At arbejde med datasæt

Table of contents


```
try:
    import fysisk_biokemi
    print("Already installed")
except ImportError:
    %pip install -q "fysisk_biokemi[colab] @ git+https://github.com/au-mbg/fysisk-biokemi.
git"
```

```
import numpy as np
import pandas as pd
from fysisk_biokemi import load_dataset, get_dataset_path
import matplotlib.pyplot as plt
```

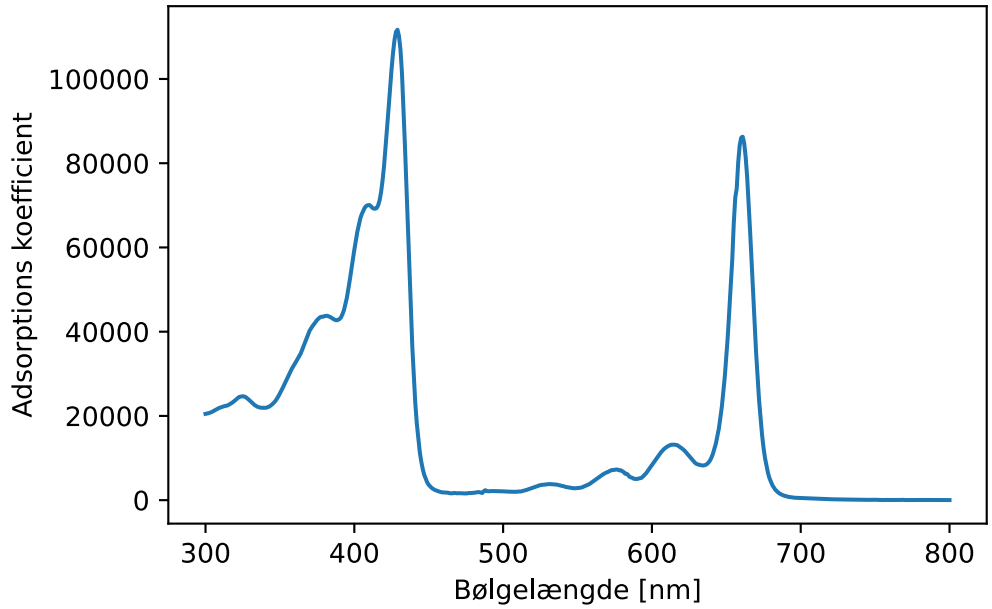
Vi har tidligere kigget på et datasæt omkring adsorption spektrummet af chlorophyll, men vi var ikke fokuserede på hvordan vi håndterede dette datasæt.

Det vi nåede frem til var at plotte datasættet, som set herunder

```
chloro_df = load_dataset("chlorophyll")
bølgelængder = chloro_df['Wavelength(nm)'] # Et array med 501 indgange
adsorption = chloro_df['AdsorptionCoefficient'] # Et array med 501 indgange

fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(bølgelængder, adsorption)
ax.set_xlabel('Bølgelængde [nm]')
ax.set_ylabel('Adsorptions koefficient')
```

```
Text(0, 0.5, 'Adsorptions koefficient')
```



Vi vil denne gang undersøge lidt mere hvordan vi kan arbejde med et datasæt.

NumPy arrays som datasæt.

Det er vigtigt at vi holder godt styr på vores data, det er ofte smart at bruge en data-type som hjælper os med dette. Vi har tidligere sæt på arrays, som er en mulighed - f.eks.

```
a = np.array([1, 2, 3, 4])
b = np.array([1, 4, 9, 16])
```

Men hvis vi har mange størrelser kan det hurtigt blive overskueligt - en anden mulighed er at gemme alle vores størrelser i det samme array

```
samlet_array = np.array([[1, 2, 3, 4], [1, 4, 9, 16]])
print(samlet_array[0, :]) # Svarer til a
print(samlet_array[1, :]) # Svarer til b
```

```
[1 2 3 4]
[ 1  4  9 16]
```

> **Note**
>
> NumPy arrays kan have flere dimensioner, `samlet_array` har her to dimension (som en matrice). I dette tilfælde beskriver hver række en af vores størrelser. Her er der brugt at `:` betyder "alle" ved indexing så `[0, :]` kan læses som første række alle kolonner.

Men det kræver så at vi holde styr hvilken akse der indeholder hvilken størrelse. Nogle gange kan det være fint at holde vores data som `np.array` men andre gange er det bedre på andre måder.

Pandas `DataFrame`

En sådan anden måde at håndtere et datasæt er ved brug af ny type, nemlig en pandas `DataFrame`.

Vi kan lave en `DataFrame` fra vores to arrays sådan her;

```
df = pd.DataFrame({"a": a, "b": b})
print(df)
```

```
   a   b
0  1   1
1  2   4
2  3   9
3  4  16
```

Her har vi så tre kolonner, den første er `index`, den anden er `a` og den tredje er `b`.

> **Note**
>
> Chlorophyll datasættet var faktisk også en `DataFrame`.

Med en `DataFrame` har vi flere muligheder for indeksering, vi kan f.eks. bruge navnet

```
print(df['a'])
```

```
0    1
1    2
2    3
3    4
Name: a, dtype: int64
```

Opgave 1

Beregn formlen $2 \times a$ hvor a kommer fra datasættet ovenfor

```
resultat = ... # Erstat ... med dine kode.
print(resultat)
```

Vi kan også lægge to arrays sammen, brug dette til at beregne $c = a + b$.

```
c = ... # Erstat ... med din kode
print(c)
```

Opgave 2

Lav et plot af a mod b hvor de to størrelser kommer fra `DataFrame`'en `df`.

```
fig, ax = plt.subplots()
... # Skriv din kode for at plotte.
```

Datasæt fra filer

Ofte vil vi ikke skrive vores datasæt direkte ind i kode, men opbevare dem som seperate filer der f.eks. kunne komme fra eksperimentielt udstyr.

Vi kan hente data fra en excel-fil, sådan her

```
dataset_path = "/sti/til/den/fil/der/har/vores/data.xlsx"
df = pd.read_excel(dataset_path)
```

> ⚠ Warning
>
> Cellen ovenfor giver en fejl når den bliver kørt fordi den fil vi forsøger at åbne ikke eksistere.

Opgave 3: Hent datasæt

Cellen nedenfor giver stien (`path`) til et datasæt der er installeret sammen med `fysisk_biokemi`-pakken.

```
path = get_dataset_path('reversible_reaction')
```

```
print(path)
```

Brug `pandas` til at læse filen ind som en dataframe

```
df = ... # Erstat ... med din kode.
print(df)
```

Udfra det information der er blevet skrevet ud hvad tror du datasættet indeholder? Tænk over følgende

- Hvor mange kolonner er der?
- Hvad er titlen på hver kolonne?
- Hvor mange rækker er der?

Opgave 4: Plot datasæt

Nu hvor vi har fået hentet datasættet vil vi gerne undersøge det nemmere ved at plotte det.

Færdiggør koden nedenfor

```
fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(df['time'], ..., label='[A]') # Erstat ... med din kode
... # Erstat ... med din kode som plotter tid mod concentration_B
ax.set_ylabel('Concentration') # Sætter navn på y-aksen
ax.set_xlabel('Time') # Sætter navn på x-aksen
ax.legend()# Viser hvad 'label' hver plottet kurve har.
```

Hvad tror du datasættet viser?

Opgave 5: Beregninger med datasæt

Som sagt kan vi også lave beregninger med et datasæt. Udregn

$$[T] = [A] + [B]$$

Og færdiggør plottet i cellen nedenfor

```
concentration_T = ... # Erstat ... med din kode

fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(..., ..., label='[T]', color='C2') # Erstat begge ... med din kode.

# Fra før
ax.plot(df['time'], df['concentration_A'], label='[A]')
ax.plot(df['time'], df['concentration_B'], label='[B]')
ax.set_ylabel('Concentration') # Sætter navn på y-aksen
ax.set_xlabel('Time') # Sætter navn på x-aksen
ax.legend() # Viser hvad 'label' hver plottet kurve har.
```

Hvorfor tror du det ser ud som det gør?