Program Origin (wersja 2021) — podstawowe wskazówki

Tomasz Kawalec, październik 2021 korekta Piotr Sowa

Program Origin jest bardzo rozbudowany. Umożliwia zarówno przygotowywanie wykresów, jak też i analizę danych. Poniżej przedstawiam jedynie najbardziej podstawowe wskazówki, jak zacząć efektywnie korzystać z tego narzędzia. Jednocześnie podkreślam, że podane przeze mnie metody nie są jedynymi rozwiązaniami — wiele operacji można wykonać na kilka sposobów. Chętnie uzupełnię ten mini-poradnik o kolejne podpowiedzi — jeśli ktoś z Czytelników chce się podzielić wiedzą o użytecznych funkcjach czy trickach, to zapraszam do kontaktu.

Spis poruszanych zagadnień:

- Organizacja pracy kilka wskazówek, jak efektywnie organizować pracę z programem Origin zarówno podczas zajęć w Pracowni Fizycznej, jak też i podczas pracy naukowej;
- Wprowadzanie danych wprowadzanie danych z plików, automatyczne wypełnianie kolumn liczbami, importowanie wielu plików jednocześnie.
- Operacje na danych prowadzenie obliczeń na bazie wprowadzonych danych.
- Tworzenie wykresów tworzenie wykresów z jedną i dwiema osiami pionowymi, przygotowywanie wykresów funkcji.
- Eksportowanie wykresów eksportowanie wykresów tak, żeby można je było zamieścić w sprawozdaniu lub w Internecie.
- Dopasowywanie funkcji dopasowywanie funkcji liniowych i nieliniowych, także z uwzględnieniem niepewności.

1 Organizacja pracy

Efektywną pracę z programem Origin można sobie zapewnić stosując kilka reguł. Mój wybór bazuje z jednej strony na własnym doświadczeniu, a z drugiej strony — na obserwacji problemów, jakie napotykają studenci podczas pracy w laboratorium i w II Pracowni Fizycznej.

- 1. Zdecydowanie sugeruję częste zapisywanie pliku, na którym pracujemy.
- 2. Zachęcam do odpowiedniego organizowania "środowiska pracy". Ta metoda wymaga pewnej samodyscypliny, ale jest niezwykle użyteczna, szczególnie gdy wracamy do naszych danych po przerwie tygodniu, miesiącu, roku. Organizacja pracy to cztery proste działania (rys. 1):
 - (a) grupowanie arkuszy z danymi (workbooków), wykresów oraz innych okien w wewnętrznych folderach Origina. Foldery te są widoczne w Project Explorer, po lewej stronie okna programu. Jeśli Explorer nie jest widoczny, prawdopodobnie jest automatycznie "zwinięty" w lewo w celu oszczędzenia miejsca. Przy pomocy "pinezki" (górna belka Explorera) możemy mieć go zawsze na wierzchu. Foldery powinny mieć rozsądne nazwy np. mogą to być daty pomiarów lub nazwy pomiarów. (Pod)foldery tworzy się klikając prawym klawiszem na folderze nadrzędnym i wybierając New Folder. Obiekty (wykresy, workbooki i inne) można przenosić między folderami korzystając z metody "przeciągnij i upuść". Obiekty z "niewyraźną" ikonką są ukryte nie są widoczne jako okna w głównym obszarze roboczym programu. Ta funkcja bywa użyteczna pozwala utrzymać porządek w obszarze roboczym. Obiekty przywracamy, klikając dwukrotnie ich nazwę w Explorerze. Ukrycia obiektu możemy dokonać albo w Eksplorerze (prawy klawisz → Hide), albo klikając krzyżyk zamykania okna na belce. Standardowo, program zapyta nas wtedy czy chcemy okno zlikwidować na stałe, czy je ukryć. Uwaga! Reakcja programu na kliknięcie krzyżyka może być zmieniona w Preferences → Options... → Open/Close. Jedna z opcji to usunięcie okna bez pytania o potwierdzenie!
 - (b) dbanie o nadawanie workbookom, arkuszom i wykresom rozsądnych nazw (w workbooku, podobnie jak w Excelu, możemy mieć wiele arkuszy; w Originie możemy też mieć wiele workbooków). Ja staram się nadawać podobną nazwę workbookowi i wykresom zrobionym na jego bazie. Dzięki temu, przy wielu wykresach oszczędza się sporo czasu i nerwów związanych z wyszukiwaniem zależności między oknami. Jeśli nie nazwaliśmy okien i nie wiemy na pierwszy rzut oka, gdzie są dane do jakiegoś wykresu, najlepiej jest kliknąć dwa razy na wykresie (na krzywej lub punktach) i w otwartym okienku kliknąć Workbook. Origin wskaże nam wtedy dane źródłowe. Nazwy nadajemy oknom klikając prawym klawiszem na górnej belce okna i wybierając Properties. Long name to nazwa nadawana dla wygody użytkownika, a ewentualna Short name to nazwa używana w skryptach automatyzujących pracę z Originem;
 - (c) unikanie tworzenia nowego workbooka do każdego, nawet małego, zestawu danych. Oczywisty powód to trudności z opanowaniem dużej liczby okien, szczególnie gdy nie są prawidłowo nazywane. Drugi powód to niepotrzebne komplikowanie tworzenia wykresów. Wykresy prezentujące dane z różnych kolumn w jednym arkuszu workbooka można otrzymać jednym kliknięciem, natomiast gdy dane są w różnych workbookach czy arkuszach, musimy się więcej napracować;
 - (d) wstawianie okienka z notatkami, komentarzami itp.
- 3. Zachęcam do korzystania z ikon rozmieszczonych wokół okna programu, dzięki czemu nie musimy szukać potrzebnych nam funkcji w menu (rys. 2, 3, 4). Użytkownik może dobrać zawartość menu do swoich potrzeb, usuwając nieużywane ikony, a dołączając inne patrz rys. 5. W nowych wersjach programu, przydatne ikony pojawiają się chwilowo również w momencie zaznaczania kolumny (patrz rys. 6) lub przy jednokrotnym kliknięciu na linii lub punktach wykresu.



Rysunek 1: Główne elementy związane z efektywną organizacją pracy w Originie.



Rysunek 2: Ikony najbardziej przydatnych narzędzi. Określenia *lewe* i *prawe* menu odnoszą się do standardowego układu pasków narzędzi po zainstalowaniu programu. Użytkownik może dowolnie zmieniać ten układ.



Rysunek 3: Ikony najbardziej przydatnych narzędzi w menu górnym — patrz też uwaga w podpisie do poprzedniego rysunku.



Rysunek 4: Ikony narzędzi wykresów w menu dolnym. Najszybszą metodą zrobienia wykresu jest zaznaczenie w workbooku przynajmniej jednej kolumny typu Y i kliknięcie ikony odpowieniego typu wykresu. Część wykresów wymaga zaznaczenia większej liczby kolumn. Patrz sekcja Tworzenie wykresów.



Rysunek 5: Dodawanie i usuwanie ikon. Często przydatne są te związane z importem danych.

2 Wprowadzanie danych

Najbardziej elementarna metoda wprowadzania danych, to wpisywanie ich ręcznie w komórki workbooków — tak jak można to robić w programie Excel. Oczywiście ta metoda ma zastosowanie jedynie w sytuacjach, gdy tych danych jest bardzo mało.

Jeśli dane w którejś kolumnie mają przyjmować wartości zgodnie z pewnym schematem (np. mają to być kolejne liczby naturalne), najlepiej skorzystać z funkcji *Set Values*. Możemy to zrobić na dwa sposoby albo wpisując funkcję w komórce F(x)=, albo zaznaczając kolumnę i wpisując ctrl+q. W tym drugim przypadku naszą funkcję wpisujemy w wygodnym okienku o nazwie *Set Values*. Bardzo przydatna jest zmienna "i", która oznacza numer wiersza. Wpisując tylko "i" w polu funkcji wypełniamy kolumnę kolejnymi liczbami naturalnymi. Możemy również generować bardziej skomplikowane dane, np. 2*i, $(-1)^i$, $(i-2)^3$ itd. (rys. 6). Bogate "zoo" dostępnych funkcji jest widoczne po kliknięciu w *Function* u góry okienka *Set Values*. W okienku tym możemy również wybrać zakres komórek, w których chcemy generować dane. Liczbę π uzyskujemy wpisując "pi". Więcej informacji o działaniach na kolumnach (w tym — kiedy te działania są zablokowane) przedstawiam w sekcji Operacje na danych poniżej.



Rysunek 6: Automatyczne wypełnianie kolumn liczbami — bezpośrednio w komórce lub w dedykowanym okienku. Przy zaznaczonej kolumnie widać pojawiający się na chwilę pomocniczy panel z ikonami przydatnych narzędzi.

Zazwyczaj dane eksperymentalne importujemy z plików, które są generowane przez oprogramowanie używane w eksperymentach. Często możemy wtedy użyć po prostu metody "przeciągnij i upuść", przenosząc bezpośrednio plik z jego lokalizacji w systemie Windows do workbooka. W tym przypadku koniecznie jednak musimy sprawdzić, jakie dane są w pliku źródłowym i porównać je z danymi, które pojawiły się w workbooku (rys. 7).



Rysunek 7: Import z pliku metodą "przeciągnij i upuść". Kolumny w pliku źródłowym były oddzielone tabulacją.

Może się zdarzyć, że Origin źle zinterpretuje separatory kolumn lub kropki/przecinki dziesiętne i zaimportowane dane będą bezużyteczne (rys. 8) Jeśli widzimy, że dane są nieprawidłowe, korzystamy z narzędzia



Rysunek 8: Błędny import z pliku metodą "przeciągnij i upuść". Kolumny w pliku źródłowym były oddzielone spacją.

 $Data \rightarrow Import \ From \ File \rightarrow Import \ Wizard$ (skrót ctrl+3), które pozwala m.in. na zadanie separatorów kolumn, separatorów dziesiętnych (kropka, przecinek) czy uwzględnienie nagłówków w plikach z danymi. Import Wizard umożliwia też wybranie dodatkowych użytecznych ustawień — przedstawiam je na rys. 9. Na ostatnim pokazanym tu panelu możemy już kliknąć Finish, chyba że chcemy dokonać importu częściowego lub zapisać parametry importu jako szablon — wtedy idziemy dalej. Import wielu plików jednocześnie do kolejnych kolumn (a nie workbooków) jest bardzo przydatny, gdy chcemy porównywać wykresy utworzone na ich bazie. Po imporcie, najpierw odpowiednie kolumny oznaczamy jako X (początkowo wszystkie będą jako Y, z wyjątkiem pierwszej). Następnie zaznaczamy potrzebne kolumny i tworzymy wykres jednym kliknięciem, zgodnie z opisem w sekcji Tworzenie wykresów.

Import Wizard - Source		? ×	
Data Type		wwbiorany	nlik lub nliki
ASCII O Binary O User Defined		wybieraniy	
		do in	nportu
	OKIGINA (2021): FINAL (piki/ssv_comma.txt		
Impart Eiter			
List filters applicable to both Data Type and file name			
Import Filters for current Data Type Origin Folder: ASCII		~	
Description			
Target Window			
Worksheet Matrix None (U	ser Defined filter needs to create window)		
Template <default></default>		~	
lemplate could be used only when import mode is start new b	coks or start new sheets CZÇSto	wygodnie je	st importować
Import Mode Start New Columns	dane z wie	lu plików de	nowych kolumn
	obok siebie	a nia da na	wych workbooków
	OUOK SIEUIC,	a me uo no	wych workookow
Cancel	<< Back Next >>	Finish	
↓ pomijamy	y dwa następne par	nele	
mport Wizard - File Name Options		? ×	
_			
Auto			
worksheet with filename			
worksheet with variable	warto zaznacz	yć, dzięki cz	zemu nazwy
workbook with variable	importowany	ych plików r	ojawia sie
Rename Long Name for Book only	wkomor	torzach do k	alumn
Include path when rename workbook	w KUIIICI	itaizacii uo k	loiuiiii
Append			
☐ file name to column comments			
Add file name user parameters row			
1			
+			
mport Wizard - Data Columns	vybieramy sep	arator kolun	n
Column Separator	Column Designations		
Delimiter Tab/Space Tab Comm	na		
Semicolon Space Other	<unchanged></unchanged>	Apply	
Treat consecutive delimiters as one	Right click column heading to designation for individual colu	set format and umn.	
O Fixed Width 9	Apply		
Number of columns 0 Apply Cust	om Date Format	~ Apply	
Text Qualifier <pre></pre> <pre></pre> <pre>Kemove</pre> Cust	om Time Format <none></none>	~ Apply	
Keep target column format Nu	umeric Separator 1 000,00	~	
✓ Remove leading zeroes from numbers □ Force Rows to same size by filling missing value	Add Sparklines Ves(it ass than 50 columns)	~	
Column Width Preview (Click and drag edge of column head	ler to resize columns) Add Column	Delete Column	
A(Y)(T&N) B(Y)(T&N)		^	
1 1006,1799 2 1006.1794	wyhier	amy senarat	or
3 1006,1858	driaciatere	Ironly separat	ainalz)
4 1006,21 5 1 006,1946	aziesiętny (кторка/prze	unek)
6 1990,2094			
8 1006,1987 kontro	lujemy poprawnoś	ć danych	
	J J I I I		
Cancel	<< Back Next >>	Finish	

Rysunek 9: Import Wizard — główne kroki

W nowych wersjach programu podjęto próbę pomocy użytkownikowi w zachowaniu integralności danych (rys. 10). Po zaimportowaniu danych z pliku, w lewym górnym rogu workbooka pojawia się zielona ikonka, oznaczająca połączenie danego arkusza z plikiem źródłowym. Oznacza to przede wszystkim, że ręczna (i też zautomatyzowana) edycja danych w zaimportowanych kolumnach jest zablokowana. W tym trybie możemy wybrać czy wraz z modyfikacją pliku źródłowego Origin ma za tymi zmianami nie podążać, podążać natychmiast, czy też podążać przy uruchamianiu projektu. Jeśli nie poprosilismy Origina o aktualizowanie danych, a plik źródłowy zostanie zmodyfikowany, ikonka zmieni kolor na żółty. Tryb połączenia z plikiem źródłowym pojawia się także w przypadku importu metodą "przeciągnij i upuść".



Rysunek 10: Kontrola integralności danych — połączenie danych i plików źródłowych.

3 Operacje na danych

Operacje na danych w workbookach mogą być znacznie bardziej rozbudowane niż te przedstawione już wcześniej. Przede wszystkim, można wygodnie generować dane na bazie danych już istniejących w kolumnach. Idea tych operacji jest w najnowszych wersjach Origina podobna do tej dobrze znanej z Excela. Jeśli w Originie jest włączona opcja *Spreadsheet Cell Notation* (a domyślnie jest), to możemy operować na kolumnach bardzo prosto. Na przykład dodanie wartości (wierszami) kolumn A i B sprowadza się do wpisania A+B (bez znaku =) w polu F(x)= wybranej kolumny. Inaczej niż w Excelu, możemy tej operacji dokonać również na kolumnie A lub B, a niekoniecznie w nowej kolumnie, chociaż takie działanie wymaga ostrożności. W szczególności, możemy np. pomnożyć wartości w kolumnie B przez 10, wpisując w komórce F(x)= kolumny B po prostu 10*B. Możemy również operować pojedynczymi komórkami, np. A2 to druga komórka (drugi wiersz) kolumny A. Przykłady działań na kolumnach są pokazane na rys. 11. Uwaga — jeśli dane w kolumnach pochodzą z importu z pliku, to mogą być modyfikowane powyższą metodą tylko jeśli wyłączymy powiązanie z plikiem źródłowym (*Disconnect Sheet*).

	A(X)	B(Y)	C(Y) 🖻	D(Y) 🖻	E(Y) 🖻	F(Y)
Long Name						
Units						
Comments						
F(x)=	(i/10)^2		10*(A+B)	sin(pi*A/180)	A[i+1]-A[i]	2*F
1	0,01	0,836911	8,469109	1,74533E-4	0,03	2
2	0,04	0,950550	9,905503	6,98132E-4	0,05	4
3	0,09	0,765085	8,550849	0,0015708	0,07	6
4	0,16	0,022354	1,823544	0,00279252	0,09	8
5	0,25	0,488488	7,384881	0,00436331	0,11	10
6	0,36	0,919619	12,79619	0,00628314	0,13	12
7	0,49	0,588054	10,78054	0,00855201	0,15	14
8	0,64	0,411993	10,51993	0,01116987	0,17	16
9	0,81	0,596533	14,06533	0,0141367	0,19	18
10	1	0,351856	13,51856	0,01745241	0,21	20
11	1,21	0,449167	16,59167	0,02111691	0,23	22
12	1,44	0,037639	14,77639	0,0251301	0,25	24
13	1,69	0,414537	21,04537	0,02949179	0,27	26
14	1,96	0,035356	19,95356	0,03420178	0,29	28
15	2.25	0.22/73/	2/ 7/73/	0.03025082	0.31	30

Rysunek 11: Przykłady operacji na kolumnach i komórkach.

W trybie Spreadsheet Cell Notation nie mamy możliwości zmiany nazwy kolumny (tzw. Short Name). Ponadto, przydzielone nazwy (litery lub grupy liter) są przez program zmieniane, gdy np. są dodawane nowe kolumny pomiędzy te już istniejące. Oczywiście Origin aktualizuje te nazwy w funkcjach wpisanych przez użytkownika. Gdy wyłączymy tryb Spreadsheet Cell Notation, Origin będzie się zachowywał tak, jak w jego starszych wersjach. Można wtedy zmieniać nazwy kolumn (Short Name) i nie są one modyfikowane przez program. Operacje na kolumnach trzeba jednak wtedy zapisywać jak dawniej, np. col(A)+col(B) lub col(A)[2]+col(B) (drugi element kolumny A + wartości kolumny B). Ta metoda zapisu działa też w trybie Spreadsheet Cell Notation, ale podlega pewnym ograniczeniom. Tryb działania na kolumnach można zmienić klikając prawym klawiszem na belce okna z workbookiem, wybierając Properties... i zaznaczając lub odznaczając odpowiednie pole.

4 Tworzenie wykresów

Najwygodniejsza metoda tworzenia wykresów to zaznaczenie wybranych kolumn w arkuszu i kliknięcie odpowiedniej ikonki w menu dolnym. Jeśli chcemy mieć wykres z jedną (niezależną) osią pionową, mamy szereg możliwych konfiguracji zaznaczania kolumn: Y, XY, XYY', XYY'Y",..., XY X'Y', itd. Gdy w arkuszu nie ma kolumny X, wykres będzie utworzony dla kolejnych liczb naturalnych. Jeśli kolumna X istnieje (nawet nie zaznaczona), to będzie źródłem danych dla osi poziomej. Zaznaczane kolumny nie muszą być obok siebie, a kolumny X nie muszą być po lewej stronie kolumn Y. Zaznaczania kolumn, które nie sąsiadują ze sobą, dokonujemy standardowo z klawiszem ctrl.

Aby otrzymać wykres z dwiema niezależnymi osiami pionowymi (i dwoma zestawami danych), zaznaczamy kolumny YY, XYY lub XY X'Y' i klikamy w menu dolnym ikonkę *Double-Y* (rys. 4 i 12).



Rysunek 12: Przykład tworzenia wykresu z niezależnymi osiami pionowymi na bazie kolumn typu XY X'Y'.

Jeśli mamy przygotowane również kolumny z wartościami niepewności, możemy je zaznaczać wraz z zaznaczaniem kolumn typu X oraz Y. Dzięki temu od razu otrzymamy wykresy, na których te niepewności będą widoczne. Jeśli chcemy dodać niepewności do wykresu na późniejszym etapie, to jest to jak najbardziej możliwe — patrz informacja poniżej o narzędziu *Plot Setup*.

Wygląd wszystkich elementów wykresów (krzywe, punkty, niepewności, osie i ich opisy, liczby, legendy) możemy w szerokim zakresie modyfikować. Część z opcji jest dostępna od razu w drugim (niższym) górnym menu po jednokrotnym kliknięciu obiektu (wielkość czcionek, litery greckie, indeksy, grubość linii i wiele innych). Wszystkie opcje np. dla osi liczbowych oraz linii czy punktów wykresu są dostępne po ich dwukrotnym kliknięciu. Edycję legendy robimy po dwukrotnym kliknięciu na tekście lub kliknięciu prawym klawiszem i wybraniu *Properties.*... Dwukrotne kliknięcie na linii/symbolu w legendzie otwiera okno edycji wykresu. Szczególnie zwracam uwagę na możliwość modyfikacji liczb przy osiach w zakładce *Tick Labels*, gdzie można wybrać notację naukową, inżynierską czy podzielić (pomnożyć) wszystkie liczby przez stałą wartość.

Szybkie utworzenie wykresu z dwiema niezależnymi osiami Y jest, patrząc głębiej, utworzeniem wykresu z dwiema warstwami (*Layers*). Widać to po pojawieniu się dwóch kwadracików z cyframi 1 i 2 w lewym górnym rogu okna z wykresem. Kliknięcie prawym klawiszem na wybranym kwadraciku i wybranie *Plot Setup...* pozwala na zarządzanie danymi w danej warstwie. Można tam decydować, które kolumny i z którego workbooka będą dostarczały dane pełniące funkcję zmiennych zależnych, niezależnych, niepewności (xEr lub yEr) czy etykiet (L). Zmieniając kolejność wykresów u dołu tego okna metodą "przeciągnij i upuść" można decydować, która linia na wykresie będzie na wierzchu, a która pod spodem. Natomiast samego

dodania kolejnej warstwy można dokonać wybierając bądź Layer Contents... (przycisk Layer), bądź Layer Management... Najprostsza metoda jednak to kliknięcie odpowiedniej ikonki w prawym menu (rys. 2), a następnie zarządzanie zawartością w Plot Setup.

W razie potrzeby, możemy modyfikować rozmiar wykresu oraz zależność geometryczną między osią X i Y. W tym celu klikamy dwa razy w dowolnym miejscu wykresu (ale nie dalej, niż sięgają osie) i w okienku *Plot Details* wchodzimy w zakładkę *Size*. Tam modyfikujemy rozmiar wykresu, np. zmieniając wartości *Left*, *Top*, *Width* i *Height* lub wymuszając proporcję między osiami (*Link Axis Length...*).

4.1 Funkcje

Origin pozwala zarówno na tworzenie osobnych wykresów funkcji (2D i 3D), jak i na dodawanie wykresów funkcji do wykresów z danymi. Ponadto, funkcje mogą być definiowane zarówno standardowo, jak i parametrycznie.



Rysunek 13: Tworzenie wykresu funkcji.

Aby narysować standardową funkcję w nowym oknie, używamy ikonki w menu górnym (rys. 3). Wpisujemy potrzebne informacje w formularzu (rys. 13 dla standardowej funkcji 2D) i dostajemy pierwszą wersję wykresu. Żeby wprowadzić modyfikacje do funkcji, klikamy linię wykresu (lub linię w legendzie) dwa razy. W formularzu (nieco innym niż ten pierwotny) możemy zarówno zmieniać samą funkcję, jak też parametry wykresu (grubość, rodzaj i kolor linii itp.). Gdy wykres funkcji klikniemy jeden raz, pojawia się (podobnie jak przy zaznaczaniu kolumn) tymczasowy panel z przydatnymi narzędziami.

Jeśli chcemy dodać kolejną funkcję do już istniejącego okna (czy to z funkcją, czy to z danymi z workbooków), w górnym menu klikamy *Insert* \rightarrow *Function Plot...*

4.2 Layout

Bardzo przydatnym typem prezentowania danych jest tzw. Layout, często używany przy przygotowywaniu wykresów do wklejenia do zeszytów laboratoryjnych lub na potrzeby zebrania danych do przedyskutowania. W Layoucie możemy zamieszczać wykresy, arkusze z danymi oraz inne obiekty, np. obrazki, oraz dodawać tekst, strzałki, itp. Nowy Layout tworzymy używając ikony w górnym menu (rys. 3). Wykresy dodajemy klikając prawym klawiszem w polu Layoutu i wybierając Add Graph. Wykresy w Layoucie nie są osobnymi obiektami, ale jedynie obrazami tych źródłowych (zatem nie możemy ich tam modyfikować) — po dwu-krotnym kliknięciu wykresu w Layoucie jesteśmy po prostu przenoszeni do okna z oryginalnym wykresem i tam możemy dokonywać jego standardowej edycji, a wprowadzone zmiany będą automatycznie widoczne w Layoucie. Rozmieszczanie wykresów i ich przeskalowywanie można sobie ułatwić narzędziami z prawego menu (rys. 2). Przykładowy Layout jest pokazany na rys. 14.



Rysunek 14: Przykład Layoutu przygotowanego do wklejenia do zeszytu pomiarowego.

5 Eksportowanie wykresów

Eksportowanie wykresów z Origina tak, aby można ich było użyć w sprawozdaniach czy artykułach naukowych, zawsze było nieco problematyczne. Wydaje się jednak, że udało się znaleźć optymalne metody eksportu. Narzędzie do eksportowania znajdziemy w *File* \rightarrow *Export Graphs* \rightarrow *Open Dialog...* (rys. 15). Można tam wybrać zarówno typ pliku wyjściowego, jak też wskazać eksportowane okna oraz wybrać parametry eksportu (m.in. rozmiar obrazka i stopień kompresji).

warto zapisać nasze ustawienia 🕨 🛛 Save to < Graph>
s w szablonie Save as <default></default>
W SZADIONIC Save iku Hertable Document Format (*.pdf) Save no Attive Page Save ia <long name=""> Image: Substitution a pliku; vać Ask Folder default> original> fay for Export Apply Page Setting s s</long>
5 ~

Rysunek 15: Panel eksportu wykresów i innych obiektów do plików.

Wyjątkowo, jeśli chcemy wstawić wykres do Worda, prawdopodobnie najlepszą jakość uzyskamy korzystając nie z narzędzia eksportowania, ale z aplikacji *Send Graphs to Word* (rys. 16. Można też próbować po prostu metody "copy and paste" lub standardowego eksportu do pliku rastrowego .jpg lub .png, pod warunkiem ustawienia dostatecznie dużej liczby pikseli w opcjach eksportu. Eksport do PNG przydaje się również, gdy chcemy przedstawić dane w Internecie.

W pozostałych przypadkach, czyli gdy używamy środowiska IATEXlub programów typu CorelDraw, zdecydowanie polecam eksport do formatu wektorowego. Który jednak format wybrać? Niestety, w zależności od wersji Origina i np. CorelDraw, sprawdzały się różne formaty. Obecnie wydaje się, że jeśli eksportujemy do CorelDraw (gdy np. przygotowujemy plakat lub chcemy po dodatkowej obróbce w Corelu użyć pliku w IATEXu), najlepiej jest użyć formatu EMF. W mojej konfiguracji wersji programów, wyeksportowane pliki PDF nie są czytane przez Corela, a pliki EPS są czytane prawidłowo tylko dla bardzo specyficznych ustawień ich eksportu z Origina. Jeśli chcemy wyeksportowanego pliku użyć wprost w IATEXu, powinniśmy użyć formatu PDF. W oknie eksportu warto w *Export Settings* wybrać *Margin Control* \rightarrow *Tight* zamiast *Page*. Dzięki temu usunięte zostaną dość spore, domyślne marginesy. Rys. 17 przedstawia wynik eksportu wykresu do formatu PDF, bez zmiany żadnych dodatkowych parametrów, poza wspomnianym *Tight*.



Rysunek 16: Eksport wprost do Worda.



6 Dopasowywanie funkcji

Niezależnie od tego, jakie funkcje będziemy dopasowywać, możemy (opcjonalnie) w łatwy sposób wskazać fragment wykresu, który ma być użyty podczas dopasowywania. W tym celu korzystamy z odpowiedniego narzędzia w lewym menu (rys. 18). Po ustawieniu znaczników w wybrane miejsca wykresu, klikamy dwukrotnie na jednym z nich, żeby zatwierdzić wybór. Uwaga — ta metoda nie działa prawidłowo, gdy wartości w kolumnie X nie zmieniają się monotonicznie (oczywiście na samym wykresie nie jest to widoczne). W takim przypadku można ręcznie wybrać zakres uwzględnianych w fitowaniu danych w oknie fitowania.



Rysunek 18: Wybieranie zakresu danych, dla których ma zostać przeprowadzone fitowanie.

6.1 Dopasowywanie funkcji liniowych i wielomianów

Najczęściej dopasowywanymi funkcjami są na początku funkcje liniowe oraz ogólniej — wielomianowe. Procedura jest bardzo prosta. Najpierw ewentualnie wybieramy zakres danych do fitowania, zgodnie z opisem powyżej, a następnie wybieramy z menu górnego Analysis \rightarrow Fitting \rightarrow Linear Fit lub Polynomial Fit. W tym drugim przypadku, w okienku fitowania możemy wybrać stopień wielomianu (Polynomial Order). Tu możemy już zakończyć przygotowania do fitowania. Jednak w celu poprawienia jakości prezentacji danych lub szybkiej analizy jakościowej wyników dopasowania funkcji, w oknie fitowania, w zakładce Fitted Curves Plot warto zaznaczyć Span to Full Axis Range. Dzięki temu dopasowana prosta (lub krzywa) będzie poprowadzona przez cały wykres, zamiast kończyć się od razu na skrajnych użytych danych (rys. 19). Wybranie tej opcji jest możliwe zarówno przy dopasowywaniu prostych, wielomianów, jak i funkcji nieliniowych, ale w tym ostatnim przypadku wyboru musimy dokonać w zakładce Fitted Curves (okno fitowania nieliniowego jest inaczej zorganizowane — patrz rys. 22). Jeśli do utworzenia wykresu wybraliśmy również kolumnę z niepewnościami Y, to będą one uwzględnione w fitowaniu. Jeśli chcemy użyć również niepewności X, musimy wybrać Analysis \rightarrow Fitting \rightarrow Fit Linear with X Error.

6.2 Dopasowywanie funkcji Gaussa i innych

Szybka metoda dopasowania funkcji Gaussa lub podobnej to użycie narzędzia Analysis \rightarrow Peaks and Baseline \rightarrow Multiple Peak Fit. Uwaga: jeśli na wykresie mamy kilka maksimów, to z przyczyn matematycznych nie



Rysunek 19: Wynik dopasowania prostej do punktów z niepewnościami X i Y. Po prawej stronie jest pokazane okno fitowania z miejscem wyboru rysowania dopasowanej funkcji na całym wykresie. Z wykresu celowo jest usunięta tabelka z wynikami, ponieważ (zgodnie z opisem w osobnych wskazówkach do przygotowywania sprawozdań), parametry znalezione w fitowaniu mają być przedstawione odpowiednio zaokrąglone i z jednostkami, a postać dopasowanej funkcji zapisana w czytelnej formie.

możemy do każdego maksimum z osobna dopasowywać wybranej funkcji, bowiem zaniedbamy wtedy efekt tzw. przyciągania pików. Ilustracja tego problemu jest przedstawiona na rys. 20. Narzędzie *Multiple Peak Fit* umożliwia prawidłowe dopasowywanie do jednego, jak też wielu pików. Po jego wybraniu działamy zgodnie z rys. 21.



Rysunek 20: Obrazowe uzasadnienie konieczności jednoczesnego dopasowywania funkcji Gaussa do krzywych z wieloma maksimami. Zwróćmy uwagę na duże różnice między składowymi krzywymi znalezionymi z dopasowań, zarówno w amplitudzie, jak i położeniu.

Jeśli pod koniec procedury dopasowywania klikniemy **Open NLFit** (zamiast **Fit**), będziemy mogli skorygować parametry początkowe, zablokować wartości wybranych parametrów lub "uwspólnić" wybrane parametry, czyli wymusić taką samą wartość np. szerokości dla wszystkich lub wybranych pików. To zaawansowane narzędzie fitowania jest tym samym, które jest używane przy dopasowywaniu funkcji nieliniowych (w tym —



Rysunek 21: Dopasowywanie funkcji do jednego lub więcej maksimów (lub minimów). Finalnie otrzymujemy dopasowanie takie, jak na rys. 20 po prawej stronie, wraz ze znalezionymi parametrami dopasowania.

własnych), opisanym w kolejnej sekcji (patrz rys. 22 i 23).

6.3 Dopasowywanie funkcji nieliniowych

Dopasowywanie funkcji musi być prowadzone pod kontrolą użytkownika. Pozostawienie tego procesu samemu Originowi często prowadzi do ewidentnie błędnych dopasowań, ale zastosowanie właściwej procedury jest zawsze skuteczne. Istotne etapy procesu dopasowywania funkcji są pokazane na rys. 22. Zwróćmy uwagę, że kliknięcie przycisku *Fit* od razu w etapie 1. spowoduje przeprowadzenie procedury fitowania, zamknięcie panelu kontroli i narysowanie znalezionej funkcji. Problem w tym, że w wielu przypadkach dopasowanie będzie błędne — Origin zatrzyma się w minimum lokalnym optymalizowanego parametru. Niestety, nie da się już poprawić dopasowania — trzeba procedurę powtórzyć od początku. Dlatego w etapie 1. klikamy przycisk *Fit until converged*, a nie *Fit.* Jeśli dopasowanie nie jest prawidłowe, przechodzimy do zakładki *Parameters* (etap 3.) i staramy się wprowadzić (nieraz metodą prób i błędów) dobre parametry startowe. Często pomaga też tymczasowe zablokowanie wartości jednego lub więcej parametrów (etap 4.). Jeśli wynik dopasowywania jest obiecujący, odblokowujemy parametry, dokańczamy procedurę (przycisk *Fit*) i otrzymujemy wynik końcowy (etap 5.). Gdy dopasowujemy kilka funkcji np. Gaussa (tak, jak to jest opisane w poprzedniej sekcji), w zakładce *Parameters* mamy możliwość sprawienia, że wybrany parametr (lub parametry) będzie taki sam dla wszystkich funkcji — np. szerokość (rys. 23).



Rysunek 22: Procedura dopasowywania funkcji z kontrolą parametrów początkowych.

dodatkowa kolumna						uwspólnienie szerokości pików								
	NO.	Param	Meaning	Share	Fixed	Value		(parametr w)						
iym	0	y0	offset			0,08762127	-	NO.	Param	Meaning	Share	Fixed	Value	
3 funkcje Gaussa ze wspólr offsetem y0	1	xc	center			1,93483871		0	y0	offset			0,08762127	
	1	w	width			1,1514194		1	хс	center			1,93483871	
	1	Α	area			0,85558475		1	w	width			1,1514194	
	2	xc_2	center			3,2911828		1	Α	area			0,85558475	
	2	w_2	width			1,1514194		2	xc_2	center			3,2911828	
	2	A_2	area			0,85857524		2	A_2	area			0,85558475	
	3	xc_3	center			4,28010753		3	xc_3	center			4,28010753	
	3	w_3	width			1,1514194		3	A_3	area			0,85558475	
	3	A_3	area			0,78862156	. '							

Rysunek 23: Dodatkowa możliwość kontroli procedury fitowania w przypadku dopasowywania kilku krzywych np. Gaussa.