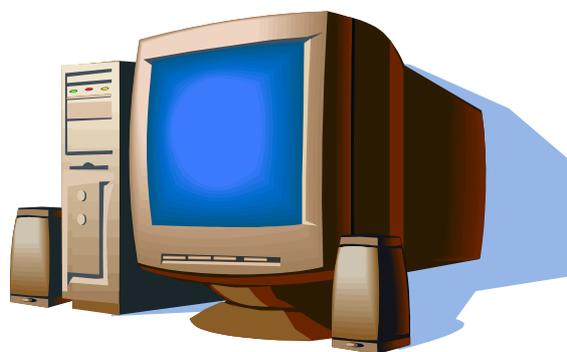


В.М. Поликарпов, И.В. Ушаков, Ю.М. Головин

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ  
КОМПЬЮТЕРНОЙ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ



• издательство ТГТУ •

Министерство образования и науки Российской Федерации  
ГОУ ВПО «Тамбовский государственный технический университет»

В.М. Поликарпов, И.В. Ушаков, Ю.М. Головин

# СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ КОМПЬЮ- ТЕРНОЙ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕН- ТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Учебное пособие



---

Тамбов  
Издательство ТГТУ  
2006

УДК 501:004.9  
ББК В16я73  
П501

Рецензенты:

Заведующий кафедрой физики  
Тамбовского государственного технического университета  
доктор технических наук, профессор  
*О.С. Дмитриев*

Заведующий кафедрой компьютерного моделирования  
Тамбовского государственного университета им. Г.Р. Державина  
доктор технических наук, профессор  
*А.А. Арзамасцев*

Поликарпов, В.М.  
П501 Современные методы компьютерной обработки эксперименталь-  
ных данных : учебное пособие / В.М. Поликарпов, И.В. Ушаков, Ю.М.  
Головин. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2006. – 84 с. – 100  
экз. – ISBN 5-8265-0498-6.

Учебное пособие посвящено вопросам практического изучения современных компьютерных методов обработки экспериментальных данных. Приведены примеры анализа экспериментальных данных по физике и химии, полученных авторами и обработанных с использованием программы ORIGIN.

Предназначено студентам, аспирантам и молодым ученым, работающим в области точных наук.

УДК 501:004.9

ББК В16я73

Работа выполнена при поддержке государственного контракта 02.442.11.7295 по лоту 2006-РИ-19.0/001 «Проведение научных исследований молодыми учеными».

ISBN 5-8265-0498-6

© Поликарпов В.М., Ушаков И.В.,  
Головин Ю.М., 2006

© Тамбовский государственный  
технический университет  
(ТГТУ), 2006

Учебное издание

Поликарпов Валерий Михайлович,  
Ушаков Иван Владимирович,  
Головин Юрий Михайлович

## СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕР- НОЙ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДААННЫХ

Учебное пособие

Редактор Т.М. Глинкина

Инженер по компьютерному макетированию Т.А. Сынкова

Подписано в печать 13.09.2006.

Формат 60 × 84 / 16. Бумага офсетная. Гарнитура Times New Roman.  
4,7 уч.-изд. л. Тираж 100 экз. Заказ № 465

издательско-полиграфический центр  
Тамбовского государственного технического университета,  
392000, Тамбов, Советская 106, к. 14

Для сбора и обработки экспериментальных данных в настоящее время широко используется компьютерная техника. Ее использование позволяет увеличить скорость обработки исходной экспериментальной информации, выявить закономерности. В начальный период развития компьютерной техники ее использование требовало обязательного знания основ программирования и самостоятельного составления соответствующих программ, что существенно ограничивало широкое использование вычислительной техники при обработке экспериментальных данных в естественных науках.

По мере роста числа персональных компьютеров, расширения их возможностей стали разрабатываться специализированные программы. Одной из наиболее удачных программ (с точки зрения авторов), предназначенных для численной обработки экспериментальных результатов, стала программа ORIGIN. Данная программа широко используется для анализа экспериментальных результатов. Она получила широкое распространение как в России, так и во всем мире. Программа ORIGIN позволяет систематизировать данные, их обрабатывать с использованием различных стандартных функций, а при необходимости – с использованием функций, создаваемых пользователями.

В то же время программа ORIGIN не русифицирована. На момент разработки данного пособия авторам не известно ни одной русскоязычной книги, посвященной программе ORIGIN. Однако существует потребность в такой книге, в чем авторы могли убедиться из бесед с коллегами, из практической работы со студентами старших курсов, принимающими участие в научных исследованиях. Отдельные части данного пособия были апробированы и оказались полезными для аспирантов и молодых ученых, осваивающих программу ORIGIN.

Данное пособие рассчитано на читателей, имеющих навыки работы с современным программным обеспечением, которое изложено, например, в [1 – 2]. В отдельной главе приведены примеры анализа данных по химии и физике, экспериментально полученных авторами и обработанных с использованием программы ORIGIN.

Работа выполнена при поддержке государственного контракта 02.442.11.7295 по лоту 2006-РП-19.0/001 «Проведение научных исследований молодыми учеными».

#### 1. СОЗДАНИЕ ПРОЕКТА. ВВОД ДАННЫХ. СОХРАНЕНИЕ ДАННЫХ. РАБОТА С ФАЙЛАМИ

Создание проекта. Для того, чтобы начать работу с программой ORIGIN, достаточно запустить эту программу. Этим автоматически создается новый проект. После запуска программы можно начинать вводить данные в окно «DATA1».

Введите данные в колонку A(X) и B(Y). По окончании ввода данных можно осуществить их графический вывод. Для этого выбираем в меню «Plot», «Scatter» (при этом на графическом окне будут выведены отдельные экспериментальные точки. Если вместо «Scatter» выбрать «Line+Symbol», то введенные точки будут соединены ломаной линией).

Затем в окне «Select Columns for Plotting» устанавливаем соответствия A(X) – X и B(Y) – Y. Затем выбираем «OK» и получаем графический вывод экспериментальных точек.

После данной операции можно проводить обработку экспериментальных данных по указанной в следующих главах методике.

Если возникает необходимость закрыть проект ORIGIN, следует сохранив данные, выбрать «File» и «Close». При этом проект ORIGIN закрывается. Появится новое (чистое) окно для ввода новых данных.

Сохранение данных. Данные, которые вносят в программу ORIGIN, результаты их обработки, коэффициенты, графики и т.д. находятся в оперативной памяти компьютера. Для того, чтобы информация не пропала при

отключении компьютера или сбое программы, ее надо регулярно сохранять.

Рассмотрим возможности сохранения данных в программе ORIGIN.

Для сохранения проекта выбираем в меню: File, затем Save Project. После этого действия появится окно, где надо выбрать место сохранения (рис. 1.1), например: C:\ORIGIN60.

Желательно создать дополнительный каталог (папку), например, каталог RESULTS, в который затем можно будет записывать файлы. Использовать для хранения файлов C:\ORIGIN60 нежелательно, так как в этом каталоге хранится много служебных файлов. Размещение файлов пользователей в этом каталоге затрудняет обработку данных. Для каждой серии обрабатываемых данных желательно иметь свой каталог.

Даем файлу название, например DATA1, и нажимаем на ОК. Файл сохранится под именем DATA1.OPJ. OPJ – это расширение файла, оно добавляется автоматически.

В дальнейшем для повторного сохранения файла, после внесения изменений, достаточно выбрать в меню: File, затем Save Project. Программа автоматически сохранит изменения в файле с прежним именем.



Рис. 1.1. Сохранение информации

В ряде случаев возникает необходимость сохранить проект под другим именем (например, когда требуются два проекта, имеющих незначительные отличия). В этом случае, если проект сохраняется первый раз, можно выбрать Save Project, если проект ранее уже сохранялся, выбираем Save Project As, меняем имя файла и выбираем ОК.

Сохранение в старом формате. Новые версии программы понимают старый формат программы ORIGIN. Однако, если информацию необходимо перенести с компьютера, на котором установлен ORIGIN60, на компьютеры с предыдущими версиями, необходимо предварительно сохранить проект в старом формате. Для этого выбираем в меню File, затем Save Project As, в разделе тип файла (рис. 1.1) выбираем: Old version (\*.ORG), и выбираем ОК.

Сохранение графики. В ряде случаев требуется сохранять отдельно график из проекта для использования в другой программе. Для этого выбираем: File, Export Page. В появившемся окне можно выбрать тип файла.

Например, для сохранения рисунка в формате Microsoft Word следует выбрать Windows Metafile (\*.WMF), для сохранения в формате Pbrush –

Bitmap (\*.bmp). Выбор типа файла зависит от того, в какой программе будет проводиться дальнейшая обработка рисунка.

В качестве примера рассмотрим сохранение рисунка в формате Pbrush – Bitmap (\*.bmp). Для этого соответствующую команду надо выбрать в строке тип файла (рис. 1.2). Опции, с которыми сохраняется файл, часто не совпадают с теми, которые нужны пользователю. Для установки нужных опций поставьте галочку в рамке напротив надписи: Show Export Options.

Нажмите «Сохранить».

После данной команды появится окно, где можно установить необходимые опции (рис. 1.3):

Bi-Level – цветовой уровень Bi, 16 color – 16 цветов, 256 color – 256 цветов, 24 Bit Color – 24 цветовых бита;

Resolution – разрешение;

Screen – разрешение экрана, Printer – разрешение принтера, Source – разрешение источника;

Pels/in – разрешение, устанавливаемое пользователем;

Size – размер;

Screen – размер экрана, Printer – размер принтера, Source – размер источника;

Inches – размер в дюймах, устанавливаемый пользователем;

File Type – тип файла;

Win3.X – для операционной системы Windows, OS2 PM – для операционной системы OS2 PM;

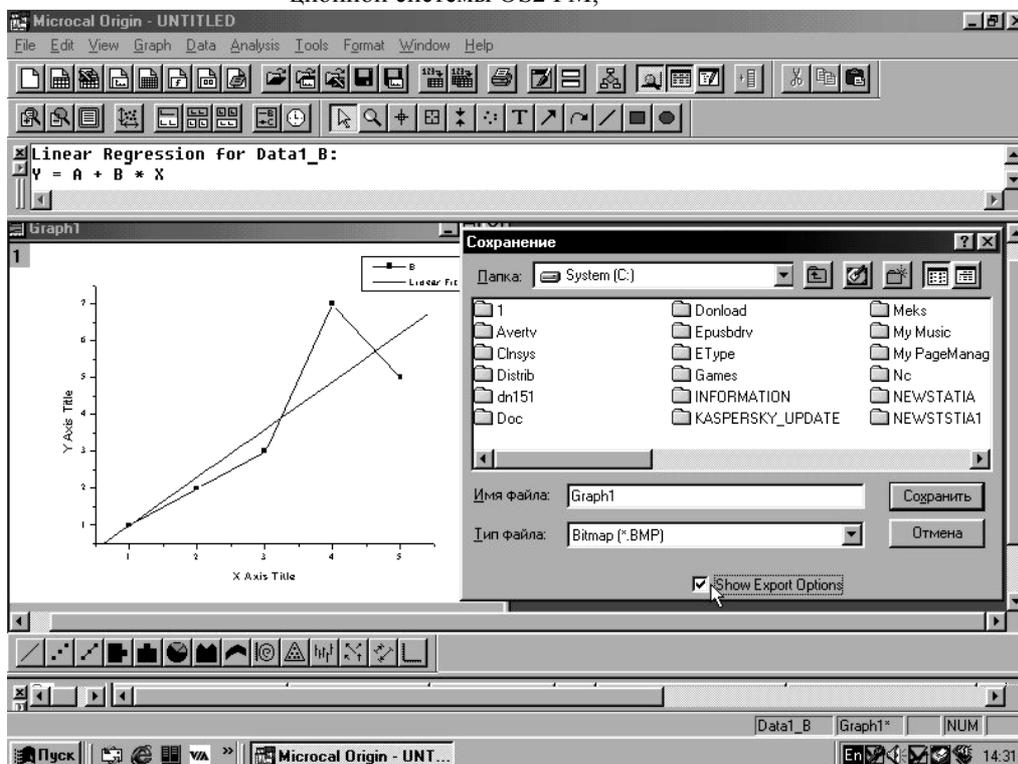


РИС. 1.2. СОХРАНЕНИЕ ГРАФИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

Color Translation – трансляция цветов;

Normal – нормальный;

Inverse – инверсный;

Inverse Grays Only – инверсный только для серого;

Gray Scale – шкала серого;

Inverse Gray Scale – инверсная шкала серого;

Data Compression – сжатие данных;

None – нет сжатия;

RLE – формат RLE.

Выбирая нужные опции, можно получить рисунок, сохраненный в формате, необходимом пользователю.

Открытие файлов. Для того, чтобы открыть новый файл, необходимо предварительно сохранить информацию (или закрыть проект, если информация не нужна).

Затем необходимо выбрать **File** и **Open**. После чего в появившемся стандартном окне выбираем нужный каталог, файл и выбираем «Открыть» (рис. 1.4).

В том случае, если требуется открыть файл старого формата, необходимо предварительно в разделе «Тип файлов:» сменить Project (\*.OPJ) на «Old version (\*.ORG)».

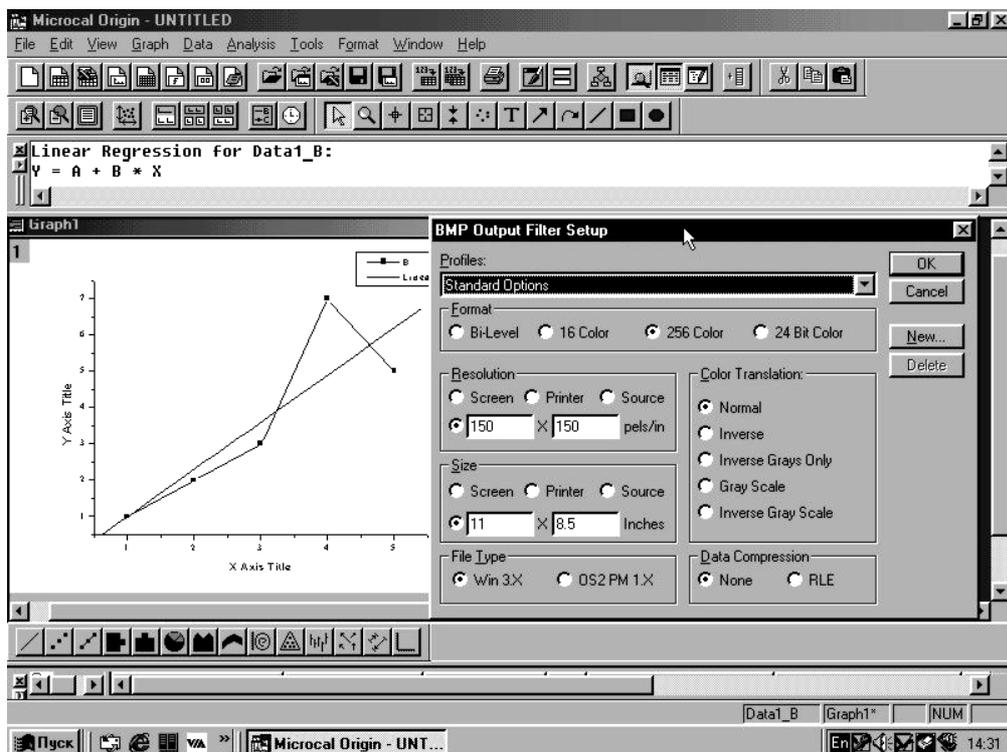


РИС. 1.3. ВЫБОР ОПЦИЙ ПРИ СОХРАНЕНИИ ГРАФИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ФОРМАТЕ «BMP»

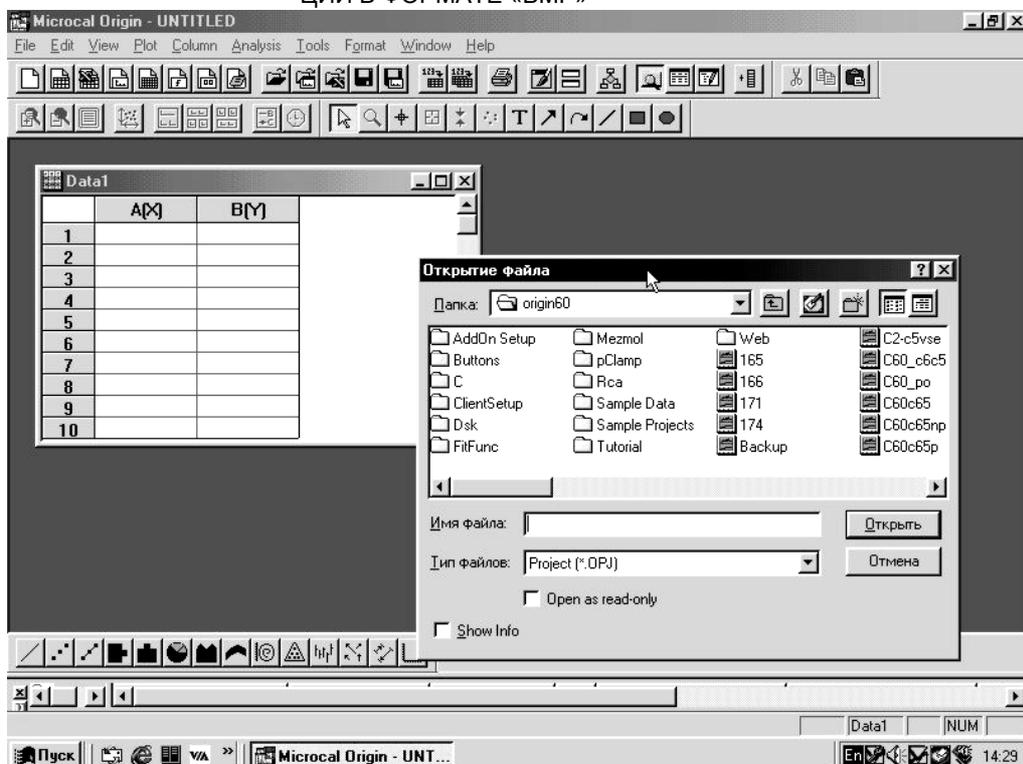


Рис. 1.4. Открытие файла

После ввода экспериментальных данных в стандартную таблицу Origin 6.0 необходимо научиться выводить полученные результаты на экран дисплея и в файлы в виде графических изображений.

Каждое графическое окно в этой программе имеет три элемента: оси координат X, Y, Z (для трехмерных объектов), одну или несколько используемых колонок с исходными данными, текст или графические метки.

Для построения графиков функций необходимо воспользоваться командой Plot (рис. 2.1). Выбрать, например, Scatter, т.е. нанесение на графический лист только экспериментальных точек. Появится окно нанесения осей координат (рис. 2.2).

Щелкнув кнопкой мыши на названии столбца и выбрав одну из кнопок  ,  , установить принадлежность столбца к оси X или Y. Щелкнуть по кнопке ОК. График отобразится в графическом окне. Если необходимо использовать на одном графике более одной зависимости, то применяется команда Add, что означает добавить следующую зависимость.

В построенном графике можно менять оси координат, метки, графические символы и т.д.

Например, щелкнув дважды левой кнопкой мыши по одной из осей координат, используется меню осей (рис. 2.3).

Scale – закладка шкалы координат. Эта закладка используется для установления вертикальной или горизонтальной осей, установки шкалы от начального до конечного значения с определенным шагом, типа шкалы (линейный, логарифмический, логический и т.д.).

Title&Format – закладка заголовка и форматирования. Устанавливает тип, ширину, стиль написания обозначения оси координат.

Grid Lines – закладка координатной сетки. Установка горизонтальных и вертикальных дополнительных и основных осей, цвета и типа основных и дополнительных осей.

Break – закладка установки вертикальных и горизонтальных разрывов. Необходимо использовать, когда экспериментальные значения отличаются друг от друга значительно (на несколько порядков).

Tick Labels – закладка меток на осях. В этой закладке устанавливаются цвет меток, их положение, формат, размер и т.д.

Minor Tick Labels – второстепенные метки осей. Дополнительные возможности по оформлению меток, связанные с добавлением меток.

Custom Tick Labels – привычные метки осей. Поворот в названиях осей, добавление меток на осях вручную самим пользователем, центрирование надписей и т.д.

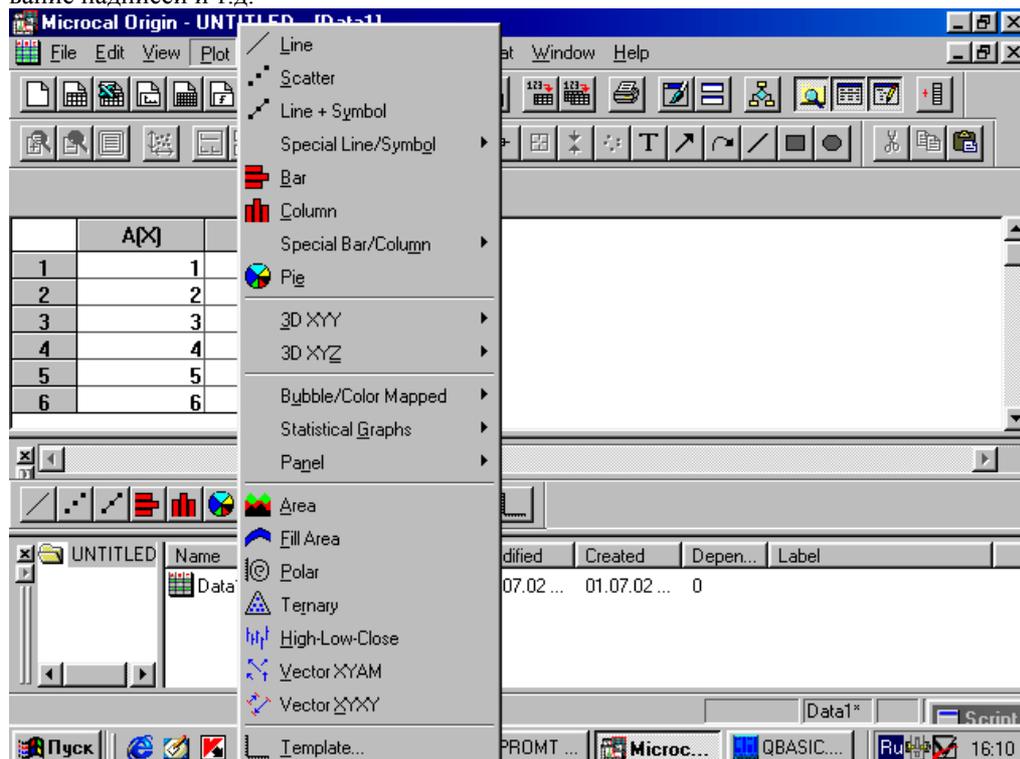


Рис. 2.1. Меню Plot (построение графических изображений)

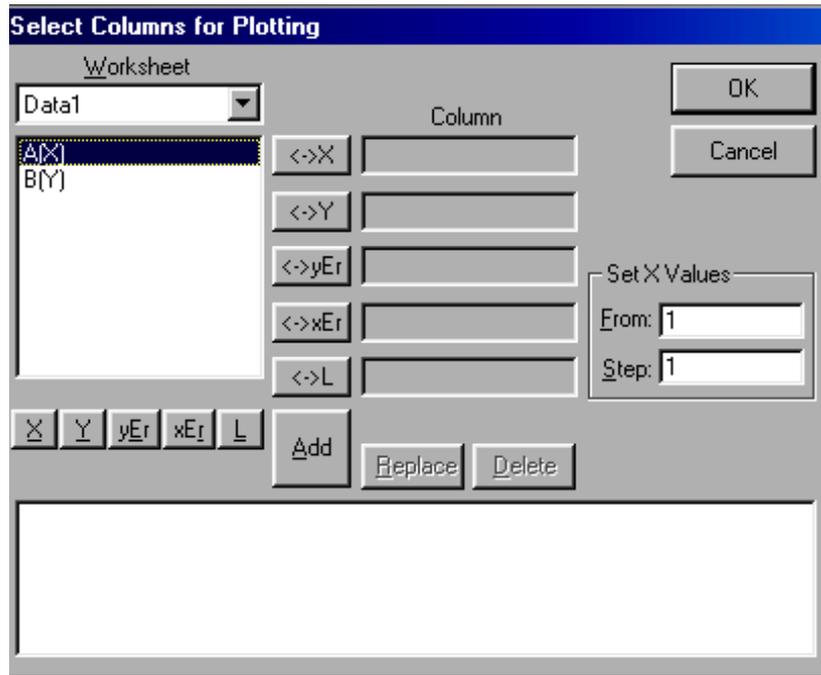


Рис. 2.2. Графическое окно выбора осей координат

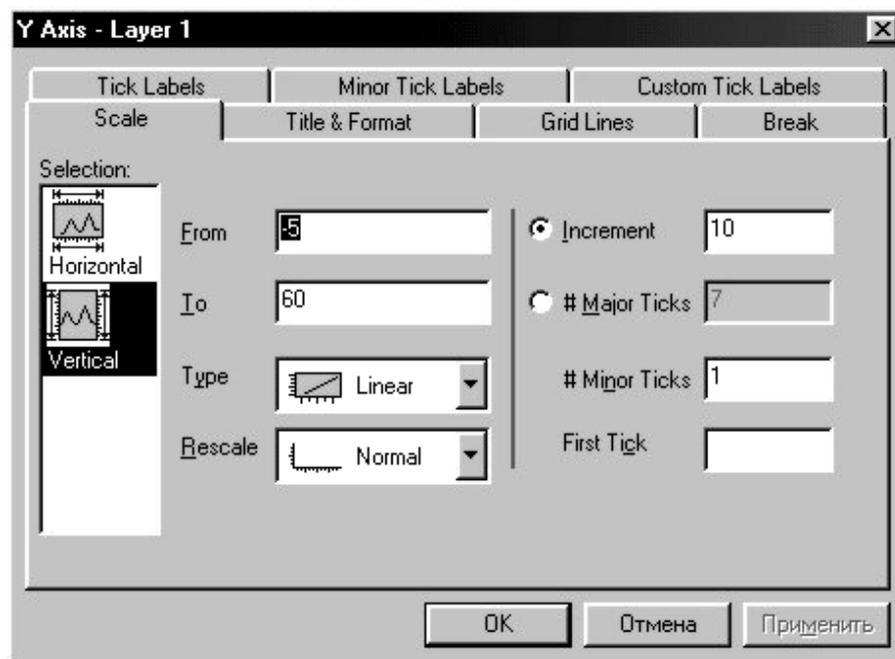


Рис. 2.3. Закладка осей координат. Раздел «Шкала»

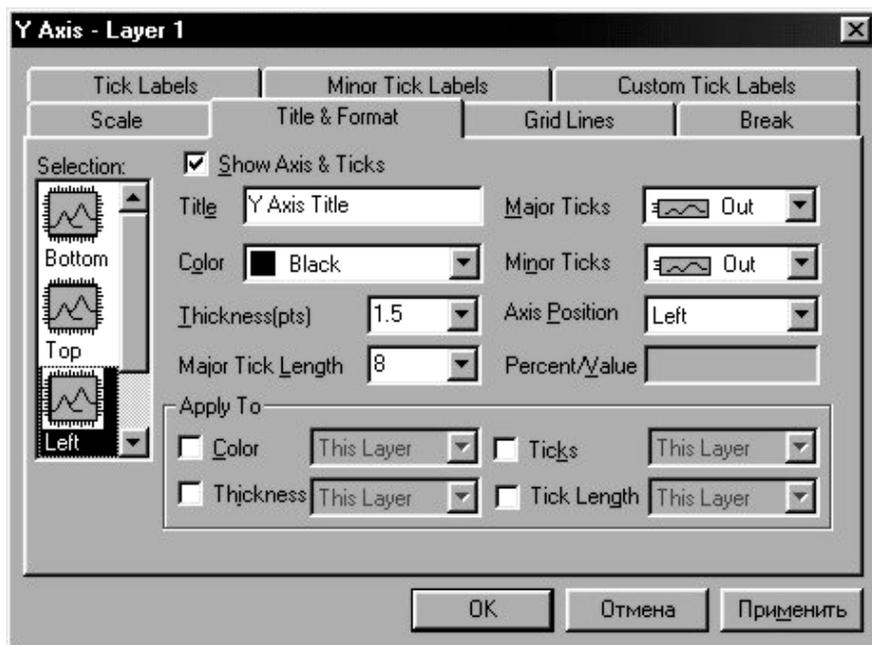
Изменить параметры другой координатной оси можно, дважды щелкнув по линии этой оси.

Ниже приведены рисунки с кратким переводом некоторых обозначений (рис. 2.4 – 2.9).

Selection – выбор, From – от, To – до, Type – тип линии, Rescale – построение новой шкалы, Increment – увеличение, Major Ticks – главные метки, Minor Ticks – второстепенные метки, First Tick – первая метка.

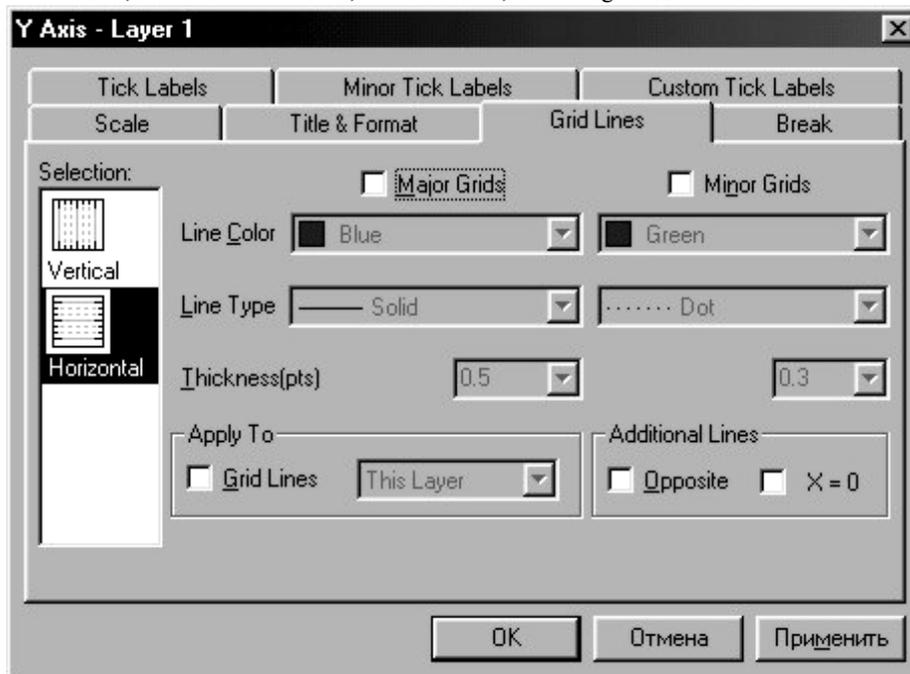
Параметры графических символов, используемых при построении графика, можно изменить, щелкнув дважды по этому символу (рис. 2.10). Закладка Plot Details – детали точек позволяет изменять внешний вид точек

(кругок, квадрат, треугольник и т.д.) (рис. 2.11), размер точек (рис. 2.12), их цвет (рис. 2.13), устанавливать вертикальные и горизонтальные оси к точкам.



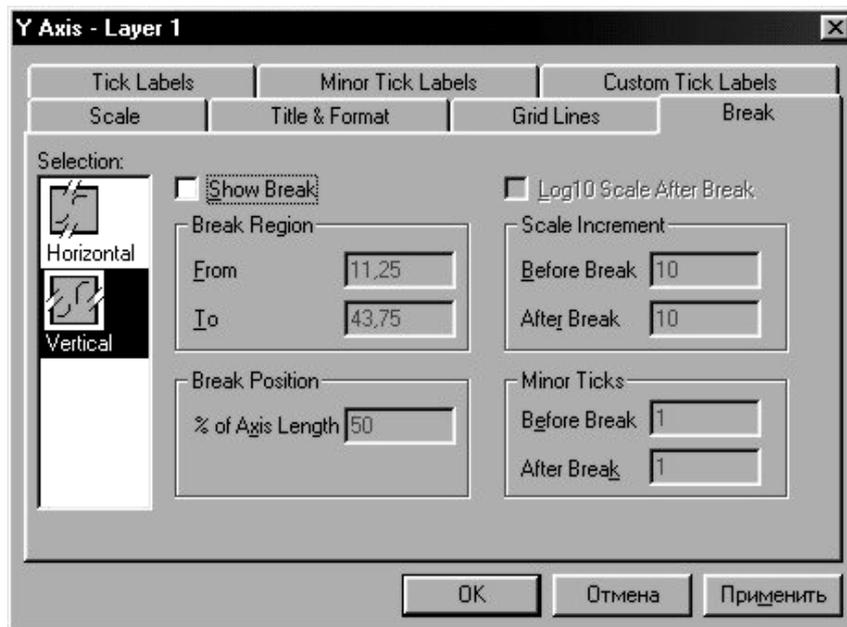
**Рис. 2.4. Название и формат осей:**

Selection – выбор; Show Axis & Ticks – показывать оси и отметки; Title – название оси; Color – выбор цвета; Thickness(pts) – толщина в точках; Major Ticks Length – длина главных меток; Minor Ticks – второстепенные отметки; Axis Position – расположение осей; Percent/Value – проценты/величина; Apply to – применить к; Color – цвет; Thickness – толщина; Ticks – метки; Tick Length – длина отметки



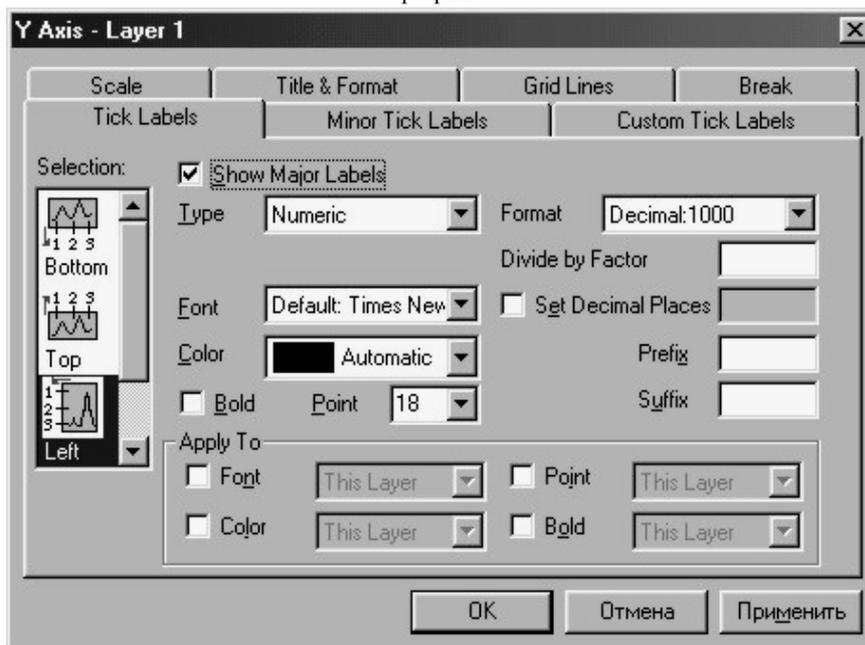
**Рис. 2.5. Закладка осей, линии:**

Selection – выбор; Major Grids – главная сетка; Minor Grid – второстепенная сетка; Line Color – цвет линии; Line Type – тип линии; Thickness(pts) – толщина в точках; Apply to – применить к; Grid Lines – линии сетки; Additional Lines – линии сетки; Opposite – напротив



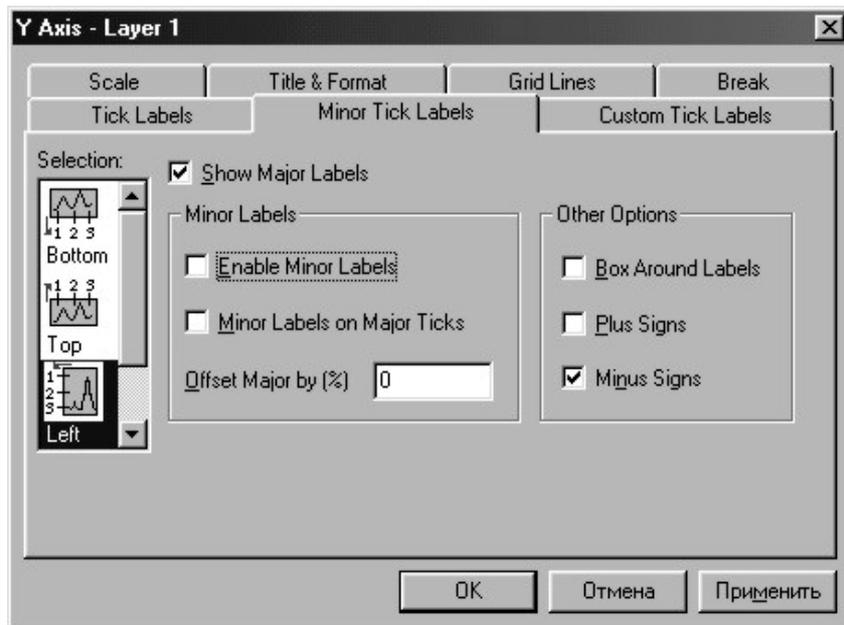
**Рис. 2.6. Закладка осей, разрыв:**

Selection – выбор; Show Break – показать разрыв; Break region – место разрыва; From – от; To – до; Break Position % of Axis Length – место разрыва в процентах от длины оси; Log10 Scale After Break – логарифмическая шкала после разрыва; Scale increment – увеличение оси; Before Break – до разрыва; After Break – после разрыва; Minor Ticks – второстепенные метки; Before Break – до разрыва; After Break – после разрыва



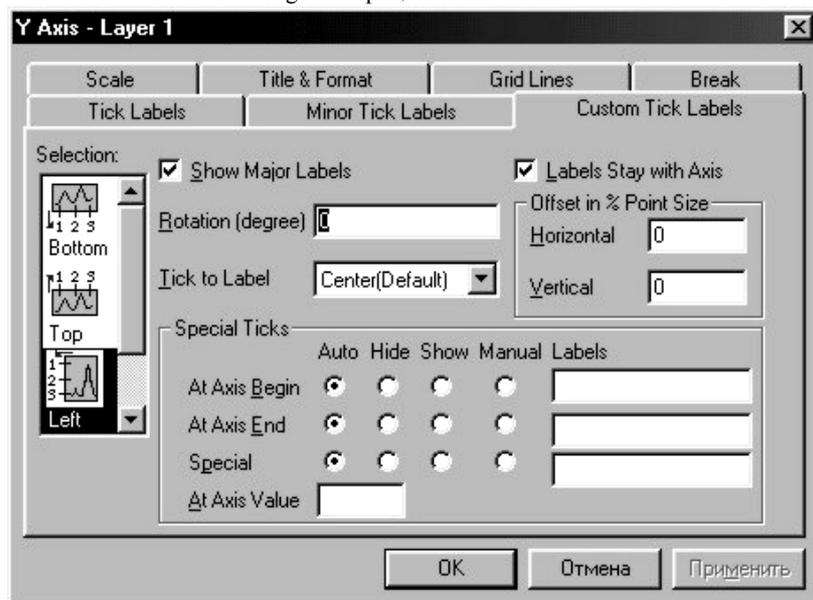
**Рис. 2.7. Закладка осей, метки:**

Selection – выбор; Show Major Labels – показать главные метки; Type – тип; Font – шрифт; Color – цвет; Bold – полужирный; Point – размер шрифта в точках; Format – формат; Divide by factor – деление на; Set decimal Places – установка места для десятичных знаков; Prefix – префикс; Suffix – суффикс; Apply to – применить к; Font – шрифт; Color – цвет; Point – точка; Bold – полужирный



**Рис. 2.8. Закладка осей, основные метки:**

Selection – выбор; Show Major Labels – показать основные метки; Minor Labels – второстепенные метки; Enable Minor Labels – возможные второстепенные метки; Minor Labels on Major Ticks – второстепенные метки на главных отметках; Offset Major by – (смещение в процентах) используется для просмотра меток; в процентах указана величина смещения меток из центра поля; Other options – другие опции; Box Around Labels – рамка вокруг меток; Plus Signs – положительные знаки; Minus Signs – отрицательные знаки



**Рис. 2.9. Закладка осей, метка пользователя:**

Selection – выбор; Show Major Labels – показать главные метки; Rotation (degree) – степень вращения; Tick to Label (Center(Default)) – расположение метки (по умолчанию в центре); Label Stay with Axis – метки, установленные на осях; Offset in % Point Size – изменение в процентах от размера; Horizontal – горизонтальное; Vertical – вертикальное; Auto – автоматически; Hide – прятать; Show – показывать; Manual – ручная (установка); Labels – метки; At Axis Begin – на начале оси; At Axis End – на конце оси; Special – специальные; At Axis Value – значение оси

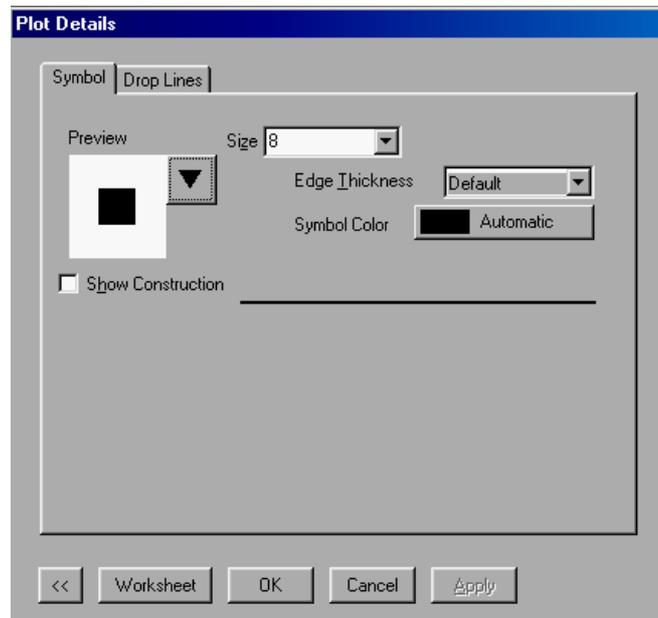


Рис. 2.10. Закладка изменения деталей графических символов

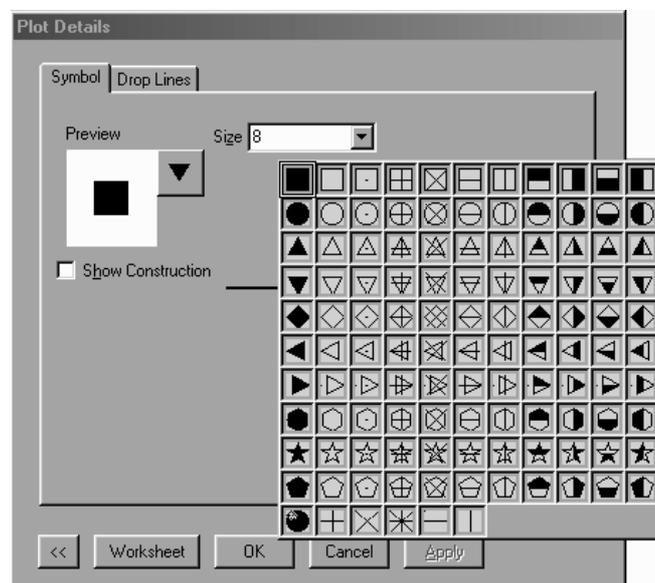


Рис. 2.11. Изменение начертания графического символа

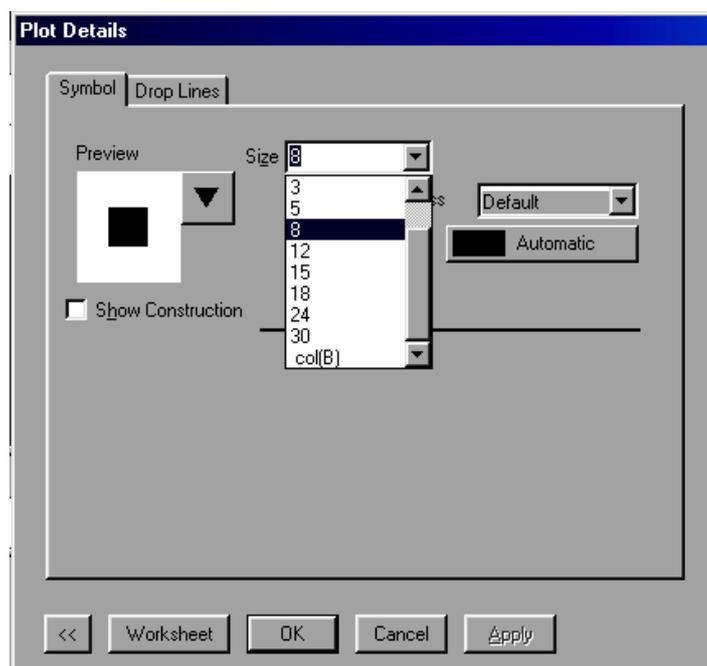


Рис. 2.12. Изменение размера графического символа

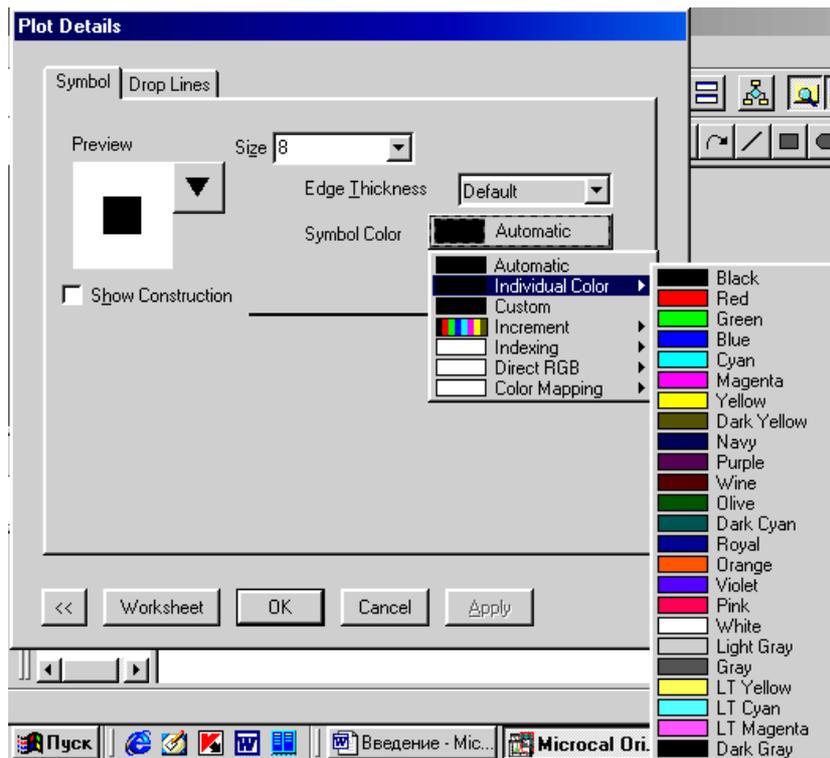
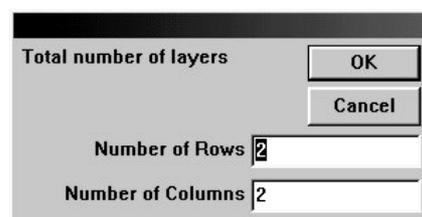


Рис. 2.13. Изменение цвета графического символа

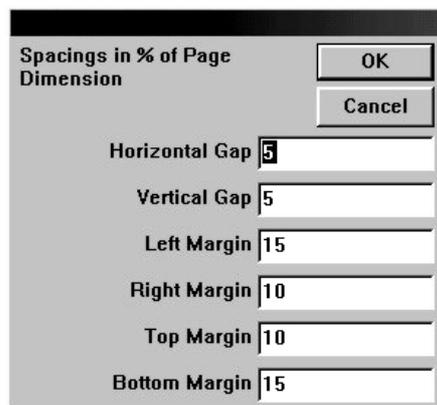
### 3. Пункт меню «инструменты» («Tools»)

Добавление и упорядочение графических окон. Стоит заметить, что, хотя данный пункт меню расположен не в группе «Tools», однако он переключается с аналогичным пунктом меню в группе «Tools», о котором мы расскажем далее.

Данная опция позволяет размещать несколько графиков на одной странице. Чтобы упорядочить графики на странице, выберите «Edit : Add & Arrange Layers». Эта команда меню открывает диалоговое окно «Total Number of Layers» (рис. 3.1, б), запрашивая число строк и столбцов, которые необходимо включить в расположение страницы. Введите нужные цифры и нажмите ОК. Это действие открывает диалоговое окно «Spacings in % of Page Dimension» (рис. 3.1, а), запрашивая параметры полей для расположения графических окон. После подтверждения выводится результирующее окно, содержащее несколько графиков.



а)



б)

Рис. 3.1. Диалоговые окна для добавления новых графиков (а) и параметров их расположения на странице (б)

Пункт меню добавления и размещения графиков («Layer»). Для добавления новых графиков и упорядочения уже существующих служит пункт меню «Tools : Layer» (см. рис. 3.1). В появляющемся диалоговом окне имеются два раздела, один из которых служит для добавления новых графиков и осей, а второй – для упорядочения существующих графиков. С помощью данного пункта меню можно:

- добавлять новые графические окна к активному графическому окну;
- определять масштаб осей для добавленных графических окон;
- размещать все графики на странице;
- определять поля страницы.

Раздел для добавления новых графических осей («ADD»). Данный раздел диалогового окна возникает, когда вы выбираете пункт меню «Tools : Layer» (см. рис. 3.2). Выбирая соответствующую кнопку, вы можете добавлять как дополнительные оси к существующему графику, так и дополнительные оси координат, помещаемые на ту же страницу. Тип шкал вводится здесь же.

Раздел для размещения графиков на странице («Arrange»). Данный раздел диалогового окна возникает также, когда вы выбираете пункт меню «Tools : Layer» (см. рис. 3.2). Здесь вы можете располагать все графики вертикально, нажав соответствующую кнопку с изображением столбца. Чтобы изменить промежуток между графиками, введите значение в связанном текстовом поле и нажмите снова на кнопку с изображением столбца. Аналогично происходит упорядочение графиков горизонтально.

При большом количестве графиков можно образовать несколько рядов. При этом указывается число строк и столбцов и нажимается соответствующая кнопка. Если общее число графиков меньше, чем количество, соответствующее установленным в текстовых полях «Columns» и «Rows», то ORIGIN может добавлять или не добавлять дополнительные графические окна. Для этого существует флажок «Add New Layers».

В поле «Margins» вводятся параметры полей страницы.

Здесь вы также можете поменять физическое расположение графиков с помощью кнопок «Swap Layers A and B» и «Move Layer A to B».

При нажатии кнопки «Swap Layers A and B» соответствующие графики, указанные в связанном текстовом поле, переставляются.

При нажатии кнопки «Move Layer A to B» график А добавляется на график В.

Пункт меню поиска пиков («Pick Peaks»). Инструмент поиска пиков доступен, когда окно графика активно. Чтобы вызвать данный инструмент, выберите «Tools : Pick Peaks» (см. рис. 3.2). Появляется диалоговое окно (см. рис. 3.4), имеющее несколько групп опций.

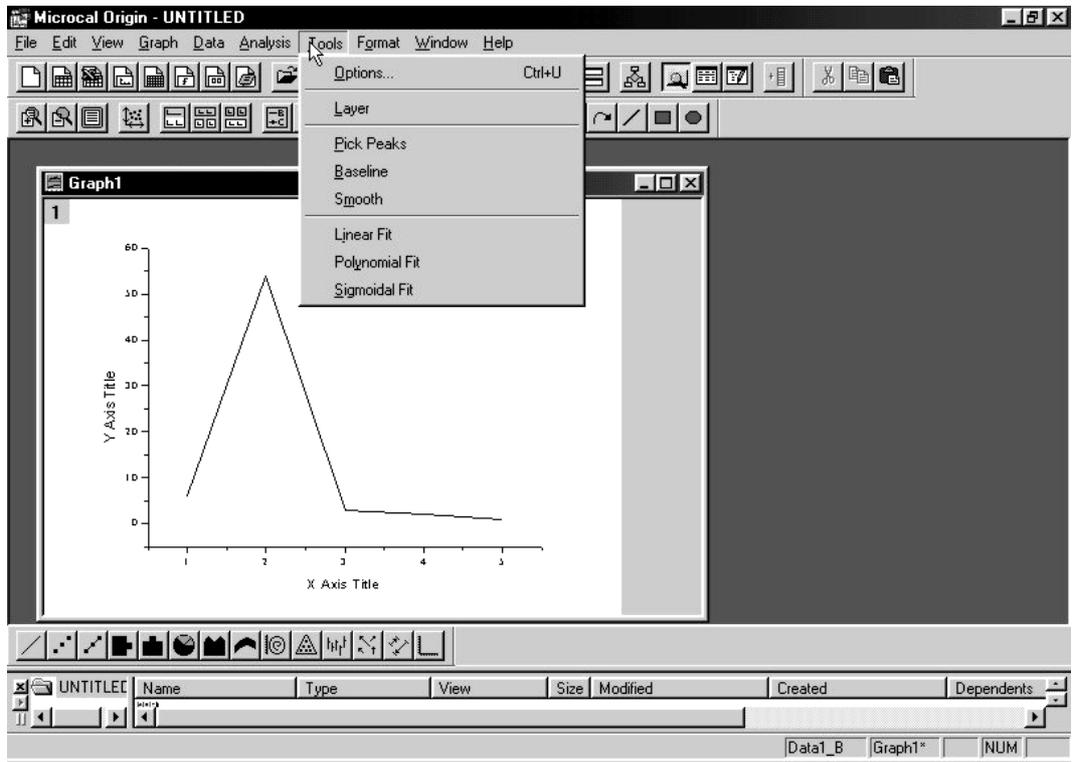
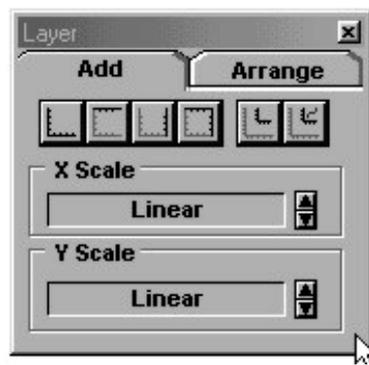
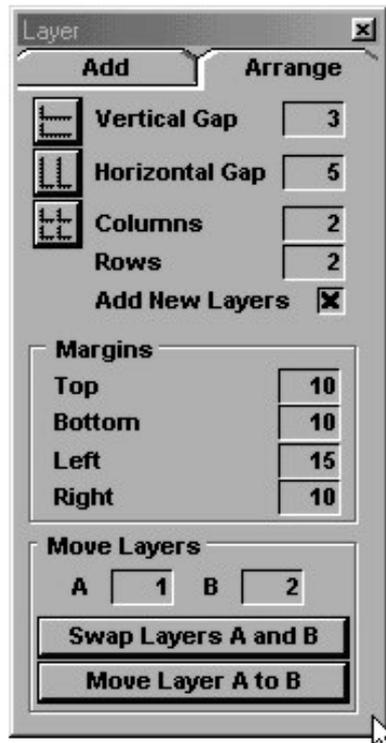


Рис. 3.2. Пункт меню «Инструменты» («Tools»)



a)



б)

Рис. 3.3. Диалоговое окно для добавления новых графических окон:  
 а – раздел добавления; б – раздел параметров размещения на странице

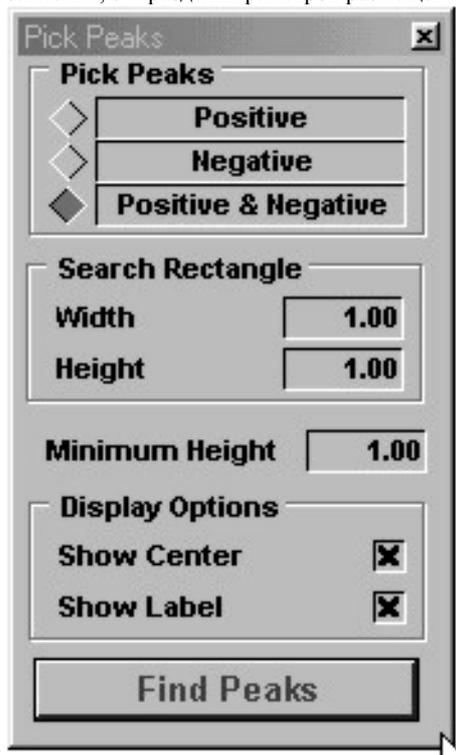


Рис. 3.4. Диалоговое окно поиска пиков

*Группа поиска пиков «Pick Peaks».* Эти опции определяют, какие пики будут найдены в процессе расчетов (положительные, отрицательные или все).

*Группа параметров поиска «Search Rectangle».* Пики ищутся на основании использования перемещающегося прямоугольника. Высота прямоугольника определена в текстовом поле «Height» (процент от полной амплитуды данных). Ширина прямоугольника определяется в текстовом поле «Width» (процент от общего количества точек в диапазоне данных). Вообще, чем меньше высота и ширина, заданные в текстовых полях «Height» и «Width», тем большее количество пиков будет найдено.

*Текстовое поле минимальной высоты («Minimum Height»)*. Минимальная высота определяется в текстовом поле «Minimum Height» (процент от полной амплитуды данных). Чем меньшее значение текстового поля «Minimum Height», тем большее количество пиков будет найдено.

*Группа опций вывода результата («Display Options»)*. Выберите флажок «Show Center», чтобы отметить центр найденных пиков.

Выберите флажок «Show Label», чтобы маркировать график координатой X для центра каждого пика.

*Кнопка поиска пиков («Find Peaks»)*. Нажмите эту кнопку, чтобы исполнять поиск пиков, основанный на указанных параметрах настройки. Пиковые результаты будут сохранены в скрытом «Peaks#» рабочем листе.

Пункт меню для анализа кривых с помощью базовой линии («Baseline»). Данный инструмент полезен для анализа пиковых областей, когда график данных имеет расчетную базовую линию.

Инструмент состоит из трех разделов «Baseline», «Peaks» и «Area» (рис. 3.5). С помощью раздела «Baseline» сначала проводится базовая линия, затем находят положительные и отрицательные пики в графике данных с помощью раздела «Peaks» и, наконец, определяется площадь области под пиками или полным графиком данных с помощью раздела «Area».

Раздел поиска базовой линии («Baseline») инструмента «Baseline». Текстовое поле для числа точек базовой линии («Number of Points»).

Напечатайте число точек, которые нужно использовать в создании базовой линии в этом текстовом поле.

*Группа для создания базовой линии («Create Baseline»)*. Нажмите кнопку Automatic, чтобы вычислить базовую линию автоматически для активного графика данных. Результат будет сохранен в скрытом рабочем листе, названном «Base#». Базовая линия создается на наборе точек.

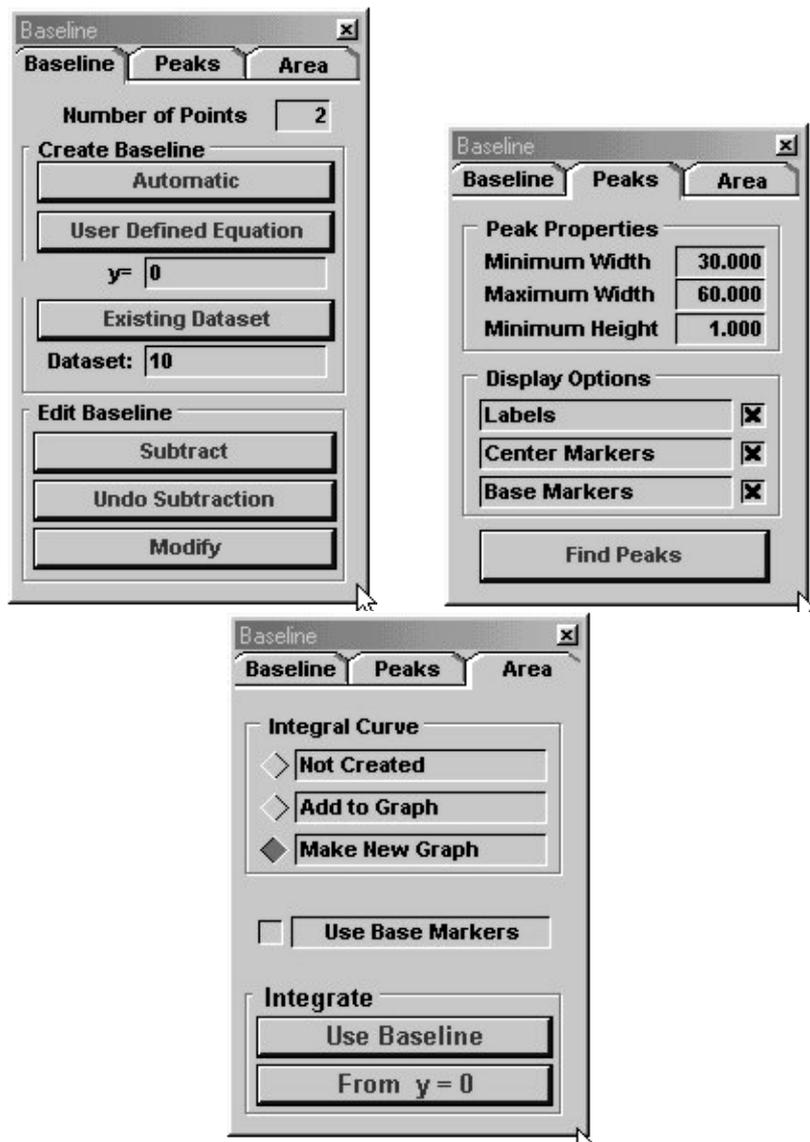
Нажмите кнопку «user defined Equation», чтобы создать базовую линию, основанную на определяемом пользователем уравнении. Уравнение должно находиться в связанном с данной кнопкой текстовом поле. Результаты будут сохранены в скрытом рабочем листе, названном «Base#».

Если базовые данные доступны в отдельном наборе данных, вы можете напечатать название того набора данных в текстовом поле «Dataset» и затем нажать кнопку «Existing Dataset» для определения базовой линии.

*Группа редактирования базовой линии («Edit Baseline»)*. Нажмите на кнопку «Subtract», чтобы вычесть полученную базовую линию от графика данных.

Нажмите кнопку «Undo Subtraction», чтобы отменить базовое вычитание.

Нажмите кнопку «Modify», чтобы вручную изменить базовую линию. Для этого нажмите на нужную точку в базовой линии и перетащите ее к новой позиции.



а) б) в)

**Рис. 3.5. Диалоговое окно анализа кривых с помощью базовой линии:**  
 а – раздел проведения базовой линии; б – раздел поиска пиков; в – раздел расчета площади

Раздел поиска пиков («Peaks») инструмента «Baseline». *Группа свойств пиков («Peak Properties»)*. Минимальная ширина пика определяется в текстовом поле «Minimum Width» (процент от общего количества точек в диапазоне данных) для того, чтобы пик был признан как пик. Чем меньше значение текстового поля «Minimum Width», тем большее количество пиков будет найдено.

Максимальная ширина пика определяется в текстовом поле «Maximum Width» (процент от общего количества точек в диапазоне данных) для того, чтобы пик был признан как пик.

Минимальная высота пика определяется в текстовом поле «Minimum Height» (процент от полной амплитуды данных, где амплитуда определена как различие между максимумом и минимумом данных). Чем меньше значение текстового поля «Minimum Height», тем большее количество пиков будет найдено.

*Группа опций вывода результата («Display Options»)*. Выберите флажок «Labels», чтобы маркировать график данных координатами X центра каждого пика.

Выберите флажок «Center Markers», чтобы отметить центр пиков.

Выберите флажок «Base Markers», чтобы отобразить маркеры в границах каждого пика.

*Кнопка поиска пиков («Find Peaks»)*. Нажмите эту кнопку, чтобы найти и положительные, и отрицательные пики в текущем графике. Эта кнопка должна быть нажата после того, как базовая линия была определена. Результаты поиска пиков будут сохранены в скрытом рабочем листе «BsPeak#».

Раздел для расчета площади под кривой («Area») инструмента «Baseline». *Группа создания интегральных кривых («Integral Curve»)*. Выберите кнопку «Not Created», чтобы найти область под кривой после нажатия клавиш «Use Baseline» или «From y=0».

Выберите кнопку «Add to Graph», чтобы найти область под кривой и составить график данных интеграции в текущем графическом окне после нажатия клавиш «Use Baseline» или «From y=0».

Выберите кнопку «Make New Graph», чтобы найти область под кривой и составить график данных интеграции в новом графическом окне после нажатия клавиш «Use Baseline» или «From y=0».

*Флажок использования базовых маркеров («Use Base Markers»)*. Выберите этот флажок, чтобы включить только область между основными маркерами при интегрировании. Когда этот флажок выбран, кнопки «Add to Graph» и «Make New Graph» недоступны.

*Интегрирующаяся группа («Integrite»)*. Нажмите кнопку «Use Baseline», чтобы найти область между активным графиком данных и базовой линией. Если включена опция «Use Base Markers», используется только область между основными маркерами.

Нажмите кнопку «From Y=0», чтобы найти область между активным графиком данных и прямой Y=0. Если включена опция «Use Base Markers», используется только область между основными маркерами.

Пункт меню для линейной аппроксимации данных («Linear Fit»). Для описания данных линейной функцией выберите «Tools : Linear Fit» (см. рис. 3.2). Если рабочий лист активен, выбирая столбец Y, вы можете выполнить линейную регрессию. Столбец Y используется как зависимая переменная, и связанный столбец X используется как независимая переменная. Для расчетов столбец ошибки может быть выбран наряду с столбцом Y. Если окно графика активно, регрессия выполняется на активном графике.

Расчетная прямая ищется на основании исходных данных (X(i), Y(i)) по формуле  $Y(i) = A + B \cdot X(i)$ , где коэффициенты A и B находятся методом наименьших квадратов.

Диалоговое окно линейной подгонки состоит из раздела для непосредственных расчетов («Operation») и раздела установок («Settings») (рис. 3.6).

Раздел установок («Settings») инструмента «Linear Fit». *Группа опций расчетной кривой («Fit Curve Options»)*. Среди множества опций в данном разделе отметим некоторые из них.

Текстовое поле «Points» служит для ввода число точек, которые нужно использовать при построении расчетной прямой.

Текстовое поле «Range Margin» служит для ввода длины расчетной прямой (в процентах). Чем больше процент, тем длиннее расчетная прямая.

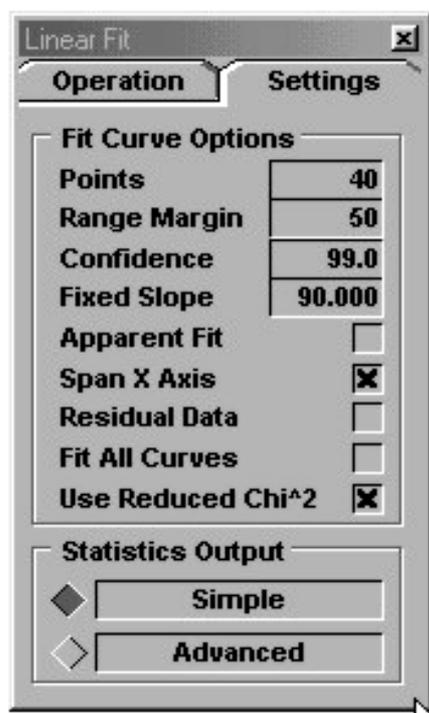
Напечатайте установленный угол наклона для расчетной прямой в связанном текстовом поле («Fixed Slope»). Чтобы использовать эту опцию, необходимо выбрать флажок «Fix Slope» в разделе «Operations».

Выберите флажок «Residual Data», чтобы создать два столбца в исходном рабочем листе. Один добавочный столбец содержит расчетные значения построенной прямой, а второй – разницу между расчетными и исходными данными.

*Группа вывода статистики («Statistics Output»)*. Выберите кнопку «Simple» для вывода простой статистики расчетов в результативном окне (коэффициенты A и B, коэффициент корреляции, стандартную ошибку, число точек, используемое для построения расчетной прямой и т.д.).



a)



b)

Рис. 3.6. Диалоговое окно линейной аппроксимации:

*a* – раздел операций; *b* – раздел установок

Выберите кнопку «Advanced» для вывода расширенного набора полученных данных (добавляются сложные виды статистических расчетов, как t-test, ANOVA и др.).

Раздел операций («Operation») инструмента «Linear Fit». Отметим некоторые опции в данном разделе.

Выберите флажок «Through Zero», чтобы выполнить линейную регрессию через ноль, когда кнопка «Fit» нажата.

Выберите флажок «Fix Slope», чтобы ограничить наклон расчетной прямой значением, указанным в текстовом поле «Fixed Slope» в разделе «Settings».

Флажок «Error as Weight» служит для учета ошибок при линейной аппроксимации. При этом график и рабочий лист должны содержать ошибку измерения.

Нажмите «Fit» для выполнения линейной регрессии на выбранном графике. После расчетов Origin создает новый (скрытый) рабочий лист, содержащий полученные данные, и составляет график этих данных в активном окне графика.

Пункт меню для полиномиальной аппроксимации данных («Polynomial Fit»). Для описания данных полиномиальной функцией выберите «Tools : Polynomial Fit» (см. рис. 3.2). Если рабочий лист активен, выбирая столбец Y, вы можете выполнить полиномиальную регрессию. Столбец Y используется как зависимая переменная, и связанный столбец X ис-

пользуется как независимая переменная. Для расчетов столбец ошибки может быть выбран наряду с столбцом Y. Если окно графика активно, регрессия выполняется на активном графике.

Расчетная кривая ищется на основании исходных данных  $(X(i), Y(i))$  по формуле  $Y(i) = A + B_1 * X(i) + B_2 * X^2(i) + B_3 * X^3(i) + \dots + B_k * X^k(i)$ , где коэффициенты A и  $B_k$  находятся методом наименьших квадратов.

Диалоговое окно полиномиальной подгонки состоит из раздела для непосредственных расчетов («Operation») и раздела установок («Settings») (рис. 3.7).

Раздел установок («Settings») инструмента «Polynomial Fit». *Группа опций расчетной кривой.* Среди множества опций в данном разделе отметим некоторые из них.

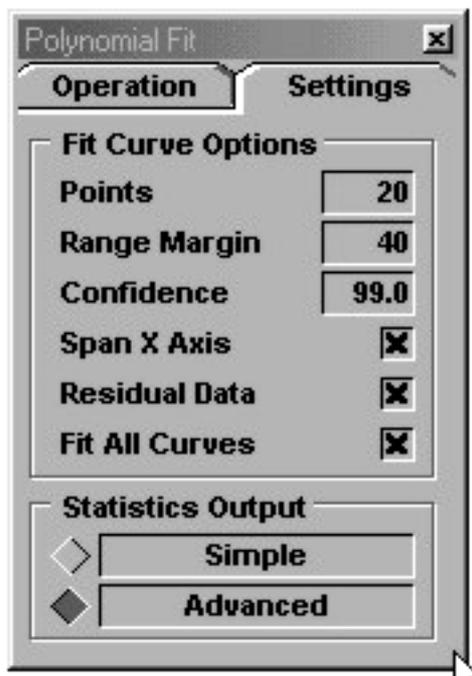
Текстовое поле «Points» служит для ввода число точек, которые нужно использовать при построении расчетной кривой.

Текстовое поле «Range Margin» служит для ввода длины расчетной кривой (в процентах). Чем больше процент, тем длиннее расчетная кривая.

Выберите флажок «Span X Axis», чтобы вычислить расчетную кривую, которая охватывает полную X ось.



a)



б)

Рис. 3.7. Диалоговое окно полиномиальной аппроксимации:

a – раздел операций; б – раздел установок

Выберите флажок «Residual Data», чтобы создать два столбца в исходном рабочем листе. Один добавочный столбец содержит расчетные значения построенной кривой, а второй – разницу между расчетными и исходными данными.

*Группа вывода статистики («Statistics Output»)*. Выберите кнопку «Simple» для вывода простой статистики расчетов в результативном окне (коэффициенты А и В, коэффициент корреляции, стандартная ошибка, число точек, используемое для построения расчетной кривой и т.д.).

Выберите кнопку «Advanced» для вывода расширенного набора полученных данных (добавляются сложные виды статистических расчетов, как t-test, ANOVA и др.).

Раздел операций («Operation») инструмента «Polynomial Fit». Данная группа подобна аналогичной группе для линейной аппроксимации.

Стоит отметить, что порядок регрессии (в пределах от одного до девяти) устанавливается с помощью кнопок вращения порядка.

Нажмите «Fit» для выполнения полиномиальной регрессии на выбранном графике. После расчетов Origin создает новый (скрытый) рабочий лист, содержащий полученные данные, и составляет график этих данных в активном окне графика.

Пункт меню для сигмоидальной аппроксимации данных («Sigmoidal Fit»).

Данный пункт меню используется тогда, когда для анализа вводимых данных можно использовать уравнение Больцмана.

## **4. Анализ данных. Пункт меню «Analysis»**

---

---

Для анализа данных имеется специальный пункт меню «Analysis». Этот пункт меню может служить как для анализа данных в рабочем листе, так и в построенном графике. Рассмотрим основные возможности данного пункта меню.

### **Анализ данных для активного графического окна**

Выполнение простых математических операций («Simple Math»). Чтобы исполнить какую-нибудь математическую операцию с одним или двумя наборами данных, выбирают пункт меню «Analysis:Simple Math» (рис. 4.1). Эта команда меню открывает диалоговое окно «Math on/between Dataset». Обратите внимание, что команда меню «Analysis:Simple Math» доступна только тогда, когда графическое окно активно. Когда активен рабочий лист, подобные результаты могут быть получены, выбирая «Column : Set Column Values».

Вычитание данных («Subtract : Reference Data»). Чтобы вычесть одни графические данные от других, выберите Analysis : Subtract : Reference Data (рис. 4.1). Эта команда меню открывает диалоговое окно «Math on\between Dataset» (рис. 4.2), где, выбирая соответствующие данные, можно выполнить операцию вычитания. Появляющееся диалоговое окно «Math on\between Dataset» аналогично диалоговому окну, появляющемуся при выборе пункта меню «Simple Math...».

Произведенные изменения отражаются и в рабочем листе!

Вычитание прямой линии («Subtract Straight Line»). Для определения прямой линии и дальнейшего вычитания построенной прямой из исходного графика выбирают «Analysis : Subtract Straight Line» (рис. 4.1). Когда эта команда меню выбрана, курсор приобретает вид перекрестия. Открывается дисплей данных и на нем указываются координаты курсора-перекрестия. Двойной щелчок в желательном местоположении устанавливает конечную точку прямой. Повтор данной операции позволяет ввести второй конец прямой и производить вычитание только что построенной прямой от исходного графика.

Произведенные изменения отражаются и в рабочем листе!

Вертикальная трансляция («Translate : Vertical»). Чтобы переместить данные активного графика вертикально (по Y оси), выберите «Analysis : Translate : Vertical» (рис. 4.1). Сначала необходимо путем изменения форму курсора выбрать какую-либо точку на графике

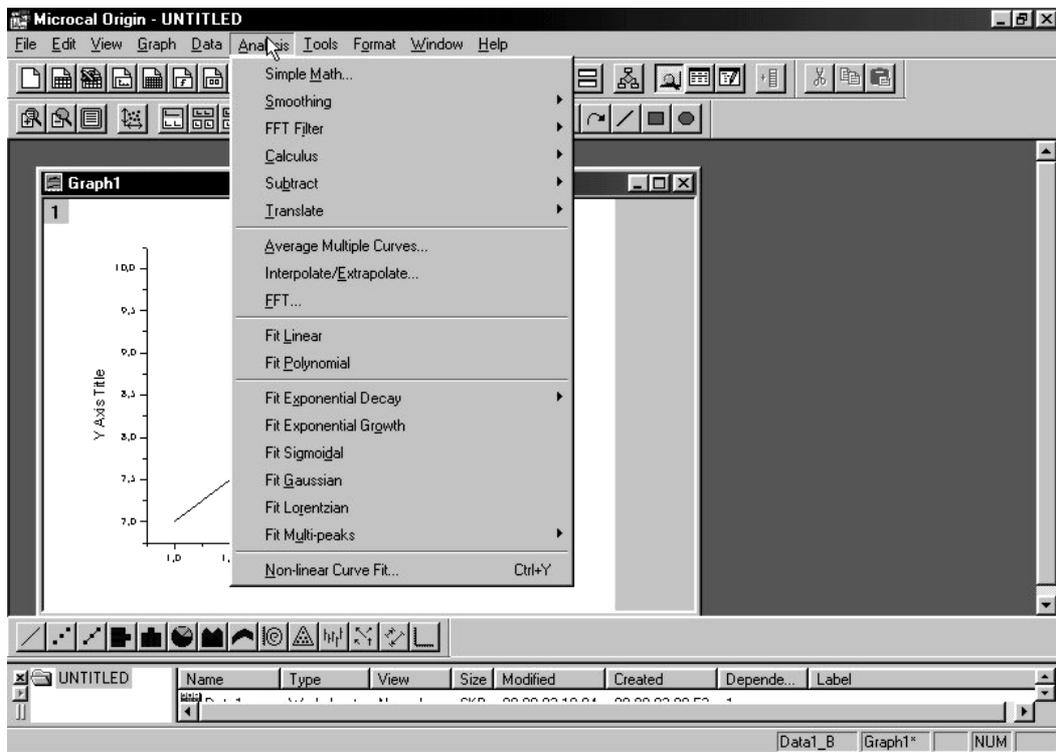


Рис. 4.1 Пункт меню «Analysis» при активном графическом окне

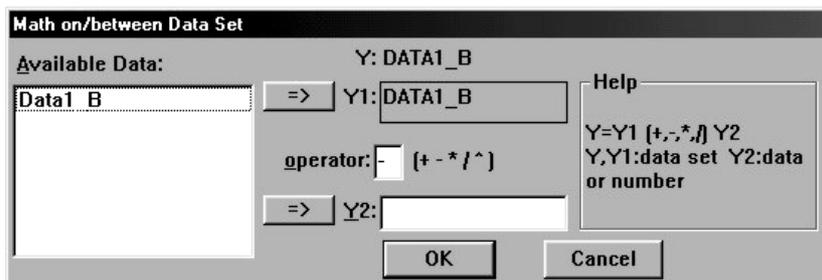


Рис. 4.2. Диалоговое окно «Math on\between Dataset»

данных и щелкнуть два раза на ней мышкой (это будет перемещаемое значение, а на графике возле указанной точки появятся две стрелки), затем необходимо указать позицию, на которую будет перемещена выделенная точка. Для этого указывают курсором на новое значение, отображаемое на дисплее данных, и опять два раза щелкают мышкой. Origin вычисляет разницу в Y между двумя выбранными Y-координатами и добавляет это значение ко всем Y данным. После этого весь график перемещается на новое положение.

Эта команда меню изменяет Y набор данных в рабочем листе.

Горизонтальная трансляция («Translate:Horizontal»). Чтобы переместить данные активного графика горизонтально (по X оси), выберите «Analysis : Translate : Horizontal». Сначала необходимо путем изменившего форму курсора выбрать какую-либо точку на графике данных и щелкнуть два раза на ней мышкой (это будет перемещаемое значение, а на графике возле указанной точки появятся две стрелки), затем необходимо указать позицию, на которую будет перемещена выделенная точка. Для этого указывают курсором на новое значение, отображаемое на дисплее данных, и опять два раза щелкают мышкой. Origin вычисляет разницу в X между двумя выбранными X координатами и добавляет это значение ко всем X данным. После этого весь график перемещается на новое положение.

Эта команда меню изменяет X набор данных в рабочем листе.

Построение средней кривой из нескольких кривых («Average Multiple Curves»). Чтобы вычислять среднее число для значений Y для всех графиков, находящихся в активном графическом окне для каждого значения X, выберите Analysis : Average Multiple Curves (см. рис. 4.1). В результате

складываются все значения  $Y$  для всех построенных графиков и делятся на общее число кривых. Итоговый результат будет сохранен в новом рабочем листе, а результирующая кривая будет добавлена в графическое окно.

Интерполяция и экстраполяция («Inter/Extrapolate»). Чтобы интерполировать или экстраполировать активный график, выберите «Analysis : Inter/Extrapolate» (см. рис. 4.1). После этого необходимо ввести минимальные и максимальные значения для результирующей кривой и общее число образующихся точек в образующемся диалоговом окне «Make Interpolated Curve from Data1\_B» (рис. 4.3). Вы не ограничены первоначальной длиной. После нажатия «ОК» результат будет сохранен в новом скрытом рабочем листе и образуется новый график.

Дифференцирование («Differentiate»). Чтобы вычислить производную для активного графика данных, выберите «Analysis : Calculus : Differentiate» (см. рис. 4.1). Origin вычисляет производную и добавляет эти данные как новый столбец в имеющийся рабочий лист.

Дифференциация/сглаживание с использованием метода Savitzky-Golay («Calculus : Diff/Smooth»). Чтобы находить первые или вторые производные для активного окна графика данных, выберите «Analysis : Calculus : Diff/Smooth» (см. рис. 4.1). Эта команда меню открывает два диалоговых окна. Первое диалоговое окно «Smoothing» (рис. 4.4) позволяет определить, сколько данных необходимо использовать программой расчета. Второе диалоговое окно «Derivatives on Data1\_B» (рис. 4.4) позволяет выбирать первые или вторые производные для вычисления. Команда меню Diff/Smooth использует Savitzky-Golay метод сглаживания, который исполняет местную полиномиальную регрессию вокруг каждой точки. Результат записывается в отдельный скрытый рабочий лист «Smoothed#».

Интегрирование («Integrate»). Чтобы проинтегрировать активный график данных от базовой нулевой линии, используя правило трапеций, выберите «Analysis : Calculus : Integrate» (рис. 4.1). На экран будут выведены результаты интегрирования, в том числе площадь под кривой, максимальное отклонение от  $X$  оси и некоторые другие. ORIGIN может вычислять и объем фигур, но в этом случае исходные данные должны находиться в матрице данных.

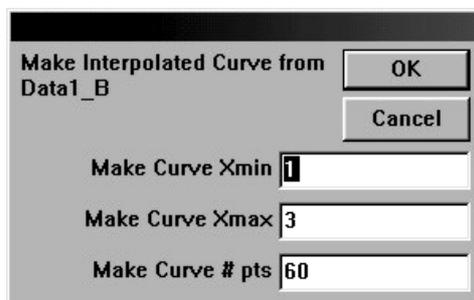
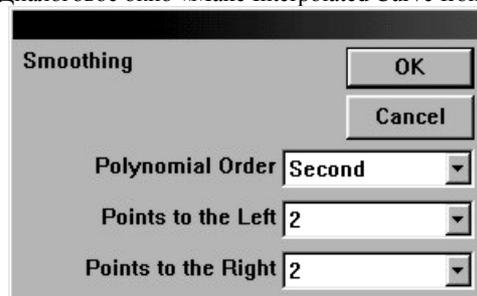
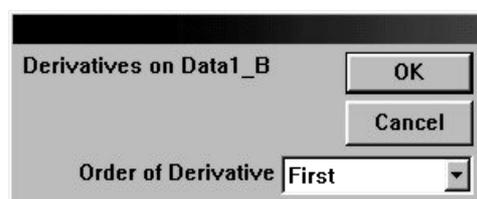


Рис. 4.3. Диалоговое окно «Make Interpolated Curve from Data1\_B»



a)



б)

Рис. 4.4. Диалоговые окна для сглаживания (а) и нахождения производных (б) методом Savitzky-Golay

Сглаживание данных («Smoothing»). Origin обеспечивает следующее сглаживание данных:

сглаживание, использующее фильтрацию Savitzky-Golay;

сглаживание, использующее среднее;

сглаживание с использованием FFT (быстрое преобразование Фурье).

Три метода сглаживания доступны от меню «Analysis : Smoothing» (см. рис. 4.1). Сглаженные данные помещаются в скрытый рабочий лист по имени «Smoothedn». Можно также заменять первоначальные данные в рабочем листе вместо создания нового рабочего листа.

1. Сглаживание, использующее метод Savitzky-Golay.

Чтобы сгладить активный график данных, используя метод Savitzky-Golay, выберите «Analysis : Smoothing : Savitzky-Golay». Эта команда меню открывает диалоговое окно «Smoothing» (рис. 4.5). Степень полинома для сглаживания имеет значение по умолчанию 2, с верхним пределом 9. Этот параметр позволяет Вам улучшать сглаживание. Чтобы изменить это значение, выберите желательное значение из раскрывающегося списка.

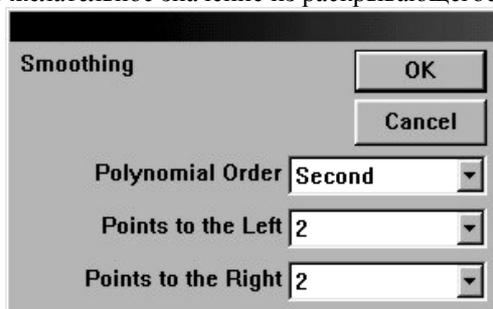


Рис. 4.5. Диалоговое окно сглаживания методом Savitzky-Golay

2. Сглаживание, использующее среднее.

Чтобы сгладить активный график данных, используя метод среднего, выберите «Analysis : Smoothing : Adjacent Averaging» (см. рис. 4.1). Эта команда меню открывает диалоговое окно «Smoothing» (рис. 4.6). Определите номер, который управляет степенью сглаживания. Если Вы вводите нечетное число  $n$ , то используются точки  $n$ , чтобы вычислить каждый усредненный результат. Если Вы вводите четное число  $m$ , то используются точки  $m + 1$ , чтобы вычислить каждый усредненный результат. Сглаженное значение по индексу  $i$  – среднее число, для данных в интервале  $[i - (n - 1) / 2, i + (n - 1) / 2]$ .

3. Сглаживание с использованием быстрого преобразования Фурье (FFT).

Чтобы сгладить активный график данных с помощью FFT, выберите «Analysis : Smoothing : FFT Filter». Эта команда меню открывает диалоговое окно Smoothing (рис. 4.7), в котором Вы определяете,

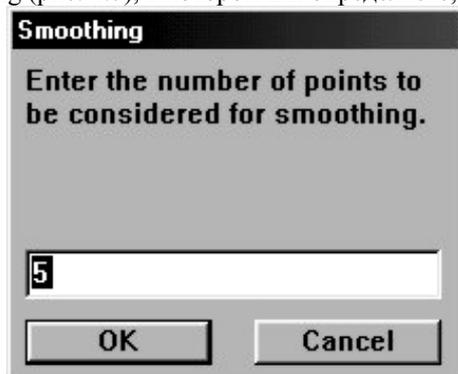


Рис. 4.6. Диалоговое окно сглаживания методом среднего

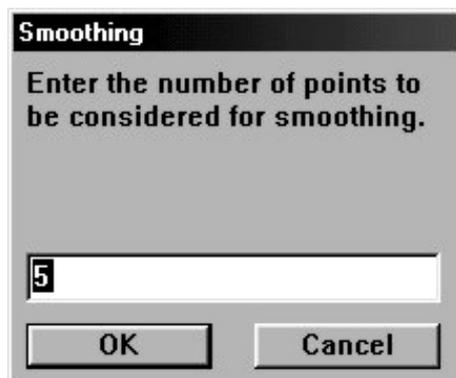


Рис. 4.7. Диалоговое окно сглаживания с помощью FFT

сколько данных нужно указать одновременно, чтобы рассмотреть подпрограмму сглаживания.

Линейная («Linear») и полиномиальная («Polynomial») аппроксимация. Для описания имеющихся данных с помощью линейной ( $Y = A + BX$ ) или полиномиальной ( $Y = A + B_1 * X + B_2 * X^2 + B_3 * X^3 + \dots + B_k * X^k$ ) зависимости в ORIGIN имеются специальные пункты меню «Analysis». Данные опции меню схожи с аналогичными опциями меню «Tools», о которых довольно подробно изложено в параграфе, посвященном пункту меню «Tools».

Другие математические функции ORIGIN пункта меню «Analysis». Помимо линейной и полиномиальной зависимостей в ORIGIN имеется большой выбор функций, служащих для аппроксимации вводимых данных.

Так, например, если вводимые данные распределены по экспоненциальной зависимости, то существуют пункты меню «Analysis : Fit Exponential Decay» и «Analysis : Fit Exponential Growth» (см. рис. 4.1), необходимые для получения формулы, пригодной для описания исходных данных.

Аналогично можно использовать для анализа вводимых данных уравнение Гаусса («Analysis : Fit Gaussian»), Лоренца («Analysis : Fit Lorentzian»), Больцмана («Analysis : Fit Sigmoidal») и т.д.

Более полный набор математических функций можно получить с помощью пункта меню «Analysis : Non-linear Curve Fit» (см. рис. 4.1).

#### Анализ данных для активного рабочего листа

Когда рабочий лист активен, много пунктов меню «Analysis» посвящено статистическим процедурам (рис. 4.8). Вообще, Origin позволяет проводить как простые статистические измерения (среднее, среднеквадратичное отклонение, поиск минимума, максимума, построение статистических гистограмм), так и более сложные измерения (t-test, ANOVA, множественный регрессионный анализ и др.). Методам сложного статистического анализа будет посвящен отдельный раздел данного параграфа.

Статистика по столбцам («Statistics on Columns»). Чтобы выполнить статистику по данным рабочего листа, выделите желательные столбцы или диапазон ячеек и выберите «Analysis : Statistics on Columns» (рис. 4.8). Эта команда меню создает новый рабочий лист, который отображает среднее, среднеквадратичное отклонение, стандартную ошибку среднего, минимум, максимум, общую сумму и т.д. для каждого из выделенных столбцов в активном рабочем листе.

Новый рабочий лист содержит кнопку «Recalculate», чтобы повторно вычислить данные статистики при изменении данных столбца.

Статистика по строкам («Statistics on Rows»). Чтобы выполнить статистику по строкам данных, выделите желательные ячейки и выберите «Analysis : Statistics on Rows» (см. рис. 4.8). Эта команда меню создает новый рабочий лист, который отображает среднее, среднеквадратичное отклонение, стандартную ошибку среднего, минимум, максимум и т.д. для каждой из выделенных строк в активном рабочем листе.

Построение статистических графиков. В ORIGIN имеется достаточно большой выбор средств для построения статистических графиков. Мы не будем подробно описывать все возможности ORIGIN в этом направлении, а рассмотрим лишь некоторые.

Чтобы создавать статистическую полевую диаграмму, выделите один или большее количество Y столбцов рабочего листа и выберите «Plot : Statistical Graphs : Box Chart». Каждый столбец Y данных представлен здесь как отдельное поле. В каждом поле показаны такие статистические величины, как среднее, минимум, максимум и т.д.

Можно создать и QC-диаграммы, которые позволяют изучить колебание данных в непрерывном процессе. Для создания диаграммы QC выделите по крайней мере один столбец значений (или диапазон) и выберите «Plot : Statistical Graphs : QC». Origin тогда создает рабочий лист и окно графика, отображающее два уровня. Рабочий лист содержит данные анализа, среди которых: среднее, среднеквадратичное отклонение для каждой подгруппы в выбранном наборе данных.

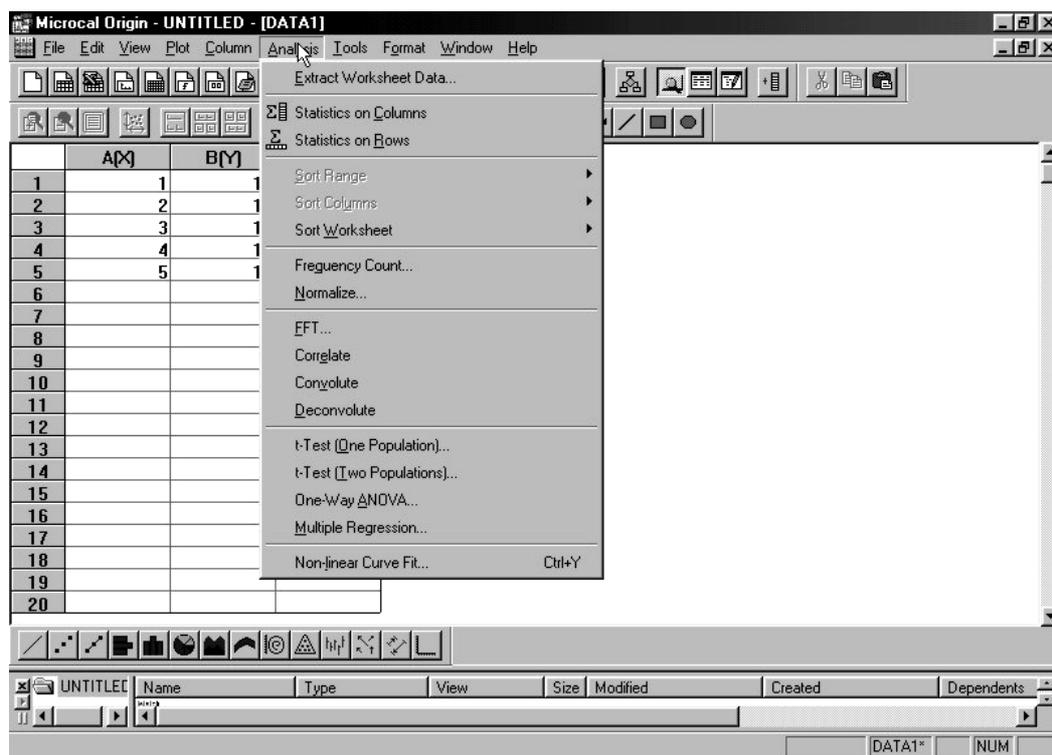


Рис. 4.8. Пункт меню «Analysis» при активном рабочем листе

Сортировка данных («Sort»). Origin может сортировать отдельные столбцы, несколько выделенных столбцов, выделенный диапазон рабочего листа или полный рабочий лист. Origin предлагает простую и групповую сортировку.

В простой сортировке указанные данные сортируются, используя, как основание, один столбец и выбранный порядок сортировки. Чтобы исполнять простую сортировку, выберите «Analysis : Sort Columns» (см. рис. 4.8). Определите возрастание «Ascending» или убывание «Descending» от связанного подменю. Если вы выделите диапазон столбцов рабочего листа или диапазон значений в множественных столбцах, Origin сортирует только выбранные данные, причем сортировка основана на крайнем левом выбранном наборе данных и выбранном порядке сортировки.

Для исполнения простой сортировки всего рабочего листа выберите «Analysis : Sort Worksheet» (см. рис. 4.8). Origin сортирует полный рабочий лист на основании крайнего левого столбца рабочего листа и выбранного порядка сортировки.

Сортировка «Custom» позволяет учитывать несколько столбцов.

Определение частотного индекса («Frequency Count»). Данная функция показывает распределение исходных данных. Для этого надо выбрать пункт меню «Analysis : Frequency Count» (см. рис. 4.8). Открывается диалоговое окно «Count Dataset» (рис. 4.9), в котором вводятся минимальные и

максимальные значения и приращение шага. Исходя из данной информации, Origin делает установленные шаги и отмечает число шагов при каждом попадании данных. Помимо числа шагов, указываются некоторые статистические параметры для исходных данных.

Нормализация данных («Normalize»). Чтобы подвергнуть нормализации набор данных или диапазон значений в наборе данных, выделите желательный столбец и выберите «Analysis : Normalize». Эта команда меню открывает диалоговое окно «Normalizing Dataset». Диалоговое окно отображает минимумы и максимумы для выбранных значений и обеспечивает текстовое поле, чтобы ввести числовое значение. Когда Вы нажимаете ОК, Origin делит все значения на введенное число (рис. 4.10).

Множественная регрессия («Multiple Regression»). Выбор пункта меню «Analysis : Multiple Regression» (см. рис. 4.8) приводит к поиску коэффициентов  $A$  и  $B_k$  в формуле  $Y = A + B_1 \cdot X_1 + B_2 \cdot X_2 + \dots + B_k \cdot X_k$ , если одна колонка рабочего листа содержит независимую переменную  $X$ , а вторая – зависимую переменную  $Y$ .

Сложные виды статистической обработки данных. В ORIGIN имеется возможность использования таких видов статистической обработки данных, как t-test и ANOVA. Использование данных возможностей довольно специфично, поэтому мы остановимся только на кратком описании данных операций.

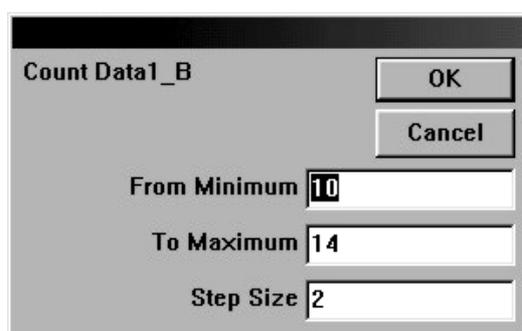


Рис. 4.9. Диалоговое окно для определения частотного индекса

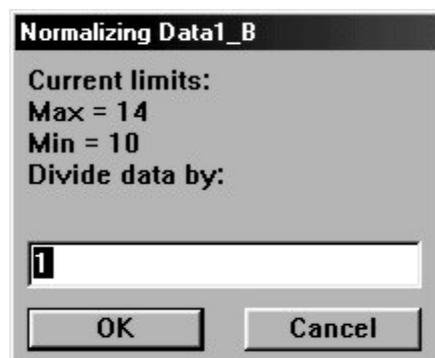


Рис. 4.10. Диалоговое окно сглаживания с помощью FFT

ANOVA используется для одновременного сравнения средних в нескольких группах, при этом предполагается, что сравниваемые переменные нормально распределены внутри групп и имеют одну и ту же дисперсию. Иными словами, предполагается, что различие между группами проявляется только в средних, но не в дисперсиях.

T-test предназначен для проверки гипотезы о равенстве математического ожидания переменной заданной величине.

Быстрый Фурье-анализ (FFT). Вызвать данную функцию и ее приложения можно как при активном рабочем листе, так и при активном графическом окне.

Несколько слов о быстром Фурье-анализе (FFT): большинство сложных алгоритмов цифровой обработки звука сейчас работают с частотной информацией, в то время как в подавляющем большинстве случаев информация представлена в виде зависимости амплитуды от времени (.wav файлы). Для того, чтобы обработать информацию, приходится переводить ее в частотный вид, обрабатывать, а затем переводить обратно. Сама обработка

здесь пока не затрагивается, описаны лишь общие для всех подобных алгоритмов проблемы разложения сигнала на частотные составляющие.

Для разложения сигнал в его частотные составляющие используется дискретное преобразование Фурье. В нашем случае это преобразование переводит  $N$  последовательных значений амплитуды сигнала в  $N/2 + 1$  пар коэффициентов  $Re[n]$ ,  $Im[n]$ .

Смысл преобразования в том, что если сложить  $N/2 + 1$  функций:  $Re[n] * \sin x + Im[n] * \cos x$ , где функции  $\sin x$  и  $\cos x$  с периодом, повторяющимся соответственно от 0 (константа) до  $N/2$  раз (0, 1, 2, 3, 4, ...,  $N/2$ ), то с некоторой степенью точности получится исходная функция –  $N$  значений амплитуды.

По формулам приведения можно преобразовать пару коэффициентов –  $Re[n]$ ,  $Im[n]$ , в другую, более полезную нам пару – амплитуду, перед  $\sin x$  –  $A[n]$ , и фазу этой синусоиды  $Ph[n]$ . Таким образом, упрощенно можно считать, что преобразование Фурье переводит  $N$  значений амплитуд в  $N/2$  синусоиды (отдельные частоты) с амплитудами  $A[n]$  и фазами  $Ph[n]$ , плюс константа.

Для серьезного ускорения процесса существует хитрый алгоритм – быстрое преобразование Фурье, БПФ, или по английски – FFT. FFT работает с комплексными числами и размерами преобразований, представляющими из себя степень двойки (128, ..., 1024, 2048 и т.д.). Не стоит однако думать, что FFT – это что-то другое, нежели разложение Фурье. Это абсолютно то же самое, просто в сотни раз быстрее. Комплексные коэффициенты – это не что иное, как коэффициенты перед  $\cos$  ( $Im[n]$ ), а действительные – перед  $\sin$ . В большинстве современных алгоритмов применяется FFT, поэтому это название прочно закрепилось за всеми алгоритмами, которые раскладывают сигнал на частоты.

## 5. Импорт и экспорт файлов данных

---

---

Origin обеспечивает инструментальные средства для импортирования данных в рабочие листы, включая импортирование файла данных в рабочий лист импортирование множественных файлов данных ASCII в отдельный рабочий лист, или импортирование множественных файлов данных ASCII в множественные рабочие листы. Дополнительно Origin обеспечивает инструментальные средства для импортирования отдельных или множественных файлов данных ASCII в окно графика.

Импортирование единственного файла ASCII. Чтобы импортировать единственный файл ASCII в окно графика, выберите File : Import ASCII : Single File, когда нужный график активен. Аналогично можно импортировать единичный файл в окно рабочего листа.

Когда рабочий лист активен, файлы ASCII, Lotus, Excel, dBASE, звуковые файлы, матрицы от Mathematica и некоторые другие могут быть импортированы. В дальнейшем мы будем рассматривать импорт только в рабочий лист. Импорт в окно графика происходит аналогично.

Чтобы импортировать данные в рабочий лист, выберите «File : Import : Single ASCII» (рис. 5.1). Эта команда меню открывает диалоговое окно ASCII Импорта. Выберите желательный файл ASCII от списка и нажмите Open.

Origin использует заданные по умолчанию параметры настройки импорта, указанные в Опциях Импорта ASCII для рабочего листа. В большинстве случаев заданные по умолчанию параметры настройки импорта приемлемы для импортирования файла данных. Origin исследует файл данных, ищет столбцы чисел и игнорирует что-нибудь еще. В некоторых случаях, однако, следует определить представление данных и параметры настройки импорта явно.

Для просмотра или изменения параметров настройки импорта нажмите Options в диалоговом окне импорта ASCII файла или выберите

«File : Import : ASCII Options». После того, как параметры настройки импорта настроены в Опциях ASCII Импорта для диалогового окна Worksheet, нажимают «Update Options», чтобы продолжить использовать эти параметры настройки для текущего рабочего листа (рис. 5.2).

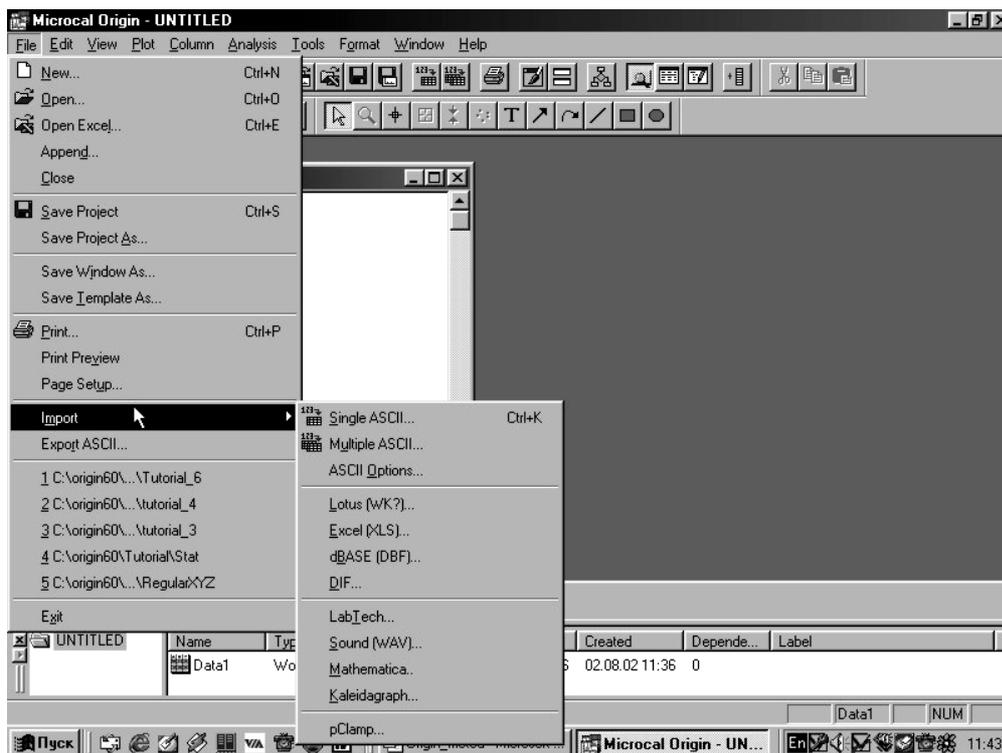


Рис. 5.1. Меню для импорта или экспорта файлов данных

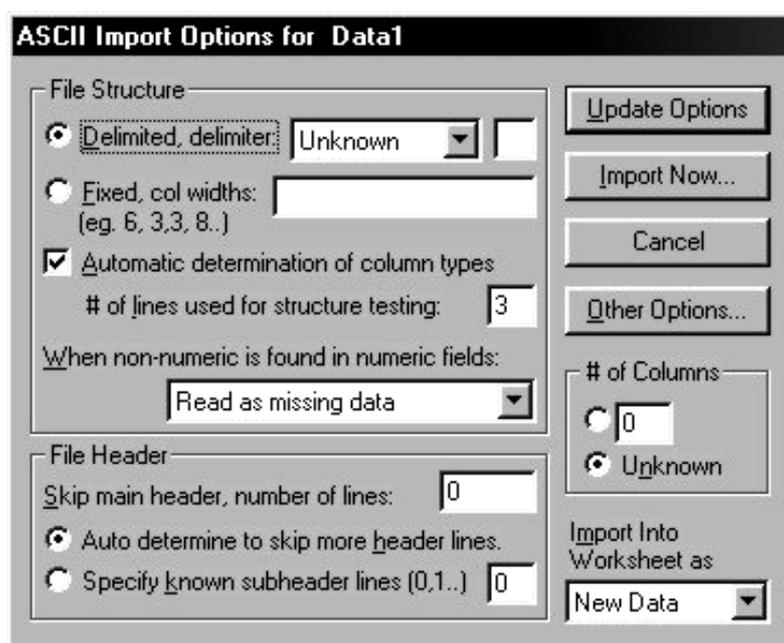


Рис. 5.2. Диалоговое окно для изменения опций импорта файлов

#### Некоторые опции для импорта ASCII файлов

Группа определения структуры импортируемого файла («File Structure»). В верхней части данной группы находятся установки для ввода

символа (обычно запятая, символ табуляции или незаполненное пространство) в файле данных, служащих для разграничения данных в файле.

Origin обычно правильно определяет структуру файла при импортировании, но иногда может иметь трудности с очень сложными файлами.

Для разграниченного файла выберите символ разграничения в раскрываемом списке «Delimited, delimiter:» или выберите Other в раскрываемом списке и введите символ разграничения в рядом находящемся текстовое поле. Если выбирается «Unknown», Origin будет искать в файле непротиворечивый разделитель.

Выбор «Fixed, col width: (e.g. 6, 3,3, 8..)» позволяет ввести в соответствующее текстовое поле ширину каждого колоночного поля в импортируемом файле.

Когда стоит флажок «Automatic determination of column types», Origin автоматически определяет, содержит ли каждый столбец текстовые или числовые данные, и устанавливает каждый тип столбца рабочего листа соответственно. Когда флажок очищен, Origin сохраняет параметры настройки типа столбца рабочего листа, в который Вы импортируете данные.

Функция «# of lines for structure testing:» служит для определения числа строк, используемых для определения структуры файла. Введите номер, который является большим чем размер заголовка, но меньшим чем размер файла.

И наконец раскрывающийся список «When non-numeric is found in numeric field:» служит для определения действий программы, когда в числовом поле данных попадает не числовая запись. В этом случае возможны варианты выбора, такие как прекращение импорта, импорт в новый рабочий лист и т.д.

Группа установки заголовка импортируемого файла («File Header»). В данной группе находятся установки, определяющие число строк в начале файла, которые должны игнорироваться перед тем, как Origin начинает импортировать данные. Стоит порекомендовать авторежим и тогда Origin пропускает строки, пока не сталкивается с непротиворечивой и распознаваемой структурой файла.

Группа установки числа импортируемых столбцов («# of Columns»). Данная группа служит для импорта всех столбцов или ограничения импортируемых столбцов. Число столбцов вводится в текстовое поле, располагающееся в данной группе.

Группа вариантов импорта в рабочий лист («Import Into Worksheet as»). Эта опция определяет, как импортированные данные добавлены к активному рабочему листу. Опция New Data допускает перезаписи существующих данных рабочего листа. Опция New Columns добавляет новые столбцы направо от текущих столбцов в рабочем листе. Опция New Rows добавляет новые строки к основанию рабочего листа.

Кнопка «Other Options...» позволяет открывать дополнительные опции, разрешающие использовать названия колонок в импортируемом файле для названия столбцов в рабочем листе, имя файла для названия рабочего листа и т.д.

После внесения необходимых опций у Вас имеются две кнопки выбора для произведения дальнейших действий.

1) Кнопка «Update Options» сохраняет текущие параметры настройки и закрывает диалоговое окно.

2) Кнопка «Import Now» открывает диалоговое окно импорта файлов после того, как Вы удовлетворены параметрами настройки диалогового окна.

В появляющемся диалоговом окне импорта файлов имеется флажок «Partial Import», при установке которого возникает диалоговое окно для частичного импорта «Import Verification» (рис. 5.3).

Как видно из рис. 5.3 в данном диалоговом окне вверху содержатся параметры импортируемого файла (имя файла, путь, число строк и столбцов).

Выбирая опцию «Partial Import», определяем диапазон импорта файла, печатая желательные диапазоны «От» и «До» пределов в текстовые поля «Column» и «Row».

Внизу диалогового окна для частичного импорта находятся флажки для изменения параметров импорта. Возможны три варианта:

1. «Replace Existing Data from Row 1 Column 1» – перезаписывает данные из импортируемого файла на место старых данных в открытом рабочем листе.

2. «As New Columns from 1<sup>st</sup> Empty Column» – создает новые колонки, не удаляя старых данных в открытом рабочем листе.

3. «Append to End of Existing Data from Column 1» – продолжает колонки, начиная с первой и добавляя данные в конец, не удаляя старых данных в открытом рабочем листе

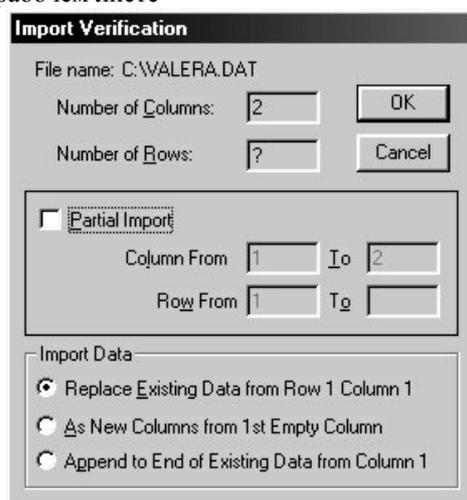


Рис. 5.3. Диалоговое окно частичного импорта файлов

Импорт множественных ASCII файлов данных производится аналогично импорту единичного файла (пункт меню «File : Import : Multiple ASCII»). При этом возможен импорт в рабочий лист или в несколько рабочих листов. Для этого существует единичный флажок на диалоговом окне для импорта нескольких файлах.

Экспорт файлов происходит при выборе пункта меню «File : Export ASCII» (см. рис. 5.1). При этом возникает диалоговое окно, которое довольно просто и мы на описании его останавливаться не будем.

## 6. ПРИМЕРЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ ORIGIN

---

---

### ПРИМЕР 1

Вывод формулы зависимости атомной амплитуды рассеяния рентгеновских лучей от угла дифракции  $\theta$  для атома углерода.

При исследовании структуры различных материалов методом рентгеноструктурного анализа, особенно при изучении некристаллических веществ, часто возникает необходимость установления зависимости интенсивности когерентного рассеяния атомами  $I_{\text{ког}}$  от угла дифракции  $\theta$ .

Интенсивность рассеяния одним атомом определяется следующим образом:

$$I_{\text{ат}}(\sin \theta / \lambda) = I_e * F^2(\sin \theta / \lambda),$$

где  $I_e$  – интенсивность рассеяния одним электроном;  $F(\sin \theta / \lambda)$  – атомная амплитуда рассеяния рентгеновских лучей;  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения;  $\theta$  – угол дифракции рентгеновских лучей.

Однако, в специальных таблицах зависимость  $F(\sin \theta / \lambda)$  дается дискретными значениями (табл. 6.1), что явно недостаточно для построения подробной зависимости интенсивности рассеянных рентгеновских лучей от угла дифракции.

Для установления зависимости  $F(\sin \theta / \lambda)$  мы использовали полиномиальную регрессию 6-й степени (пункт меню «Analysis : Fit Polynomial»). При этом помимо самой зависимости на графике выводится расчетная кривая, обозначенная красным цветом.

6.1. Атомная амплитуда рассеяния рентгеновских лучей для атома углерода

$\sin \theta / \lambda$	$\theta$	$F(\sin \theta / \lambda)$
0	0	6
0,1	8,86	5,141
0,2	17,94	3,612
0,3	27,52	2,538
0,4	38	1,983
0,5	50,35	1,707
0,6	67,52	1,548

Примечание. В данной таблице длина волны рентгеновского излучения соответствует 0,154 нм (медное излучение).

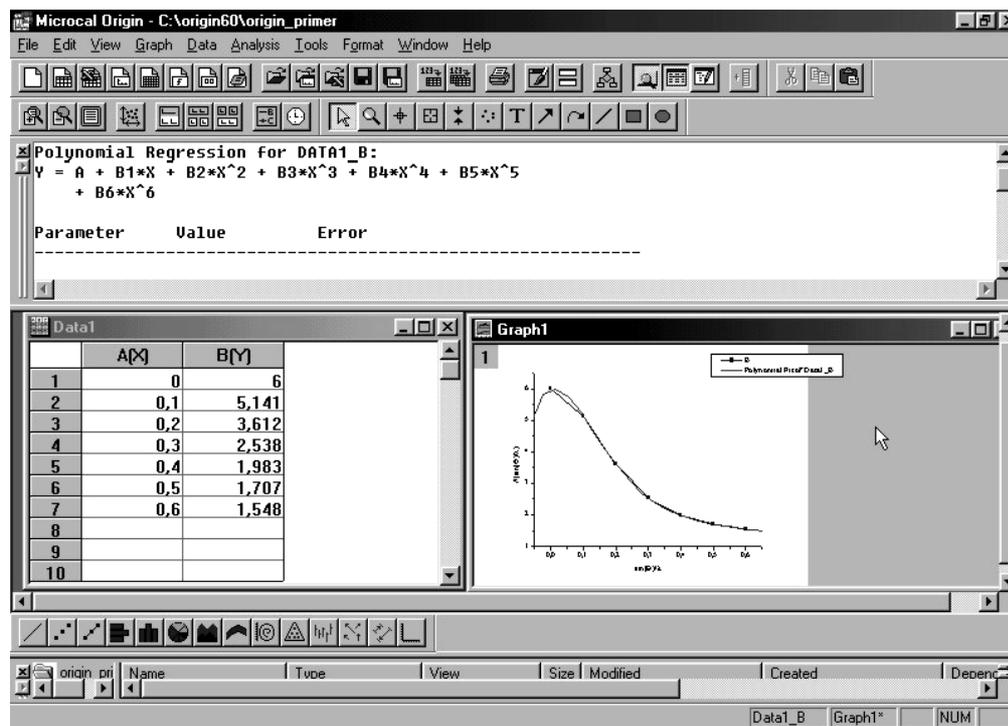


Рис. 6.1. Результат использования полиномиальной регрессии для вывода зависимости атомной амплитуды рассеяния рентгеновских лучей от угла  $\theta$

В результате расчетов была получена следующая формула (см. рис. 6.1):

$$F(X) = A + B1*X + B2*X^2 + B3*X^3 + B4*X^4 + B5*X^5 + B6*X^6,$$

где

$$X = \sin \theta / \lambda;$$

$$A = 6; B1 = 3,3015; B2 = -184,19167;$$

$$B3 = 790,72917; B4 = -1515,625;$$

$$B5 = 1412,08333; B6 = -520,83333.$$

С помощью данной формулы мы можем определить интенсивность когерентного рассеяния рентгеновских лучей атомами углерода для любого угла дифракции  $\theta$ , что особенно важно при структурном анализе жидкостей, аморфных и мезоморфных соединений [3, 4].

## ПРИМЕР 2

Определение характера зависимости вероятности образования трещин при индентировании от нагрузки на индентор для термически обработанного аморфного металлического сплава (см. [5] и ссылки там).

Полученные в результате проведения физических экспериментов данные приведены в табл. 6.2.

Обработку экспериментальных результатов проводили следующим образом. При индентировании образование отпечатка сопровождается или не сопровождается зарождением трещин. Если в результате индентирования возникла трещина, то вероятность считали равной единице. Если трещин не образовывалось, вероятность считали равной нулю. Каждая экспериментальная точка на рис. 6.2 соответствует 20 опытам. Затем количество нагружений, при которых образовались трещины, разделили на общее количество нагружений. Данные результаты приведены в табл. 6.2.

Линейные зависимости, полученные при аппроксимации экспериментальных данных, приведены на рис. 6.2, рисунок экспортирован в формате BMP (в черно-белом формате, с изменением количества точек). Для аппроксимации экспериментальных данных необходимо выполнить следующие операции:

- 1) в программу IRIGIN ввести данные, приведенные в табл. 6.2;
- 2) выделив данные с помощью меню «PLOT. SCATTER», построить графическую зависимость;
- 3) линейные зависимости строить с помощью пунктов меню «ANALYSIS. FIT LINEAR».

Таблица 6.2.

Нагрузка (граммы)	Отношение количества нагружений, при которых образовались трещины, к общему количеству нагружений, для различных температур					
	888 К	823 К	783 К	773 К	763 К	748 К
50	0					
60	0,05					
70	0,05	0				
80	0,4	0,15				
90	0,55	0,5				
100	0,65	0,8		0		
110	0,95	0,85	0	0,4	0,05	
120	1	1	0,2	0,6	0,15	
130			0,2	0,8	0,3	
140			0,3	0,9	0,5	
150			0,3	0,9	0,6	
160			0,8	1	0,8	
170			1		0,8	

180					0,9	
190						
200						0,05
240						0,15
280						0,2
320						0,3
360						0,4
400						0,35

Линейная зависимость  $b$ , в целях удобного (не сжатого) отображения зависимостей 1 – 5, приведена на рисунке частично.

В табл. 6.3. приведены коэффициенты линейных зависимостей и коэффициенты корреляции. Высокие коэффициенты корреляции, от 0,92 до 0,99, косвенно свидетельствуют о том, что данный физический процесс действительно описывается линейной зависимостью.

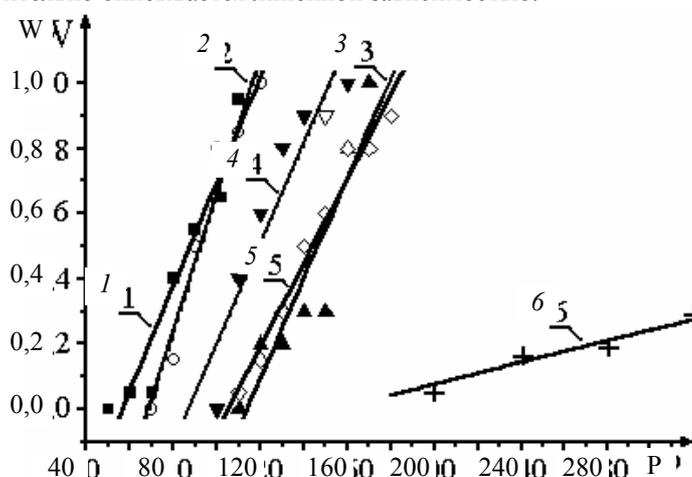


Рис. 6.2. Зависимость вероятности (W) образования трещин при индентировании от нагрузки на индентор (P). Температуры отжига и значения коэффициентов для приведенных зависимостей равны соответственно:

- 1, O –  $T_{от} = 888$  K,  $a = 0.016$ ,  $b = -0.905$ ;
- 2, F –  $T_{от} = 823$  K,  $a = 0.021$ ,  $b = -1.459$ ;
- 3, ▲ –  $T_{от} = 783$  K,  $a = 0.015$ ,  $b = -1.75$ ;
- 4, ▼ –  $T_{от} = 773$  K,  $a = 0.015$ ,  $b = -1.339$ ;
- 5, ◇ –  $T_{от} = 763$  K,  $a = 0.013$ ,  $b = -1.352$ ;
- 6, + –  $T_{от} = 748$  K,  $a = 0.002$ ,  $b = -0.262$

### 6.3. Температуры отжига и коэффициенты линейных зависимостей и корреляции $W = a \cdot P + b$

$T_{от}, K$	A	B	R
748	0,002	-0,262	0,952
763	0,013	-1,352	0,986
773	0,015	-1,339	0,934
783	0,015	-1,75	0,92
823	0,021	-1,459	0,977
888	0,016	-0,905	0,977

Таким образом, анализ данных показывает, что по мере повышения температуры отжига линейно снижается нагрузка, необходимая для образования трещин при индентировании.

Пример 3

Анализ дифрактограммы для полидиметилсилана

При проведении рентгеновских исследований любого вещества важной задачей является правильный анализ полученных экспериментальных данных. Одним из важнейших этапов обработки дифрактометрических экспериментальных результатов является установление углового положения дифракционных максимумов, на основании которых проводится дальнейший расчет структуры. В нашем примере в качестве образца использовался полимер – полидиметилсилан (ПДМС), синтезированный в институте нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева в городе Москве.

Это кристаллический полимер, дифрактограмма которого представлена на рис. 6.3. Для получения более наглядной дифрактометрической кривой сначала была применена процедура сглаживания (пункт меню «Tools : Smooth : Adjacent Averaging»). Исходная и сглаженная кривые представлены на рис. 6.3.

После этого мы убрали фоновое рассеяние путем проведения (кнопка «Automatic» инструмента «Baseline», рис. 6.3), модификации (кнопка «Modify») и вычитания базовой линии (кнопка «Substract»). Затем были установлены положения максимумов для кристаллических рефлексов с помощью пункта меню «Tools : Pick Peaks». Результаты проведения вышеуказанных операций представлены на рис. 6.4.

Результат анализа дифрактограммы ПДМС приведен в табл. 6.4. Межплоскостные расстояния  $d$  были рассчитаны по формуле Вульфа–Брэгга для медного излучения ( $\lambda = 0,154$  нм).

Полученные результаты затем использовались для анализа структуры и установления особенностей температурного поведения данного полимера, в том числе для определения типа и параметров кристаллической решетки в процессе нагрева [6].

6.4. Определенные угловые положения  $2\theta$  для кристаллических рефлексов и соответствующие им межплоскостные расстояния  $d$

Номер рефлекса	$2\theta$	$d$
1	13,2	6,71
2	14,55	6,09
3	21,9	4,06
4	26,35	3,38
5	27,25	3,27
6	29,3	3,05

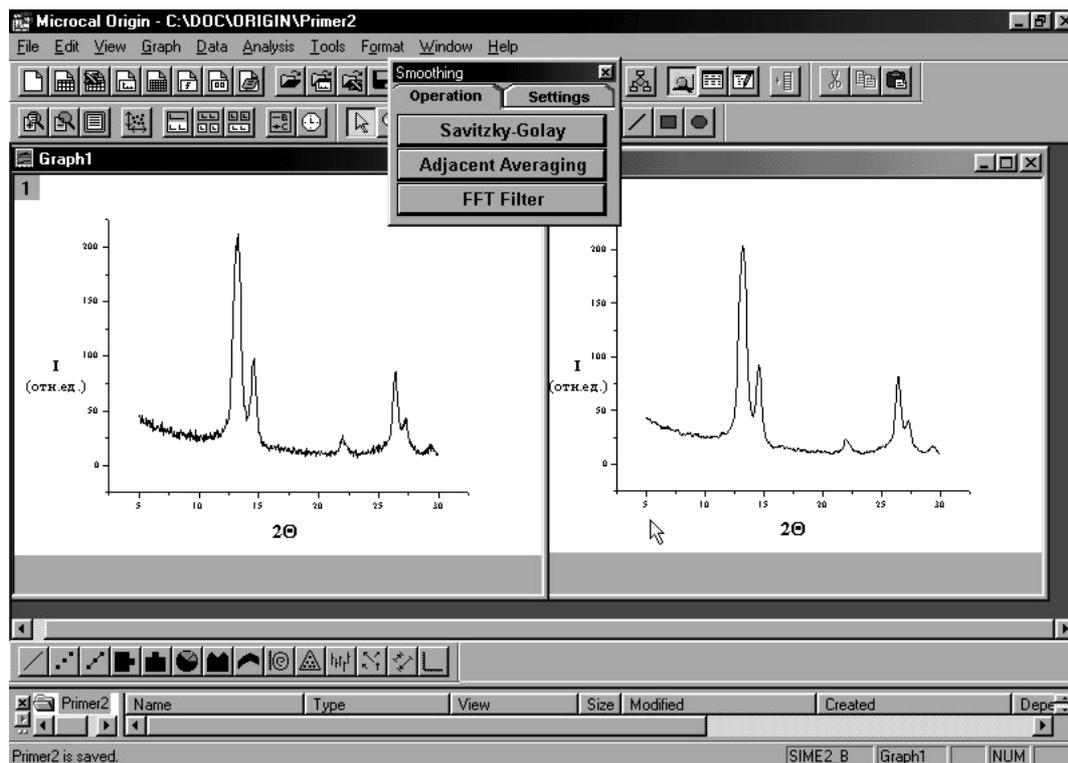


Рис. 6.3. Исходная и сглаженная дифрактограммы ПДМС

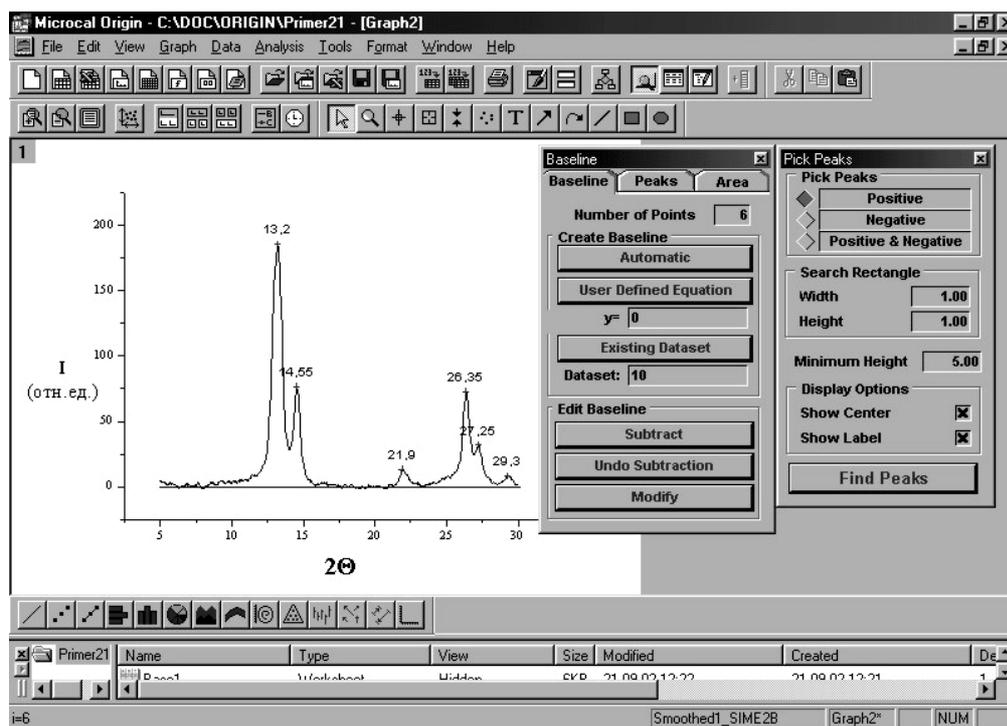


Рис. 6.4. Результативная дифрактограмма ПДМС с указанными угловыми положениями кристаллических рефлексов

#### Заключение

Таким образом, в данном учебном пособии рассмотрены основные возможности современной компьютерной обработки экспериментальных данных. Появление данной работы обусловлено потребностью использования современных компьютерных, информационных технологий при обработке исходных данных. Правильное использование возможностей, предоставляемых современной компьютерной техникой, позволяет решить ряд задач, таких как оперативная обработка экспериментальных данных, возможность быстрой проверки некоторых теоретических предположений и др.

Обучение студентов и аспирантов проводится на базе программы ORIGIN, одной из наиболее удачных программ (с точки зрения авторов), предназначенных для численной обработки результатов экспериментальных работ. Программа ORIGIN в настоящее время широко используется для анализа экспериментальных результатов как в России, так и во всем мире. Быстрое совершенствование этой программы, наличие современного интерфейса, постоянное расширение ее возможностей позволяют рассматривать ORIGIN в качестве лидирующей программы в данной области.

Несомненно, что в ближайшие годы значимость компьютерной обработки экспериментальных данных будет возрастать. В этой связи обучение студентов и аспирантов основным навыкам современной обработки экспериментальных данных является актуальной задачей, которой необходимо уделять должное внимание, чтобы не допустить отставание в этой области.

#### Список литературы

1. Гиляревский, Р.С. Основы информатики : курс лекций / Р.С. Гиляревский. – М. : «Экз», 2004. – 319 с.
2. Степанов, А.И. Информатика : учебник для ВУЗов. 4-е изд. / А.И. Степанов. – М., 2005. – 688 с.

3. Рентгенографическая характеристика и фазовый состав фуллерена / Ю.М. Королев, В.В. Козлов, В.М. Поликарпов, Е.М. Антипов, Н.А. Платэ // Доклады РАН. – М., 2000. – Т. 374, № 11. – С. 74 – 78.
4. Особенность рентгенографического фазового состава фуллерена C<sub>60</sub> / Ю.М. Королев, В.В. Козлов, В.М. Поликарпов, Е.М. Антипов // Высокмолекулярные соединения. – М., 2001. – Т. А 43, № 11. – С. 1933 – 1940.
5. Ушаков, И.В. Деформирование и разрушение металлического стекла, нанесенного на композиционное основание, в условиях локального нагружения инденторами различной геометрической формы / И.В. Ушаков // Вестник Тамбовского государственного университета. Сер. Естественные и технические науки. – 2006. – Т. 11. – Вып. 2. – С. 163 – 167.
6. Поликарпов, В.М. Переход «порядок – беспорядок» в кремний-, германий- и борсодержащих полимерах и их органических аналогах : дис. ... д-ра хим. наук / В.М. Поликарпов. – М., 2003. – 302 с.

#### Приложение

При работе с ORIGIN возможно как использование пиктограмм на панелях инструментов, так и меню. В данном пособии изучение методов работы с ORIGIN проводится с использованием меню. В связи с тем, что версии программы ORIGIN, имевшиеся на момент написания данного пособия, не русифицированы, в данном разделе пособия приведены английские названия пунктов меню и их перевод на русский язык. В ряде случаев дан расширенный перевод, поясняющий назначение некоторых пунктов меню.

FILE		Действия с файлами	
NEW		Создать новый файл	
Open		Открыть файл	
Open Excel		Открыть файл Excel	
Append		Присоединить	
Close		Закрыть файл	
Save Project		Сохранить файл	
Save Project As		Сохранить файл под другим именем	
Save Window As		Сохранить окно	
Save Template As		Сохранить временную информацию	
Print		Печать	
Print Preview		Предварительный просмотр перед печатью	
Print Setup		Установка параметров печати	
Import	Single ASCII	Импортирование данных	Импортирование единственного файла
	Multiple ASCII		Импортирование множественных файлов данных
	ASCII Options		Опции ASCII
	Lotus (WK)		Импортировать файл с расширением *.WK.
	Excel (XLS)		Импортировать файл с расширением *.XLS.
	dBASE (DBF)		Импортировать файл с расширением *.DBF.
	DIF		Импортировать файл с расширением *.DIF.
	Lab Tech		Lab Tech
	Sound (WAV)		Звук*. WAV.
	Mathematica		Математика
Kaleidagraph	Калейдография		
p Clamp	Скрепление		
Export ASCII		Экспорт ASCII данных	
Exit		Выход из системы	

Пункты меню ORIGIN не являются неизменными, их содержание может изменяться в зависимости от текущей операции. В связи с этим рассмотрено изменение пунктов меню при наиболее часто встречающихся операциях. Например, при внесении данных в меню EDIT добавляется ряд пунктов меню, это выделено в приложении отдельной таблицей «Добавление пунктов в меню EDIT при внесении данных».

Полный перевод изменяющегося меню с подробным толкованием пунктов занимает слишком много места. Кроме того, в ряде случаев названия пунктов меню повторяются. В связи с этим в данном пособии приведен перевод основных, наиболее используемых разделов.

## FILE EDIT

Edit		Редактирование	
Undo		Отменить последнее действие	
Cut		Вырезать	
Copy		Копировать в буфер обмена	
Paste		Вставить из буфера обмена	
Paste Transpose		Вставить с перестановкой	
Paste Link		Вставить связь	
Clear		Очистить	
Button Edit Mode		Режим редактирования кнопок	
Insert		Вставить	
Delete		Удалить	
Clear Worksheet		Очистить рабочий лист	
Set As Begin		Возврат к начальному состоянию	
Set As End		Возврат к конечному состоянию	
Reset to Full Range		Переустановить полный режим	
Convert to Matrix	Direct	Преобразовать в матрицу	Прямо
	Expand Columns		Расширить колонки
	2D Binning		Двумерное отображение матрицы в буфере
	Regular XYZ		Регулярно в XYZ
	Random XYZ		Случайно в XYZ
Transpose		Переставить, перенести в другую часть уравнения с обратным знаком	

## ДОБАВЛЕНИЕ ПУНКТОВ В МЕНЮ EDIT ПРИ В НЕСЕНИИ ДАННЫХ

Update Client		Обновить данные Клиента	
Copy Page		Копировать страницу	
New Layer (Axes)	(Normal) : BottomX + LeftY	Новый слой (оси)	Нижний X + Верхний Y
	(Lunked) : TopX + RightY		Верхний X + Правый Y
	(Lunked) : TopX		Верхний X
	(Lunked) : RightY		Правый Y
Add & Arrange Layers		Добавить и преобразовать слои	
Rotate Page		Вращать страницу	
Merge all Graph Windows		Объединить все графические окна	

View		Просмотр	
Toolbars		Выбор панелей инструментов	
Status Bar		Установка/удаление строки состояния	
Project Explorer		Вывод информации о текущем проекте	
View Win- dows	None	Просмотр окон	Пустой лист
	Windows in Activ Folder		Окна в рабочей папке
	Windows in Activ Folder and Subfolders		Окна в рабочей папке и субпапке
Results Log		Строка результатов	
View Mode	All Results	Выбор режи- ма просмотра	Все результаты
	Results in Activ Folder		Результаты в рабочей папке
	Results in Activ Folder and Subfolders		Результаты в рабочей папке и субпапке
Show X Column		Просмотр колонки X	
Actively Update Plots		Режим активного обновления графика в соответствии с изменяемыми данными	
Go to Row		Переход на указанную строку	
Show Grid		Вывод сетки	

### VIEW

## ДОБАВЛЕНИЕ ПУНКТОВ В МЕНЮ VIEW ПРИ ВНЕСЕНИИ ДАННЫХ

Print View		Печать в режиме просмотра	
Page View		Просмотр страницы	
Draft View		Просмотр проекта	
Zoom in		Увеличение	
Zoom Out		Уменьшение	
Whole Page		Целая страница	
Show	Layer Icons	Показать	Слой пиктограмм
	Active Layer Indicator		Индикатор активного слоя
	Object Grid		Объект сетки
	Axis Grid		Ось сетки
	Frame		Рамка
	Labels		Метки
	Data		Данные
	All Layers		Все слои
Master Items	Образцы предметов		
Maximize Layer		Сделать слой максимальным	
Full Screen		Полный экран	

## PLOT

Plot		Диаграмма	
Line		Линия	
Scatter		Разброс	
Line + Symbol		Линия + символ	
Special Line/Symbol	Vertical Drop Line	Специальная линия/символ	Опустить вертикально линию
	2 Point Segment		2 точки сегмента
	3 Point Segment		3 точки сегмента
	Vertical Step		Вертикальный шаг
	Horizontal Step		Горизонтальный шаг
	Spline		Spline
	Double-Y		Двойной Y
	Line Series		Серии линий
	Waterfall		Водопад
	Zoom		Приближение
Yerror	Погрешность по Y		
XYError	Погрешность в плоскости XY		
Bar		Строка	
Column		Колонка	
Special Bar/Column	Stack Bar	Специальная строка/колонка	Объединить строки
	Stack Column		Объединить колонки
	Floating Bar		Плавающая строка
	Floating Column		Плавающая колонка
Pie		Пирог	
3DXY	3DBars	3DXY (трехмерное отображение XY)	Трехмерное отображение строк
	3Driibbons		Трехмерное отображение лент
	Walls		Стены
	Waterfall		Водопад
3DXYZ	Scatter	3DXYZ (трехмерное отображение XYZ)	Разброс
	Trajectory		Траектория
Bubble/Color Mapped	Bubble	Бабл/цветная карта	Бабл
	Color Mapped		Цветная карта
	Bubble + Color Mapped		Бесцветная + цветная карта
Statistical Graphs	Box Chart	Статистические графики	Коробка диаграмм
	QC (X bar R) Chart		QC диаграмма
	Histogram		Гистограмма
	Histogram + Probabilities		Гистограмма + Вероятности
	Stacked Histograms		Объединенные гистограммы
Panel	Vertical 2 Panel	Панель	Вертикальная панель 2
	Horizontal 2 Panel		Горизонтальная панель 2
	4 Panel		Панель 4
	9 Panel		Панель 9
	Stack		Объединить
Area		Площадь	
Fill Area		Заполненная площадь	
Polar		Построение графика в полярных координатах	
Ternary		Трехмерный график	
High – Low – Close		Выше – Ниже – Закрыть	
Vector XYAM		Вектор XYAM	
Vector YXY		Вектор YXY	
Template		Временная информация	

## C O L U M N

Column		Колонка	
Set as X		Установить колонку X	
Set as Y		Установить колонку Y	
Set as Z		Установить колонку Z	
Set as Label		Установить метку	
Disregard Column		Игнорирование колонки	
Set as YError		Установить погрешность для Y	
Set as XError		Установить погрешность для X	
Set Column Values		Установить данные в колонках	
Fill Column With	Row Numbers	Заполнить колонку ...	Нумеровать ряды
	Uniform Random Numbers		Единообразная случайная нумеровка
	Normal Random Numbers		Нормальная случайная нумеровка
Add New Column		Добавить новую колонку	
Move to First		Перенести на первую	
Move to Last		Перенести на последнюю	

## A N A L Y S I S

Analysis		Анализ	
Extract Worksheet Data		Извлечение данных рабочего листа	
Statistics on Columns		Статистика данных в выделенных колонках	
Statistics on Rows		Статистика данных в выделенных строках колонок	
Sort Range		Сортировать область	
Sort Columns		Сортировать колонки	
Sort Worksheet	Ascending	Сортировать рабочий лист	По возрастанию
	Descending		По убыванию
	Custom		По определению пользователя
Frequency Count		Частота шага	
Normalize		Нормализация	
FFT		График и статистика данных FFT	
Correlate		Корреляция	
Convolute		Свернуть	
Deconvolute		Развернуть	
t-Test (One Population)		Тестирование данных одного набора	
t-Test (Two Population)		Тестирование данных двух наборов	
One-Way ANOVA		Единственный ANOVA	
Multiple Regression		Множественная регрессия	
Non-linear Curve Fit		Подбор нелинейной кривой	

### П У Н К Т Ы   В   М Е Н Ю   A N A L Y S I S   П Р И   А К Т И В И - З А Ц И И Г Р А Ф И Ч Е С К О Г О   О К Н А

Simple Math...		Элементарная математика	
Smoothing	Savitzky – Golay...	(Сглаживание) Округление	Савитский – Голэй
	Adjacent Averaging...		Смежная средняя величина
FFT Filter	Low Pass...	Фильтр FFT	Пропустить низкий...
	High Pass...		Пропустить высокий...
	Band Pass...		Пропустить полосу
	Band Block...		Объединить в группы

	Threshold		Отправной пункт
Calculus	Differentiate	Исчисление	Дифференцирование
	Diff/Smooth...		Дифференцирование с округлением
	Integrate...		Интегрирование
Subtract	Reference Data	Вычитание	Ссылочные данные
	Straight Line		Прямая линия
Translate	Vertical	Транслирование	Вертикальный
	Horizontal		Горизонтальный
Average Multiple Curves		Построение мультикривых	
Interpolate/Extrapolate		Интерполяция/Экстраполяция	
Fit Exponential Decay	First Order	Расчет экспоненциального уменьшения	Первый порядок
	Second Order		Второй порядок
	Third Order		Третий порядок
Fit Exponential Growth		Расчет экспоненциального роста	
Fit Gaussian		Расчет функции Гаусса	
Fit Lorentzian		Расчет функции Лоренца	
Fit Multi-Peaks	Gaussian	Расчет для многих пиков	Функции Гаусса
	Lorentzian		Функции Лоренца

### TOOLS

Tools	Инструменты
Options	Опции
Worksheet Script	Описание рабочего листа
Linear Fit	Расчет линейной функции
Polynomial Fit	Расчет полинома
Sigmoidal Fit	Расчет сигмоидальной функции

### ИЗМЕНЕНИЕ ПУНКТОВ В МЕНЮ TOOLS ПРИ ВНЕСЕНИИ ДАННЫХ

Layer	Слой
Pick Peaks	Подбор пиков
Baseline	Основная линия
Smooth	Округлить

### FORMAT

Format		Формат	
MENU	Full Menus	Меню	Полное меню
	Short Menus		Неполное меню
Worksheet		Рабочий лист	
Set Worksheet X		Установить рабочий лист X	
Column		Колонка	
Snap to Grid		Перенести на сетку	

Label Control	Контрольная метка
Color Palette	Цветная палитра

### ИЗМЕНЕНИЕ ПУНКТОВ В МЕНЮ ФОРМАТ ПРИ ВНЕСЕНИИ ДАННЫХ

Layer	Слой		
Plot	График		
Shap Axes to Grid ???	Нарисовать оси сетки		
Shap Objects to Grid ???	Нарисовать объекты сетки		
Axes	X Axis	Оси	Ось X
	Y Axis		Ось Y
	Z Axis		Ось Z
Axis Tick Labels	X Axis Tick Labels	Разметка осей	Установка меток на оси X
	Y Axis Tick Labels		Установка меток на оси Y
	Z Axis Tick Labels		Установка меток на оси Z
Axis Titles	X Axis Title	Озаглавить ось	Озаглавить ось X
	Y Axis Title		Озаглавить ось Y
	Z Axis Title		Озаглавить ось Z

### WINDOWS

Windows	Работа с окнами
Cascade	Каскад
Tile Horizontally	Расположить окна горизонтально
Tile Vertically	Расположить окна вертикально
Arrange Icons	Упорядочить пиктограммы
Refresh	Обновить
Rename	Переименовать
Duplicate	Копия
Script Window	Оригинал
Folders	Папки

### HELP

HELP	Помощь
Origin	Справочная система ORIGIN
Lab Talk®	Показать список разделов, упорядоченный тематически
Search	Поиск
Tip of the Day	Совет дня
About Origin	О программе ORIGIN (информация об авторских правах и версии ORIGIN)

**МЕНЮ FILE (ПРИ УДАЛЕНИИ ВСЕХ ДАН-**

<b>FILE</b>	Действия с файлами
<b>NEW</b>	Создать новый файл
Open	Открыть файл
Open Excel	Открыть файл Excel
Append	Присоединить
Close	Закрыть файл
Save Project	Сохранить файл
Save Project As	Сохранить файл под другим именем
Exit	Выход из системы

**НЫХ)**

**МЕНЮ VIEW (ПРИ УДАЛЕНИИ ВСЕХ ДАН-**  
**НЫХ)**

<b>View</b>		Просмотр	
Toolbars		Выбор панели инструментов	
Status Bar		Установка/удаление строки состояния	
Project Explorer		Вывод информации о текущем проекте	
View Windows	None	Просмотр окон	Пустой лист
	Windows in Activ Folder		Окна в рабочей папке
	Windows in Activ Folder and Sub-folders		Окна в рабочей папке и субпапке
Results Log		Строка результатов	
View Mode	All Results	Просмотр режима просмотра	Все результаты
	Results in Activ Folder		Результаты рабочей папки
	Results in Activ Folder and Subfolders		Результаты рабочей папки и субпапки

**ПУНКТЫ МЕНЮ GRAPH И DATA ПРИ АКТИВИ-**  
**ЗАЦИИ ГРАФИЧЕСКОГО ОКНА**

<b>Graph</b>		Работа с графиками	
Add Plot to Layer	Line	Добавить график в слое	Линия
	Scatter		Разброс
	Line + Symbol		Линия + Символ
	Column		Колонка
	Area		Площадь
Add Error Bars		Добавить погрешность в строке состояния	

Add Function Graph	Добавить график функции
Rescale to Show All	Перемасштабировать для полного просмотра
New Legend	Новая надпись
New Color Scale	Новая цветовая гамма
Stuck Grouped Data in Layer	Сгруппировать прикрепленные данные
Exchange X-Y Axis	Поменять X- и Y-оси

#### D A T A

Data	Данные
Set Display Range	Установить режим просмотра
Data Markers	Маркеры данных
Move Data Points	Переместить точки данных
Remove Bad Data Points	Убрать плохие точки из данных

#### МЕНЮ TOOLS (ПРИ УДАЛЕНИИ ВСЕХ ДАННЫХ)

Tools	Инструмент
Options	Опции

#### МЕНЮ WINDOWS(ПРИ УДАЛЕНИИ ВСЕХ ДАННЫХ)

Windows	Работа с окнами
Script Window	Описание окна
Folders	Папки

#### МЕНЮ HELP(ПРИ УДАЛЕНИИ ВСЕХ ДАННЫХ)

Help	Помощь
Origin	Справочная система Origin
Lab Talk®	Показать список разделов, упорядоченный тематически
Search	Поиск
Tip of the Day	Совет дня
About Origin	О программе Origin (информация об авторских правах и версии Origin)

## Оглавление

---

---

ВВЕДЕНИЕ .....	3
1. СОЗДАНИЕ ПРОЕКТА. ВВОД ДАННЫХ. СОХРАНЕНИЕ ДАННЫХ. РАБОТА С ФАЙЛАМИ .....	4
2. Начальная обработка данных .....	11
3. Пункт меню «инструменты» («Tools») .....	24
4. Анализ данных. Пункт меню «Analysis» .....	37
5. Импортирование и экспортирование файлов данных .....	49
6. ПРИМЕРЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАН- НЫХ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ ORIGIN .....	55
Заключение .....	63
Список литературы .....	64
Приложение .....	65