

## **Przetwarzanie plików z danymi zebranymi przez Physical Properties Measurement System**

### 1. Wstęp

Program służy do przetwarzania plików z danymi zbieranymi przez Physical Properties Measurement System (PPMS, pomiary ciepła właściwego), tak aby móc w wygodny sposób importować pliki do Origina, a z rysowanych wykresów wstępnie ocenić jakość danych.

Program ma następujące funkcje:

- A) Przetwarzanie pliku .dat na plik .txt, w którym znajdują się tylko potrzebne kolumny z pliku wejściowego i kolumny z przeliczonymi wartościami.
- B) Usuwanie punktów odstających.
- C) Rysowanie wykresów.

### 2. Przetwarzanie pliku .dat na plik .txt

Plik wejściowy .dat składa się z 15 linii komentarzy, w których można znaleźć informacje takie jak: nazwa próbki (linia 2), masa próbki (linia 4), masa molowa próbki (linia 6), nazwy kolumn z jednostkami (linia 14), data pomiaru adendy (linia 15). Reszta pliku to zebrane dane.

Program usuwa linie z komentarzami, zostawiając same dane. Dane w kolumnach z niezbędnymi danymi (5 – pole magnetyczne, 7 – temperatura próbki, 9 – pojemność cieplna próbki, 11 – pojemność cieplna dla adendy z osobnego, wcześniejszego pomiaru) są uśredniane – dla danej temperatury wykonywane są zawsze 2 pomiary, jeden po drugim, a takie dwa punkty uśredniamy. Dane uśrednione są nadpisywane w kolejnych wierszach od góry, a reszta wierszy jest usuwana. Następnie dodawane są nazwy, jednostki odpowiednich wielkości fizycznych, komentarze (masa, masa molowa, liczba moli – obliczona, informacja, że ciepło właściwe jest liczone dla danych uśrednionych) – kolumny, które nas nie interesują nie mają nagłówka. Zanim nagłówki zostaną dołączone do danych, obliczane jest ciepło właściwe  $C$  w  $J/(mol\ K)$  ( $HC$  kolumna 9 / liczba moli) i  $C/T$  w  $J/(mol\ K^2)$  (kolumna 12 / kolumna 7), dodane jako dwie ostatnie kolumny. Dopiero potem usuwane są niepotrzebne kolumny (0, 1, 2, 3, 4, 6, 8, 10). Taki DataFrame jest zapisywany do pliku w tej samej lokalizacji co plik wejściowy, tylko z rozszerzeniem .txt. Taki plik jest już gotowy do importowania do Origina (1. wiersz nagłówki, 2. jednostki, 3. komentarze, reszta - dane).

### 3. Usuwanie punktów odstających

Aby ocenić, czy w danych znajdują się jakieś punkty odstające do usunięcia, rysowany jest wykres  $C(T)$  (wykres jest zapisywany jako plik .png). Jeżeli na wykresie znajduje się jakiś punkt, który chcemy usunąć, klikamy na niego (współrzędne zaznaczanych punktów pojawiają się w konsoli, można sprawdzić, czy się na pewno kliknęło dany punkt). Następnie, ze współrzędnych brana jest tylko wartość temperatury, która jest szukana w kolumnie 7. Indeks wiersza, w którym znajduje się dana temperatura jest zapisywany do listy, a potem na podstawie tej listy, dane wiersze są usuwane z danych. Dane z usuniętymi punktami są zapisywane do pliku z rozszerzeniem .txt i dodatkową informacją na końcu w nazwie: -out.

Punkty nie muszą być usuwane – jeśli się nie zaznaczy żadnego punktu pliki bez ‘-out’ i z ‘-out’ są takie same.

### 4. Rysowanie wykresów

Dane z ewentualnymi usuniętymi punktami są wykorzystywane do rysowania wykresów  $C(T)$  i  $C/T(T)$ . Wykresy są zapisywane jako jeden plik .png z dodatkową informacją na końcu w nazwie: -out.

### 5. Testy

Do kodu napisane są następujące testy:

- Sprawdzenie, czy pliki .txt i .png istnieją i czy nie są puste.
- Sprawdzenie, czy żadna z wartości nie jest wartością null i nan.
- Sprawdzenie liczby wierszy i kolumn w plikach tekstowych.
- Sprawdzenie wartości dla przykładowego pliku (okomentowane, bo to zależy czy się usunęło jakieś punkty czy nie).

### 6. Uwagi

- Żeby uruchomić program dla danego pliku trzeba zmienić ścieżkę do niego w zmiennej *filename*.
- Mierzone są dwa zestawy punktów – od najwyższej do najniższej temperatury, i od najniższej do najwyższej. Punkty nie są sortowane.
- Czasem przy kliknięciu wybierane są dwa punkty jednocześnie, gdy punkty są bardzo blisko siebie – oba punkty będą usunięte.
- Wszystkie DataFrame są nazywane hc – od heat capacity.

### 7. Referencje

- [https://matplotlib.org/stable/users/event\\_handling.html](https://matplotlib.org/stable/users/event_handling.html)
- <https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/reference/api/pandas.isnull.html>
- <https://pandas.pydata.org/docs/>