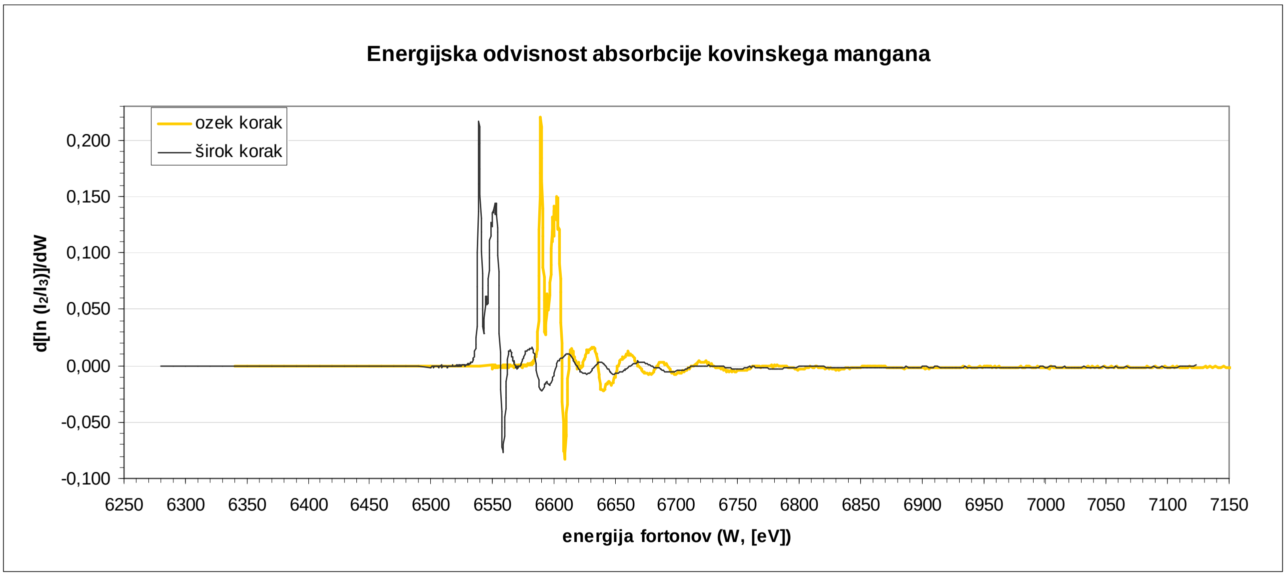


Graf 2.2

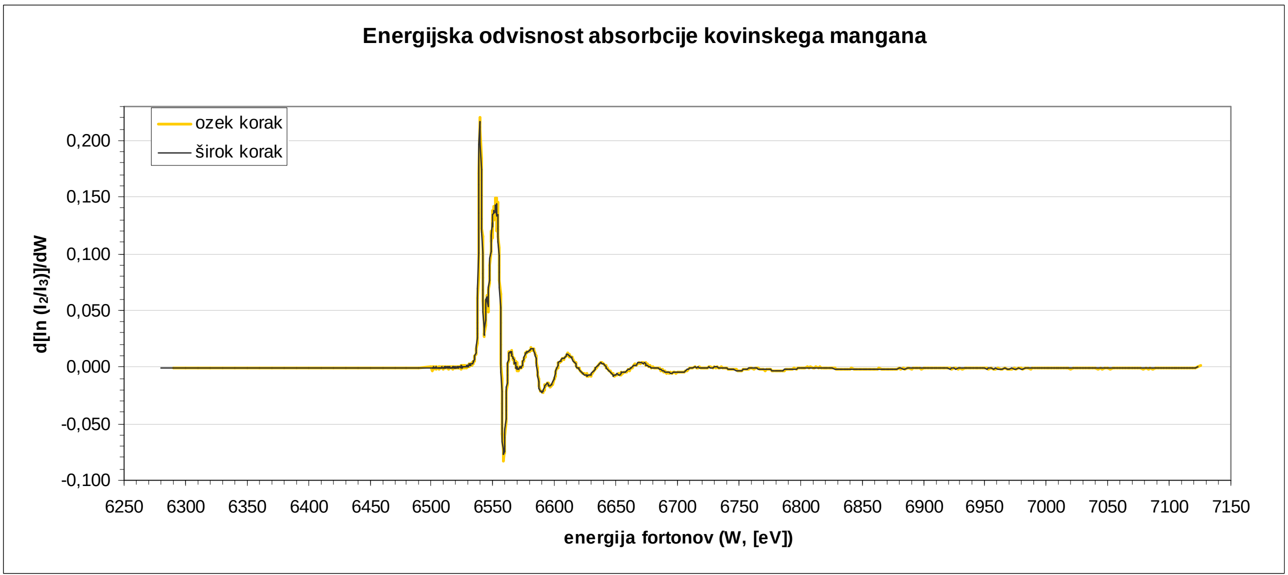
Grafa 2.1 in 2.2 prikazujeta izvirne podatke iz naloge 4.3. prvi za celotno merilno območje, drugi pa približa vrhove, kjer najdemo nastrmejše predele krivulje (dva vrhova v absorbcijskem spektru) in sicer na intervalu 6550 – 6600 eV.

Na naslednji strani sledijo grafi po obdelavi podatkov, torej po aproksimaciji odvodov zgornje krivulje.

Graf 2.3 prikazuje aproksimacijo z ozkim in širokim korakov (metodi kot v prvi nalogi) z zamikom oranžne krivulje za 50 eV po x-osi (v desno), za boljšo preglednost rezultatov. Naslednji graf, 2.4) pa nato prikazuje krivulji pri pravih vrednostih in prinaša podatke o tem kako dobro se krivulji prekrivata.

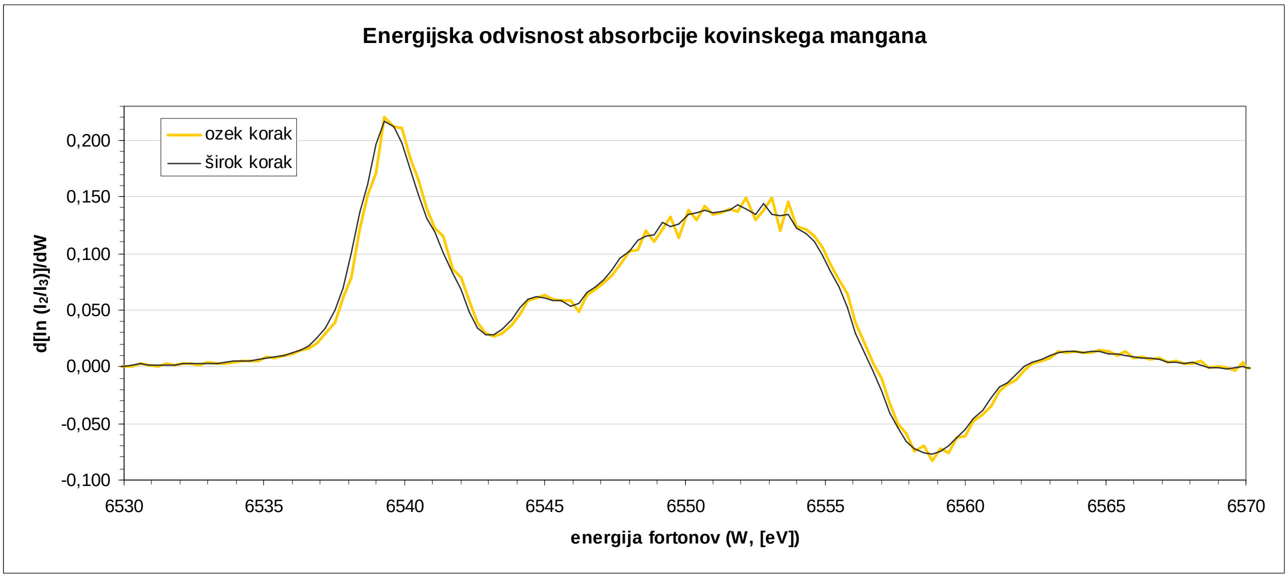


Graf 2.3 – zamik oranžne krivulje za 50 eV v desno, za boljšo preglednost



Graf 2.4 Primerjava prekrivanja in zobatosti krivulj

Sledi še graf, ki bolj podrobno prikazuje območje navečje strmine, tj. kot na grafu 2.2:



Graf 2.5 – Povečava območja največje strmine premice

Odvod funkcije je definiran kot naklonski koeficient tangente na krivuljo v tisti točki. Torej bo odvod največji v tisti točki, kjer je krivulja najbolj strma.

V tej točki na grafu absorbcijskega spektra najdemo **energijo rentgenskega absorbcijskega robu**. Torej iščemo točko kjer je odvod največji:

- pri ozkem koraku je to pri energiji okrog: **6539,297 eV**
- pri širšem koraku pa **6539,604 eV**

3.)V matematiki se namesto naših porazdelitev, ki pomenijo gostoto verjetnosti, kadar jih pravilno normiramo na celotno število ali na celotno mero, dostikrat uporabljajo integralske verjetnosti, ki so definirane z integralom

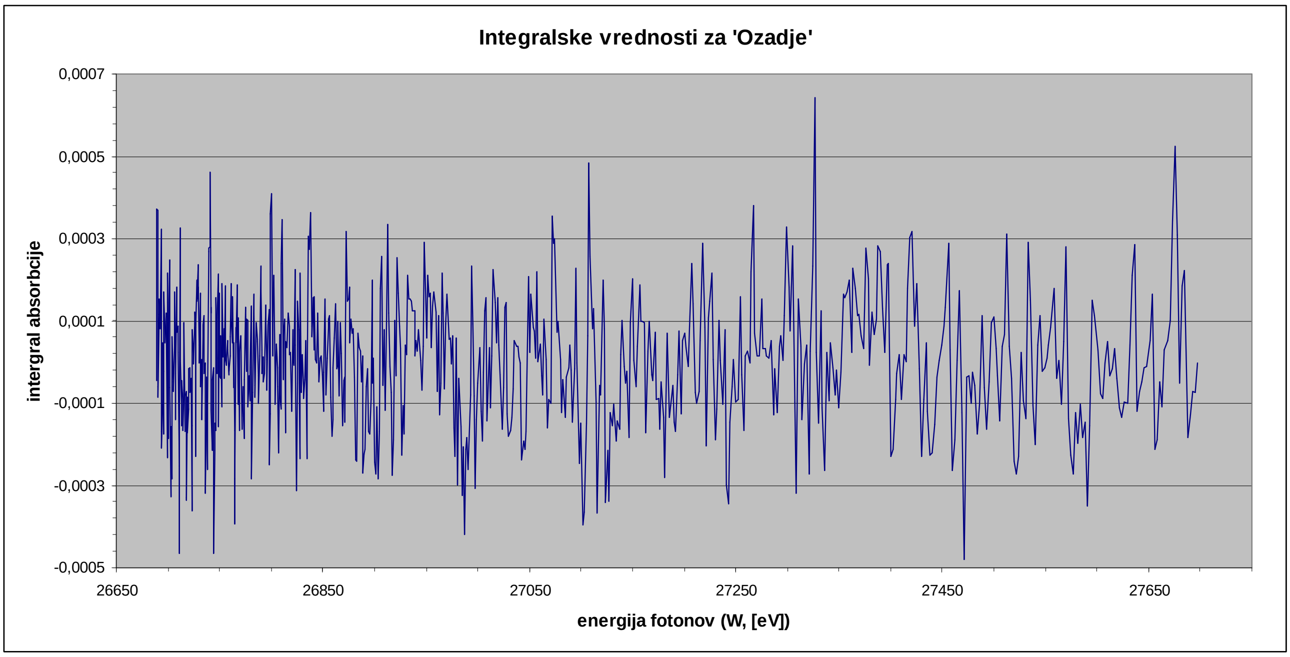
$$W(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\mathrm{d}x \, ,$$

oziroma pač od spodnje meje porazdelitve. Določi W(x) za podatke iz datoteke "Ozadje.dat" in iz histograma, dobljenega iz sinusne krivulje (naloga 2.4). Ali je iz slednjega rezultata mogoče uganiti analitični zapis porazdelitve?

Za podatke iz datoteke Ozadje.dat sem najprej obdelala podatke po dani formuli:

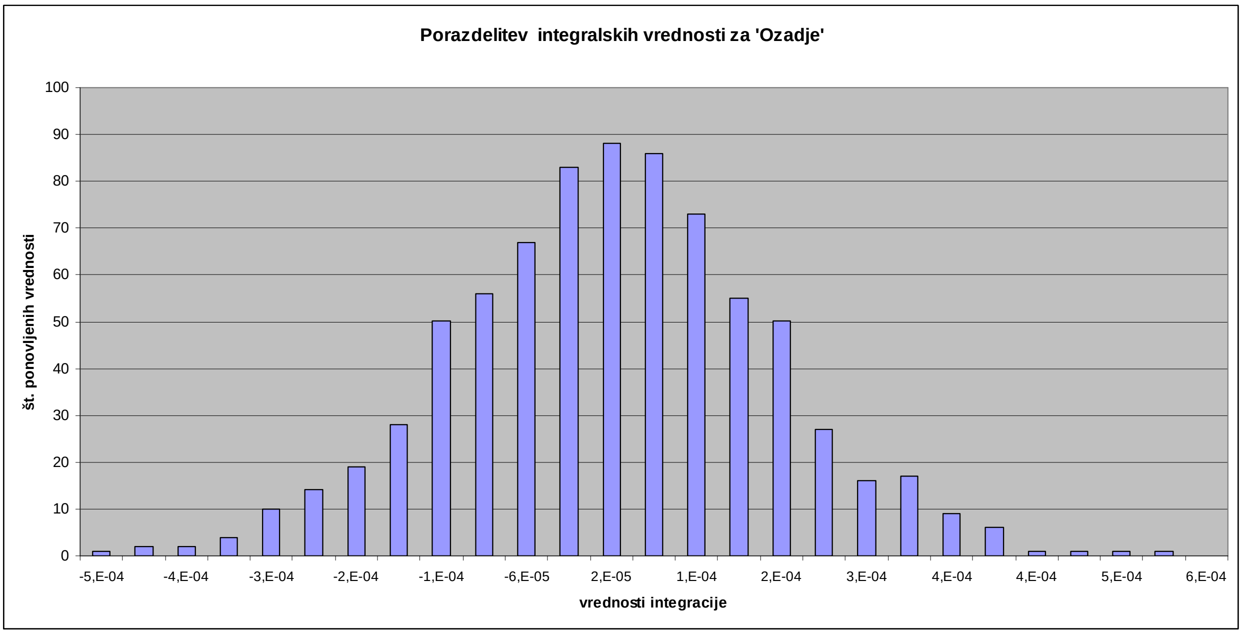
```
w[i]:= w[i-1] + 0.5*h*(y[i-1] + y[i])
```

Tako sem dobila integralske vrednosti (integrale absorbcije), ki se gibljejo takole v odvisnosti od energije fotonov (graf 3.1):

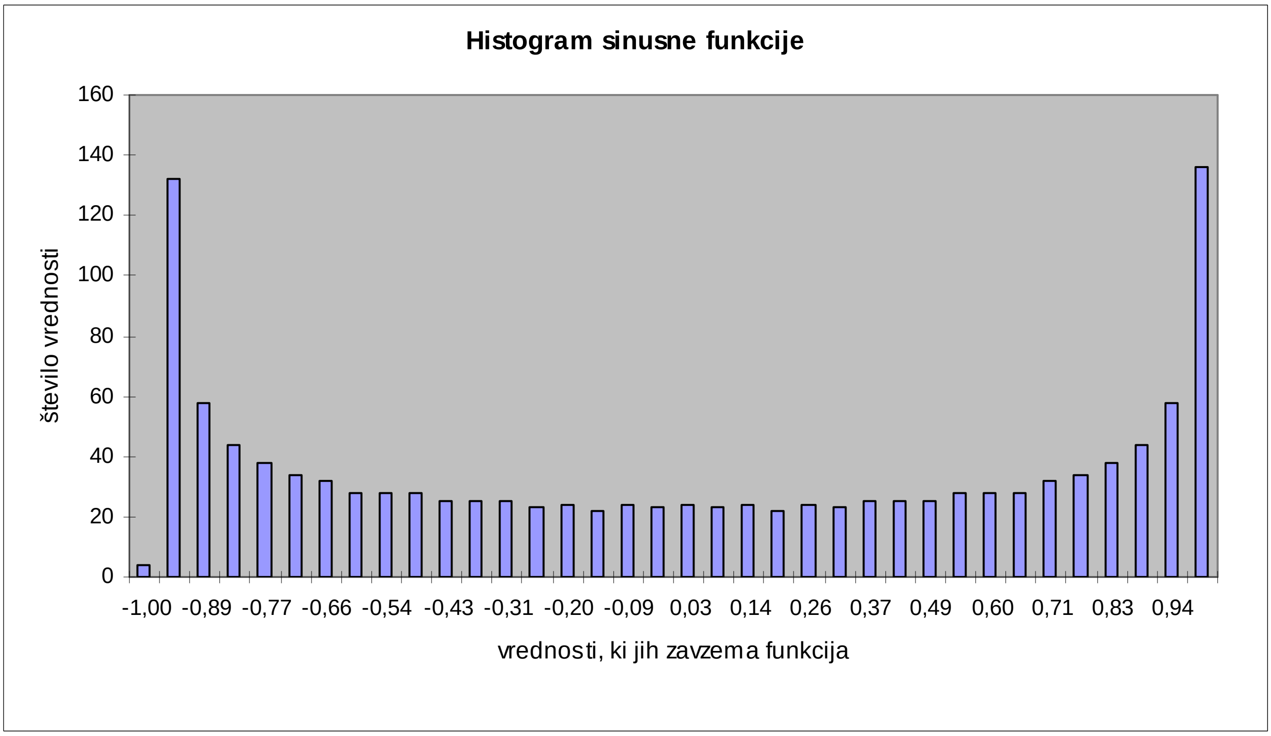


Graf 3.1

Nato sem še vstavila podatke v histogram za prikaz, kako so porazdeljene integralske vrednosti (graf 3.2):

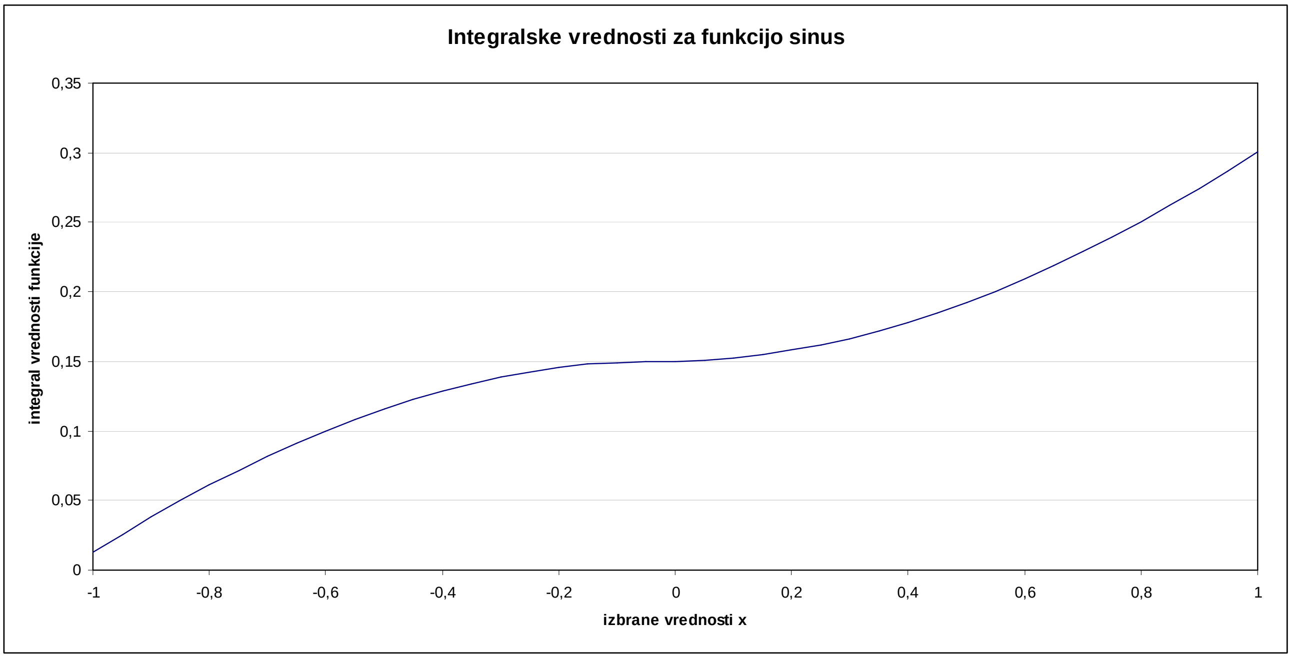


Graf 3.2



Graf 3.3 – Histogram iz naloge 2.4

Za sinusno funcijo sem prav tako izračunala integralske vrednosti. Podatke sem vzela iz datoteke pripravljene za nalogo 2.4.



Količino, ki je definirana z odvodom merjene količine `y`, lahko določimo le približno, saj v tabeli ne moremo izpeljati limitnega procesa `h→0`, ki ga terja matematična definicija. Zadovoljimo se z diferenčnim približkom, v katerem je `h` kar korak naše tabele merjenih vrednosti:

```
for i:= t to n-1 do u[i] := (y[i+1]-y[i])/(x[i+1]-x[i]);
```

Vrednosti odvoda `u[i]` je v tem primeru treba pripisati vrednostim `x` na sredi intervala, torej smo pripravili novo tabelo parov `u[i]`, `xx[i] = (x[i+1]+x[i])/2`, `i:= 1, 2, ..., n-1`. Kadar bi radi obdržali količini `y` in `u` v isti tabeli, torej pripisani istim `x`, je bolje uporabiti simetrično aproksimacijo za odvod, `u[i] = (y[i+1]-y[i-1])/(x[i+1]-x[i-1])`. Če se velikost koraka `x` v tabeli ne spreminja prehudo, lahko gornjo vrednost pripišemo abscisi `x[i]`.
Odvajanje podatkov prinaša še eno neprijetnost, izgubo natančnosti. Pri količkaj gladki odvisnosti `y(x)` sta si sosednji vrednosti v tabeli blizu tudi po velikosti in je njuna razlika v števcu odvoda majhna. Njena natančnost (absolutna napaka) je istega reda velikosti kot napaka izmerkov – v resnici je za faktor √2 večja – zato pa je relativna napaka lahko dosti večja. Povedano drugače, napaka se začne na določeni decimalki merjenega rezultata. Ko dve taki vrednosti odštejemo, lahko izgubimo eno ali več vodilnih decimalk, tako da ima napaka v rezultatu odštevanja večji relativni delež. Zato so grafi odvodov vedno bolj zašumljeni (zobati) kot grafi izvirnih količin. Če se zanesemo na gladkost `y`, lahko zobatost odvoda popravimo z zglajenimi formulami, ki upoštevajo širši interval sosednjih vrednosti. – Ob povedanem je očitno, da potrebujemo za drugi odvod količine zelo natančne podatke, da se po dvakratnem odštevanju rezultat ne izgubi v šumu meritve.
Integracija, nasprotno, je stabilna operacija, ki ne ojačuje šuma meritve. Integralsko količino `w[i]` lahko dobimo s trapezno integracijo. Če je integrirana količina podana v ekvidistantni tabeli `x[i] = x0 + i*h`, `i = 0, 1, 2, ..., n`, dobimo integral od `x0` do `x[i]`:

```
w[0] := 0;
for i:= 1 to n do w[i] := w[i-1] + 0.5*h*(y[i-1] + y[i]).
```

V neenakomerni tabeli moramo namesto `h` vnesti "trenutno" velikost intervala `x[i]-x[i-1]`. Če nas ne moti, da je integrirana količina `w` podana v drugih točkah kot `y`, namreč v srednjih točkah intervalov, je mogoče zgornji račun še poenostaviti.

Naloge

1. Nariši graf diferencialne upornosti dU/dI za tokovno odvisnost v datoteki "Korozija.dat".
2. Za kovine je energija rentgenskega absorpcijskega robu definirana kot energija točke, v kateri ima absorpcijski spekter največjo strmino. Poišči to energijo za kovinski mangan iz spektra "Md29mn_00001.fio" ($\ln(I_2/I_3)$) iz naloge 4.3). Zadostuje, da določiš odvod v območju ~20 eV samega robu.
3. V matematiki se namesto naših porazdelitev, ki pomenijo gostoto verjetnosti, kadar jih pravilno normiramo na celotno število ali na celotno mero, dostikrat uporabljajo integralske verjetnosti, ki so definirane z integralom

   $$W(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\mathrm{d}x ,$$

   oziroma pač od spodnje meje porazdelitve. Določi $W(x)$ za podatke iz datoteke "Ozadje.dat" in iz histograma, dobljenega iz sinusne krivulje (naloga 2.4). Ali je iz slednjega rezultata mogoče uganiti analitični zapis porazdelitve?

V Excel sem uvozil datoteko "Ozadje.dat" in uredil podatke logaritma po velikosti ter jih tudi normiral. Urejene podatke sem nato v Originu narisal v zgornji graf.
b. Sin(x)
Pri Sin(x) sem naredil enako kot pri Ozadje.dat, le da sem uvozil podatke za funkcijo Sin(x) izracunane pri vaji 2, histogrami.