

精通 Origin 7.0

周剑平 编著

北京航空航天大学出版社

内 容 简 介

Origin7.0 是美国 OriginLab 公司推出的数据分析和制图软件,是公认的简单易学、操作灵活、功能强大的软件,既可以满足一般用户的制图需要,也可以满足高级用户数据分析、函数拟合的需要。

本书结合大量的实例,由易到难地介绍了 Origin7.0 的功能和使用方法。包括 Origin 基础知识、Origin 的 2D/3D/多层制图方法、Layout 页面的使用方法、函数拟合、数据分析和 Origin 的程序语言等。内容翔实,实战性强。通过本书的学习可掌握 Origin7.0 大部分功能的运用。

本书适合科学研究人员、工程技术人员、理工科高等院校的教师、研究生及本科生使用。

图书在版编目(CIP)数据

精通 Origin 7.0/周剑平编著. —北京:北京航空航天大学出版社,2003.12

ISBN 7-81077-336-4

I. 精… II. 周… III. 数值计算—应用软件, Origin 7.0 IV. 0245

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 113745 号

精通 Origin 7.0

周剑平 编著

责任编辑 阎蓓

北京航空航天大学出版社出版发行

北京市海淀区学院路 37 号(100083) 发行部电话:010-82317024 传真:010-82328026

<http://www.buaapress.com.cn> E-mail: bhpresse@263.net

河北省涿州市新华印刷厂印装 各地书店经销

*

开本:787×1092 1/16 印张:23.5 字数:60.2 千字

2004 年 3 月第 1 版 2004 年 3 月第 1 次印刷 印数:5 000 册

ISBN 7-81077-336-4 定价:35.00 元

前 言

Origin 是美国 OriginLab 公司(其前身为 Microcal 公司)开发的图形可视化和数据分析软件,是科研人员和工程师常用的高级数据分析和制图工具。自 1991 年问世以来,由于其操作简便,功能开放,很快就成为国际流行的分析软件之一,是公认的快速、灵活、易学的工程制图软件。在国内,其使用范围也越来越广泛,本书的编著目的就是帮助初学者快速掌握 Origin 7.0 的使用。

当前流行的图形可视化和数据分析软件有 Matlab,Mathmatica 和 Maple 等。这些软件功能强大,可满足科技工作中的许多需要,但使用这些软件需要一定的计算机编程知识和矩阵知识,并熟悉其中大量的函数和命令。而使用 Origin 7.0 就像使用 Excel 和 Word 那样简单,只需点击鼠标,选择菜单命令就可以完成大部分工作,获得满意的结果。

像 Excel 和 Word 一样,Origin 是个多文档界面应用程序。它将所有工作都保存在 Project(*.OPJ)文件中。该文件可以包含多个子窗口,如 Worksheet,Graph,Matrix,Excel 等。各子窗口之间是相互关联的,可以实现数据的即时更新。子窗口可以随 Project 文件一起存盘,也可以单独存盘,以便其他程序调用。

Origin 具有两大主要功能:数据制图和数据分析。Origin 数据制图主要是基于模板的,提供了 50 多种 2D 和 3D 图形模板。用户可以使用这些模板制图,也可以根据需要自己设置模板。Origin 数据分析包括排序、计算、统计、平滑、拟合和频谱分析等强大的分析工具。这些工具的使用也只是单击工具条按钮或选择菜单命令。

在 Origin 7.0 的基础上,OriginLab 公司开发了 Originpro 和附加模块(Add-on modules)。用户可以在 Originpro 中建立自己需要的特殊工具。Originpro 的灵活界面使用起来快捷方便,这样用户可以将精力集中到图形的数据分析上,而不是处理图形本身。Add-on modules 为 Origin 和 Originpro 添加了特殊的高级数据分析功能,可以弥补 Origin 7.0 相对 Matlab 和 Mathmatica 的不足。用户可以自定义数学函数和制图模板,添加菜单命令和命令按钮,调用 Origin C 和 NAG 函数。

Origin7.0 是一个复杂的应用软件,其中的各个部分相互交错,有机地结合在一起。本书结合大量的实例,本着由浅入深、由易到难、循序渐进的编排原则,全面地介绍了 Origin 的数据制图和数据分析功能。

本书前 4 章是 Origin 的基础部分。通过这部分的学习,可以掌握 Origin 的基本制图操作。第 1 章为概述,简单介绍 Origin7.0,包括 Origin 的特征,安装/卸载 Origin7.0 及其新功能。第 2 章为 Origin7.0 基础准备,介绍了 Origin7.0 的基础知识,包括 Origin7.0 的界面环境、窗口管理、工具条、不同窗口的菜单命令和文件类型等,还包括 Origin 的基本操作,如打开、保存文件或子窗口,重命名子窗口等。这一章的内容比较零散,读者可以先浏览一遍,然后通过后面章节的学习来加深理解各个窗口、不同命令的功能和作用。第 3 章为 Worksheet,主要介绍 Worksheet 的基本操作,包括数据的导入和导出、数据管理及 Worksheet 列的属性设置等。第 4 章为二维 Graph,介绍了根据 Worksheet 制图的各种方法,还介绍了各种 2D 图形

模板的特点、个性化 Graph 的显示效果、图形的输出及线性拟合。

第 5~8 章是 Origin7.0 操作的提高部分。这部分内容帮助读者灵活地应用 Origin 绘制图形,创建出美观大方的图片。第 5 章为 Origin 中的 Excel,介绍了 Origin 中 Excel 的使用,内容包括 Excel 和 Worksheet,Matrix 相互转换,利用 Excel 数据制图及在 Origin 中管理 Excel。第 6 章为多层 Graph,介绍了多层图形的绘制,如何利用 Graph 窗口的层高效地创建和管理多个数据曲线或对象,内容包括多层图形模板、图形管理和多层图形的个性化,最后给出一个绘制多层图形综合应用的例子。第 7 章为三维 Graph,介绍了 3D Graph 图形,包括 Worksheet 和 Matrix 数据的相互转换,绘制 3D 表面图、等高线图、扫描图及 3D Graph 图形的个性化。第 8 章为 Layout 的使用,介绍了 Layout 窗口的使用,包括在 Layout 窗口添加 Graph,Worksheet 和文本内容等,以及个性化 Layout 和 Layout 图形的输出。

第 9~11 章是 Origin7.0 的高级操作部分,是为高级用户准备的,以实现 Origin 的分析功能。第 9 章为非线性拟合,Origin 提供了 200 多个内置函数,而且支持用户自定义函数,除了函数拟合外,还介绍了 Origin 的新功能——峰拟合模板(PFM),这一章可以使读者合理分析数据曲线的特征。第 10 章为数据分析,介绍了 Origin 的数据分析功能,包括数学运算、统计、快速傅里叶变换、平滑和滤波、基线和峰值分析等。第 11 章为 Origin 中的程序,介绍了 Origin 的程序语言,包括 LabTalk 程序和 Origin C 程序。Origin C 程序是 Origin7.0 的新功能。这一章没有详细介绍这些程序的编写过程,只是通过例子介绍了基本语句、结构及其函数的调用。

附录 A 是 Origin7.0 工具栏一览表。附录 B 是 Origin7.0 常见程序指令。

本书基本上覆盖了 Origin7.0 的全部功能,可操作性强,具有下述特点:

语言精炼 避免不必要的重复。许多地方更注意操作方法及特点,而将重复的步骤省略掉,如第 4 章详细介绍了 Graph 制图及其个性化方法,后面章节为了图形的美观,遇到个性化 Graph 窗口时,只是轻轻带过或干脆不提,直接给出图形;如为了突出图 10.7 中的平均曲线,示图中已经将其加粗。书中配备了大量的插图,每个插图都经过了精心设计,做到美观大方;有的是一图多用,如图 2.8 和图 9.31 等。除个别必要的插图类似外,如果后面章节中遇到前面的图形,则都标出“参考图……”字样。另外,描述选择菜单命令时,多级命令之间统一用竖线并统一省去“菜单命令”四字,如选择 File|Save。

使用同一数据进行多方位操作 便于比较不同图形模板的特点、不同分析方式的差别,如 4.7 节中的模板图形,在第 6 章中又多处用到;第 7 章中基本上是使用 $\sin x + \sin y$ 生成的数据,第 8 章又用这些图形进行其他操作等。这样既避免了在各小节中重复介绍导入数据,节约了笔墨,又可比较不同模板、命令的异同。

保留了软件中的英文名称 便于软件的学习操作,如 Worksheet(表格文件)、Project(目标文件)、Graph(图形)和 Layout(版面页)等。本书中的菜单命令和按钮命令的名称如果是英文,则不加引号,直接写出;如果是中文,为了区分,名称上加双引号。

具有很强的实战性 本书作者在工作中积累了丰富的操作经验,书中许多例子是科研过程中处理过的,如 6.6 节中的例子取自 J.-p. Zhou, et al., *J. Magn. Magn. Mater.*, 238 (2002) L1-L5,其他例子也在书中注明了出处,有兴趣的读者可查阅相关的文献。在本书中只集中精力介绍了这些数据曲线处理的过程和方法,而不涉及曲线的具体物理意义,这样更有助于读者提高操作技巧。

与其他计算机应用软件一样,Origin7.0 也是一门操作性很强的软件,建议读者在学习的过程中能够一边学习,一边实践。在 OriginLab\OriginPro70\Samples 和 OriginLab\OriginPro70\Tutorial 文件夹中给出了大量数据和例子,读者可参考这些例子,使用这些数据进行学习。另外,为了提高本书的可操作性,书中的部分例子以 *.OPJ 的格式保存在北京航空航天大学出版社网站的下载专区,供读者下载使用。

本书中的许多图形,如图 4.14,图 9.4 和图 10.54 等,图中的几条曲线几乎重叠在一起,书中是以不同的颜色来区分的,但目前印刷书籍出于价格和技术原因,不得不牺牲色彩信息,采用了黑白印刷方式,给读者带来了阅读上的不便,请读者见谅。为了方便读者理解书中内容,本书中涉及该问题的图形,主要是第 4 章、第 9 章和第 10 章的图形,以电子文档的形式,也存放在北航出版社的网站上,供读者下载使用。

本书在编写过程中得到了李华飏先生的大力帮助,在此表示感谢;同时感谢本实验室老师和同学对本书提出的宝贵意见。

由于时间仓促,水平有限,书中不免有错误疏漏之处,竭诚欢迎专家和广大读者批评和指正,以便在以后工作中加以改进。作者联系方式:j_p_zhou@sina.com.cn。

周剑平
2003.12 于北京

目 录

第 1 章 概 述	1
1.1 Origin 简介	1
1.1.1 Origin 和 Excel 比较	1
1.1.2 Matlab 简介	2
1.1.3 Mathematica 简介	3
1.1.4 Maple 简介	3
1.1.5 Origin 7.0 的特征	4
1.2 获得 Origin 7.0 的帮助	7
1.3 Origin 7.0 的组件	8
1.3.1 Originpro	8
1.3.2 Originpro PFM	8
1.3.3 附加模块	8
1.4 安装注册 Origin 7.0	9
1.4.1 Origin 7.0 对系统的要求	9
1.4.2 Origin 7.0 的安装、卸载和注册	9
第 2 章 Origin 7.0 基础准备	11
2.1 Origin 7.0 界面	11
2.2 菜单及菜单命令	12
2.2.1 Worksheet 窗口的菜单命令	15
2.2.2 Graph 窗口的菜单命令	17
2.2.3 Matrix 窗口的菜单命令	19
2.2.4 Excel 工作表窗口的菜单命令	20
2.2.5 Layout 页面的菜单命令	20
2.2.6 Notes 窗口的菜单命令	21
2.3 工具条	21
2.3.1 Standard 工具条	22
2.3.2 Edit 工具条	23
2.3.3 Graph 工具条	23
2.3.4 2D Graphs/2D Graphs Extended 工具条	23
2.3.5 3D Graphs/3D Rotation 工具条	23
2.3.6 Worksheet Data 工具条	24
2.3.7 Column 工具条	24
2.3.8 Layout 工具条	24
2.3.9 Mask 工具条	24
2.3.10 Tools 工具条	24

2.3.11	Object Edit 工具条	25
2.3.12	Arrow 工具条	25
2.3.13	Format 工具条	25
2.3.14	Style 工具条	25
2.3.15	Data Display 工具	26
2.3.16	生成新工具条	27
2.4	Project 管理器	28
2.5	Origin 7.0 的窗口及文件管理	29
2.5.1	生成新窗口	30
2.5.2	打开窗口	30
2.5.3	窗口重命名	33
2.5.4	隐藏窗口	34
2.5.5	刷新窗口	34
2.5.6	删除窗口	34
2.5.7	复制窗口	35
2.5.8	排列子窗口	35
2.5.9	保存文件	35
2.6	Origin 中的其他窗口	37
2.6.1	Script Window 的菜单命令	37
2.6.2	Results Log 窗口	38
2.6.3	Code Builder	39
2.7	Origin 7.0 窗口模板	39
2.8	Origin 7.0 的界面设置	41
2.8.1	设置程序开始窗口	41
2.8.2	Options 对话框的其他设置	42
2.8.3	颜色调色板设置	49
2.8.4	个性化模板	50
2.9	文件的打包/解包	51
第 3 章	Worksheet	53
3.1	Worksheet 的基本操作	53
3.1.1	改变 Worksheet 的显示属性	53
3.1.2	Worksheet 列的操作	55
3.1.3	Worksheet 行列的转换	58
3.1.4	Worksheet 数据的选择	58
3.1.5	Worksheet 数据显示	59
3.2	数据的输入	59
3.2.1	导入单个 ASCII 文件	60
3.2.2	导入多个 ASCII 文件	63
3.2.3	导入 Thermo Galactic (SPC)	64

3.2.4	导入 pCLAMP 文件	65
3.2.5	其他文件的导入	66
3.2.6	使用 ODBC 导入数据库文件	66
3.2.7	直接将文件拖到 Worksheet	67
3.2.8	将数据复制到 Worksheet	68
3.2.9	使用 Origin 提供的功能填充数据	68
3.2.10	使用函数设置数据	68
3.2.11	设置递增的 X 值	69
3.3	数据的输出	70
3.3.1	通过粘贴板导出	70
3.3.2	将 Worksheet 数据保存为 ASCII 文件	70
3.3.3	部分数据生成 ASCII 文件	71
3.4	列的制图属性设置	72
3.4.1	列的设置及其相互关系	72
3.4.2	设置多个 X 列	72
3.4.3	设置 Worksheet 为无 X 列	73
3.4.4	数据类型的设置及其应用	73
3.5	Worksheet 数据管理	74
3.5.1	数据排序	74
3.5.2	规格化数据	76
3.5.3	Worksheet 中的数据交换	76
3.5.4	从 Worksheet 中提取数据	77
3.6	Worksheet 的 Script 窗口	78
3.7	将 Worksheet 保存为模板文件	79
第 4 章	二维 Graph	80
4.1	Graph 窗口介绍	80
4.2	使用 Worksheet 制图	83
4.2.1	Worksheet 数据的选择	83
4.2.2	激活 Worksheet 数据制图	83
4.2.3	不激活 Worksheet 数据的情况下制图	84
4.3	直接在 Graph 窗口中制图	85
4.3.1	将单个 ASCII 文件导入到 Graph 窗口中	85
4.3.2	将多个 ASCII 文件导入 Graph 窗口中	85
4.3.3	使用 Layer n 对话框导入数据	87
4.3.4	选中 Worksheet 数据的情况下制图	89
4.3.5	使用 Draw Data 工具制图	89
4.3.6	用鼠标将文件数据拖入 Graph 窗口中	90
4.3.7	添加误差线	90
4.3.8	屏蔽曲线中的数据	92

4.3.9	数据浏览	93
4.4	线性拟合	97
4.4.1	线性回归拟合	97
4.4.2	多项式回归	99
4.4.3	多重回归	100
4.4.4	线性拟合工具	101
4.5	函数制图	103
4.5.1	在 Graph 窗口中绘制函数曲线	103
4.5.2	在 Function Graph 窗口中制图	104
4.5.3	根据函数生成数据组/点	105
4.6	分类数据制图	106
4.7	Graph 模板	107
4.7.1	二维折线、散点、折线+符号图	107
4.7.2	二维柱状、条状图	111
4.7.3	面积图、极地图、瀑布图	113
4.7.4	其他图形模板	116
4.8	个性化 Graph 图形	120
4.8.1	个性化数据曲线	120
4.8.2	个性化坐标轴	127
4.8.3	图例和时间	133
4.8.4	添加文本、时间、箭头线或其他注释	134
4.8.5	更改 Graph 的显示效果	139
4.9	Graph 的输出	141
4.9.1	Graph 之间的切换	141
4.9.2	输出到其他程序中	141
4.9.3	将 Graph 图形插入其他应用程序中	142
4.9.4	打印	143
第 5 章	Origin 中的 Excel	148
5.1	Excel 工作簿给 Origin 界面带来的变化	148
5.2	利用 Excel 工作簿数据制图	149
5.2.1	对话框法	149
5.2.2	激活数据用默认的方式制图	150
5.2.3	拖放法	151
5.3	Origin 7.0 中 Excel 工作簿的管理	152
5.3.1	打开 Excel 工作簿	152
5.3.2	保存 Excel 工作簿	152
5.3.3	将 Excel 工作簿保存为外部链接	152
5.3.4	将 Excel 工作簿保存为 Project 内部文件	154
5.4	Origin 7.0 中使用 Excel 可能遇到的问题	154

第 6 章 多层 Graph	155
6.1 多层工具及其意义	155
6.2 Origin 多层模板	156
6.2.1 水平双屏图	156
6.2.2 垂直双屏图	156
6.2.3 双 Y 轴图	157
6.2.4 堆垒多层图	158
6.2.5 四/九屏图形	158
6.3 多层图形管理	159
6.3.1 添加层	159
6.3.2 删除层和隐藏层	161
6.3.3 合并 Graph 窗口	162
6.3.4 将多层 Graph 图形导入多个 Graph 窗口中	163
6.3.5 Layer 中的 Arrange 使用	163
6.4 个性化 Graph 图形	164
6.4.1 个性化图层的显示属性	165
6.4.2 层和坐标轴的链接	167
6.4.3 调整层的位置	167
6.4.4 个性化图例	168
6.5 保存 Graph 为模板文档	170
6.6 多层 Graph 图形举例	171
6.6.1 导入数据	171
6.6.2 多层图形中添加数据	172
6.6.3 设置层之间的链接	173
6.6.4 个性化图层	174
6.6.5 个性化坐标轴	174
6.6.6 个性化显示	175
6.6.7 添加文本说明	176
6.6.8 保存文件	176
第 7 章 三维 Graph	177
7.1 Origin 中的 Matrix	177
7.1.1 Matrix 数值设置	178
7.1.2 Matrix 基本操作	180
7.1.3 Matrix 和 Worksheet/Excel 相互转换	181
7.1.4 保存 Matrix 窗口	184
7.2 生成三维图形	185
7.2.1 3D XYY Graph	185
7.2.2 3D XYZ Graph	187
7.2.3 3D 表面图	188

7.2.4 等高 Graph	191
7.3 个性化 3D Graph	193
7.3.1 3D 等高图的个性化	193
7.3.2 表面图的个性化	196
7.3.3 改变 Graph 的显示效果	198
7.4 扫描图形	201
7.4.1 数据的导入	201
7.4.2 制图	202
7.4.3 图形导出	204
7.4.4 曲线转换为数据	204
第 8 章 Layout 的使用	205
8.1 把 Graph, Worksheet 及文本添加到 Layout 页面	205
8.1.1 生成新 Layout 页面	205
8.1.2 把图片和文本添加到 Layout 页面	206
8.1.3 改变图片的内容	207
8.1.4 提高页面的刷新速度	207
8.2 个性化 Layout 页面	207
8.3 Layout 页面的输出	209
8.3.1 使用剪贴板输出 Layout 页面	209
8.3.2 输出 Layout 页面为图形格式文件	209
第 9 章 非线性拟合	211
9.1 Origin 7.0 常用的非线性拟合	211
9.1.1 基本拟合函数	211
9.1.2 拟合举例	213
9.1.3 S 拟合工具	215
9.1.4 拟合比较工具	216
9.2 高级非线性拟合	217
9.2.1 NLFS 基本模式	217
9.2.2 NLFS 高级模式	219
9.2.3 拟合向导	224
9.2.4 NSLF 拟合过程中遇到的问题	225
9.3 自定义函数拟合	226
9.3.1 自定义拟合函数	226
9.3.2 初始化参数	227
9.3.3 指定函数变量	228
9.3.4 曲线模拟	228
9.3.5 拟合数据	230
9.3.6 拟合结果	231
9.4 峰拟合模板	235

9.4.1	安装卸载 PFM	235
9.4.2	Choose Data 页面	236
9.4.3	Precondition Data 页面	238
9.4.4	Baseline Points 页面	240
9.4.5	Create Baseline 页面	241
9.4.6	Baseline Conditioning 页面	241
9.4.7	Peak Finding 页面	242
9.4.8	Define Peaks 页面	244
9.4.9	Peak Edit Control 页面	245
9.4.10	Fit 页面	246
9.4.11	Results 页面	248
9.4.12	个性化 Peak Fitting 向导	252
第 10 章	数据分析	254
10.1	数学运算	255
10.1.1	算术运算	255
10.1.2	减去参考直线	256
10.1.3	垂直或水平移动	256
10.1.4	多条曲线平均	258
10.1.5	插 值	258
10.1.6	微 分	259
10.1.7	积 分	261
10.2	统 计	261
10.2.1	描述性统计	262
10.2.2	方框图	264
10.2.3	直方图	266
10.2.4	质量控制图	268
10.2.5	t-检验	269
10.2.6	方差分析	273
10.2.7	存活率分析	283
10.3	快速傅里叶变换	288
10.3.1	FFT 数学原理简介	288
10.3.2	FFT 运算及 FFT 工具	289
10.3.3	相关、卷积和去卷积	294
10.4	数据的平滑和滤波	296
10.4.1	使用菜单命令平滑	296
10.4.2	平滑工具	297
10.4.3	数字滤波	297
10.5	基线和峰值分析	301
10.5.1	拾取峰工具	301

10.5.2 基线工具	303
第 11 章 Origin 中的程序	307
11.1 LabTalk 语法	307
11.1.1 赋值声明	307
11.1.2 算术声明	308
11.1.3 Origin 的宏	308
11.1.4 函数声明	310
11.1.5 命令声明	312
11.1.6 替换表示	313
11.2 LabTalk 结构	314
11.2.1 循环	314
11.2.2 判断	317
11.3 Origin C 及其代码编辑器	319
11.3.1 Origin C 的代码编辑器	319
11.3.2 Origin C 文件及其管理	320
11.3.3 Origin C 例子	323
11.3.4 系统文件	323
11.4 调用 Origin C 函数	323
11.4.1 设置自动制图模板	324
11.4.2 在 Graph 窗口中设置分析按钮	325
11.4.3 添加 Origin 命令按钮	326
11.4.4 添加菜单命令	328
11.4.5 添加 Origin 函数	329
11.5 调用 NAG 函数	330
11.5.1 NAG 函数	330
11.5.2 调用 NAG 函数	331
11.5.3 编辑 NAG 函数调用程序	331
11.5.4 分步调试函数	335
11.5.5 Debug 工具条上的其他按钮	335
附录 A Origin7.0 工具条一览表	337
附录 B Origin7.0 LabTalk 常见程序命令和函数	350
参考文献	359

第 1 章 概 述

Origin7.0 是 Windows 平台下用于数据分析和数据制图的软件,其功能强大、简单易学,在学术研究领域有广泛的应用。本章为该软件的简介,主要内容包括:

- Origin 简介;
- 获得 Origin 7.0 帮助;
- Origin 7.0 的附加组件;
- 安装注册 Origin 7.0。

1.1 Origin 简介

Origin 是 OriginLab 公司(其前身为 Microcal 公司)开发的图形可视化和数据分析软件,自 1991 年问世以来,由于其功能强大,操作简便,很快就成为国际流行的分析软件之一。

Origin 7.0 是一种高级数据可视化和分析软件,具有快速、灵活、易学的优点,为科学家和工程师提供了图形、分析和数据处理的综合解决方案。该软件具有如下特点:

- ① 功能强大(数值计算、数值处理、数据分析);
- ② 界面友好、直观;
- ③ 操作简单,易学易用,使用 Origin 7.0 就像使用 Excel 和 Word 那样简便,只需点击鼠标就可以完成大部分工作;
- ④ 功能开放,在 Origin 7.0 的基础上,开发了 Originpro 和附加模块(Add-on modules)。Originpro 是在 Origin 7.0 的基础上发展起来的高级组件,用户可以在这里建立自己需要的特殊工具。Originpro 灵活的界面使用起来快捷、方便,这样用户就可以集中精力进行分析,而不必处理图形本身。Add-on modules 还为 Origin 7.0 和 Originpro 添加了特殊高级数据分析功能,这些可以弥补 Origin 7.0 相对 Matlab 和 Mathematica 的不足。

Origin 7.0 的这些特点使其很快成为大学生、研究生、科技工作者的常用软件之一。

1.1.1 Origin 和 Excel 比较

Excel 虽然也具有数据可视化功能,但其提供的主要是电子表格功能,并可以简单地将数据可视化,如图 1.1 所示。Excel 在作图方面显然不如 Origin 功能强大,比如对图形分析时只能添加简单的趋势线,不能进行 Gaussian 或 Lorentzian 拟合,没有积分和微分等计算功能。Origin 不仅可以根据数据制出满意的图形,包括条状、线形、扇形和三维图形,还可以将几组数

据放在一个图形中,进行比较处理,更重要的是可以对图形进行分析处理,比如平滑、拟合、过滤、积分和微分等。

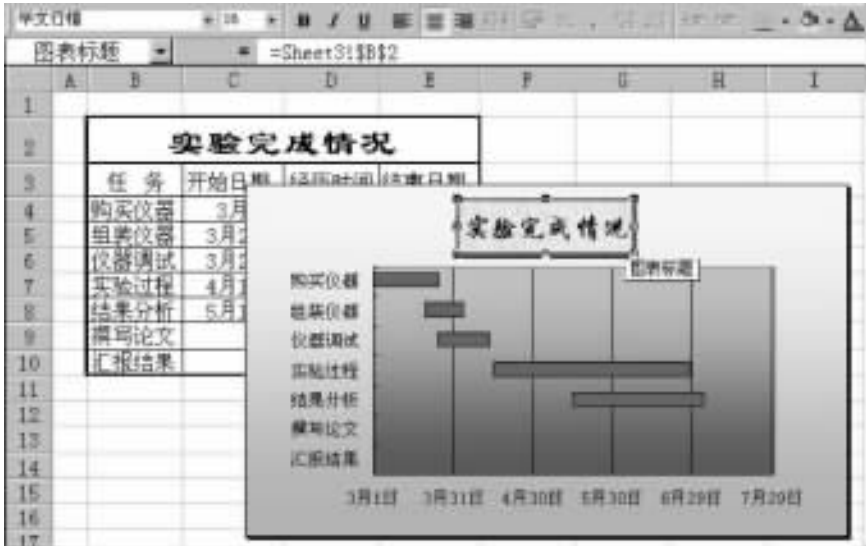


图 1.1 Excel 制图举例

1.1.2 Matlab 简介

Matlab 作为线性系统的一种分析和仿真工具,1984 年被 MathWork 公司开发并被作为产品推向市场。Matlab 建立在向量、数组和矩阵的基础上,人机界面直观,输出结果可视化,深受用户欢迎。近年来,随着 Matlab 版本的不断升级,其所含的工具箱越来越丰富,功能越来越强大。

Matlab 具有一系列丰富的功能,可以解决工程、科学计算和数学学科中的许多问题;但是使用 Matlab 需要矩阵知识,因为 Matlab 中的所有数据都是以矩阵形式存储的;还需要计算机编程技术,对不熟悉计算机程序的使用者来说,使用 Matlab 是很困难的;Matlab 提供了丰富的函数和命令,这需要用户去记住。

例如解线性方程:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 366 \\ 804 \\ 351 \end{bmatrix}$$

其输入及屏幕显示结果如下:

>>A=[1 2 3; 4 5 6; 7 8 0]

A=

1 2 3
4 5 6
7 8 0

>>b=[366; 804; 351]

b=

```

366
804
351
>>x=inv(A)*b
x=
25.0000
22.0000
99.0000

```

其中 $\text{inv}(\mathbf{A})$ 是计算 $\mathbf{A}^{-1}$ 的 Matlab 函数。

1.1.3 Mathematica 简介

Mathematica 开始是美国物理学家 Stephen Wolfram 领导的小组进行量子力学研究时开发出来的。1987 年 Stephen Wolfram 组建了 Wolfram 公司并推出了商品软件 Mathematica 1.0, 后来该公司对软件不断改进, 陆续推出了 1.2 版、2.0 版和 3.0 版。Mathematica 具有强大的数学计算功能和图形功能, 支持比较复杂的符号计算和数值计算。

```

例如解代数方程:  $x^3 - 1 = 0$ 
In[1]:=
Solve[x^3-1==0,x]
Out[1]=
{{x->1},{x->(-1)^(2/3)},{x->(-1)^(4/3)}}

```

1.1.4 Maple 简介

Maple V 是由加拿大 Waterloo University 开发的数学软件, 其无与伦比的符号运算能力使 Maple 在国际数学软件的激烈竞争中独占鳌头。Maple V 提供了 2 000 余种数学函数, 涉及的范围非常广泛, 包括基本代数、几何学、数论、有理函数、微积分、微分方程、代数、群论、离散数学等许多数学领域。Maple V 提供了内部程序语言, 使用户可以开发自己的应用程序。Maple 的最主要功能是符号运算, 运算时的最大优点是无须事先对变量赋值, 所得的结果是以符号形式表达的, 表达式中的数字也是绝对的准确值, 如 $1/3$ 不会表示成 $0.333\ 33\dots$ 。这是其他软件无法与之相比的。

例如一个求导数问题:

```

>f:=y*cos(x^2);
f:=y*cos(x^2)
>Diff(diff(f,x),y)=diff(diff(f,x),y);

$$\frac{\partial^2}{\partial y \partial x^2} y \cos(x^2) = -2 \sin(x^2) x$$


```

此外, Maple 还支持数值计算和图形可视化功能, 包括二维图形和三维图形。

使用 Matlab, Mathematica 和 Maple 需要一定的计算机编程知识, 并需要熟悉其中大量定义的函数和命令, 如 Matlab 中的 $\text{abs}(x)$ 表示求绝对值或复数的幅值, $\text{expm}(\mathbf{A})$ 表示矩阵求幂; Mathematica 中的 $\text{D}[]$ 表示求导, $\text{Integrate}[]$ 表示积分, $\text{Solve}[]$ 表示解方程; Maple 中的

Diff()表示求导, det(v)表示求矩阵的行列式值。而使用 Origin 7.0 就像使用 Excel 和 Word 那样简便,只需点击鼠标就可以完成大部分工作,获得满意的结果。

1.1.5 Origin 7.0 的特征

Origin 7.0 具有易于操作、灵活多样的数据处理方式,并具有高质量的图形工具和强大的数据分析工具。其主要特征如下:

- 支持不同格式数据的导入,包括:ASCII,dBase,pClamp, Lotus 和 LabTech 等;
- 可直接在 Origin 中运行 Excel;
- Origin 界面直观;
- 50 多个 2D/3D 图形模板、Layout 页面和自定义模板;
- 多种图形导出格式,包括 EPS,JPG,TIF,EMF,BMP,PDF 和 PSD 等;
- 数据分析工具十分强大,包括线性拟合、多项式拟合和 S 拟合等拟合工具,数据的屏蔽、过滤、FFT、相关、卷积和去卷积等数据处理工具,描述性统计、单体/双体检验和正态比较检验等数据统计方法。
- 彩色显示编辑、调试 Origin C 程序的代码编辑器;
- 使用灵活的对话框和向导,建立 Add-on Modules 应用开发环境,并可以从外部 DLL (Dynamic Link Library)访问。

Origin 7.0 提供了许多新功能,简化了操作过程,增强了分析能力,如表 1.1 所列,其具体用法将在后面的章节中介绍。

表 1.1 Origin 7.0,6.1,6.0 功能比较

版 本	7.0	6.1	6.0
用户界面			
数据分析工具按钮	√		
制图时直接对文本或图形的操作(包括拖拉、调整大小及旋转)	√		
原位编辑文本	√		
文本格式工具条(字体、大小、加粗、斜体、下划线、上/下标、希腊字符)	√		
调整 Worksheet、Matrix 列的宽度	√		
画图工具(包括手动画多线、多角、自由图形)	√		
Graph 模板库	√		
在 Matrix 窗口中预览映像图	√		
多重选择 Object 格式	√		
新多标签 Object 控制对话框	√		
对象样式工具条(颜色、阴影样式、边框样式、边框宽度)	√		
多线和多角的点一点编辑功能	√		
对 Graph 感兴趣区域的分析	√		

续表 1.1

版 本	7.0	6.1	6.0
撤消 Object 格式	✓		
Project 管理器文件夹的批处理窗口	✓	✓	
Worksheet 单元格空间不足指示	✓	✓	
Worksheet, Graph, Layout 分批打印功能	✓	✓	✓
非近邻 Worksheet 列的控制选择	✓	✓	✓
在 Origin 中运行 Excel 程序	✓	✓	✓
100 多个 Graph 符号	✓	✓	✓
使用 Project 管理器管理较大的 Project 文件	✓	✓	✓
将 Worksheet 中的数据/部分数据拖拉到 Graph	✓	✓	✓
Graph 操作			
用调色板美化 Matrix 映像图	✓		
Graph 模板库制图向导	✓		
支持标签的颜色递增变化	✓	✓	
Screen Reader 和 Data Reader 工具中间十字指示放大	✓	✓	
多重数据点的补偿制图	✓	✓	
打印 Graph 图形到多个页面	✓	✓	
增强的 Box Chart 控制功能	✓	✓	✓
增强的内置符号设置	✓	✓	✓
快速 3D Graph 图形高速缓冲	✓	✓	✓
单个等高线及其级别的控制	✓	✓	✓
支持面积填充样式	✓	✓	✓
使用不同颜色代表不同的维度	✓	✓	✓
使用位图自定义符号	✓	✓	✓
Graph 类型			
映像图	✓		
彩色映像直方图	✓		
Smith 图	✓		
3D 饼图	✓	✓	✓
XYXY 矢量图	✓	✓	✓

续表 1.1

版 本	7.0	6.1	6.0
文件导入/导出			
将映像图导入到 Matrix	✓		
文件的打包/解包	✓		
导入 MINITAB 的 *.MTW 和 *.MPJ 文件	✓		
导入 SigmaPlot 的 *.SP 和 *.JNB 文件	✓		
用鼠标拖拉的方式导入 Thermo Galactic 的 *.SPC 文件	✓		
用 RGB,CMYK 和 YcbCr 颜色设置图像文件	✓	✓	
导入/导出扫描映像图	✓	✓	
改良了 Graph 图形导出格式,包括 *.EPS	✓	✓	
ODBC 查询及导入	✓	✓	
增加了 Graph 图形导出格式:AI, CGM,EPS, TIF 和 PDF 等	✓	✓	✓
导出 Layout 页面或复制到剪贴板	✓	✓	✓
导入二元 pClamp 文件	✓	✓	✓
数据处理			
用随机 XYZ 方式将 Worksheet 数据转换成 Matrix 数据	✓		
用鼠标将 Windows 资源管理器中的文件拖拉到 Origin 中	✓		
支持无关列数据	✓		
2D 区间(Binning)Worksheet 数据	✓	✓	
增加了矢量数据格式	✓	✓	✓
Worksheet 转置	✓	✓	✓
分析功能			
自动的 NLSF 参数初始化设置	✓		
F-检验的自动拟合比较	✓		
强大的单因子、双因子 ANOVA 分析	✓		
强大的 t-检验(单体和双体)	✓		
NLSF 拟合向导	✓		
正态检验(Shapiro-Wilk)	✓		
存活率分析(Kaplan-Meier, Cox Proportional Hazards)	✓		
低通、高通、带通滤波器	✓	✓	✓
负峰的寻找及拟合	✓	✓	✓
噪音阈值过滤	✓	✓	✓

续表 1.1

版 本	7.0	6.1	6.0
程 序			
NAG 数字库	✓		
支持 ANSI C 语言和 Origin 对象的 C 语言编辑器	✓		
支持颜色代码编辑和调试的代码编辑器界面	✓		
可调的 Results Log 字体大小	✓		
可控的 Notes 窗口	✓		
鼠标拖动方式添加用户工具	✓	✓	
动态链接工具条按钮和变量	✓	✓	
扩展数字输出格式	✓	✓	
OriginPro 6.1 和 MS VC++ 生成的运行工具和向导	✓	✓	
自动重复工作的长周期时间计时器函数	✓	✓	
自定义工具条运行 LabTalk 脚本命令	✓	✓	✓
可自定义任何工具条按钮	✓	✓	✓

1.2 获得 Origin 7.0 的帮助

如果在使用过程中遇到了问题,可以通过不同的途径获得帮助。

- Origin 7.0 软件中的“帮助”文件包括 Origin 7.0 的所有组件,可以解决许多问题。单击 Origin 7.0 窗口菜单栏中 Help| Origin/search 或直接按 F1 键,就可打开“帮助”文件对话框,和其他软件类似,也有“目录”和“索引”两个标签,从目录中找到或从索引中检索到所要找的内容。在 Help 下拉菜单中还可以获得关于 Programming 的帮助文件。
- Origin 7.0 还提供一些数据文件和 Project 文件,在文件夹\OriginPro\Samples 中,配有许多说明文件,用户可以从中得到一些帮助,比如分析过程、生成 Graph 文件和程序的应用等。
- 直接访问 Origin 的主页 www.originlab.com,或选择 Help| Origin on the Web 访问关于 Origin 7.0 的相关问题,获得在线帮助。
- 本书从 Origin 7.0 界面入手,由浅入深、由易到难介绍了 Origin 7.0 的功能及使用,可以解决使用 Origin 7.0 过程中遇到的大部分问题。

1.3 Origin 7.0 的组件

Origin 和 Originpro 是 OriginLab 公司提供的主要产品,除此以外,还提供了用户工具和模板,增强了 Origin 和 Originpro 的功能。

1.3.1 Originpro

Originpro 是在 Origin 基础上发展起来的软件,除具有 Origin 的所有功能外,还包括峰拟合模块 PFM(Peak Fitting Module)和 *.GIF 导出组件,为用户提供开发环境,建立分析组件,建立组件后,用户可以在 Origin 或 Originpro 上运行。其具有以下优点:

- Originpro 为用户提供了灵活的界面,包括生成对话框、标签工具、Originpro 使用对话框向导。保存向导变成工具栏上的一个按钮,可以往 Origin 7.0 菜单栏中填加菜单命令。
- 强大的 Origin C 程序环境(Origin C 是 Origin 7.0 的一部分),带有 C++ 特征的 ANSI C,支持字符串、矢量、矩阵和复数矩阵,方便地连接到 Origin 文件的 Worksheet 和 Graph 等,包含用于高级计算的 NAG(Numerical Algorithms Group)关键组件,代码编辑器提供了用不同颜色表示的语法,可设置调试断点并提供了输出窗口,添加了外部 DLL 访问。
- 动态数据交换功能 DDE(Design Dynamic Data Exchange),将 VB 和 VC++ 的程序导入到 Origin 7.0 中可视化,可作为图形服务器。
- 使用 Origin C 中的 COM 可以访问其他软件或硬件,如和 Microsoft Office 交换数据,使用 ActiveX Data Object 导入数据库,将 Worksheet 导出为 XML 文件。
- 添加了 PFM 组件,执行灵活的峰分析,自动探测峰,自动设置峰初始化参数。

1.3.2 Originpro PFM

在光谱学、材料科学、工程技术、药理学等领域经常会遇到分析多峰数据的问题,当几个峰重叠在一起时,分析起来是很困难的。峰拟合模板 PFM(Peak Fitting Module)提供了一系列功能来解决这一问题,包括:数据过滤、自动或手动设置基线、拾取峰,提供了大量拟合函数(用户可以自己定义)和高精度的非线性最小二乘法拟合。

PFM 向导界面简单、易操作,简化了峰的分析。

1.3.3 附加模块

通过 OriginLab 站点,OriginLab 公司还提供了其他一些用户工具和模板,其中一些是免费的。这些工具和模板增强了 Origin 7.0 和 OriginPro 的功能。大部分工具和模板是以 *.OPK 文件格式提供的,下载这些文件后复制到 Origin 7.0 或 OriginPro 即可。

1.4 安装注册 Origin 7.0

1.4.1 Origin 7.0 对系统的要求

Origin 7.0 只有在适合的硬件环境中才能正常运行,合理地配置外部系统是保证 Origin 7.0 良好运行的先决条件。Origin 7.0 要求的计算机系统的最低配置如下:

- 高于 133 MHz Pentium CPU,或其他相当的 CPU 产品;
- 64 MB 随机存储器;
- CD-ROM 驱动器;
- 50 MB 硬盘空间;
- Microsoft Windows 95/Windows NT 4.0;
- IE5.0,用于获得 Origin 在线帮助或下在免费组件。

1.4.2 Origin 7.0 的安装、卸载和注册

安装或升级 Origin 7.0,应在 Windows 环境中打开 Origin 7.0 CD-ROM,双击 setup. exe,出现图 1.2 后面的安装界面;单击“install...”,Origin 7.0 就出现图 1.2 前面的对话框。如果安装,则选择 Modify;修复选择 Repair;卸载选择 Remove。这里我们选择 Modify,然后单击 Next 按钮,根据安装向导的提示,需要输入 Origin 7.0 的序列号和授权密码。这些号码在 Origin 7.0 软件包中。



图 1.2 Origin 7.0 安装向导页面

在安装的过程中,将提示用户 Origin 7.0 的工作目录。如果用户不指定,那么将自动安装到默认目录:C:\Program Files\OriginLab\OriginPro7.0。当第一次运行 Origin 7.0 时,会出

现提示用户注册向导页面,如图 1.3 所示。用户按照向导提示进行注册,注册后就可以运行 Origin 7.0 了。

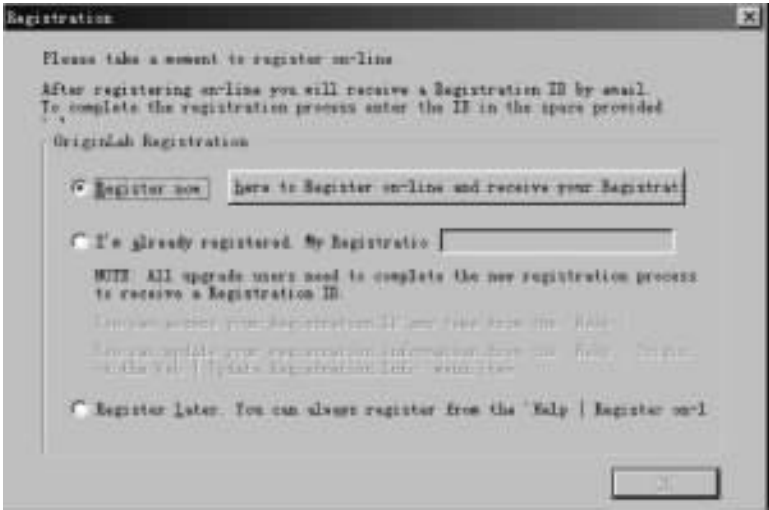


图 1.3 Origin 7.0 注册向导页面

在 Windows 资源管理器中可以查看 Origin 7.0 目录。该目录包括几个子目录,在子目录 samples 和 Tutorial 中包含了许多示例的数据文件和 Project 文件,供用户学习参考。

第 2 章 Origin 7.0 基础准备

Origin 7.0 是 Windows 操作系统平台下的数据分析和制图软件。本章主要介绍 Origin 7.0 的工作界面和基本操作,以使读者对 Origin 7.0 的工作环境有个大概了解,并掌握其基本的操作方法。

本章内容包括:

- Origin 7.0 工作环境;
- 针对不同窗口的菜单命令;
- 工具条命令按钮;
- Project 管理器;
- Origin 7.0 的窗口及文件管理;
- Origin 7.0 中的其他窗口,包括脚本窗口、结果记录窗口和编码编辑器;
- Origin 7.0 模板窗口;
- Origin 7.0 界面设置;
- 文件的打包/解包处理。

2.1 Origin 7.0 界面

Origin 7.0 与当前流行的 Windows 软件(如 Microsoft Office 2000)界面相似,是一个多文档界面 MDI(Multiple Document Interface)应用程序。运行 Origin 7.0 后,就打开了一个 Project 文件,并带有一个 Worksheet 窗口。Origin 7.0 中有 Worksheet, Graph, Layout, Excel 工作表, Matrix 和 Note 六种主要窗口。这些窗口具有不同的作用,可使用户直观、快捷、方便地分析数据。Origin 7.0 界面各部分的名称如图 2.1 所示。

从图 2.1 中可以看到,Origin 的工作界面包括下述几部分。

- 标题栏 在窗口的顶部是 Origin 7.0 的标题栏,显示当前文件的名称及路径。
- 菜单栏 标题栏下面是菜单栏。菜单栏中的每个菜单项还包括许多菜单子项,通过这些菜单命令可以实现几乎所有 Origin 7.0 的功能。
- 工具栏 菜单栏下面是工具栏。Origin 7.0 提供了分类合理、功能强大、使用方便的多种工具条。这些工具是 Origin 7.0 常用命令的总汇,大部分工具可以在菜单栏中找到对应的命令。
- 工作区 窗口的中间部分是工作区,Project 文件的所有 Worksheet, Graph, Matrix 等



图 2.1 Origin 7.0 界面

窗口的工作都是在这里完成的。

- Project 管理器 窗口的下面是 Project 管理器,类似于 Windows 中的资源管理器,以树形形式显示出 Project 文件各部分名称以及它们之间的相互关系。
- 状态栏 窗口的最下面是状态栏,为用户标出当前的工作内容以及对象的有关情况。

2.2 菜单及菜单命令

Origin 7.0 的菜单随着激活窗口的不同而改变。掌握菜单的布局和逻辑分类是很重要的,各菜单的简要说明如表 2.1 所列。这些命令针对某一窗口进行操作,如图 2.2 所示:(a) Worksheet 菜单栏;(b) Graph 菜单栏;(c) Note 菜单栏;(d) Layout 菜单栏;(e) Matrix 菜单栏;(f) Excel 窗口的菜单栏(其中圈住的三个菜单命令是 Origin 7.0 的,其余的是 Excel 程序的菜单命令)。其中有的命令相同,比如 File,Edit 和 Help 等,而有的命令不同。

表 2.1 Origin 7.0 菜单功能简要说明

菜 单	功能说明
File	执行文件功能操作
Edit	执行编辑功能操作
View	执行视图功能操作
Plot	执行绘图功能操作
Column	执行列功能操作

续表 2.1

菜 单	功能说明
Graph	执行 Graph 功能操作
Data	执行数据功能操作
Tools	执行工具功能操作
Format	执行格式功能操作
Layout	执行 Layout 功能操作
Analysis	执行分析功能操作
Statistics	执行统计功能操作
Window	执行窗口功能操作
Help	执行帮助功能操作



(a) Worksheet 菜单栏; (b) Graph 菜单栏; (c) Note 菜单栏;
(d) Layout 菜单栏; (e) Matrix 菜单栏; (f) Excel 菜单栏

图 2.2 Origin 7.0 窗口菜单栏

Origin 7.0 提供了两种不同显示方式的菜单命令——完整菜单显示和缩略菜单显示。默认情况下是完整菜单命令栏,用户可以转换成缩略形式,方法是:选择 Format| Menu| Short Menus,这样在菜单栏中就只显示几个常用的命令。如果用户想转换到完整菜单命令栏,则方法类似:选择 Format| Menu| Full Menus。对于这两种不同的显示方式,菜单栏中下拉菜单的命令也不同,如图 2.3 所示的 Worksheet 窗口 Plot 下拉菜单显示的缩略菜单命令和完整菜单命令。选用哪种显示方式,这要根据用户的需要来确定。

有的虽然菜单栏命令相同,但针对不同的窗口,其下拉菜单命令也不同。比如 Worksheet 窗口和 Graph 窗口的 Analysis 和 Tools,如图 2.4 所示, (a)和(c)分别是 Worksheet 窗口的 Analysis 和 Tools 下拉菜单, (b)和(d)分别是 Graph 窗口的 Analysis 和 Tools 下拉菜单。

有的命令后面跟有“...”,说明该命令隐含对话框或卷动窗;有的命令后面跟有黑三角,说明该命令后面隐含子菜单。

其中的一些命令可以通过快捷键实现,这些快捷键一般显示在相应命令的右边。比如图 2.4(a)中所示的 Set All Column Values,可相应按下 Ctrl+F5 键。



图 2.3 Worksheet 窗口 Plot 下拉菜单的缩略命令和完整命令



(a)(c): Worksheet 窗口 Analysis 和 Tools 的下拉菜单；
(b)(d): Graph 窗口 Analysis 和 Tools 的下拉菜单

图 2.4 Worksheet 窗口和 Graph 窗口下拉菜单比较

其中的一些命令前面带有位图标志,如图 2.3 中所示 Column, Scatter, Pie 等前面的标志。带有这种位图标志的命令在工具栏有相对应的图标按钮,可以通过单击按钮来实现相应的功能。图 2.3 所示带位图标志的命令和图 2.1 中 2D 制图工具按钮相对应。

若要关闭位图标志,则选择 Tools| Options 进入 Options 对话框,如图 2.5 所示。将 Display bitmaps in menu 前面方框中的“√”去掉,然后单击“确定”按钮,就出现一个问“是否保存设置”的对话框,单击“是”,就关闭了位图标志。若要想再次显示位图标志,则添加 Display bitmaps in menu 前面方框中的“√”。

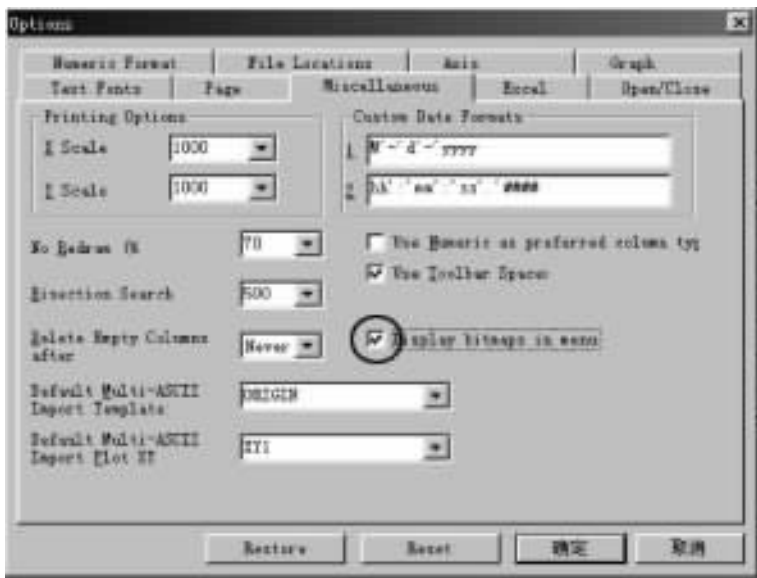


图 2.5 Options 对话框的 Miscellaneous 选项卡

许多命令的快捷方式可以通过右击鼠标而得到,在不同的窗口、不同的地方右击鼠标,可以得到不同的快捷菜单,在后面的章节中将会详细介绍。

Origin 7.0 有 Worksheet, Graph, Matrix, Excel 工作表,有 layout 页面和 notes 几个主要窗口,来分析、预览和显示数据,激活不同的窗口,其相应的菜单栏和工具条也不同。下面介绍这些命令的功能。

2.2.1 Worksheet 窗口的菜单命令

Worksheet 窗口是 Origin 7.0 最基本的窗口之一,默认的标题是 Data1 和 Data2 等,如图 2.1 所示。其主要功能是组织处理数据,包括探测、统计、分析和可视化等。当第一次打开 Origin 7.0 时,由 Origin 7.0 模板自动生成一个 Worksheet,激活 Worksheet 窗口,相应的菜单栏命令如图 2.2(a) 所示,包括 File, Edit, View, Plot, Column, Analysis, Statistics, Tools, Format, Window 和 Help 命令,各命令的下拉菜单命令简介如下。

● File

所有的文件操作都在这里执行,除了公用的 Origin project 和 Window 命令外(这些命令在其他 Windows 程序中也经常遇到,在这里就不作介绍了),该菜单还提供了 Import/Export ASCII、导入/导出数据命令。ASCII 文件指的是 ASCII 码文件,即美国信息交换标准码(A-

merican Standard Code for Information Interchange)。

● Edit

除了公用 cut(剪切), copy(复制), paste(粘贴)和 undo(撤消)命令外, 该菜单还提供了:

- Button Edit Mode 模板编辑按钮, 显示编辑程序标签;
- Clear Worksheet 清除 Worksheet, 删除 Worksheet 中内容;
- Set As Begin/End 设置 Worksheet 显示范围;
- Convert to Matrix 将 Worksheet 转化成 Matrix, 其中有几种方式可以选择;
- Transpose 将 Worksheet 的行列对调。

● View

该菜单功能是控制屏幕显示, 控制 Origin 7.0 界面上各种对象的显示、隐藏状态, 以及当前窗口的显示细节。公用命令包括显示 Toolbars(工具条), Status bar(状态栏), Script Window(脚本窗口), Code Builder(编码编辑器), Project 管理器和 Results Log(结果记录)。针对 Worksheet 窗口的命令有:

- Show X Column 显示隐藏的 Worksheet 的 X 列;
- Actively Update Plots 当 Worksheet 数据改变时, 更新其对应的 Graph 图形;
- Go to Row 到达指定的行;
- Show Grid 显示网格线。

● Plot

该菜单命令是针对 Worksheet, Matrix 或 Excel 工作簿而设置的, 下拉菜单命令是将数据按照指定的 Graph 模板制图, 包括 2D, 3D 模板和 Origin 7.0 模板库。

● Column

该菜单命令是 Worksheet 窗口专用的, 下拉菜单提供了以下命令:

- Set as X/Y/Z 将 Worksheet 的某一列设置为 X/Y/Z;
- Set as Labels 设置为标签;
- Disregarded Column 设置为无关列;
- Set as X/Y Error 设置为 X/Y 误差;
- Set Column Values 对某列进行简单的数学计算并输出新值;
- Fill Column With 填充列, 包括填充行号、大于 0 的任意数和任意数;
- Add New Columns 添加新列;
- Move to First/Last 将列移动到第一/最后一列;
- Set as Categorical 设置为分类数据列。

● Analysis

Worksheet 中的下拉菜单命令如下:

- Extract Worksheet Data 提取 Worksheet 数据;
- Set All Column Values 根据模板设置填充所有列数值, 该操作不能撤消;
- Sort Range/Column/Worksheet 排列数据, 包括数值上升/下降和按照要求排列;
- Normalize 将数值规格化;
- FFT 执行快速傅里叶变换操作;

- Correlate 执行相关操作；
- Convolute 执行卷积操作；
- Deconvolute 执行去卷积操作；
- Non-linear Curve Fit 执行非线性曲线拟合操作。

● Statistics

该菜单命令是 Worksheet 窗口独有的。在 6.1 以前的版本中该菜单命令是在 Analysis 下拉菜单中的。其下拉菜单包括一系列针对数据进行的统计命令：

- Descriptive Statistics 描述统计；
- Hypothesis Testing t-检验；
- ANVOA 方差分析；
- Multiple regression 多元回归；
- Survival Analysis 存活率分析。

● Tools

该命令的下拉菜单提供了许多窗口的公用命令,包括 Options。在 Options 对话框中,用户可以根据需要设置许多属性,如图 2.5 所示,包括字体格式、Graph、Excel、坐标轴、页面等属性;Pack/Unpack OPK files...和 Uninstall OPK files...将选中的文件打包/解包和卸载 OPK 文件。针对 Worksheet 窗口,Tools 下拉菜单还提供了下拉命令：

- Worksheet Script 联系 LabTalk 和 Worksheet 脚本文件；
- Linear/Polynomial/Sigmoidal Fit 线性/多项式/S 曲线拟合；
- Fit Comparison 通过拟合相同的函数来比较两列数据。

● Format

该菜单提供了 Menu 命令。改变菜单显示方式,其中的缩略型只包括基本常用的菜单命令,完整型包括全部命令。公用命令有;Snap to Grid,对齐 Object;Label Control,编辑标签的名称和与程序相关的属性;Color Palette,调色板。还包括 Worksheet 专用命令：

- Worksheet 改变 Worksheet 设置属性；
- Set Worksheet X Worksheet 中没有设置 X 轴的情况下,该命令激活,将 X 设置为递增序列；
- Column 设置 Worksheet 列的显示属性。

● Window

Window 下拉菜单中的命令对不同的窗口都一样,提供了 Cascade, Title Horizontally, Title Vertically 和 Arrange Icons。这几个命令是排列 Origin 7.0 子窗口的显示方式的,即层叠、标题水平对齐、标题垂直对齐和重排方式;Refresh,刷新;Rename,重命名;Duplicate,复制激活的窗口;Script Window,显示脚本窗口;Folder,选择文件夹。若在一个 Project 文件中有几个不同的子文件,则在该菜单的下面会显示出这些文件名称供选择。

● Help

该下拉菜单中的帮助对所有的窗口都一样,Origin 7.0 帮助系统是全面而细致的,提供了打开 Origin 和 programming 相关的帮助文件、访问 OriginLab 站点和注册等。

2.2.2 Graph 窗口的菜单命令

Graph 窗口如图 2.1 所示,其默认的名称 Graph1、Graph2 等,是 Origin 中最重要的窗口,

在这里用户可以编辑、生成图形,包括编辑 Graph 图层、坐标轴、数据点显示方式和文本等内容。当激活 Graph 窗口时,菜单栏命令及其菜单命令如图 2.2(b)所示,有 File, Edit, View, Graph, Data, Analysis, Tools, Format, Window 和 Help。下面介绍关于 Graph 的新命令,对于前面介绍过的公用命令则不再重复。

- File 中关于 Graph 的命令

- Import ASCII 导入数据,包括一组文件;
- Import Image 导入扩展名为 *.bmp 的图形;
- Export Page 导出页面。

- Edit 中关于 Graph 的命令

- Copy Page 将 Graph 复制到剪贴板,可以直接粘贴到 Word 文档或其他程序中;
- New Layer(Axes) 添加新层,其坐标轴方式可选择;
- Add and Arrange Layers 在激活的 Graph 中添加、排列层;
- Rotate Page 风景形式和肖像形式显示方式之间的转换,即调整图形的不同长宽比例;
- Merge all Graph Windows 将所有的 Graph 图形合并到一个 Graph 窗口中。

- View 中关于 Graph 的命令

- Pint/Page/Window/Draft View 不同的显示方式;
- Zoom In/out/Whole Page 放大/缩小/整页显示图形;
- Show 显示 Graph 的不同部分,包括是否显示 Graph 图标、标签、网格线、数据、图层等子菜单;
- Maximize Layer 最大化选中的图层;
- Full Screen 全屏显示,全屏显示后单击鼠标恢复到原来的显示状态。

- Graph 下拉菜单命令,Graph 菜单是 Graph 窗口特有的。

- Add Plot to Layer/Add Error Bar/Add Function Graph 给 Graph 添加数据/误差/函数;
- Rescale to Show All 重新标定坐标轴;
- New Legend 生成新图例;
- New XY Scale 新坐标轴定标;

- Data 菜单也是 Graph 窗口特有的,其下拉菜单命令如下:

- Data Makesrs 首先选择 Tools 工具条上的 Data Selector 按钮,进行范围设置,再选中该命令,按下 Enter 键,完成数据选择;
- Set Display Range 完成数据选择后,选择该命令,只显示选中的数据范围;
- Reset to Full Range 只显示部分数据的情况下,选择该命令,显示所有的数据;
- Move Data Points 移动数据点,选择该命令,鼠标变成,选中数据点可进行移动;
- Remove Bad Data Points 删除奇点,选中该命令,鼠标变成,选中数据点,双击“删除”。

- Analysis 中关于 Graph 的命令

- Simple Math 执行数学运算；
- Smoothing 平滑曲线；
- FFT Filter FFT 过滤器；
- Calculus 微分、积分运算；
- Substrate 减运算；
- Translate 转化操作；
- Average Multiple Curve 将几条曲线平均；
- Interpolate/Extrapolate 执行插值操作；
- Fit... 后面的命令都是关于线性或非线性拟合的操作。
- Tools 中关于 Graph 的命令
 - Layer 打开添加/安排新层对话框,给 Graph 添加新层；
 - Pick Peaks 从曲线中挑选衍射峰；
 - Base Line 为曲线添加基线；
 - Smooth 平滑曲线。
- Format 中关于 Graph 的命令
 - Page/Layer/Plot 打开一个对话框,具有几个标签,设置页面/图层/曲线的显示属性；
 - Axes/Axis Tick Labels/Axis Titles 打开一个对话框,设置坐标轴、坐标轴刻度等显示属性。

2.2.3 Matrix 窗口的菜单命令

与 Worksheet 不同,Matrix 中只显示 Z 数值,而没有显示 X, Y 数值,默认的标题是 Matrix1、Matrix2 等,如图 2.1 所示。Matrix 菜单栏如图 2.2(e) 所示,下面介绍各命令的下拉菜单。

- File 下拉菜单中关于 Matrix 的命令
 - Import/Export ASCII 导入/导出数据；
 - Import/Export Image 导入/导出图像。
- Edit 下拉菜单中关于 Matrix 的命令为 Convert to Worksheet,将 Matrix 转换成 Worksheet。
- View 下拉菜单中关于 Matrix 的命令
 - Go to Row 显示指定的行；
 - Data/Image Mode 数据模式/图像模式转换；
 - Show Column/Row//X/Y 显示行/列和显示 X/Y 数值之间转换。
- Plot 下拉菜单提供了 Matrix 数据制图的模板命令,包括三维模板和等高线制图模板。
- Matrix 菜单命令

Matrix 菜单命令是 Matrix 窗口独有的,包括的命令如下:

- Set Properties/Dimensions 设置 Matrix 的显示属性和维数；
- Set Values 通过函数设置 Matrix 中的数值；
- Transpose 矩阵转置；

- Invert 矩阵求逆;
- Rotate90 旋转 90° ;
- Flip V/H 竖直/水平倒转, 竖直倒转是第一行和最后一行互换, 第二行和倒数第二行互换等, 水平倒转是相对列的类似变换;
- Expand/Shrink 扩展/收缩 Matrix;
- Smooth 平滑;
- Integrate 积分。

● Image 菜单命令

Image 菜单命令也是 Matrix 窗口独有的, 主要调整 Matrix 的显示属性。

- Convert to Gray+Data 将位图转换成灰度+数据显示方式;
- Tuning 打开 Tuning 对话框, 调整 Matrix 亮度、对比度等属性;
- Palettes 当 Matrix 为 Image Mode 显示模式时, 该命令激活, 包括 Gray Scale(灰度显示)、Rainbow(彩色显示)和 RedWhiteBlue(红白蓝显示)三种显示模式。

● Tools 下拉菜单中关于 Matrix 的命令

- Region of Interest Mode 显示工具条工具, 复制并生成新 Matrix。

2.2.4 Excel 工作表窗口的菜单命令

在 Origin 7.0 界面中可以打开 Excel 工作表, 这要求用户的计算机同时装有 Microsoft Excel 应用程序(Microsoft Office 95 或更高级版本)。在这里可以完成几乎所有 Excel 工作, 但我们所关心的是 Origin 7.0 中的 Excel, 故本书只介绍 Excel 中的 Origin 7.0 中的功能。打开 Excel 工作表后, 菜单栏如图 2.2(f) 所示。这个菜单栏包括三个 Origin 菜单: File, Plot 和 Window。其中 File 和 Plot 菜单命令与前面介绍的相似; 由于其他菜单均转换成相应的 Excel 菜单命令, 故在 Window 下拉菜单命令中添加了一些 Origin 7.0 其他窗口下拉菜单的命令, 比如 Option, Toolbar 等。另外附加的一项命令是 Create Matrix, 将选中的 Excel 数据转换成 Matrix 数据。

2.2.5 Layout 页面的菜单命令

Layout 页面用于创建图形外观。Project 文件中的任何组件如 Graph, Worksheet 都可以在 Layout 页面中显示排列, 同时还可以添加文本或注释。其菜单栏如图 2.2(d) 所示, 下面介绍其下拉菜单命令。

● File 菜单提供的关于 Layout 页面的命令

- Import Image 输入图像文件;
- Export Page 输出页面。

● Layout 是 Layout 页面特有的菜单, 包括下列命令:

- Add Graph/Worksheet 以图片的格式将 Graph/Worksheet 添加到 Layout 窗口中;
- Set/Clear Picture Holder 显示/清除图片占位符;
- Global Speed Control 预览图片时增加刷屏速度, 增强显示效果。

● Format 菜单提供的关于 Layout 页面的命令只有 Layout Page, 用于设置页面显示属

性。其他菜单命令与介绍的相似,这里就不再赘述了。

2.2.6 Notes 窗口的菜单命令

Notes 窗口只能输入文本,如图 2.1 所示,是用来记录使用过程中遇问题的注释或提示的,与 Windows 记事本类似。该窗口可以单独保存,也可以保存在 Project 文件中。其菜单栏如图 2.2(c)所示,其中独有的命令是 View 下拉菜单中的 Word Wrap,功能是打包文本文档。

2.3 工具条

Origin 7.0 工具条提供了大量的命令按钮。工具条包含了常用菜单命令的快捷按钮,给用户带来了很大方便。这些命令按钮大部分可以在菜单栏中找到对应的命令,比如标准工具条中的几个“新建”按钮,可以从菜单中选择 File| New 实现。

第一次打开 Origin 7.0 时,窗口中出现 Standard 工具条、Graph 工具条、Format 工具条、Style 工具条、Tools 工具条和 2D Graphs 工具条。其中的一些命令按钮只有相应的窗口激活后,命令按钮同时处于激活状态时才能使用。

这些工具条是为了方便用户操作而设计的,用户可以根据自己的需要进行改变。选择 View| Toolbars,弹出图 2.6 所示的对话框。在这里可以根据需要,选中相应的标题,则显示对应的工具条。比如经常对数据进行操作的用户可选中 Worksheet Data,常画三维图形的用户可选中 3D Graphs,则在工具栏中出现 Worksheet Data 和 3D Graphs 工具条。



图 2.6 个性化工具条对话框

选中“显示工具提示”(Show Tooltip)复选框,则在使用工具栏时,只要将鼠标放到工具条某一按钮上,会在旁边出现一个方框,显示出该按钮的名称,并在状态栏中显示出该按钮的功能,如图 2.7 所示。大约 5 s 后,该方框消失。

工具条是浮动显示的,可以放在窗口中的任何位置。当将工具条拖动离开工具栏时,就会在工具条的上部显示出该工具条的名称,如图 2.7 中的 2D Graphs 工具条。



图 2.7 显示按钮名称及功能

打开 Excel 窗口时,出现和 Excel 相关的工具条;当关闭 Excel 窗口而激活其他窗口时,和 Excel 相关的工具条消失,但留下了空白,成为工具条空白区,如图 2.8 所示。如果想隐藏这个区域,则在该区域右击鼠标,单击快捷菜单的 Hide Toolbar Spacer,但这样的话,下次再打开 Excel 窗口时,还会留下这个空白区域。如果在图 2.5 Options 对话框 Miscellaneous 的选项卡中,取消 Use Toolbar Spacer 功能,则再打开 Excel 窗口时,就不会留下工具条空白区了。



图 2.8 工具条空白区/工具提示

这些工具条都可以根据用户的需要拖动到合适的位置。下面简单介绍各工具条按钮的名称及功能,其中有的在图 2.1 中出现了,有的没有出现。

Origin 7.0 提供了 16 种工具条,如图 2.6 的 Toolbar 列表所示,下面给予简单介绍。

2.3.1 Standard 工具条

如图 2.9 所示,从左到右,Standard(标准)工具条可以分成几组:第一组为新建按钮,包括新建 Project, Worksheet, Excel, Graph, Matrix, Function, Layout 和 Note。第二组为打开、保存按钮,包括打开 Project, 模板或 Excel, 保存 Project 或模板。第三组为导入按钮,导入 ASCII 数据、多个 ASCII 数据。第四组是 Windows 常用的按钮,包括打印、刷新、复制和 custom routine。第五组是 Project 管理按钮,该按钮控制显示/隐藏图 2.1 中 Project 管理器;结果记录按钮,按下该按钮,则在图 2.1 中 Project 管理器后面出现一个新窗口;还有脚本窗口按钮、编码编辑器按钮及给 Worksheet 添加新列按钮。



图 2.9 Standard 工具条

2.3.2 Edit 工具条

Edit(编辑)工具条包括剪切、复制和粘贴按钮,如图 2.10 所示。

2.3.3 Graph 工具条

如图 2.11 所示,Graph 工具条只有激活 Graph 或 Layout 窗口时才能使用。该工具条提供了变焦、重新标定坐标轴以显示所有数值,将各层在多个 Graph 窗口中显示,添加颜色、图例、坐标、时间等按钮。其详细功能将在后面介绍。



图 2.10 Edit 工具条



图 2.11 Graph 工具条

2.3.4 2D Graphs/2D Graphs Extended 工具条

2D Graphs 工具条提供了 2D Graphs 普通制图模板,包括直线、散点、饼图和极坐标等,如图 2.12 所示。当激活 Worksheet, Excel 工作表时,先选择工作表中的数据,然后单击工具条上的某个按钮,则可以将数据在 Graphs 窗口中绘制成图形。当 Graphs 窗口激活时,用户可以改变 Graphs 窗口中图形的类型,例如可以将折线图变成散点图或柱形图,或者从菜单栏 Data 的菜单中选择激活某一数据图,单击 2D Graphs 工具条中的按钮来改变图形类型。

2D Graphs Extended(扩展)工具条提供了更多的制图模板。



图 2.12 2D Graphs/2D Graphs Extended 工具条

2.3.5 3D Graphs/3D Rotation 工具条

3D Graphs/3D Rotation(旋转)工具条提供了 3D Graphs 普通制图模板,如图 2.13 所示。第一行,前两个按钮是制作 XYZ 数据 3D 图的,接下来的四个按钮是制作 XYY 数据 3D 图的,后面的是使用 Matrix 数据制图的。第二行的是 3D Rotation 工具条。该工具条按钮提供了以不同方式旋转视图,达到合适的视觉效果。

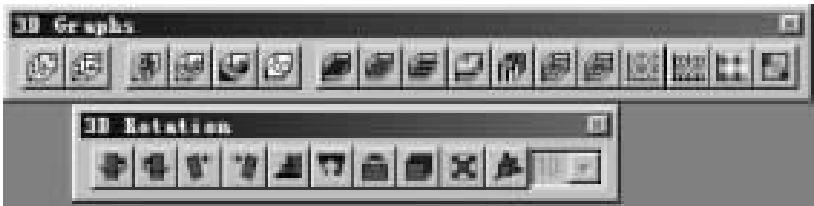


图 2.13 3D Graphs/3D Rotation 工具条

2.3.6 Worksheet Data 工具条

如图 2.14 所示,Worksheet Data(数据)工具条只有当激活 Worksheet 时才能使用。其提供了对行/列数据统计、排序、设置列值、根据行号或随机填充数据的功能。

2.3.7 Column 工具条

Column(列)工具条只有激活 Worksheet 列时才能使用。其提供了可视化变量设置和列的移动等按钮。



图 2.14 Worksheet Data 工具条



图 2.15 Column 工具条

2.3.8 Layout 工具条

该工具条的功能是针对 Layout 窗口起作用的,可以往 Layout 窗口中添加 Graph 或 Worksheet。如图 2.16 所示。

2.3.9 Mask 工具条

如图 2.17 所示。在激活 Graph 或 Worksheet 时,Mask(屏蔽)工具条被激活。该工具条提供了屏蔽数据点、数据范围、解除屏蔽等工具。



2.16 Layout 工具条



图 2.17 Mask 工具条

2.3.10 Tools 工具条

Tools 工具条提供了添加文本、注释、线条、箭头、放大、读取数据、设定数据区域、画任意线等按钮,如图 2.18 所示,其中后四个按钮是 Origin 7.0 新添加的功能。



图 2.18 Tools 工具条

2.3.11 Object Edit 工具条

Object Edit(对象编辑)工具条针对激活窗口中一个或几个注释对象,或 layout 页面中的多个图片。这些按钮具有设置图片对齐方式(包括左对齐、右对齐、上对齐、下对齐、垂直居中对齐和水平居中对齐)、统一高度/宽度、调整叠放次序等功能,如图 2.19 所示。



图 2.19 Object 编辑工具条

2.3.12 Arrow 工具条

Arrow(箭头)工具条是设置线或箭头形状的,如图 2.20 所示,可以针对一个或多个箭头进行操作。第一个按钮是显示线或箭头以终点为不动点在水平方向上的投影;第二个按钮是显示线或箭头在竖直方向上的投影;后面四个按钮是改变箭头的大小和显示形状的。使用这些命令按钮时应首先选中一条或几条直线或箭头。



图 2.20 Arrow 工具条

2.3.13 Format 工具条

Format(格式)工具条是 Origin 7.0 新加的,用于直接在 Graph, Layout 等窗口中编辑文本或注释,提供了编辑字体格式、颜色、大小、加粗、放大、缩小、下划线等功能,其用法和 Word 等软件相同,如图 2.21 所示。

其中的 Greek 按钮  所代表字体可以进行设置,选择 Tools| Options 打开 Options 对话框,单击 Text Fonts 标签,在 Greek 的下拉列表中选择合适的字体。



图 2.21 Format 工具条

2.3.14 Style 工具条

Style(风格)工具条也是 Origin 7.0 新加的,如图 2.22 所示。前三个工具是用于编辑线条、箭头、方框、椭圆、多边形的边框线条颜色、类型和粗细的。后面四个工具是编辑方框、椭

圆、多边形的,其功能分别是改变添加网格线类型,改变背景颜色,改变网格线粗细,改变网格线颜色。



图 2.22 Style 工具条

2.3.15 Data Display 工具

最后要介绍的是 Data Display(数据显示)工具,如图 2.23 所示。该工具的作用是按下 Screen Reader(屏幕读数)按钮  或 Data Reader(数据读取)按钮 ,将鼠标放到 Graph 窗口时,在数据显示条中动态显示鼠标相应的坐标值。

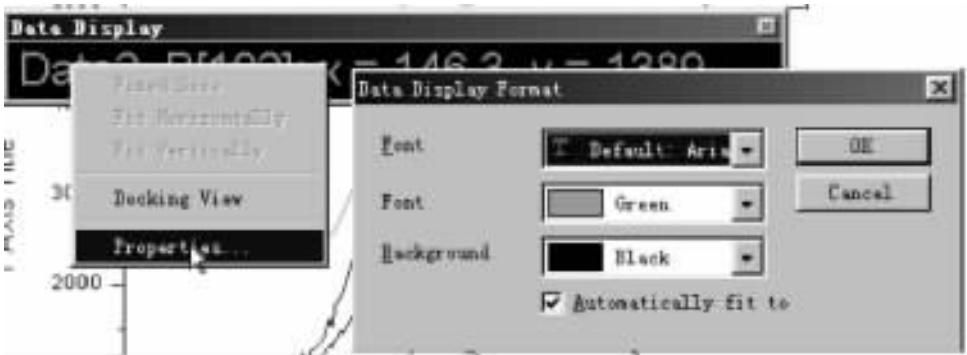


图 2.23 Data Display 工具

可以将该工具放在窗口的任何位置,或用鼠标调整其大小。右击该工具条,其快捷菜单命令如图 2.23 所示。

- 单击 Docking View,将显示工具放在工具条位置上,或双击该工具将其放在工具条位置上。如果要将该工具显示为浮动状态,则取消该命令或双击数据显示工具。
- 单击 Properties,打开 Data Display Format 对话框,设置字体、文本颜色和背景颜色;选中 Automatically Fit to Display 复选框,自动调整显示工具中字体的大小,使得字体大小随显示工具的大小而变化。
- 当取消 Automatically Fit to Display 复选框的选择时,激活快捷命令 Fixed Size, Fit Horizontally 和 Fit Vertically。若选中 Fit Horizontally 选项,则文本在宽度方向上添满显示工具,调整显示工具时,文本做相应的调整;若选中 Fit Vertically 选项,则文本在高度方向上添满显示工具,调整显示工具时,文本做相应的调整;若选中 Fixed Size 选项,则其他两项命令不起作用,固定文本大小不随显示工具的改变而改变。

其实利用 Customize Toolbar 对话框的 Button Group 标签可以对 Origin 命令有一个总体认识。如图 2.24 所示,在左边的 Groups 列表框内选择 Worksheet Data,在右侧则出现该工具条包含的命令按钮。如果选中一个按钮图表,那么在下面的 Button(按钮)文本框内显示该按钮命令的功能。



图 2.24 Customize Toolbar 工具条按钮群

2.3.16 生成新工具条

前述是 Origin 7.0 默认的工具条,用户可以在工具条上添加、移动按钮,也可以生成新工具条。从菜单栏中选择 View| Toolbars,弹出图 2.6 所示的对话框;单击 New(新建)按钮,弹出图 2.25(左边)所示的 New Toolbar 对话框;添入新工具条名称,单击 OK 即可。或者在图 2.24 所示的对话框中单击 New(新建)按钮,弹出图 2.25(右边)所示的 Create Button Group 对话框,添入新工具条名称、按钮数量、图标位置,单击 OK。这些按钮的属性可以通过图 2.24 中的 Settings 按钮来设置。



图 2.25 New Toolbar 和 Greate Button Group 对话框

2.4 Project 管理器

Project 管理器是组织 Origin Project 文件的工具。如果一个 Project 文件含有多个子窗口,那么 Project 管理器就显得非常重要。为了管理好这个 Project 文件,可以用 Project 管理器建立文件夹,也可以通过 Project 管理器来控制工作区中各子窗口的视图效果。

当首次运行 Origin 7.0 程序时,Project 管理器在窗口和工具条的下面,如图 2.1 所示。可以用鼠标将该窗口拖动到窗口的任何地方。

为了组织管理 Project 文件,须打开 Project 管理器;有时为了扩大工作区空间,又须关闭它。可以单击 Standard(标准)工具条中的 Project 管理器按钮,来切换显示/隐藏 Project 管理器,或选择 View| Project Explorer 进行切换。

Project 管理器格式和性质就像 Windows 资源管理器一样,可以像使用 Windows 资源管理器那样,选中文件夹,右击鼠标,弹出图 2.26 所示的快捷菜单。在这里可以进行“新建”、“删除”、“重命名”文件、“保存”Project 文件、“查看”文件夹属性等操作,也可以在文件夹之间移动文件。

Project 管理器的另一个功能是控制工作区的预览效果。在 Project 管理器中右击鼠标,可弹出窗口预览效果菜单,如图 2.27 所示;若选择图 2.26 中的 View Windows 也会出现同样的菜单;或从菜单栏中选择 View| View Mode 也可。其共有三种显示方式:

- View None 不显示子窗口;
- View Windows in Active Folder(默认)
只显示当前选定的文件夹内的文件;
- View Windows in Active Folder & Subfolders 显示当前选定的文件夹及其子文件夹内的子窗口。

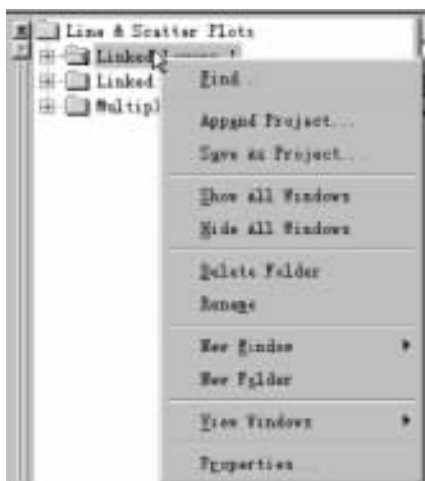


图 2.26 对文件夹操作菜单

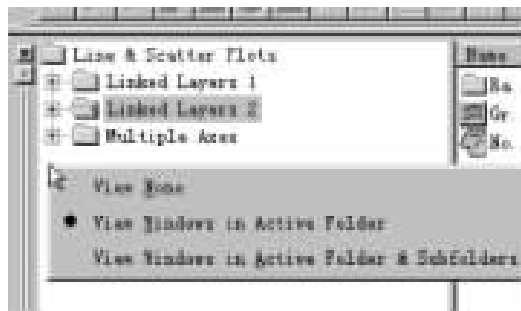


图 2.27 窗口预览效果菜单

默认情况下,只有 Project 管理器中选中的文件夹中的文件显示在工作区,这样用户就可以集中精力对选中的窗口进行操作了。

如果一个 Project 含有多重子文件夹,那么查找某个子文件夹是一件麻烦的事情。Origin 7.0 提供了自动查找功能。在图 2.26 所示的快捷菜单中单击 Find,则弹出如图 2.28 所示的对话框,可进行查找文件或文件夹操作。



图 2.28 Find 对话框

当关闭 Project 管理器而要切换到某窗口时,可以选择 Window | Folders | 文件夹或文件名,或者单击 Window 菜单下面列出的文件名称,就可以显示要编辑的窗口,如图 2.29 所示。

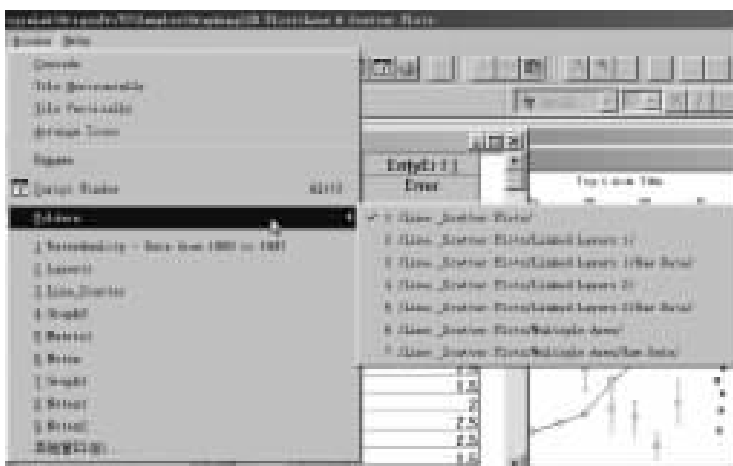


图 2.29 快速显示文件或文件夹

2.5 Origin 7.0 的窗口及文件管理

Origin 7.0 中包含 Worksheet, Matrix, Excel 工作簿和 Graph 等窗口,可以生成或打开许多这样的窗口,但是除了受到计算机内存的限制外,还要考虑到易于管理。下面介绍对 Origin 7.0 窗口的管理操作。

Origin 7.0 将用户所有的工作都保存在后缀为 .OPJ 的 Project 文件中,与 Visual Basic 等软件很类似。保存 Project 文件时各子窗口也随之一起存盘,子窗口也可以单独保存,以便别的 Project 文件或其他应用程序调用。

2.5.1 生成新窗口

若要生成新窗口,则可以直接单击 Standard(标准)工具条中的生成新窗口按钮。这些按钮提供了默认的 Origin 模板窗口,比如单击 New Worksheet 按钮 ,则根据 ORIGIN. OTW 模板生成新窗口。如果想改变这些模板类别,那么选择 File| New,打开一个“新建”对话框,如图 2.30 所示。选中 Worksheet,从模板下拉列表中选择想要的模板的类型,单击 Set Default,便改变了 New Worksheet 按钮  联系的模板类型。通过这种方法也可以生成新类型的 Worksheet 窗口。



图 2.30 “新建 Worksheet”对话框

2.5.2 打开窗口

打开 Origin 7.0 后,会自动出现一个 Worksheet 窗口。如果在一个 Project 文件窗口中添加另一个 Project,则有两种途径可以实现:

- 选择 File| Append;
- 在 Project 管理器文件夹图标上右击鼠标,从快捷菜单中选择 Append Object。

这两种途径执行的结果是相同的。打开图 2.31 所示的对话框,选择需要添加的文件,单击 OK 按钮,显示 Reminder Message 对话框;如果单击 No 按钮,则出现 Attention 对话框,如图 2.32 所示。这样的话,将会在窗口中出现所有包含在 Project 中的子窗口,并将名称相同的窗口进行重命名。

有时只需对某个窗口进行操作。Origin 7.0 的子窗口可以脱离创建它们的 Project 而单独保存和打开。如果想添加某种类型的文件,必须是已经保存为这种类型的,比如打开 Worksheet、Graph 等窗口,单击标准工具条中的“打开”按钮 ,将会出现一个对话框,如图 2.31 所示,从对话框的下拉列表中选择适合的类型。

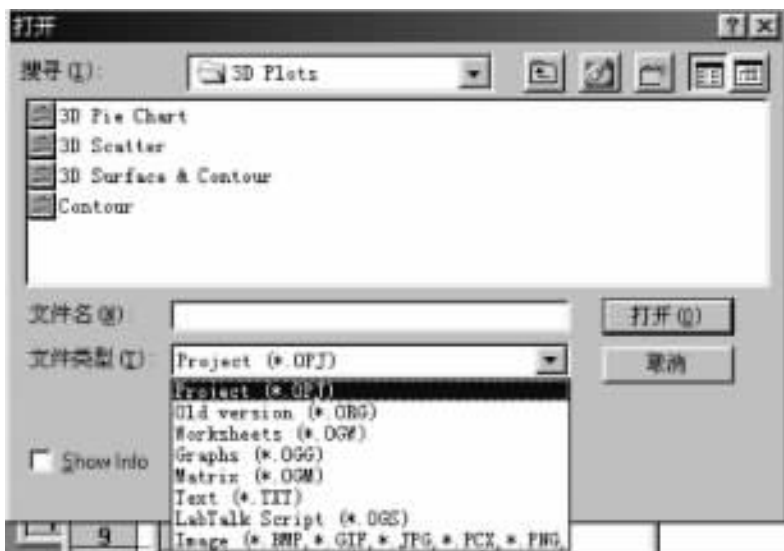


图 2.31 “打开”对话框



图 2.32 Reminder Message 和 Attention 对话框

- *.OPJ 打开 Project 文件；
- *.OGW 打开 Worksheet 窗口；
- *.OGG 打开 Graph 窗口；
- *.OGM 打开 Matrix 窗口；
- *.TXT 打开 Note 窗口；
- *.OGS 打开 LabTalk 脚本。

注意：*.ORG 文件是 Origin4 或以前老版本创建的 Project 文件。

打开一个窗口后,这个窗口文件就作为 Project 文件的一部分了。

默认情况下,Origin 7.0“打开”命令会自动指示到上次打开过文件的路径,这是 Origin 7.0 的新功能,但用户可以取消这个路径或定制新路径,选择 Tools| Options,单击 Options 对话框的 File Locations 选项卡;清除 Track File Dialog Changes 复选框,取消 Origin 上次打开文件路径。

若指定新路径,则选中 Track File Dialog Changes 复选框,从上半部分的列表中选中文件组,如 Origin;然后单击 Edit 按钮,打开 File Extension Group Defaults 对话框,如图 2.33 所示。在 Open Path 下拉列表中用户可以选择:

- **User Path** 在 Open Path 组下拉列表中选择 User Path,此选项是默认的。如果已经打开过文件,那么在下面的文本框中会显示出最近打开过文件的路径。如果想指定新路径并每次都打开该路径的文件,那么单击  按钮,浏览、选中期望的路径,单击 OK 按钮,如图 2.33 所示。
- **Project Path** 选择该选项,Origin 将打开对话框的路径设置为当前打开的 Project 文件的路径。
- **Origin Path** 选择该选项,Origin 将打开对话框的路径设置为 Origin 文件夹。

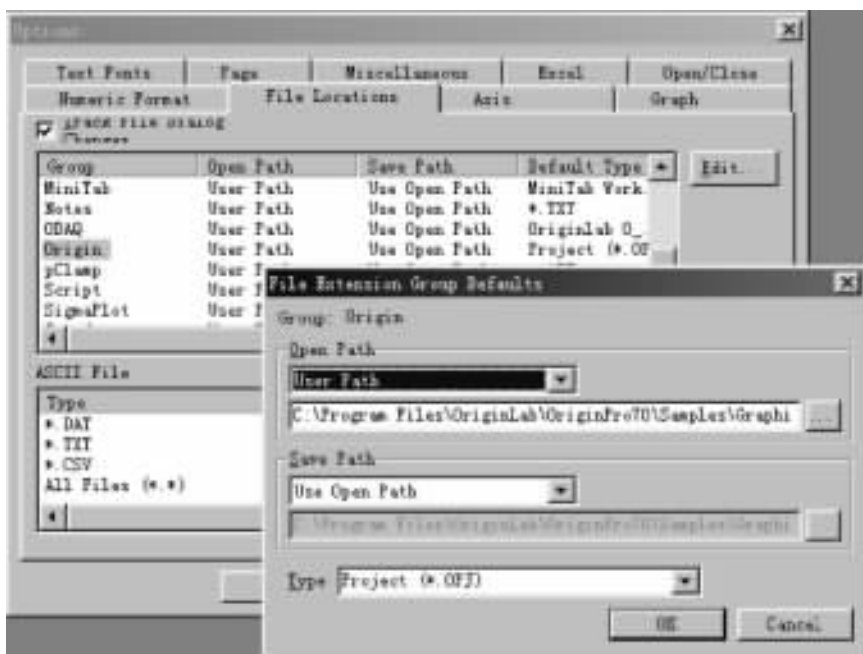


图 2.33 定制文件路径

在 Save Path 下拉列表中是让用户保存文件路径的:

- **Use Open Path** 选中该选项,保存文件时,保存文件对话框会将路径指示到打开文件的路径。如果想将文件保存到同样的位置,则选中该选项。
- **User Path** 选中该选项,保存文件时,保存文件对话框会将路径指示到刚保存过的文件路径,在下面的文本框中已经显示出来。如果用户想指定一个路径,每次保存时都保存到该位置,则单击  按钮,找到合适位置,单击 OK 按钮。
- **Project Path** 选中该选项,保存文件对话框会将路径指示到当前打开的 Project 文件。
- **Origin Path** 选中该选项,保存文件对话框会将路径指示到 Origin 文件夹。

在 Type 下拉列表中,提供了当前选中类型(本例是 Origin)中的所有扩展名。该选项决定了“打开”、“保存”文件时的默认文件类型,Origin 已经将常用的文件类型设置为默认。

如果想打开 Excel 文件,那么单击标准工具条的“打开”Excel 按钮 ,或选择 File| Open Excel,会出现一个对话框,询问是作为 Excel 工作表打开,还是作为 Origin Worksheet 打开,如图 2.34 所示。如果选择 Open as Excel Workbook,则可以在 Origin 中使用 Excel 电子表格

的所有功能,并且能够利用 Origin 提供的工具绘图,当保存 Project 文件时,Excel 工作表将被作为链接一起保存;如果选择 Open as Origin Worksheet,会将 Excel 工作表转换出 Worksheet,而不能使用 Excel 电子表格的功能,并且这些数据也不再和原来的 Excel 工作表保持链接关系。

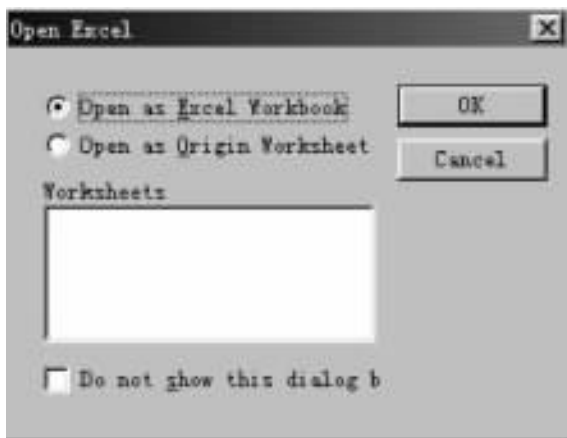


图 2.34 Open Excel 工作表对话框

2.5.3 窗口重命名

若要对 Worksheet, Matrix 等窗口重命名,则激活该窗口,选择 Window| Rename,或在标题栏上右击鼠标,选择快捷菜单命令 Rename,打开如图 2.35 所示的 Rename 对话框。



图 2.35 Rename 对话框

也可以在 Project 资源管理器中,像使用 Windows 窗口那样对文件或文件夹进行重命名。若对 Excel 工作表重命名,则在窗口的标题上右击鼠标,从快捷菜单中选择 Properties,然后重命名。

重命名时必须注意下述各项。

- 选中 Name(single word)复选框

选中 Name (single word)复选框,就可以在其后面的文本框中输入新名称了,但要注意:

- 名称不能超过 13 个字节;

- 窗口的名称不能以数字开头,若键入的子窗口名称是以数字开头的,那么 Origin 会自动在它前面加上“A”;
- Origin 会忽略字节之间的所有空格。

● 选中 Label 复选框

选中 Label 复选框,在后面的文本框中输入窗口标签说明:

- 允许键入更多的字符;
- 接受特殊字符,如下划线、斜杠和空格等;
- 本操作只是重新命名了子窗口说明,而子窗口的名称并没有改变。

● 选中 Both Name and Label 复选框

本选项可重命名子窗口的名称和说明。名称和说明都会子窗口的标题栏上显示出来,中间以连字符相连。如:无标题-C:\My Documents\无标题.txt。

2.5.4 隐藏窗口

为了突出工作区,可以在不删除的前提下隐藏暂时不用的窗口。隐藏后的窗口图标显示模糊,如图 2.36 所示。双击 Project 管理器右边要隐藏窗口的图标,即可实现隐藏/显示切换;也可以选中窗口图标,从右击鼠标的快捷菜单中实现,或在窗口的标题上右击鼠标,从快捷菜单中选择 Hide。

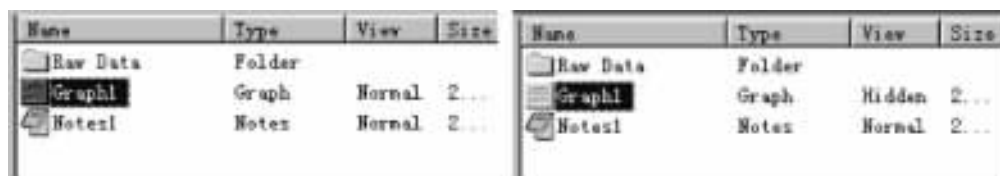


图 2.36 窗口隐藏前后图标的显示不同

2.5.5 刷新窗口

当 Graph 或 Worksheet 窗口的内容改变后,或重新显示隐藏窗口后,Origin 会自动刷屏,但偶尔有的窗口不能正确地显示。当遇到这种情况时,单击标准工具条中的“刷新”按钮 ,或选择 Windows| Refresh,即可刷新当前激活窗口的子窗口。

2.5.6 删除窗口

若要删除 Project 的子窗口,则单击窗口右上角的“关闭”按钮;或选中 Project 管理器中窗口的相应图标,从右键的快捷菜单中选择 Delete Window。为防止丢失必要的的数据,系统会弹出提示框,问是 Delete,还是 Hide。如果选择 Hide 按钮,则该窗口从工作区中消失,但仍保留在整个 Project 文件中,这样还可以激活该窗口。

注意:选择 Tools| Options,打开 Options 对话框;选择 Open/Close 选项卡,在窗口关闭选项中选择想要的窗口关闭的响应类型,如图 2.37 所示;若选中 Backup Project Before Saving 复选框,则可实现 Project 文件自动备份功能,备份文件名为 BACKUP.OPJ。

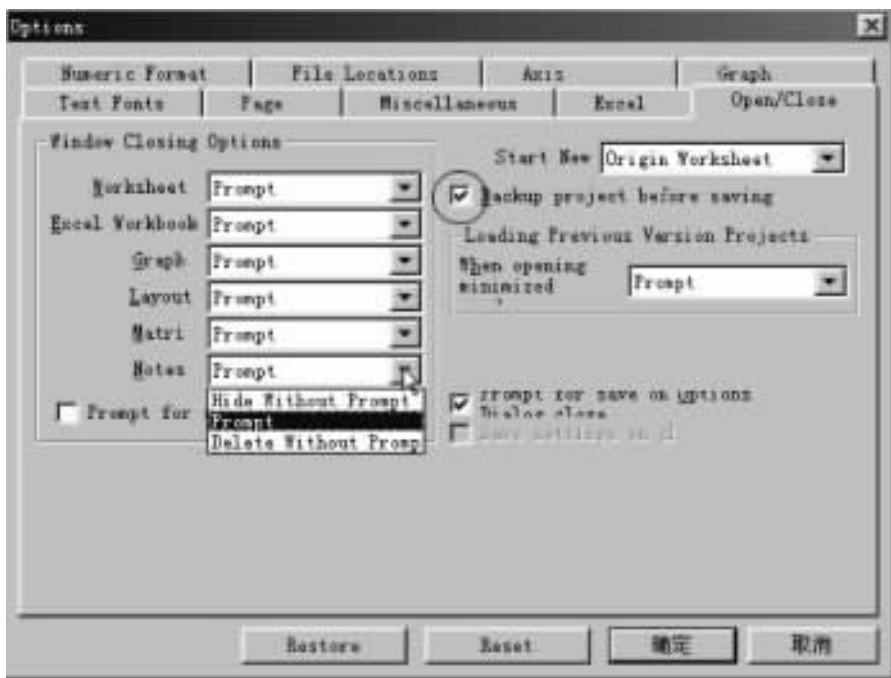


图 2.37 设置窗口关闭响应选项

2.5.7 复制窗口

若想复制激活的 Worksheet, Graph, Matrix 或 Layout 页面窗口, 则单击工具条中的“复制”按钮 , 或者选择 Windows| Duplicate, 就会复制当前激活的窗口。新生成的窗口默认名称是窗口名称+N, N 是该类型窗口缺省文件名的最小正整数序号。

2.5.8 排列子窗口

当在 Origin 7.0 中包含多个子窗口时, 有三种排列方式:

- 层叠 选择 Windows| Cascade, 则当前激活的子窗口全部显示, 而其他子窗口层叠排列在其后面, 只显示标题, 如图 2.38(a) 所示。
- 水平平铺 选择 Window| Title Horizontally, 则全部子窗口水平平铺显示, 如图 2.38(b) 所示。
- 竖直平铺 选择 Windows| Title Vertically, 则全部子窗口竖直平铺显示, 如图 2.38(c) 所示。

2.5.9 保存文件

若要保存 Project 文件, 则选择 File| Save Project, 或单击标准工具栏中的“保存”按钮 。这时有两种情况:

- 如果该 Project 文件以前保存过, 那么 Origin 7.0 自动保存修改过的内容;
- 如果该 Project 文件以前没有保存过, 系统会弹出 Save As 对话框, 默认文件名为



图 2.38 Origin 子窗口的三种排列方式

UNTITLED.OPJ,如图 2.39 所示。

在文件名文本框内键入文件名,单击“保存”即可保存 Project 文件。

如果需要把 Project 保存为新文件,则选择 File| Save Project As,即可打开 Project 保存对话框,保存为新文件,并保持旧文件不变的备份功能。

除了保存为 Project(*.OPJ)文件外,各窗口可以单独保存(Layout 页面除外),这样这些文件就可以在 Origin 的其他 Project 文件中打开了。若要保存激活的窗口,则选择 File| Save Window As,打开“保存”命令对话框,在保存类型下拉列表中选择正确的扩展名类型。扩展名类型如表 2.2 所列。



图 2.39 “另存为”Project 文件对话框

表 2.2 窗口文件扩展名

窗 口	文件扩展名
Worksheet	*.OGW
Matrix	*.OGM
Graph	*.OGG
Excel 工作表	*.XLS
Note	*.TXT

2.6 Origin 中的其他窗口

除了上面介绍的窗口外,Origin 7.0 中还提供了 Script,Results Log 和编码编辑器窗口,下面分别介绍。

2.6.1 Script Window 的菜单命令

Script Window(脚本窗口)是执行 LabTalk 语言程序时用到的一个文本编辑器,如图 2.40 所示。LabTalk 是 Origin 旧版本的程序语言,在 Origin 7.0 中又添加了许多新功能,引入新 Origin C 程序语言;然而当执行程序解释 LabTalk 脚本时,Origin 会按照字节编码形式编辑 OriginC,但运行时速度比运行 LabTalk 快得多。

虽然 Origin C 是 Origin 7.0 中的首选程序,但必须使用 LabTalk 命令才能调用 Origin C 函数。这些命令是从 Script Window 或一些其他支持 LabTalk 的 Script Window 来执行的。打开脚本窗口,有以下两种方法:

- 选择 Window| Script Windows;
- 单击标准工具条中的 Script Windows 命令按钮.

注意:当保存 Project 文件时,Script Window 中的内容不能一起随之保存。

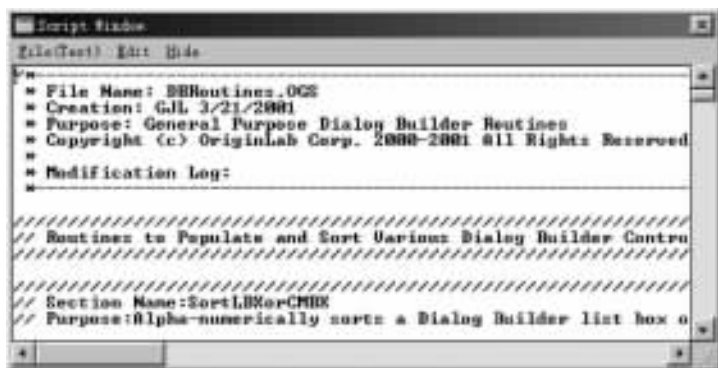


图 2.40 Script Window(脚本窗口)

2.6.2 Results Log 窗口

Origin 7.0 自动地显示曲线拟合和分析结果,如线性拟合、多项式拟合、S 拟合等结果。在大部分情况下,会自动打开输出结果,也可以单击标准工具条上的结果记录“显示”/“隐藏”按钮,手动打开/隐藏“结果记录”窗口,即使隐藏情况下也不会丢失记录数据。

当首次打开 Results Log(结果记录)窗口时,它会出现在工作区最上面,而且窗口中包含窗口名称、时间标记、项目位置、分析类型和结果,以便查看,如图 2.41 所示,可以查看数据分析拟合后得到的参数。

在 Results Log 窗口中,可以预览所有对象记录,也可以查看当前文件夹中的记录。选择 View | View Mode,在子菜单有三个不同的子菜单,可选择其中任一子菜单显示相应的记录;或者从该窗口鼠标右键的快捷菜单中选择显示方式。

注意:结果记录窗口是浮动的,可以根据需要将其拖动到 Origin 工作区的合适位置;如果不能拖动,按 Ctrl 键即可。

结果记录窗口中的内容是不能编辑的,但可以清除或复制,通过鼠标右键快捷菜单中的命令来实现,如图 2.41 所示。快捷菜单中 Clear Last Entry 选项可删除最先记录条目。如果选择 Clear 选项,则打开 Clear Result Log 对话框,从中选择“删除”。若撤消删除操作,则从快捷菜单中选择命令 Restore Last Cleared Entry。

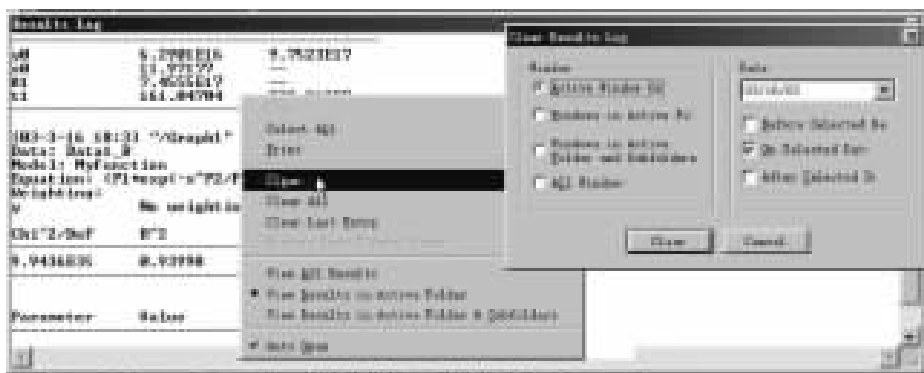


图 2.41 Results Log 窗口及其快捷菜单命令 Clear 打开的 Clear Results Log 对话框

2.6.3 Code Builder

Origin 7.0 程序语言称为 Origin C。Origin C 支持几乎所有的 ANSI C 语法和一些包括内在的动态链接扩展库的 C++ 组件,而且 Origin C 的一些目标文件如 Worksheet 和 Graph 等都会映射到 Origin C 中的某个类型,也允许从 Origin C 中直接管理这些目标文件及其属性。

Origin C 的整体开发环境称作 Code Builder(编码编辑器),如图 2.42 所示。单击标准工具条上的 Code Builder 按钮,就可以打开编码编辑器了。编码编辑器提供了撰写、编辑和调试 Origin C 函数的功能,一旦编辑了 Origin C 函数,Origin 就可以调用了。

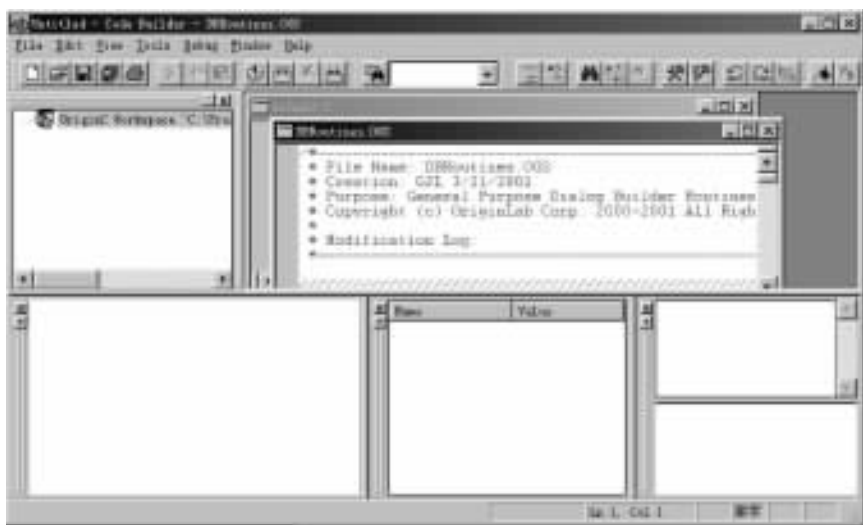


图 2.42 Code Builder 窗口

2.7 Origin 7.0 窗口模板

当生成新的 Worksheet, Graph 和 Matrix 时,Origin 会根据自带的模板生成新窗口。模板决定了窗口的属性,如 Worksheet 的列数、每列的显示特征、ASCII 数据导入设置和列公式的使用,又如 Graph 窗口的层数、层的排列方式、每层的制图类型(如散点或柱状)、坐标轴属性、文本标签和其他说明。本质上来说,模板决定了除数据外窗口的所有属性。模板文件的扩展名如下:

- Worksheet *.OTW;
- Graph 或 Graph 函数 *.OTP;
- Matrix *.OTM。

Origin 本身带了许多模板,这些模板可以通过单击制图工具条中的按钮来实现,如 2D Graph 工具条、2D Graph 扩展工具条和 3D Graph 工具条等。同时 Origin 提供了模板库工具来编制、访问模板。

激活 Worksheet 或 Excel 工作表,选择 Plot| Template Library,打开如图 2.43 所示的 Select Template 对话框(这是 Origin 7.0 的新功能)。可以根据用户的需要,修改现有的模板或生成新模板,这两个过程相似:首先打开一个 Origin 模板窗口,定制这个窗口的属性,然后保存为模板即可,但其中的数据是不会保存的。

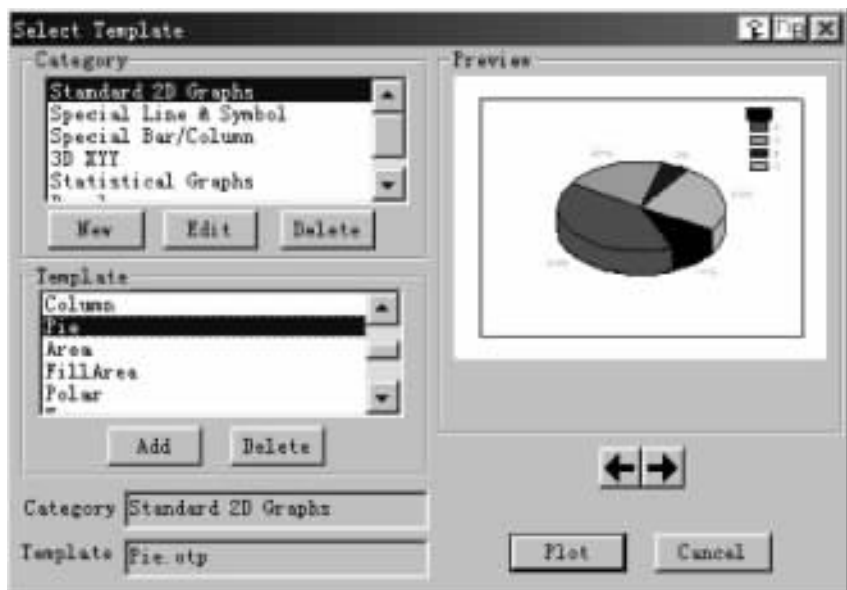


图 2.43 Origin 模板库

例如,编辑标准工具条上与 New Worksheet 按钮  相关联的模板。单击  打开 New Worksheet,编辑 Worksheet 属性。如果用户经常导入包含 X,Y,Y 误差格式的 ASCII 数据,则单击标准工具条上的 Add New Columns 按钮 ,然后在新列上右击鼠标并从快捷菜单中选择 Set As| Y Error,保存为模板文档。若选择 File| Save Template As,则在保存模板对话框的文件名文本框中会出现默认的模板名称 ORIGIN. OTW。如果单击“保存”按钮,则会覆盖 Origin 中的模板文档。当然用户可以键入新文件名,保存新模板设置,如 ORIGINSHEET. OTW。

下一步是设置 New Worksheet 按钮  和新模板文档链接起来。选择 File| New,打开“新建”对话框,先从列表选中 Worksheet,如图 2.30 所示;再从模板群下拉列表选中 ORIGINSHEET. OTW;单击 Set Default 按钮,就可以将这个模板和 New Worksheet 按钮联系起来了。

注意:在 Origin 7.0 中的某些对话框的右上角提供了  三个按钮:第一个是最小化,单击后对话框变成  ,再单击该按钮,恢复视窗;第二个按钮是打开如图 2.44 所示的提示框;第三个按钮是关闭对话框。



图 2.44 模板对话框的提示帮助框

2.8 Origin 7.0 的界面设置

2.8.1 设置程序开始窗口

默认情况下打开 Origin 应用程序时,会自动打开一个 Worksheet 窗口。根据用户的需要,启动 Origin 后的默认窗口可以改变成其他窗口。

只要将 Origin 支持的文件,如 Graph 模板文件(*.OTP),Graph(*.OGG),Worksheets(*.OGW)等文件,用鼠标拖动到 Origin 的图标或执行文件上,如图 2.45 所示,就打开了 Origin 应用程序,同时带有该窗口。

采用这种方法的缺点是,下次启动 Origin 时,仍然是以默认的 Worksheet 窗口打开的,但可以修改成显示其他窗口。

- 选择 Tools| Options;如果当前的窗口是 Excel,则选择 Window| Origin Options。
- 在 Options 对话框中选择 Open/Close 选项卡。
- 选择 Start New 下拉列表中的选项,如果想在打开 Origin 程序时同时含有 Worksheet 和 Graph 窗口,则选择 Origin.opj,如图 2.46 所示。

在这里还有其他选项,如 Prompt for Save on Options Dialog Close 复选框等。设置完毕后,单击“确定”按钮,会弹出问是否保存为 Origin 开始选项的对话框,单击“是”,那么 Origin 将这些参数写到 OPTION.CNF 文件中,供下次启动时使用。

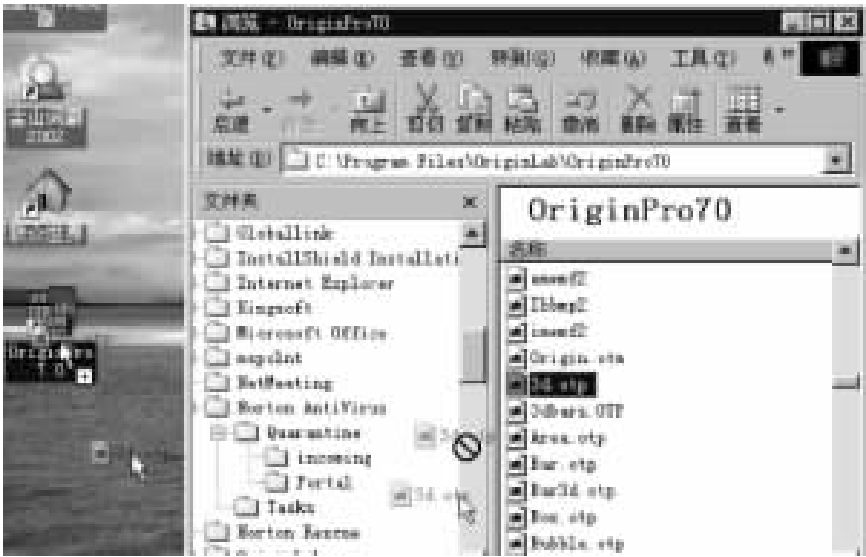


图 2.45 将 3d.otp 文件拖动到 Origin 图标上



图 2.46 设置新 Project

2.8.2 Options 对话框的其他设置

除了上面介绍的设置外,Options 对话框还提供了其他选项设置。

● Numeric Format 选项卡

Numeric Format 选项卡如图 2.47 所示。

➤ Convert to Scientific Notation 组中,从 Upper/Low Threshold 下拉列表中选择合

适的数字,该数字为从十进制表示转换成科学记数法时的上/下阈值。

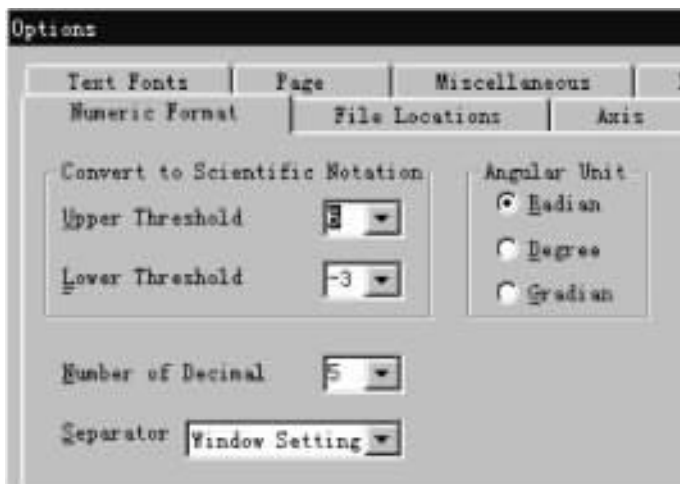


图 2.47 Options 对话框的 Numeric Format 选项卡

- Number of Decimal 下拉列表中的数字控制 Worksheet 单元格中的数字位数,指定小数点后面的有效数字位数,若超过了该阈值,Origin 按照四舍五入的方法控制在指定的位数中。
- 从 Separator 下拉列表中选择合适的数字分割符。
- 在 Angular Unit 组中选择角度表示方式:弧度、度或斜度。

● Text Fonts 选项卡

Text Font 选项卡如图 2.48 所示。

- 在 Text Tool 组中,用户可以通过 Font 设置使用 Tools 工具条上 Text 按钮  输入文本时的默认字体,通过 Color 和 Size 设置字符的默认颜色和大小,通过 Greek 设置 Format 工具条中 Greek 按钮  对应的默认字体。
- 在 Default 下拉列表中选择字体,默认字体显示在控制框里。
- 选中 Align Fonts with Baseline 复选框,当一行文本中含有不同类型的字体时,这些字从下面水平对齐。
- WYSIWYG in Page View mode 复选框只应用于 Graph 窗口中的文本,如果选中的话,则当 Graph 窗口处于 Page View(页面预览)状态时,Origin 使用设计的程序显示 Graph 窗口的文本。此时文本将精确显示,和打印出的效果相同,而 Graph 窗口中其他部分仍按照屏幕方式显示。
- Make text horizontal for in-place 复选框,选中该复选框,在编辑文本时,不论该文本框旋转了多少度,文本均转换成水平状态,这样便于用户编辑。
- 选中 Simple selection mode 复选框,不允许使用鼠标旋转文本框。
- 选中 Disable in-place editing 复选框,不允许在原位编辑文本,双击文本打开 Text Control 对话框进行编辑。
- In Percent of Current Font 组中,Line 下拉列表中的数值为文本标签间距的百分比。如果文本的大小为 20 个像素点,Line 下拉列表中选择 20,那么文本间距为 4

个像素点。Subscript & Superscript 是控制上下标的大小的,其中的数字为相对于文本大小的百分比。Subscript 控制框中的数字为下标超出文本基线的百分比,相应的,Superscript 控制框中的数字为上标超出文本上边基线的百分比。

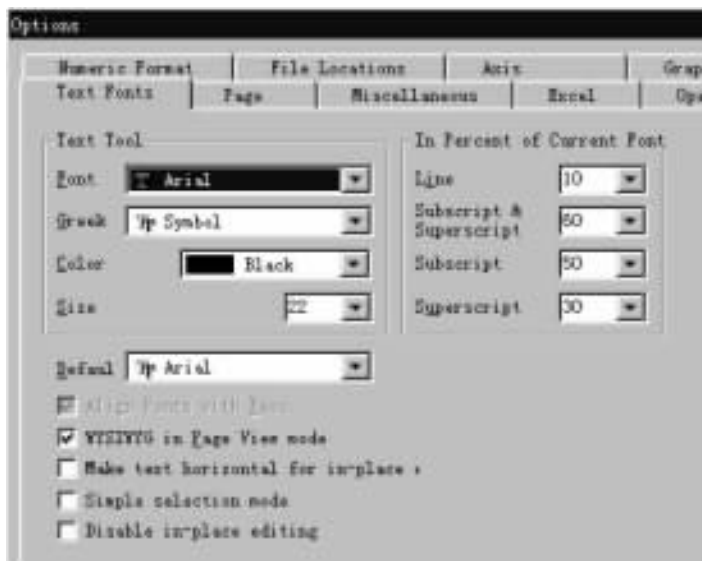


图 2.48 Options 对话框的 Text Fonts 选项卡

● Page 选项卡

Page 选项卡如图 2.49 所示。

- Copy/Export Page Settings 组控制复制 Graph 文件到剪贴板或输出 Graph 文件时的设置。
- Ratio 中的数值是将 Graph 图形复制到其他应用程序中时的显示百分比。
- 当复制 Graph 窗口用命令 Edit| Copy Page 或导出向量图形文件时,Margin 下拉列表中的三个选项用来控制页面边距:① Border,复制时会在图形的外面加有一定的边距,作为整个图形的一部分;② Tight,复制时图形的外面没有边距;③ Page,复制整个页面,这里的页面指的是 Graph 窗口中的白色背景部分,这部分也是打印区域,在这个区域外的部分则不会被复制。所以如果在此背景外面还有图形,那么最好选择 Border 或 Tight。
- 选中 Border 时,激活 Clip Border 宽度控制框,设置图形的边距,其中数值是输出图形边距相对于图形的百分比。
- Simple 和 Advanced,在 Origin 6.0 中将 Graph 图形导入到向量文件或复制时,会出现符号变形、坐标刻度不准和文字间距不均等问题,在 Origin 7.0 中提供了控制这些问题的功能。Simple 模式提供的输出模式和 Origin 5.0 版本相似,不能解决以下两个问题:
 - ① 不规则面积的阴影,如填充面积、极图或 3D 图形;
 - ② 填充不完整默认模式的面积。Advanced 模式不会出现这些问题,但在 Windows 98 或 Windows 95 的操作环境中,可能会出现不能填充不规则图形的面积

的问题。最好的解决办法是同时将 Set Resolution 设置为 300~600 dpi。默认的设置 为 Advanced, Set Resolution = 300,可在大部分输出或复制时纠正旧版本中存在的问题。

- 在 Grid Spacing 组中选择坐标轴网格线和对象网格线的稠密程度。

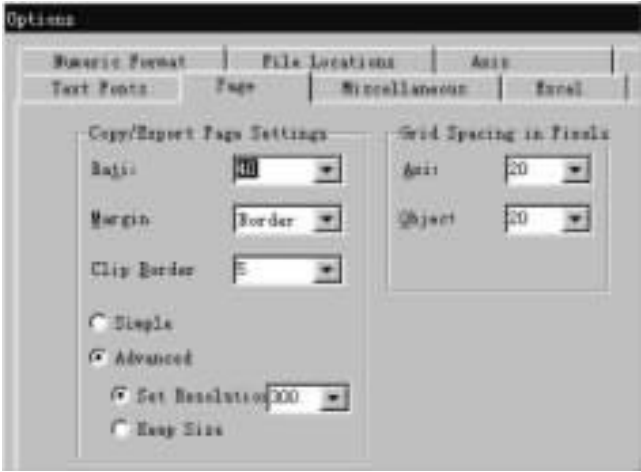


图 2.49 Options 对话框的 Page 选项卡

● Miscellaneous 选项卡

Miscellaneous 选项卡如前面图 2.5 所示。

- Printing Options 组设置打印效果的尺寸,如用户想打印 6 英寸宽的图形,可是却打印出了 6.062 5 英寸宽,这时可将 X Scale 因子设置为 1 010,因为 $(6.062\ 5 \times 1\ 000)/6=1\ 010$ 。Y Scale 因子是控制图形打印的高度的。
- Custom Date Formats 组设置日期格式,字符串不能超过 60 字节,合法的字符如表 2.3 所列。

表 2.3 日期格式中的合法字符串

名 称	表 示	Origin 中的显示方式			
月	M	M——月 份, 如 January = 1, 后面必须跟分割符	MM——双字符月份表示, 开头可带 0, 如 January=01	MMM——三字符月份缩写, 如 January=Jan	MMMM——完整月份写法, 如 January, 后面必须跟分割符
日	d	d——月 中的某天, 如 1, 后面必须跟分割符	dd——月 中的 某天, 双字符表示, 开头可带 0, 如 01	ddd——星 期 的 缩写, 如 Mon	dddd——星 期 的 完整 写 法, 如 Monday, 后面必须跟分割符
年	y	y——年 的 表示, 如 1901=1, 后面必须跟分割符	yy——年 后 面 的 两个 字 节, 开 头 可 带 0, 如 1901=01		yyyy——年 的 完整 写 法, 如 1991

续表 2.3

名 称	表 示	Origin 中的显示方式			
时	h, H	h——12[小]时制的表示,如 1,12,后面必须跟分割符	hh——12[小]时制开头可带 0 的[小]时表示,如 02,12	H——24[小]时制的表示,如 2,15,后面必须跟分割符	HH——24[小]时制开头带 0 的[小]时表示,如 02,18
分	m	m——分的单数字表示,如 2,45,后面必须跟分割符	mm——开头可带 0 的分表示,如 02,22		
秒	s	s——秒的单数字表示,如 2,45,后面必须跟分割符	ss——开头可带 0 的秒表示,如 02,22		

注意:表 2.3 中的分割符不许用单引号括住。

如想显示 Saturday, October 26, 2002,则键入 dddd, 'MMMM' d, 'yyyy'。

- No Redraw (% Covered) 下拉列表中的数字是用于控制窗口刷新情况的,如果 Origin 被其他窗口覆盖住所设置百分数的比例,则 Origin 窗口不再刷新。
- Bisection Search Points 下拉列表中的数字是使用 Data Reader 工具或双击数据点时的响应速度。
- 当 Worksheet 转置后,Delete Empty Columns after Worksheet Transpose 下拉列表控制是否删除多余的列或行。
- 将多个 ASCII 文件导入到多个 Worksheet 时,Default Multi - ASCII Import Template 下拉列表控制默认的 Worksheet 模板。
- Default Multi-ASCII Import Plot XY 下拉列表控制导入多个 ASCII 文件制图时的默认设置,其中的含义参看 4.3.2 小节。
- Use Numeric as preferred column type 复选框控制 Worksheet 中的列是数字格式,还是文本+数字格式。如果有 Origin 4.1 版本的文件,则最好选中该复选框。
- Use Toolbar Spacer 复选框控制是否显示菜单栏下面的空白区,参见 2.3 小节。
- Display bitmaps in menus 复选框控制是否显示菜单命令位图,参见 2.2 小节。

● Axis 选项卡

Axis 选项卡如图 2.50 所示。

- Max. Number of Ticks 组控制坐标轴刻度显示的最大数目。
- Distance from Tick Labels(%)组控制坐标轴数字与坐标轴之间的距离。
- 当对数坐标刻度使用科学记数法时,Display 1 as 10⁰ in Log Scale 复选框控制坐标轴标签显示方式,如图 2.51 所示。

● Graph 选项卡

Graph 选项卡如图 2.52 所示。

- Origin Dash Lines 组,当 Graph 图形是 Line 或 Line + Symbol 时,该组用于设定线的默认类型。在 Dash 下拉列表中选中类型,在后面的文本中键入虚线线长、点

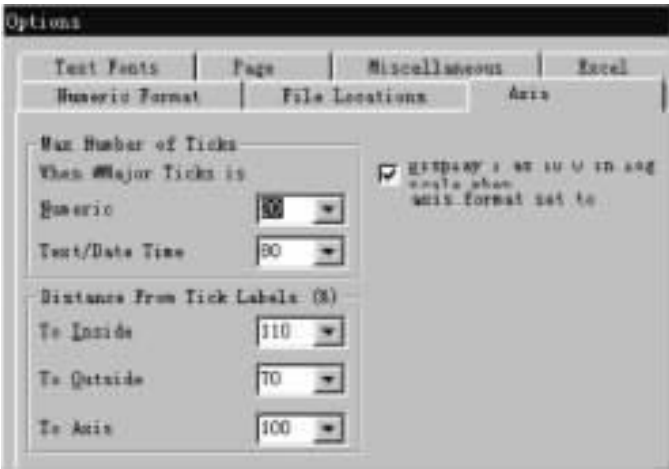


图 2.50 Options 对话框的 Axis 选项卡

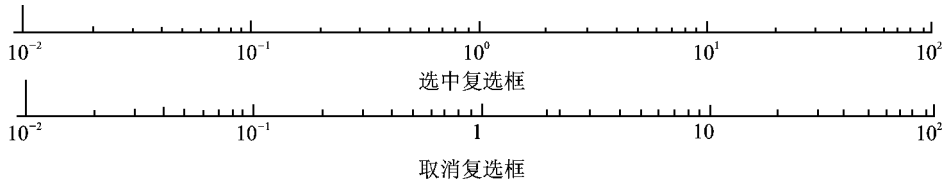


图 2.51 选中和不选中复选框坐标轴标签的不同显示

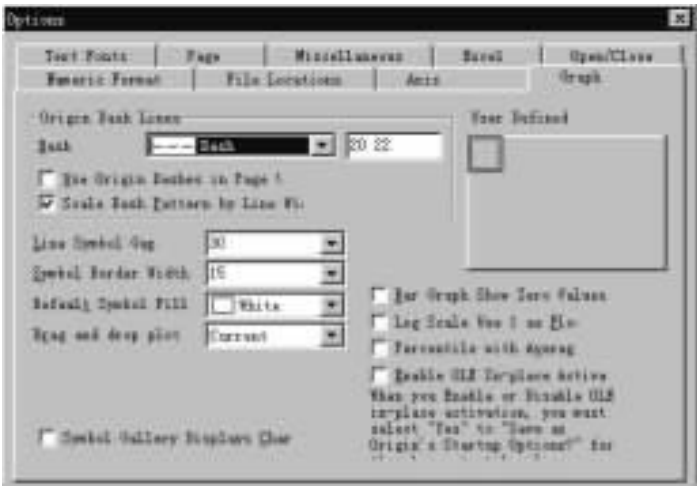


图 2.52 Options 对话框的 Graph 选项卡

之间的距离及周期。如选择了 Dash, 则后面相应文本框中的默认值是 20 22, 其意思是短线的长度是 20, 短线间距离为 22 等。若选中 Use Origin Dashes in Page View 复选框, Graph 窗口在 Page View 模式下就显示虚线的实际形状。若选中 Scale Dash Pattern by Line Width 复选框, Origin 将保持短线和短线之间空间的适当比例。

- 当 Graph 图形选择 Line + Symbol 时,Line Symbol Gap (%)复选框控制符号和线之间的空隙,其中的数字为符号直径的百分数。该选项只有在 Plot Details 对话框的 Line 选项卡中选中 Gap to Symbol 时才起作用。
- Symbol Border Width (%)复选框中的数字决定了 Line+Symbol 或 Symbol 图形中符号的边框宽度,为符号半径的百分数。
- Default Symbol Fill Color 下拉列表中是 Line+Symbol 或 Symbol 图形中符号的默认填充颜色。
- Drag and drop plot 下拉列表的选项是当使用鼠标将数据拖动到 Graph 窗口时的默认制图类型。Current 选项为 Graph 窗口中当前的图形类型。
- 若选中 Symbol Gallery Displays Characters 复选框,则在 Plot Details 对话框 Symbol 选项卡中的符号库中出现希腊符号。
- 若选中 Bar Graph Show Zero Values 复选框,则在 bar 或 column 图形中当 $Y=0$ 时显示为一条线。
- 当 bar 或 column 图形中使用对数坐标时,若选中 Log Scale Use 1 as Floor 复选框,设置 1 为基线,则 bar 将在不同的方向上显示。这样有利于显示小于 1 的数值,如图 2.53 所示。

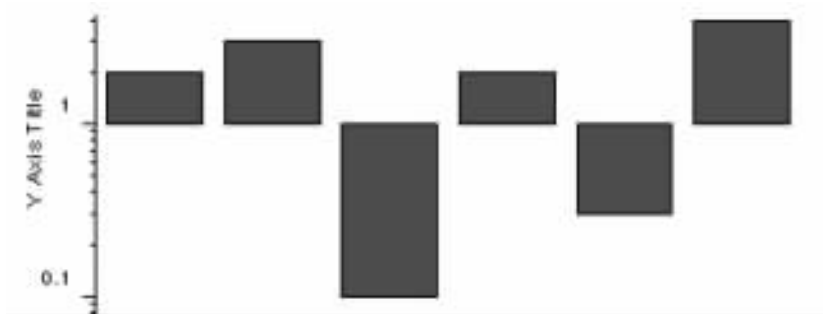


图 2.53 选中 Log Scale Use 1 as Floor 复选框后的图形显示方式

- 如果选中 Percentile with Averaging 复选框,则在统计分析时,Origin 将填补百分点。该对话框的选择影响到统计图形的百分线。
- 若选中 Enable OLE In-place Activation 复选框,用户在其他应用程序中编辑 Origin 对象文件时,不打开 Origin 界面,这样许多命令不能使用,建议用户不要选择此选项。
- User-defined Symbols Grid,Origin 中可以显示其他程序中生成的图像符号,但必须小于等于 16×16 pixel。如果图像大于此数值,则 Origin 只显示左上角部分。

● Excel 选项卡

Excel 选项卡如图 2.54 所示。

- 选中 Default Plot Assignments 复选框,激活工作簿数据制图时,就已经假定了列的设置符合选中的 Graph 类型。如果没有选中数据,则 Origin 将打开 Select Columns for Plotting 对话框。
- 选中 Scan data for legend 复选框,Graph 生成的图例会自动和相应的工作簿文本

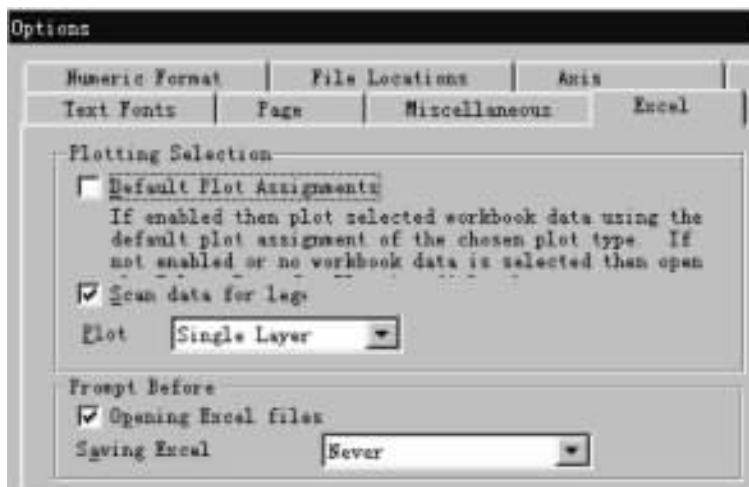


图 2.54 Options 对话框的 Excel 选项卡

建立链接。

- Plot 下拉列表中有三个选项,控制数据制图的显示模式:① Single Layer,将数据组绘制到 Graph 窗口单层中;② Multiple Layers,将不同数据组绘制到 Graph 窗口的不同层中;③ Multiple Pages,将不同数据组绘制到不同的 Graph 窗口中。
- 选中 Opening Excel files 复选框,当选择 File| Open Excel 或单击 Standard 工具条中的 Open Excel 按钮  时,Open Excel 对话框会提供一个选项,询问是作为 Excel 工作簿打开,还是作为 Origin Worksheet 打开;如果取消该复选框,无提示对话框,作为 Excel 工作簿直接打开。
- 在 Project 文件中有 Excel 工作簿进行保存时,Saving Excel files 下拉列表选项决定了保存这些工作簿的几种情况:① Never,如果 Project 文件中有 Excel 工作簿,则 Origin 不打开 Save Excel Workbooks 对话框,默认情况下,Excel 工作簿会自动更新;② Before Saving,若 Project 包含一个 Excel 工作簿,则当选择 File| Save Project 保存文件时,Origin 会打开 Save Excel Workbooks 对话框,该对话框让用户选定更新哪个 Excel 工作簿,默认情况下,更新所有 Excel 外部工作簿;③ Before Save Project As...,当选择 File| Save Project As 时,Origin 会打开 Save Excel Workbooks 对话框。

在 Options 对话框中,还有 File Locations 选项卡,参见 2.5.2 小节。

2.8.3 颜色调色板设置

Origin 的许多选项都可以使用颜色来显示数据。这些选项中的颜色由颜色调色板控制,而调色板也可以根据用户的喜好进行修改。选择 Format| Color Palette,打开 Color Palette 对话框,其中的颜色顺序为使用颜色序列制图时的基本次序,如图 2.55 所示。下面介绍其中各项的作用。

- 单击按钮  或 ,调整选中颜色在调色板中的次序。
- 将鼠标放到颜色上,会变成小手,单击打开“颜色”对话框,如图 2.55 所示。在该对话

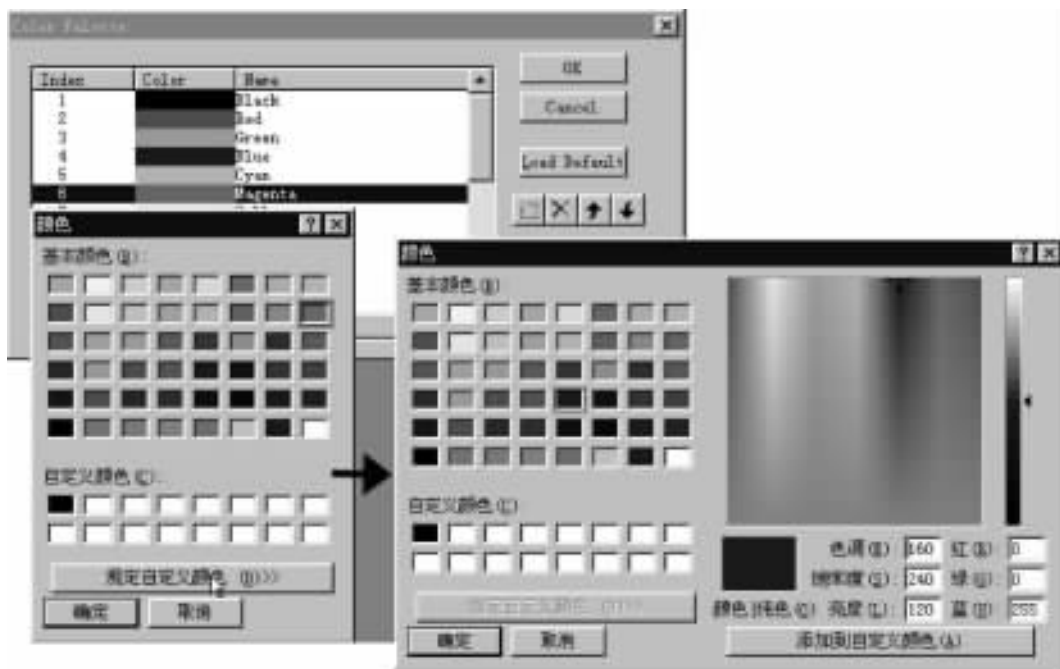


图 2.55 Color Palette 对话框及其颜色设置

框中选择要选的颜色,然后单击“确定”按钮,完成颜色更改。也可以单击“规定自定义颜色”,扩展该对话框进行颜色设置。

- 将鼠标放到颜色名称上,单击可以更改颜色的名称。
- 单击 New Color 按钮 ,也会打开“颜色”对话框,增加调色板颜色。

这样定制好的颜色就可以在制图过程中应用了,参见第 4 章。

2.8.4 个性化模板

用户可以根据自己的需要修改现有的模板文件或生成新模板文件,以 Graph 的 Line 模板为例进行说明。

- 选择 File| New,打开 New 对话框,在窗口中选中 Graph,在 Name 下拉列表中选中 LINE,如图 2.56 所示。
- 打开 Graph 后,进行修改,然后选择 File| Save Template As,打开“保存”对话框,键入模板名称如 mydefine.otp 即可。

这样就可以用模板文件进行制图了。选中 Worksheet 中的数据,选择 Plot| Template Library,或单击 2D Graphs 工具条中的 Template 按钮 ,打开 Select Template 对话框,如图 2.57 所示。从 Category 中选择模板种类,在下面的 Template 中选择模板。对话框的按钮 可以浏览模板类型。

操作完毕后,保存文件为模板文件,但其中的数据不会一起被保存。



图 2.56 打开模板文件对话框

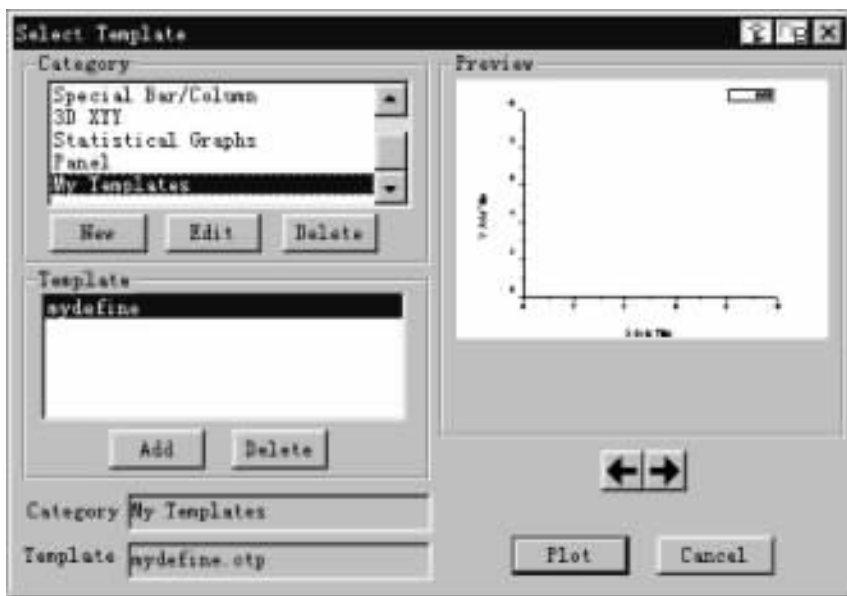


图 2.57 Select Template 对话框

2.9 文件的打包/解包

在创建图形或数据分析过程中,可能用到其他应用程序中的数据,这就需要我们了解数据的导入功能。当完成了图形的制作和数据分析后,需要输出,比如打印或输出到其他的应用程

序中。

用户可以和其他用户共享 Origin 文件。如果共享的文件较多,就可以使用文件的打包/解包功能。该功能对使用 Origin C 路由的用户尤其重要。

● 文件的打包

选择 Tools| Pack/Unpack OPK Files,打开 Origin Pack 对话框,如图 2.58 所示。



图 2.58 Origin Pack 对话框

单击 Add 按钮,从添加文件对话框中选择要添加的文件,然后单击 OK 按钮,即可将文件保存为 *.OPK 文件。选中 Save folder information 复选框,保证文件按照 Origin 文件结构保存。

● 文件的解包

单击 Extract 按钮,导入 *.OPK 文件进行解包。

第 3 章 Worksheet

Worksheet 是 Origin 7.0 中 Project 文件的一个十分重要的窗口,其主要的功能是保存、组织和编辑数据,也可以进行数据处理、检验或分析。当运行 Origin 7.0 应用程序时,就打开了一个带有由 ORIGIN.OTW 模板文件生成的 Worksheet 窗口的 Project 文件。在这里可以进行生成新 Worksheet 和打开 Worksheet 等第 2 章中介绍的操作,除此以外,Origin 7.0 针对 Worksheet 还提供了丰富的命令操作和分析功能。

本章主要内容:

- Worksheet 的基本操作;
- 数据的输入;
- 数据的输出;
- 列属性的设置;
- Worksheet 数据管理;
- Worksheet 的 Script 窗口;
- 保存 Worksheet 文件为模板文档。

3.1 Worksheet 的基本操作

对 Worksheet 来说,Origin 7.0 提供了菜单命令和工具条对其列、行和显示属性进行操作。

3.1.1 改变 Worksheet 的显示属性

像其他窗口一样,Worksheet 窗口也可以根据用户的喜好进行设置,包括行和列的标头显示、Worksheet 的网格线和单元格字体等。这些配置在 Worksheet Display Control 对话框中进行设置。要打开这个对话框,可以通过如下操作:

- 在 Worksheet 左上角的空白单元格处双击鼠标;
- 激活 Worksheet,选择 Format | Worksheet;
- 在 Worksheet 右边空白处右击,从快捷菜单中选择 Properties 命令。

这时会打开图 3.1 所示的 Worksheet Display Control 对话框,图中所显示的是 Origin 的默认设置,这些用户可以根据自己的喜好进行更改。

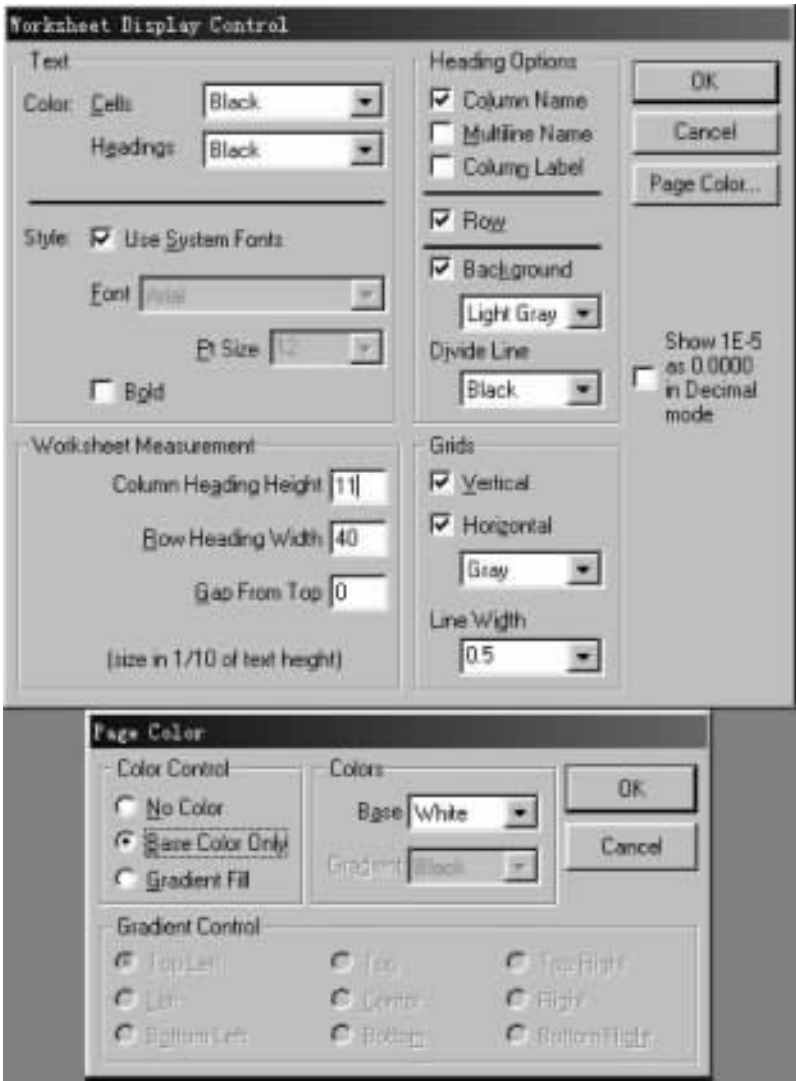


图 3.1 Worksheet Display Control 对话框

● Text(文本)组

从 Color(颜色)下拉列表中对 Worksheet 单元格和标题的文本颜色进行设置;去掉 Style(格式)复选框中的“√”,然后可以从 Font 下拉列表中指定字体;从 Pt Size 下拉列表中指定字体大小;从 Bold 复选框选择是否加粗字体。

● Heading Options(标头选项)组

列标头包括列名称和列标注,选中复选框则显示 Worksheet 中列的名称和列标注,当然列的名称和列标注可以通过激活单个列,从 Worksheet Column Format 中进行设置。若选中 Multiline Name 复选框,则列的名称中如果有“.”符号会分行显示,如果看不到分行,增加 Worksheet Measurement 中列的高度。

选中 Row 复选框,显示行数。

Background 选项设置行和列标头的背景颜色,可以从下拉列表中选择合适的颜色。

● Worksheet Measurement(度量)组

在这里可以更改列标头的高度和行标头的宽度。当列标头含有列标注或多行显示时,有必要增加列标头的高度。当然,如果添加了列标注,那么 Origin 7.0 会自动增加列标头高度。

Gap From Top 文本框设置列标头和 Worksheet 标题之间的间隙。键入合适的数字,它们之间会出现间隙,但均在 Worksheet 窗口内。

● Grids(网格线)组

用于设置 Worksheet 中单元格之间的网格线。可以设置是否显示,从相应下拉列表中可以设置网格线的颜色和网格线的宽度。

● Show 1E-5 as 0.0000 in Decimal mode 复选框

若选中这个复选框,那么单元格中数字以十进制的格式显示,并且其显示属性可以通过选择 Tool| Options 对话框中 Numeric Format 选项卡中的 Lower Threshold 进行设置。这样单元格中数字就始终以十进制的方式显示了。比如 Origin 安装时 Lower Threshold 的默认设置是 $-3,0.00001(1E-5)$ 将显示为 0.0000,0.00005 将显示为 0.0001,0.1 将显示为 0.1000。

● Page Color 按钮

单击 Page Color 按钮会弹出图 3.1 下面部分的对话框,可以对激活的 Worksheet 页面的背景颜色进行设置,可以设置为单色,也可以设置为渐变色。

3.1.2 Worksheet 列的操作

● 添加列,可以通过如下操作来实现。

- 单击 Standard 工具条上的 Add New Columns 按钮 ;
- 在 Worksheet 的空白处右击,从快捷菜单中选择 Add New Column;
- 选择 Column| Add New Columns,弹出如图 3.2 所示的对话框,添上要增加的列数,单击 OK 按钮即可。

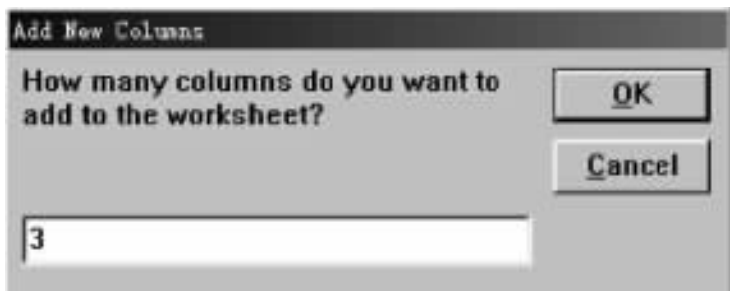


图 3.2 Add New Columns 对话框

上述的前两种方法只能添加一列,添加的列排在 Worksheet 的右边,列的名称是默认的,按照字母顺序排列(A,B,C,...AA,BB,...),但不能有重复。

在 Worksheet 的不同地方右击鼠标,弹出的快捷菜单是不同的,如图 3.3 所示:(a) 在列标题处右击(如果单击,则选中列,这时列处于高亮状态);(b) 在行标题处右击;(c) 在单元格处右击;(d) 在 Worksheet 标题处右击;(e) 在单元格右边空白处右击;(f) 鼠标放在 Worksheet 左上角的空白单元格处,使光标变成指向右下方的箭头,然后单击,选中整个工作表;(g)

在选中的整个工作表上右击。

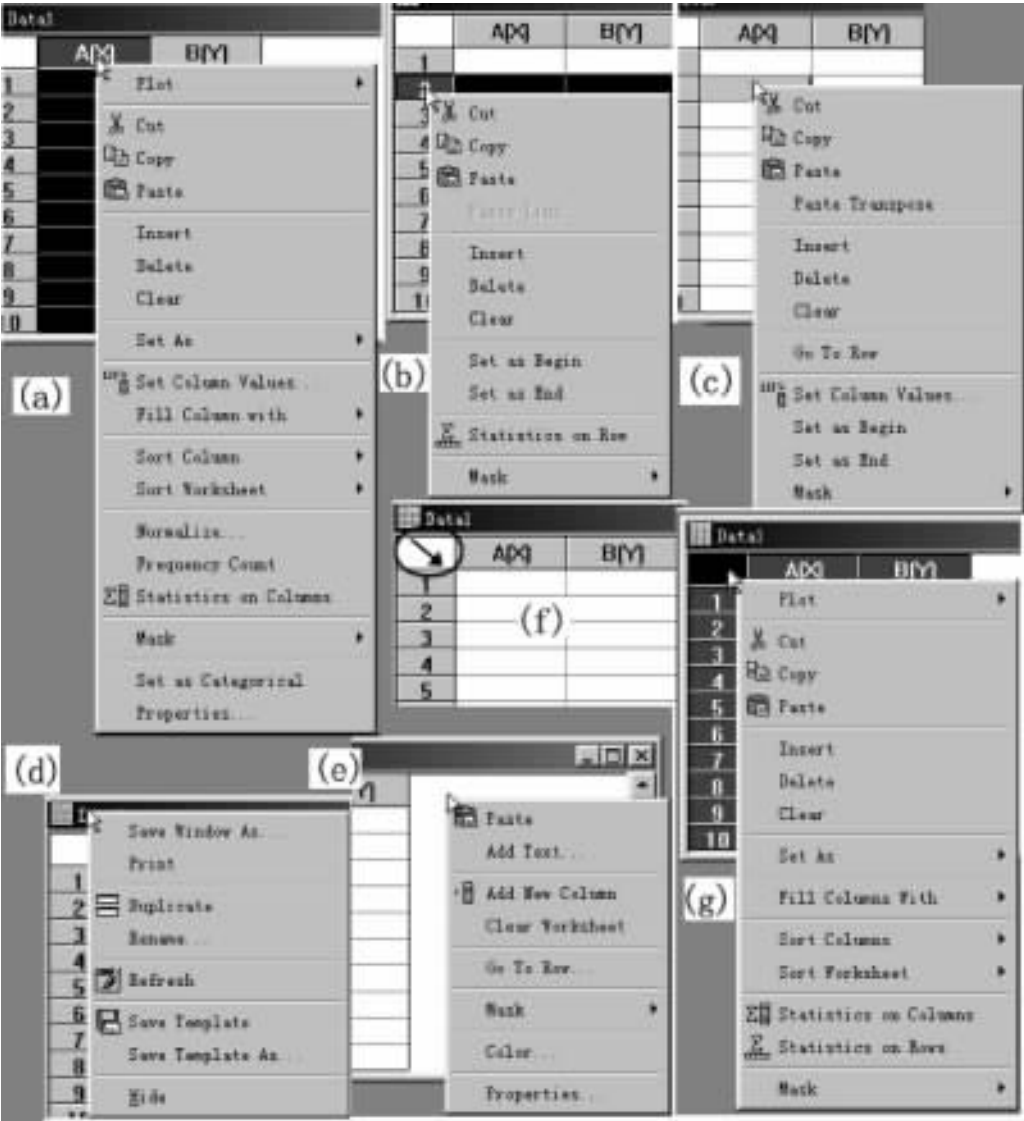


图 3.3 Worksheet 中不同位置右击弹出的快捷菜单

● 插入列

可以在指定的位置插入列。单击列标题，激活列，选择 Edit| Insert，或右击鼠标从弹出的快捷菜单中选择 Insert，如图 3.3(a)所示，就会在激活列的左边插入新列，并设置为 Y 列，和激活的列没有关系，名称按照字母先后顺序排列。

如果插入 n 列，则可以重复上面的操作 n 次；也可以同时选中 n 列，再选择 Insert 命令。

● 删除列

选中要删除的列，选择 Edit| Delete，或右击鼠标在弹出的快捷菜单中选择 Delete，如图 3.3(a)所示，就会将列删除。如果只删除其中的数据而不删除列，则选择 Clear 或按键盘上的 Delete 键。

如果删除了列或其中的数据,则其他文件中和这些数据相关联的数据都会被删除。

● 移动列

将选中的列移动到 Worksheet 的开头:选择 Column| Move to First,或单击 Column(列)工具条中的 Move to First 按钮 ;将选中的列移动到 Worksheet 的最右面:选择 Column| Move to Last,或单击 Column(列)工具条中的 Move to Last 按钮 ;Column(列)工具条中的 Move Left 和 Move Right 按钮分别使列向左、向右移动一列。如果选中几列,则会将它们全部移动而不改变其顺序。

● 改变列宽和重命名

双击列标题,或者选中列并选择 Format| Column,或者选择右击鼠标弹出的快捷菜单中的选项 Properties,弹出如图 3.4 所示的 Worksheet Column Format 对话框。在 Column Name 文本框中键入新名,可以实现对列的重命名,但列的名称不能重复,最多不能超过 18 字节,Origin 忽略字符中间的空格。如果要多行显示名称,则在名称中间加“.”符号,并选中图 3.1 所示的 Multiline Name 复选框。

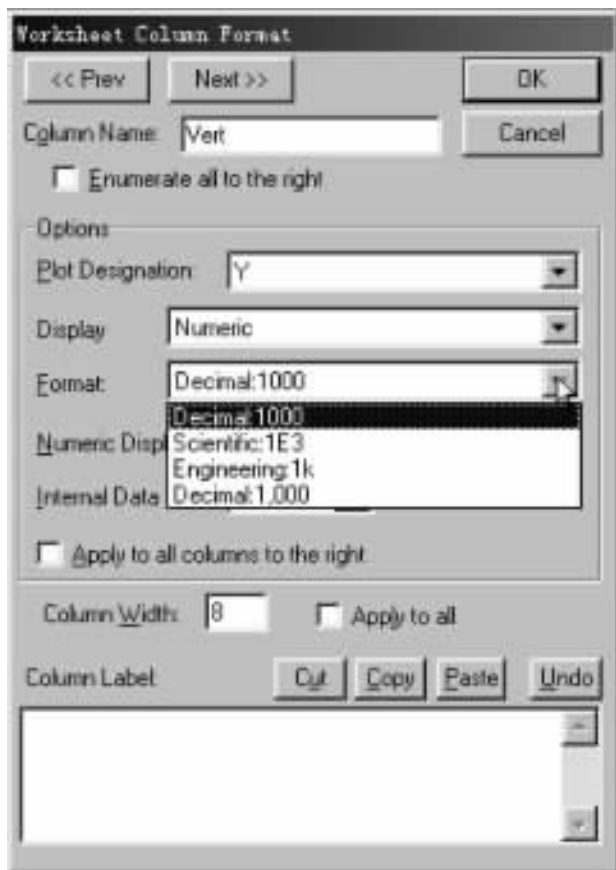


图 3.4 Worksheet Column Format 设置

Enumerate all to the right 复选框的意思是将此列作为其右边列的基本名称,从此列开始,后面的列只添加数字作为列名称。如这列的名字是 min,若选中此复选框,则后面列的名称依次是 min1,min2 等。

Column Label(列标注)提供了列的附加信息。在许多 Graph 模板中,列表注出现在 Graph 的图例中,每列的列标注最多不能超过 63 字节,可以输入任何字符。

在 Column Width 文本框中可以设置列宽,键入的数字必须是整数。另外,还可以设置数字的显示属性(Display,Format 和 Number display)和设置列的制图属性(Plot Designation)等。这些将在 3.4 小节中介绍。

对于调整列宽,Origin 7.0 提供了一种简便的方法:将鼠标放在列标题之间的中缝处,鼠标变成“↔”后拖动鼠标即可,如图 3.5 所示。

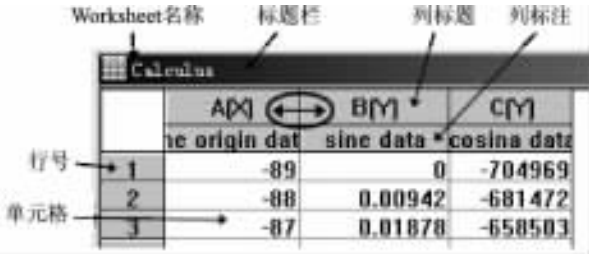


图 3.5 拖动鼠标更改列宽及 Worksheet 各个部分名称

对行只能进行“插入”和“删除”操作,其方法和前面介绍的对列的操作类似,这里就不再赘述了。

3.1.3 Worksheet 行列的转换

激活 Worksheet,选择 Edit| Transpose,就可以将 Worksheet 的行和列调换了;但需要注意下列几点:

- 转换前,如果 Worksheet 的行数多于列数,则转换后 Origin 会给 Worksheet 添加新列,并自动添加列名称;
- 转换前,如果 Worksheet 的列数多于行数,则转换后 Origin 保留 Worksheet 多余的列。

这些默认的设置可以更改为删除多余列,选择 Tool| Options,打开 Miscellaneous 选项卡,在 Delete Empty Columns after Worksheet Transpose 下拉列表中选择 Always 或 prompt 即可,如图 2.5 所示。

注意:在转换时,Worksheet 的每列必须具有相同的显示属性,否则不能转换。显示属性的设置在图 3.4 所示的 Display 下拉列表中。具体设置将在 3.4.5 小节中介绍。

3.1.4 Worksheet 数据的选择

Origin 在制图和数据分析过程中会用到 Worksheet 中的部分数据,下面介绍 Worksheet 数据的选择。

- 选择整个 Worksheet
 - 将鼠标放在 Worksheet 左上角的空白单元格处,等鼠标变成箭头,如图 3.3(f)所

示,单击;

- 将鼠标放在第一列标题处,按下左键,拖动鼠标到最后一列,同样也可以进行行操作;
- 单击列标题选中第一列,然后按下 Shift 键,选中最后一列,同样也可以进行行操作。

● 选择列

- 单击要选中的第一列,用鼠标拖动到要选中的最后一列,释放鼠标,就选中了这几列;
- 单击要选中的第一列,按下 Shift 键,单击要选中的最后一列,就选中了这两列之间的所有列;
- 单击要选中的一列,按下 Ctrl 键,分别单击要选择的其他列,就可以选中所有不相邻的列。

● 取消选择

在选中整个 Worksheet 或部分列的情况下,在 Worksheet 旁边的空白处单击,则取消选择。行的选择和列的选择类似。用鼠标拖动的方式可以选择部分单元格。

3.1.5 Worksheet 数据显示

Origin 提供了预览 Worksheet 部分数据的功能。这样用户就可以集中精力来分析感兴趣的部分,未被选中的部分只是隐藏而不会被删除。

若要看到 Worksheet 中的某一行,则选择 View| Go To Row 或右击鼠标从快捷菜单中选择 Go To Row 命令,如图 3.3(c)所示弹出对话框,填入行的序号即可。

● 设置 Worksheet 数据显示范围

Origin 提供了设置显示 Worksheet 部分数据的功能,而将其他数据隐藏掉。该功能使用户只针对这部分数据进行预览、分析和制图等操作,设置方法如下。

选中单元格,选择 Edit| Set as Begin 或从图 3.3(c)所示的快捷菜单中选择命令 Set as Begin,那么该单元格前面的数据就隐藏了;可以用同样的方法设置数据显示的结尾。

如果用户要恢复显示整个 Worksheet 数据,那么选择 Edit| Reset to Full Range。

3.2 数据的输入

对于 Project 文件来说,对 Worksheet 的数据管理是基本的也是重要的内容。数据输入有以下几种方法:

- 使用键盘输入;
- 导入数据文件;
- 使用粘贴板粘贴其他程序中的数据;
- 使用 Origin 提供的功能根据行号生成数据;
- 使用函数设置数据;
- 设置递增的 X 值。

如果数字太长超过了单元格的显示范围,则单元格不能正确显示,而将数字显示为#####。这点和以前的版本不同(以前的版本是显示部分数字,容易和完整的数字混淆),但如果将单元格激活为编辑模板或增大单元格的宽度,那么整个数字就显示出来了。

如果要取消这一功能,则在 Script(脚本)窗口中键入如下命令:

```
@wc = 1 <Enter>
```

若重新激活这一功能,则键入:

```
@wc=0 <Enter>
```

用键盘输入数据,和其他应用程序的输入方法类似,如 Excel 等。

Origin 提供了导入多种数据格式的功能,如 ASCII, Lotus, Dbase, DIF, LabTech, Thermo Calactic SPC, Minitab 和 SigmaPlot 等,还可以导入 Mathematica 的向量和矩阵文件及 Kaleidagraph 的数据文件等,另外,用户可以使用 ODBC 查询数据库。激活 Worksheet 窗口后,选择 File| Import 出现数据导入命令菜单,如图 3.6 所示,下面分别介绍。



图 3.6 “导入数据”菜单命令

3.2.1 导入单个 ASCII 文件

选择图 3.6 中的 Single ASCII 或单击标准工具条 Import ASCII 按钮,打开如图 3.7 所示的 Import ASCII 对话框;选择 ASCII 文件,单击“打开”按钮,就会按照 Origin 默认的 ASCII 导入方式,检测数据文件;设置列数,将第一行非数字字符设置为列标题,将第二行非数字字符设置为列标注,将数据导入到 Worksheet 窗口的单元格中。大部分情况下,用户使用这些方式,但有时还需要指定数据结构和导入设置,这就需要定制 ASCII 导入设置。

单击 Import ASCII 对话框中的 Options 按钮或选择 File| Import| ASCII Options,打开 Worksheet 的 ASCII Import Options 对话框,如图 3.8 所示。图 3.8 中的设置是 Origin 默认

设置,在这里可以修改导入单个/多个 ASCII 文件设置。

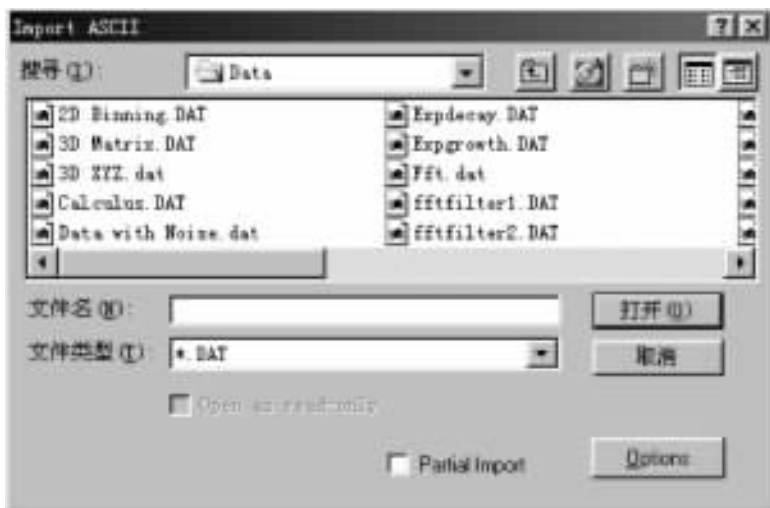


图 3.7 Import ASCII 文件对话框



图 3.8 ASCII Import Options 对话框

● File Structure(文件结构)组

有两种类型的 ASCII 文件:一种是数字间隔限定符号(Delimited delimiter)是逗号、Tab 键或空格键,另一种是固定列宽度(fixed column)。Origin 会自动辨认出要导入数据的结构类型;但如果遇到复杂文件时辨别是比较困难的,这时需要用户进行设置:从 Delimited, delimiter 的下拉列表中选择合适的符号类型,或填入列的固定宽度。这需要用户了解要导入的

ASCII 数据的结构类型。

如果选中 Automatic determination of column types 复选框,则 Origin 会自动识别每列包含的文本或数字数据,并设置为相应的类型;如果不选,则 Origin 会保留导入数据列的类型设置。

在 # of lines used for structure testing 文本框中填入一个数字,大于标头而小于文件长度。

如果数据开头包含 0 填充数据,选中 Support numbers with leading zeros 复选框,检测数据正确导入。

导入数据过程中,Origin 7.0 会检测文件内容,看是否包括非数字符号。When non-numeric is found in numeric fields 下拉列表选项提供了如何处理除了标头外在数字区出现的非数字符号。

● File Header(文件标题)组

File Header 组设置列标头。Origin 7.0 在导入数据时会跳过标头,可以设置跳过几行副标头文字,也可以在 Worksheet 列标注中保持这些文本。默认情况下,可以在列标注中显示 7 行标头文件。

● # of Columns(列数)组

当选中 Unknown 时,Origin 7.0 导入文件中所有列,并把第一列设置为 X,其他列设置为 Y 列。如果用户指定了 Origin 7.0 导入 n 列,而导入的文件列数大于 n ,则只导入前 n 列,不会生成新 Worksheet 导入其他列;如果文件列数小于 n ,则导入整个文件。

● Import Into Worksheet as 下拉列表

这个选项决定了将数据添加到 Worksheet 的方式:① New Data 选项,将新数据覆盖 Worksheet 中数据;② New Columns 选项,在当前的 Worksheet 右边添加新列,在新列中导入数据;③ New Rows 选项,在当前的 Worksheet 下面添加新行,在新行中导入数据。

● Import Now 按钮

单击 Import Now(立即导入)按钮,Origin 更新对话框中的设置,并按照新设置导入选中的 ASCII 数据;单击 Update Options(更新选项)按钮,保存针对激活的 Worksheet 设置并关闭对话框。

● Other Options 按钮

单击 Other Options(其他选项)按钮,打开如图 3.9 所示的 Data Import Options for...对话框,提供了更多的设置。

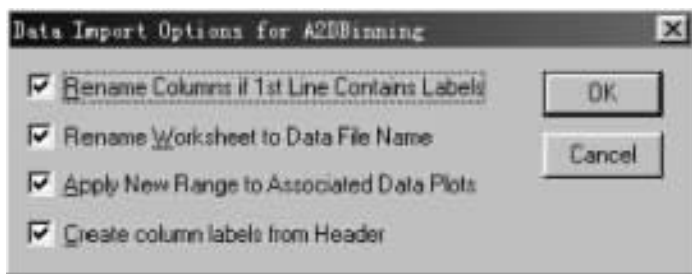


图 3.9 Data Import Options 对话框

单击 Update Options(更新选项)按钮后,更改后的设置只是针对当前激活的 Worksheet 起作用的。如果想继续对其他 Worksheet 起作用,则必须将 Worksheet 保存为模板文档。

● 导入部分 ASCII 数据

如果只导入 ASCII 文件的部分数据,则在 Import ASCII 对话框中(如图 3.7 所示)选中 Partial Import 复选框,选中“文件”,单击“打开”按钮,弹出“导入确认”对话框,如图 3.10 所示。在这里指定要导入的数据范围。

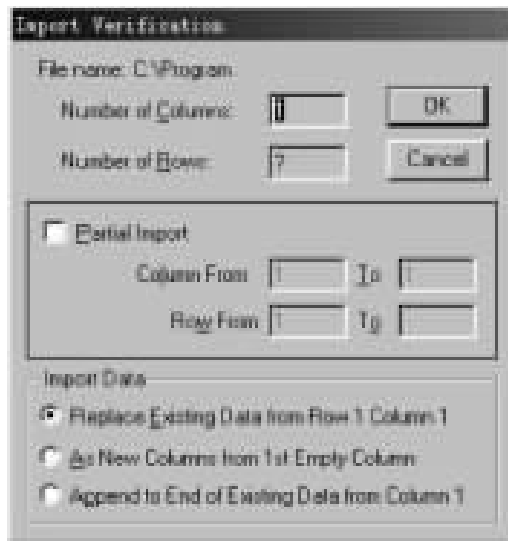


图 3.10 Import Verification 对话框

3.2.2 导入多个 ASCII 文件

Origin 允许同时导入多个 ASCII 文件到一个 Worksheet 的不同列或几个 Worksheet。方法是激活 Worksheet,选择 File| Import| Multiple ASCII 命令(如图 3.6 所示)或选择标准工具条中的 Import Multiple ASCII 按钮,打开 Import Multiple ASCII 文件对话框,如图 3.11 所示。



图 3.11 Import Multiple ASCII 对话框

选中要导入的文件,单击 Add File(s)按钮,则该文件出现在下面的窗口中。在 Import each file as 下拉列表中有三个选项:

- ① New Columns,在同一个 Worksheet 的不同列中导入数据;
- ② New Rows,在同一个 Worksheet 中按先后顺序导入 ASCII 数据;

③ New Worksheet,将数据导入到不同的 Worksheet 中,当选中该项时,在下面的窗口中显示出模板选项,若将鼠标放在上面,会变成小手,单击鼠标,会出现模板选项下拉列表,如图 3.12 左图所示,用户可以选择;若右击鼠标,会出现快捷菜单如图 3.12 右图所示,这里用户可以选择将选中的模板应用于所有的文件,或是应用于部分文件,也可以选择 Origin 默认的模板。

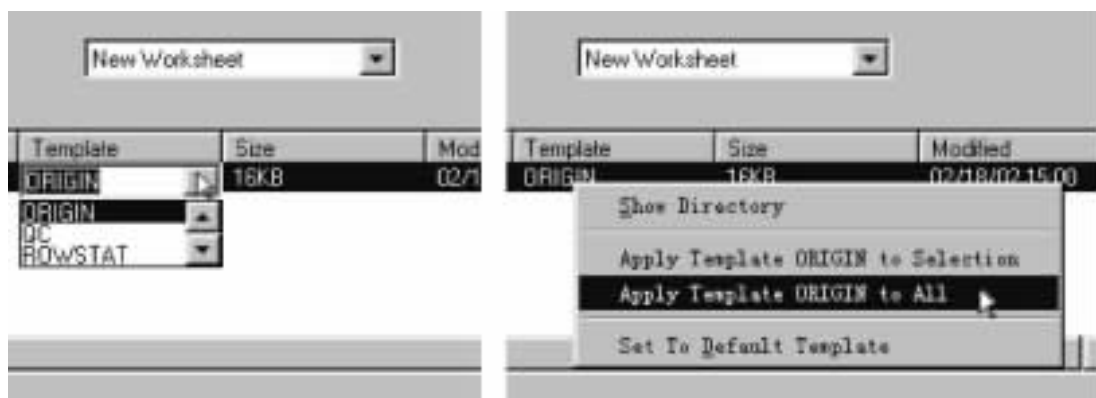


图 3.12 导入多个 ASCII 文件时的模板选项

Origin 默认模板可以被设置。选择 Tool| Options,打开 Options 对话框,单击 Miscellaneous 标签,在 Default Multi-ASCII Import Template 的下拉列表中设置。

3.2.3 导入 Thermo Galactic (SPC)

选择 File| Import| Thermo Galactic (其扩展名是 *.SPC),Origin 允许打开单个或多个 SPC 列。如果数据文件包含一列 X 值,则 Origin 将其设置为 X 列;如果文件只有初始 X 其他值是递增序列,要预览这些数值,可以进行如下操作:

- 双击列头处的  按钮,打开 Column additional information(列附加信息)对话框,用户可以在这里修改初始 X 值和递增方式,如图 3.13 所示;
- 单击列头选中列,然后选择 Format| Set Worksheet X,也可以打开图 3.13 的对话框进行修改。



图 3.13 Column additional information 对话框

3.2.4 导入 pCLAMP 文件

pCLAMP 二元文件的扩展名是 *.ABF 或 *.DAT。在图 3.6 中选择导入命令 pCLAMP, 打开导入对话框, 此对话框与图 3.11 相似。选择一个或几个文件, 单击 OK 按钮, 打开 pCLAMP Options 选项对话框, 如图 3.14 所示。

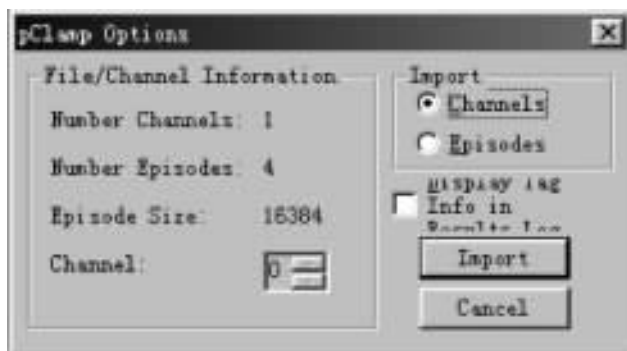


图 3.14 pCLAMP Options 选项对话框

如果只导入一个文件,文件的开头部分读入 pCLAMP 选项对话框中,在 File/Channel Information 组中显示了通道(Channel)数目、导入数据的片段(episode)数和 episode 的大小;在 Import 组中可以选择 Channel 或 Episodes 模式。

- Episodes 模式

如果文件中包含多个 Channel,则可以从 File/Channel Information 组的 Channels 文本框中设置 Channels 数目。如果文件含有标签记录,则可以选择 Display Tag Info in Results Log 复选框,打开文件后自动打开“结果记录”窗口,显示文件名称、通道和大小等信息。

- Channels 模式

将所有数据导入到一列中。

如果同时导入几个文件,则只有 Import 组中的 Episodes 模式和 Channels 模式可以使用。

3.2.5 其他文件的导入

除了上面介绍的外,Origin 7.0 还可以导入其他类型文件。从图 3.6 所示的菜单命令选中要导入的文件类型,其导入过程基本类似,这里就不作详细介绍了。下面列出了各种文件的扩展名。

- Lotus 文件 *.WK4, *.WK5, *.WK1.x, *.WK2.1, *.WK3.x;
- dBASE 文件 *.DBF, Origin 支持 dBASE II, dBASE III, dBASE III Plus 和 dBASE IV;
- DIF 文件 *.DIF;
- MiniTab 数据文件 MiniTab 工作表;
- LabTech 文件 *.PRN, 将二进制实数或二进制整数导入激活的 Worksheet 窗口,其他文本格式 LabTech 文件按照 ASCII 格式导入;
- SigmaPlot 文件 *.JNB, *.SPW, *.sp5, *.spg;
- Sound(WAV)文件 *.WAV;
- Kaleidagraph 数据文件 *.QDA;
- Mathematica 数据文件 导入 Mathematica 4.0 数据文件,可以从 OriginLab 站点的 Add-on Modules 页面中下载 Origin 和 Mathematica 的连接工具。

3.2.6 使用 ODBC 导入数据库文件

ODBC(Open Data Base Connectivity)意思是打开数据基本通道,可以直接从数据库把数据导入 Worksheet 中。选择 File| Import| ODBC,打开 ODBC Dialog 对话框,如图 3.15 所示。

- Data Base 选项卡

Data Base 选项卡可以添加或删除数据源。数据源(Data Source)列表中显示了所有可以访问的数据源,这些名称是用户定义的,可以不同。Table/View 列表中显示相应的数据源。

单击 Add Source 按钮,打开微软的 ODBC 数据源器对话框,如图 3.15 所示,这里用户可以进行添加新数据源、找到列表中数据源的完整路径、删除已有的数据源、添加或删除数据库驱动器等操作。有兴趣的读者可以参考数据库方面的书籍。

- Select Case 选项卡

单击 Select Case 标签,将选中的表格或图片导入到 Origin 的 Worksheet 中,然后用户可以进行指定列、筛选列和添加条件等操作。



图 3.15 ODBC Dialog 对话框和 ODBC 数据源管理器

3.2.7 直接将文件拖到 Worksheet

事实上,用户可以直接从 Windows 资源管理器中将 ASCII, SigmaPlot, MiniTab 和 Thermo Galactic SPC 文件用鼠标拖到 Origin 中。首先,将 Windows 和 Origin 窗口缩小,在 Windows 窗口选中文件,用鼠标拖到 Origin 的 Worksheet 窗口中,当鼠标的下面出现+,释放鼠标即可,如图 3.16 所示。如果当前没有打开 Origin,则可以将文件直接拖到 Origin 图标上。

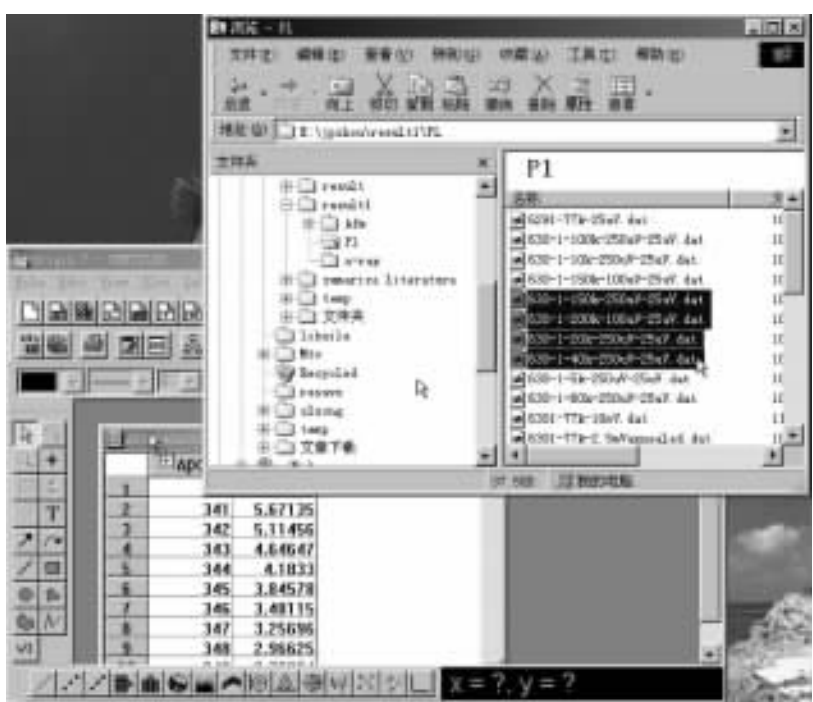


图 3.16 将数据拖到 Origin 的 Worksheet 窗口中

注意:对于 ASCII 和 Thermo Galactic SPC 文件来说,如果将鼠标拖到 Worksheet 窗口里面,则后来的文件将覆盖前面的文件;如果将鼠标放到 Origin 中的 Worksheet 窗口外或 Worksheet 标题栏上,则会生成新 Worksheet 窗口而不会覆盖前面导入的数据。对于 Sigma-Plot and MiniTab 文件来说,不会出现覆盖情况,总是生成新 worksheet 窗口。

导入数据的格式可以通过图 3.8 的 ASCII Import Options 对话框进行设置。

同样也可以用这种方法将相应的数据类型拖到 Matrix 窗口和 Graph 窗口中。

3.2.8 将数据复制到 Worksheet

除了导入数据外,用户可以直接使用粘贴板工具将数据粘贴、转置粘贴到 Worksheet 窗口中。

激活 Worksheet 窗口,选中将要粘贴区域的左上角单元格,选择 Edit | Paste 或 Transpose Paste 即可实现。

Origin 还提供了动态链接工具。选中要粘贴区域的左上角,选择 Edit | Paste Link。该命令在粘贴的数据和源数据之间建立了动态数据交换 DDE(Dynamic Data Exchange)链接,当源数据改变时,被粘贴的数据也作相应的改变,该链接还可随 Project 文件一起保存。

3.2.9 使用 Origin 提供的功能填充数据

Origin 提供了自动填充功能。

● 填充行号

选中 Worksheet 中的一列,单击 Worksheet 数据工具条中的 Set column values according to row number 按钮 ,或选择 Column | Fill Column With | Row Numbers,或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Fill Column With | Row Numbers,就会将行号填入到列中;

● 填充随机数

选中 Worksheet 中的一列,单击 Worksheet 数据工具条中的 Set column values with uniform random number 按钮 ,或选择 Column | Fill Column With | Uniform Random Numbers,或右击从鼠标弹出的快捷菜单中选择 Fill Column With | Uniform Random Numbers;

● 填充正态随机数

选中 Worksheet 中的一列,单击 Worksheet 数据工具条中的 Set column values with normal random number 按钮 ,或选择 Column | Fill Column With | Uniform Normal Numbers,或右击从鼠标弹出的快捷菜单中选择 Fill Column With | Uniform Normal Numbers。

注意:填充随机数时,最大值和最小值由 UNIFORM_MIN 和 UNIFORM_MAX 变量决定,默认情况下,这两个值分别为 0 和 1。填充正态随机数时,平均值和标准偏差是由 NORMAL_MEAN 和 NORMAL_SIGMA 变量决定的,这些变量在配置文件\OriginLab\Origin-Pro70\Modified Files\ORIGIN.INI 的 FillColumn 部分。

3.2.10 使用函数设置数据

Origin 允许用户使用数学表达式来填充序列。选中一行或列中的部分单元格,选择

Column| SetColumn Values(设置列值),从鼠标右键的快捷菜单中选择 Set Column Values 或单击 Worksheet 数据工具条中的 Set column values 按钮 ,打开 Set Column Values(设置列值)对话框,如图 3.17 所示。在这里可以进行以下操作。

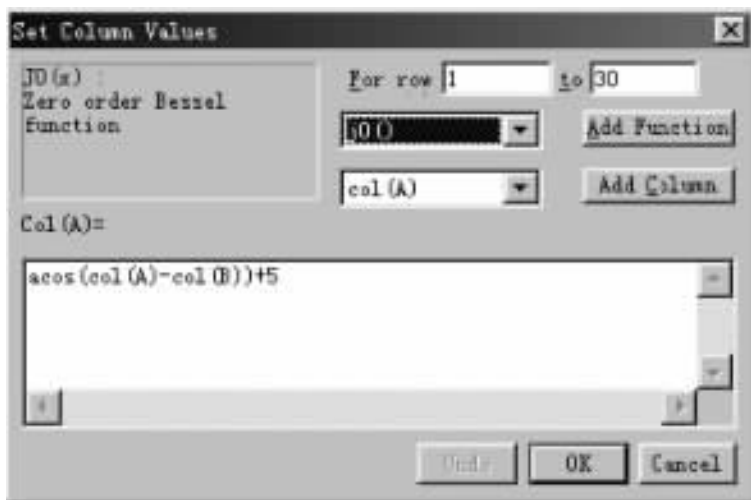


图 3.17 Set Column Values 对话框

● 设置 Worksheet 范围

在开头和结尾行里会自动显示出所选择列的范围,用户也可以在这里进行修改,所填充的数值就在这个范围内。

● 函数设置

用户可以在文本框中直接键入函数,也可以使用 Add Function 和 Add Column 下拉列表中的命令建立函数表达式,形式是 Column(Name) = 文本框中内容。Origin 7.0 在 Add Function 下拉列表中提供了许多数学和统计函数,用户也可以用 Origin C 语言编辑自己的函数。选中一个函数,在左边的文本框中就会出现该函数的简单说明,单击 Add Function 按钮,该函数就会出现在下面文本框中的光标位置上;在 Add Column 下拉列表中包含有当前激活的 Worksheet 中所有列名称。

该设置为用户添加数学和统计函数提供了简便的途径。如果用户需要其他 Worksheet 中的数据,则使用 WorksheetName_ColumnName 语句。如使用 Data3 中的 C 列,则键入 Data3_C 即可。变量 i 可以用来代表行号,如 $\text{col}(A) = \log(i)$ 函数,在列中填充行号的对数值。

Origin 允许表达式中含有被填充的列,如 $\text{col}(A) = (\text{col}(A) - \text{col}(B)) + 5$,用 $(\text{col}(A) - \text{col}(B)) + 5$ 计算的结果来代替原来 A 列中的数据。

3.2.11 设置递增的 X 值

假如在 Worksheet 中没有 X 列,而该函数对应的 X 值是有规律的递增序列,那么就可以使用该功能。选中一列,选择 Format| Set Worksheet X,打开如图 3.18 的“设置 X 递增序列”对话框,填入初始值和步长值即可。

如果某列对应的 X 值是递增序列,则在列标题的左边会出现倒三角 ,双击倒三

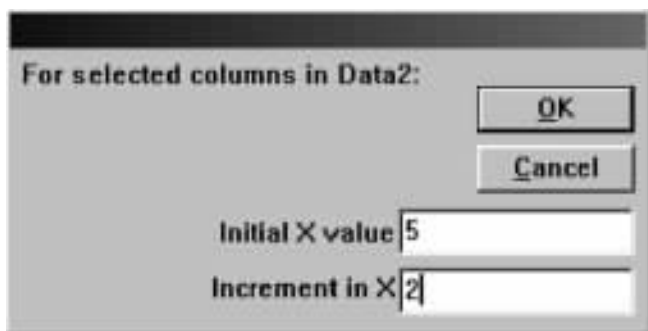


图 3.18 “设置 X 递增序列”对话框

角,打开图 3.13 所示的 Column additional information 对话框,可以修改初始值和步长值。

若要显示 X 值,则选择 View| Show X Column。

3.3 数据的输出

Worksheet 数据可以导出,以供其他应用程序使用。

3.3.1 通过粘贴板导出

Worksheet 数据可以复制到 Windows 粘贴板。选中要复制的数据范围,选择 Edit| Copy,或者单击编辑工具条中的 Copy 按钮,或者使用快捷键 Ctrl+V,那么这些 Worksheet 数据就可以在其他工作表或应用程序中粘贴了。

3.3.2 将 Worksheet 数据保存为 ASCII 文件

对于含有大量数据的 Worksheet 来说,粘贴的办法很不方便,Origin 7.0 可以将 Worksheet 数据保存为 ASCII 文件,默认文件扩展名为 *.DAT,数据间的默认分隔符是 Tab,导出步骤如下。

- 激活 Worksheet 窗口,选择 File| Export ASCII,打开 Export ASCII 对话框,如图 3.19 所示,在保存类型下拉列表中除了默认的 *.DAT 文件外,还支持 *.TXT 和 *.CSV 格式。
- 确定文件保存的路径、文件名和类型,单击“保存”按钮,打开图 3.20 所示的 ASCII Export Into...对话框,在对话框内进行参数设置。
- 选中 Include Column Names(包括列名)复选框,各数列的列名被复制到 ASCII 文件的第一行,<Enter>,然后是数据。
- 选中 Include Column Labels(包括列标注)复选框,各数列的列标注被复制到 ASCII 文件的第二行,<Enter>,然后是数据;若没有选中 Include Column Names 复选框,则列标注被复制到 ASCII 文件的第一行。
- Export Selection(导出选定范围)复选框,此复选框无需用户指定,如果选定了数据范围,再执行导出命令的话,此复选框将自动被选中,如果想导出整个 Worksheet 文件,



图 3.19 Export ASCII 对话框

则清除此复选框。

- Separator(分隔符), 此下拉列表中有 5 种分隔符, “TAB”, “,”, “SPACE”, “、TAB”, “、SPACE”, 默认为“TAB”, 用来分隔列标注和数据。

保存完毕后, 用写字板或记事本打开该文件, 其格式如图 3.20 所示。

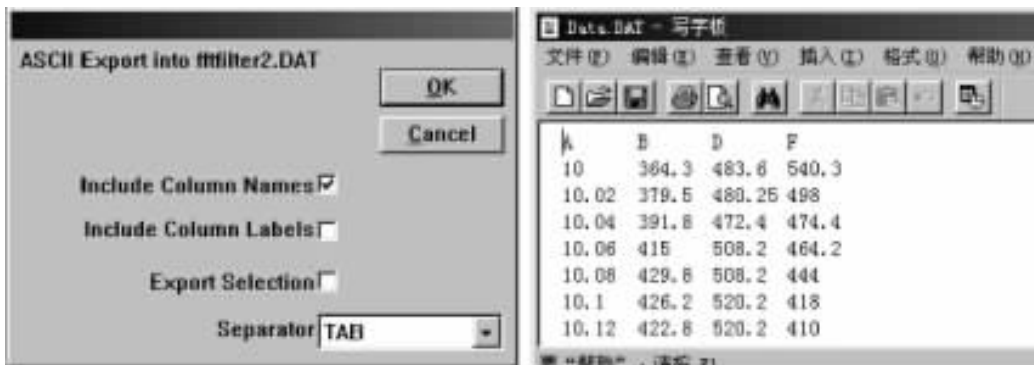


图 3.20 “ASCII 输出格式”对话框及其输出后数据文件

3.3.3 部分数据生成 ASCII 文件

生成的方法和上面介绍的类似, 这里只介绍在保存之前数据的选择。

- 直接用鼠标选中需要保存的 Worksheet 数据范围;
- 删除不需要导出的行和列, 这会改变 Worksheet 数据;
- 选择 Edit | Set as Begin 和 Edit | Set as End, 确定列的范围。

3.4 列的制图属性设置

3.4.1 列的设置及其相互关系

Origin 7.0 提供了指明 Worksheet 中列的相互关系和制图属性的功能,列可以设置为 X , Y , Z , L (标签), X 误差, Y 误差或 Disregarded(无关列)中的一种,这种属性决定了其数据制图属性。

- 列设置为 X , Y 或 Z , 如果在 Worksheet 中只有一列设置为 X 列, 则为 Worksheet 中所有其他的 Y 列或 Z 列提供 X 坐标值; 如果 Worksheet 中有几个 X 列, 则每个 X 列只为它右边的而且下一个 X 列的左边的所有其他的 Y 列或 Z 列提供 X 坐标值; 对于选中非相邻的列来说, X 列只为选中的 Y 列或 Z 列提供 X 坐标值; 如果选中的列中没有 X 列, Origin 会自动寻找选中的 Y 列或 Z 列左边的 X 列; 如果左边没有, 会寻找 Y 列的右面, 但不会寻找 Z 列右面的 X 列。
- 列设置为 L (标签), 标签列中的文本或数值在制图时作为其左边最临近 Y 列的标签添加到 Graph 中, 即每个点上都显示标签列中的文本或数值。
- 列设置为 Disregarded(无关), 即使选中了该列, 其中的数据也不会出现在 Graph 中。
- 列设置为 X Error(X 误差), 该设置的前提是已经设置了 X 列, 其中的数值是 X 列对应数值的误差范围。如果 Worksheet 中有几个 X 列的话, X 误差列针对左边最临近的 X 列; 如果左边没有 X 列, Origin 从右边选择; 如果选中了非相邻列, 选中的 X 误差列只为选中的 X 列提供误差值; 如果选中几个 X 列, Origin 寻找 X 误差列的左边, 左边没有然后从右边指定 X 列; 如果选中的列中没有 X 列的话, Origin 寻找 X 误差列的左边的第一个 X 列, 左边没有然后寻找右边。
- 列设置为 Y Error(Y 误差), 在设置了 Y 列的情况下, Y 误差列中的数值是 Y 列对应数值的误差范围, 其针对的 Y 列寻找方法同上。

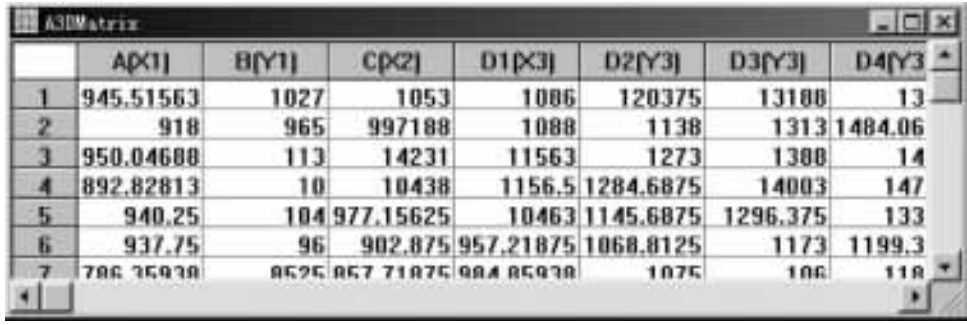
列设置方法包括以下几种:

- 在列标题处右击鼠标, 选择 Set As... (图 3.3a);
- 选中列, 选择 Column| Set as...;
- 选中列, 单击 Column 工具条中相应的按钮;
- 双击列标题, 从 Worksheet Column Format 对话框的 Plot Designation 下拉列表中选择相应的命令, 如图 3.4 所示;
- 选中列, 选择 Format| Column 或选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 Properties, 也可以打开 Worksheet Column Format 对话框进行设置。

3.4.2 设置多个 X 列

Worksheet 中可以设置多个 X 列, 选中整个 Worksheet 或几列, 从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Set As| XYY , $XY XY$, $XYY XYY$ 或 $XYYY XYYY$; 或选中几列, 选择 Column| Set As X 或选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 Set As| X 。

在 Origin 中会建立 X 列和 Y 列之间的关系,所有的 Y 列和其左边的邻近 X 相关联。Origin 将第一个 X 列设置为 X1,和它相关联的 Y 列设置为 Y1,依次类推。如果用 Y1 列制图的话,其默认的 X 值为 X1 列数值,Y2 列制图时的 X 值在 X2 列,依次类推。如果几个相邻列被设置为 X 列,Origin 设置如图 3.21 所示,这样如果用 Y3 列制图的话,他们对应的 X 值在 X3 列,而不是在 X2 列。



	A[X1]	B[Y1]	C[X2]	D1[X3]	D2[Y3]	D3[Y3]	D4[Y3]
1	945.51563	1027	1053	1086	120375	13188	13
2	918	965	997188	1088	1138	1313	1484.06
3	950.04688	113	14231	11563	1273	1388	14
4	892.82813	10	10438	1156.5	1284.6875	14003	147
5	940.25	104	977.15625	10463	1145.6875	1296.375	133
6	937.75	96	902.875	957.21875	1068.8125	1173	1199.3
7	786.35938	8525	857.71875	984.85938	1075	106	118

图 3.21 多个 X 列设置

3.4.3 设置 Worksheet 为无 X 列

可以设置 Worksheet 为无 X 列工作表。选中 X 列,将其设置为 Y 列或其他列。这时,若用 Y 列制图,Origin 会将行号默认为 X 数值,或者按照 3.2.11 小节中那样设置 X 列值。

要在 Worksheet 中显示默认的 X 列的话,选择 View| Show X Column。如果没有设置 X 列,Origin 会默认初始值和递增差值为 1。

3.4.4 数据类型的设置及其应用

打开 Worksheet Column Format 对话框,如图 3.4 所示,除了前面介绍的重命名及设置列宽外,这里主要介绍数据类型的设置。

Options 组可以设置列的制图属性、显示类型、格式和配置等属性。列的制图属性设置在前面已经介绍了,这里只介绍其他功能。

列的数据 Display (显示) 下拉列表中提供 Numeric, Text, Time, Date, Month, Day of week 和 Text & Numeric 七种显示类型,其功能说明在表 3.1 中。

表 3.1 列数据显示 (Display) 类型

显示设置	说 明
Numeric	只接受数字类型的数据
Text	接受任何 a、b、c 等字符,同时接受数字字符,这时的数字是作为文本对待的,不能用于计算
Time	只接受时间数值,格式为“[小]时:分:秒:分秒”,中间用冒号隔开
Date	只接受日期格式的数值,中间用空格、斜线或连字符连接,比如合法字符 9/23/2002 或 Mon Sept 23 2002,Origin 只显示合法的日期,如 2/31/2002 和 Fri Sept 23 2002 被视为非法字符,另外,对于不完整的字符如 9/23,Origin 则将当前的年加入 9/23/2002

续表 3.1

显示设置	说 明
Month	只接受月字符,用户可以输入月份的数字 1~12,在不发生歧义的情况下,Origin 将月份缩写到最小限度,如将 November 缩写为 N,但 June 缩写为 Jun
Day of week	只接受星期,可以输入数值 0~6 或文本,如 M 或 Mon、T 或 Tue 等
Text & Numeric	这是 Worksheet 列的默认格式,接受任何字符,但在 Worksheet 的所有操作中(如制图或计算),文本字符作为缺少数值对待,该选项占用的内存较多

选择的显示类型不同,其 Format(格式)下拉列表也不同,这里只介绍常用的 Numeric 或 Text & Numeric 类型的下拉列表,这些格式的说明详见表 3.2 所列。

表 3.2 Numeric 或 Text & Numeric 的显示格式

格 式	Worksheet 显示
Decimal;1 000	1,1 000,1E6,1E9,科学计数的阈值在 Options 对话框的 Numeric Forma 选项卡的 conversion to scientific notation 中进行设置
Scientific;1E3	1E0,1E3,1E6,1E9
Engineering;1k	1. 0,1. 0k,1. 0M,1. 0G
Decimal; 1 000	1,1 000,1E6,1E9

如果选择的是日期和时间类型,那么可以进行简单数学运算。比如,一个 Worksheet 的 A 列是时间值,B 列是测量的数据,用户想知道获得每个数据所需的时间,那么就可以生成 C 列,并在 Set Column Values 对话框中设置 C 列数值如下:

```
col(A)[i]-col(A)[i-1],i≥2
```

在数据 Display(显示)下拉列表中选中 Numeric 或 Text & Numeric 时,Numeric Display 下拉列表中有三个选项。

- Default Decimal Digits,显示 Worksheet 单元格中的所有数字,数字位数由 Options 对话框的 Numeric Format 选项卡的 Number of Decimal Digits 下拉列表选项决定。
- 选中 Set Decimal Places =,在后面出现文本框,输入一个数字,表示单元格中小数点后面要显示的位数,如果不输入的话,默认值为 5,此时 Options 对话框的 Numeric Format 选项卡的 Number of Decimal Digits 下拉列表选项不起作用。
- Significant Digits =,在后面出现文本框,输入一个数字,表示单元格中要显示的有效数字的位数。

3.5 Worksheet 数据管理

对已经建立的 Worksheet 窗口来说,数据管理是基本的、重要的内容之一。

3.5.1 数据排序

Origin 7.0 可以进行单列、多列设置及对整个 Worksheet 的数据进行排序。排序类似于

数据库系统中的记录排序,是根据某列或某些列数据的升降顺序,将整个工作表的行进行重新排列。这里只介绍整个 Worksheet 数据排序,其他两种比较简单,方法类似。

Worksheet 排序的步骤如下:

- 把鼠标放到 Worksheet 的左上角空白单元格处,等鼠标变成指向右下方的箭头,然后单击,选中整个 Worksheet;
- 单击 Worksheet 工具栏的 Sort 按钮 , 或选择 Analysis | Sort Range/Columns/Worksheet | Custom,弹出 Nested Sort 对话框;
- 在 Nested Sort 对话框的 Selected Column 列表框中选中 Angle,单击 Ascending 按钮,则 Angle 就被添加到 Nested Sort 列表框中,如图 3.22 所示,这时,Angle 列成为 Worksheet 升序排列的首要列;
- 在 Nested Sort 对话框的 Selected Column 列表框中选中 Length,单击 Ascending 按钮,则 Length 就被添加到 Nested Sort 列表框中,这时,Length 列成为 Worksheet 升序排列的次要列;
- 单击 OK 按钮,排序前后的 Worksheet 如图 3.23 所示。

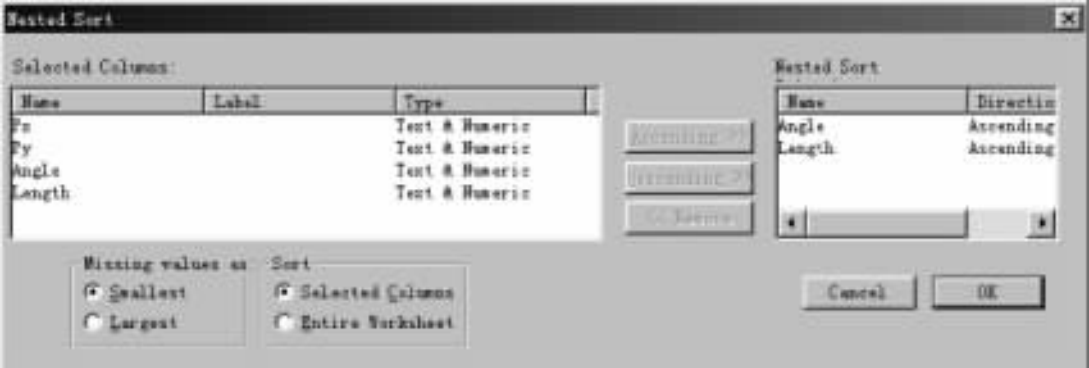


图 3.22 Nested Sort 对话框

VectorITAM				
	Px[P]	Py[Y]	Angle[Y]	Length[Y]
1	5	5	0.88507	4
2	5	6	1.00407	6
3	5	7	1.14417	8
4	5	8	1.30454	10
5	5	9	1.48014	12
6	5	10	-1.48014	14
7	5	11	-1.30454	16
8	5	12	-1.14417	18
9	5	13	-1.00407	20
10	5	14	-0.88507	22

VectorITAM				
	Px[P]	Py[Y]	Angle[Y]	Length[Y]
1	5	10	-1.48014	14
2	6	10	-1.46014	16
3	7	10	-1.4289	18
4	14	9	-1.4289	20
5	8	10	-1.3734	22
6	13	9	-1.3734	24
7	5	11	-1.30454	16
8	6	11	-1.24905	18
9	9	10	-1.24905	22
10	12	9	-1.24905	26

图 3.23 Worksheet 排序前后对比

Worksheet 以 Angle 为首要列升序排列,其他列也作相应的变化。如果 Angle 列中有两个单元格的数值相同,就根据对应行的 Length 列的值来升序排列 Worksheet,当然用户可以设置更多的次级排序列。

选中一列,如果直接选择 Analysis| Sort Columns| Ascending/Descending,则该列执行升序/降序排列,其他数据原位不变;如果选择 Analysis| Sort Worksheet| Ascending/Descending,该列执行升序/降序排列,其他数据按照数据间对应关系作相应的变化。

3.5.2 规格化数据

规格化数据就是把列或其中的一部分数据除以某个因子,以上例中的 Angle 列为例介绍其方法。

- 单击 Angle 列的标题栏,选中 Angle 列,也可以选择其中的一部分;
- 选择 Analysis| Normalize,或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Normalize 命令,弹出 Normalizing VectorXYAM_Angle 对话框,如图 3.24 所示,其中给出列的最小值和最大值,在 Divide data by 文本框中默认的因子是列的最大值,用户可以输入新的因子;
- 单击 OK 按钮。

这样 Angle 列中的所有数值都除以这个因子,并用所得的商代替原数据。



图 3.24 Normalizing 对话框

3.5.3 Worksheet 中的数据交换

Origin 7.0 具有在 Worksheet 之间或内部交换数据的功能,可以通过剪贴板或 Script 窗口实现。

- 使用剪贴板交换数据

选中 Worksheet 中的单元格,选择 Edit| Copy(或 Ctrl+C,或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Copy),将数据复制到剪贴板。如果只复制一个单元格数据,可以在要粘贴的地方选择 Edit| Paste(或 Ctrl+V,或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Paste);如果复制了一组数据,则将鼠标放在要粘贴地方的左上角,然后选择粘贴命令。

如果选择了 Paste Transpose 命令,则将所选中的数据转置粘贴。若必要,Worksheet 会添加新列。

- 使用 Script 窗口交换数据

Script 窗口(参考 2.6.1 小节)中的 LabTalk 脚本命令可以用来执行 Worksheet 之间的数据交换。仍以上面的 VectorXYAM 工作表为例,说明如何使用 Script 窗口交换数据。

- 单击标准工具条中的 New Worksheet 按钮 ,生成新 Worksheet;
- 单击标准工具条中的 Script Window 按钮 ,打开 Script 窗口;

➤ 在 Script 窗口中输入下列命令：

```
COPY VECTORXYAM_ANGLE DATA2_A<Enter>
```

执行该命令,将 VectorXYAM 工作表中的 ANGLE 列数据复制到 DATA2 工作表中的 A 列。如果没有执行命令,从 Script 窗口选择 Edit| Script Execution 命令,然后在命令行的末尾按下 Enter 键。

3.5.4 从 Worksheet 中提取数据

Origin 7.0 提供了提取 Worksheet 数据的功能。用户指定 Worksheet 中数据的位置,然后将这些数据复制、粘贴到另外一个 Worksheet 中。

选择 Analysis| Extract Worksheet Data,打开 Extract Worksheet Data 对话框,如图 3.25 所示。下面介绍该对话框中各命令的作用。

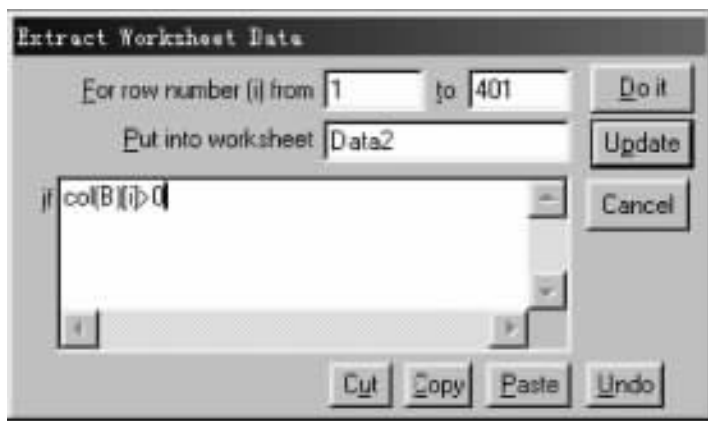


图 3.25 Extract Worksheet Data 对话框

- 选择 Worksheet 范围,在 For row number (i) from...to...文本框中指定行的范围。用户可以填入数字,如果在选择命令之前选择了范围,Origin 会自动显示选中范围。
- Put into Worksheet 文本框,用户在这里填入接收数据的 Worksheet 名称,默认的名称为 Data+数字,Origin 将生成这个 Worksheet 窗口。
- 表达式文本框,在 if 文本框中填入条件表达式,可以使用合法的逻辑、关系符号和数学符号(+, -, *, /, ^等)。如果用到 Worksheet 列,则使用 col()表达式,在括号中填入列名称;如果用到行,则使用变量 i,Origin 默认的命令是 col(B)[i]>0。

Origin 支持的逻辑、关系符号：

> 大于;
 >= 大于等于;
 < 小于;
 <= 小于等于;
 == 等于;
 != 不等于;
 && 与;
 || 或。

3.6 Worksheet 的 Script 窗口

对于一些 Worksheet 的重复性操作,如导入数据、计算、制图等,可以使用 LabTalk 脚本来自动完成一系列工作。用户可以使用 Worksheet Script 对话框,将 LabTalk 脚本程序和 Worksheet 联系在一起。Worksheet Script 对话框可以保存在 Worksheet 模板文档里,然后根据用户定制的 Worksheet 模板打开 Worksheet 窗口。

另外用户可以定义按钮,将 LabTalk 脚本程序和 Worksheet 联系在一起,自定义按钮在 Customize Toolbar 对话框的 Button Groups 选项卡中。在这里用户可以指定某按钮在 Worksheet 激活才可用,每当点击时,就执行一个 LabTalk 脚本命令。

要打开 Worksheet Script(脚本)窗口,激活 Worksheet,选择 Tools| Worksheet Script,如图 3.26 所示,输入到对话框中的 LabTalk 脚本和当前的 Worksheet 相联系,执行程序由对话框控制,保存 Worksheet 模板时,与之相联系的 Worksheet Script 也一起保存。

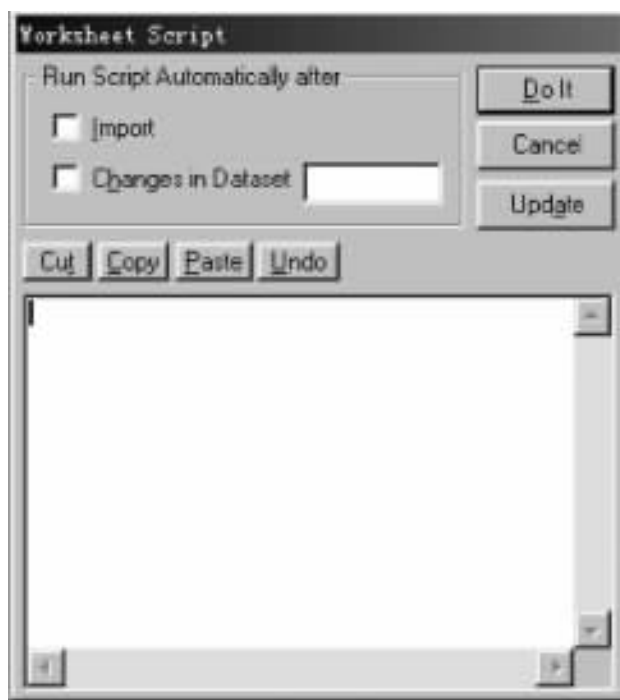


图 3.26 Worksheet Script 窗口

下面介绍 Worksheet Script 窗口各部分的功能。

- Run Script Automatically after 组

选中 Import 复选框,当导入 ASCII 文件时,执行 Worksheet Script 命令;选中 Changes in Dataset 复选框,当从脚本到相应的文本框中指定的数据改变时,运行 Script 命令。

- Script 窗口

在这里输入 LabTalk script 命令,Script 命令必须符合 LabTalk script 文件语法。

- Do It 按钮

单击 Do It 按钮,马上执行 Script 窗口中的 script 命令,script 及执行方法按照 Worksheet 的默认设置值设置。

- Update 按钮

单击 Update 按钮,设置 Script 和执行方法为 Worksheet 的默认设置。

3.7 将 Worksheet 保存为模板文件

通过以上的介绍,对 Origin 的 Worksheet 基本操作有了初步的了解,要保存编辑好的 Worksheet 为模板文件,选择 File| Save Template As,在保存对话框内键入文件名,选择合适的路径,单击 Save 按钮,就完成了对文件的保存,Origin 会自动加上扩展名 *.OTW。

保存了模板文件,同时将列的数目、标题、设置及利用 Script 生成的列之间的关系等一起保存。若要打开基于上面建立的模板文件的 Worksheet 窗口,则在新建窗口中的模板下拉列表中选择合适的模板即可,参考 2.5.1 小节。

第 4 章 二维 Graph

Graph 窗口是 Origin 中最重要的组成部分,在这里完成制图,实现数据可视化。制图包括二维和三维,其中二维制图是基础。本章介绍 Origin 7.0 的二维制图及其相关的基本操作。

本章内容包括:

- Graph 窗口介绍;
- 根据 Worksheet 制图;
- 直接在 Graph 窗口中制图;
- 线性拟合;
- 函数制图和分类数据制图;
- Graph 模板;
- 个性化 Graph 图形;
- Graph 图形输出。

4.1 Graph 窗口介绍

图 4.1 是 Origin 的 Graph 窗口。下面介绍窗口的组成部分。

● 页 面

Graph 窗口包含一个编辑页面。页面作为制图的背景,包括几个必要组成部分:层、坐标轴和文本等。用户可以根据需要修改这些内容,但每个页面至少含有一个层,否则页面将不存在。

● 图 层

每个图层至少包含三个要素:坐标轴、数据制图和与之相联系的文本或图标。Origin 将这些要素组合在一起,设置其大小等属性。在 Graph 窗口中用户最多可以放置 50 个层,但图层标记上只能显示一位数字,如将 5,15,25 等均显示为 5。

用户可以直接在页面窗口中移动或调节图层的大小。单击该图层的坐标轴,使坐标轴处于高亮状态,这也是默认的框架位置,将鼠标放在框中或边上,变成十字形,拖动鼠标,即可移动。将鼠标放在框架的边或角上,等鼠标变成双箭头状,拖动鼠标,即可调整图层的大小,如图

4.1 所示。

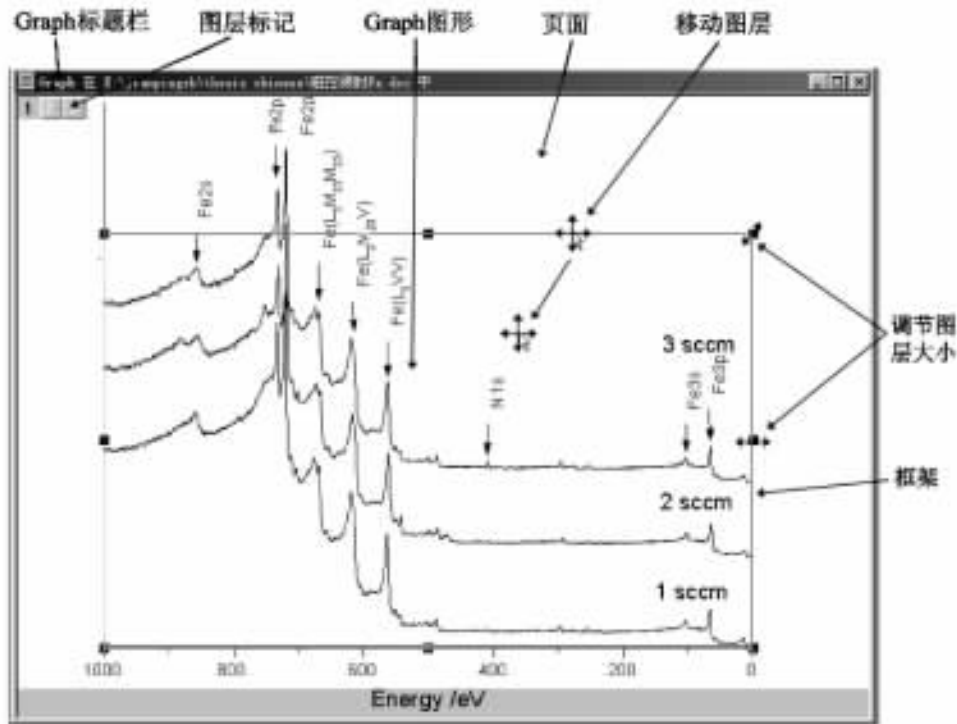


图 4.1 Graph 窗口

如果一个 Graph 窗口中包含多个图层,对窗口的编辑只能针对某个图层,需要激活图层,方法如下:

- 单击该层的坐标轴;
- 单击 Graph 窗口左上角该层的标记,标记下陷的图层为当前激活的图层;
- 单击该层的对象。

● 框 架

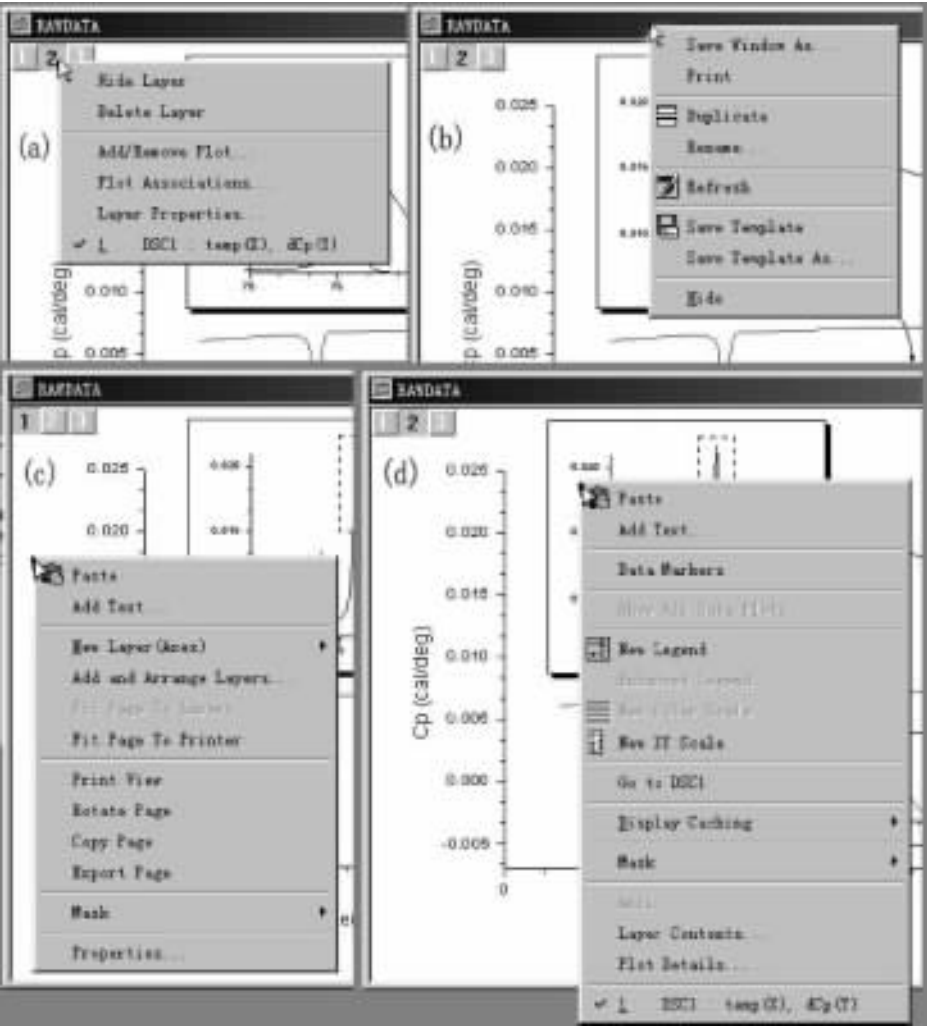
框架是个长方形的方框,将绘图区框在里面,对于二维图形就是坐标轴的位置,如图 4.1 所示,三维图形部分在坐标轴的外面。对于 Graph 来说,框架是独立于坐标轴之外的元素,坐标轴可以设置为隐藏,但框架仍然存在。可以通过选择 View| Show| Frame 显示/隐藏框架。

● 鼠标右键的快捷菜单

在 Graph 的不同地方右击鼠标,弹出的快捷菜单是不同的,如图 4.2 所示。在 Graph 窗口中,在图层标记、Graph 标题栏、图形的边上和在图形上右击鼠标得到了不同的快捷菜单,这些命令具有不同的功能。

● 数据图形化

图形化的数据来源可以是 Worksheet, Matrix 或公式,能够从菜单命令 Data 最下面的列表中查看到当前激活层的数据来源。如果该层中有几组数据,则可以激活其中一组,对其进行处理分析。选择菜单命令 Data 最下面列表中的相应数据,如图 4.3 所示,或从该图层标志处右击鼠标弹出的快捷菜单中选择相应的数据组,图 4.2(a)所示,激活的数据前面带有“√”标记。



(a) 在图层标记处右击;(b) 在 Graph 标题栏右击;
(c) 在图形的边上右击;(d) 在图形上右击

图 4.2 在 Graph 窗口的不同位置右击鼠标

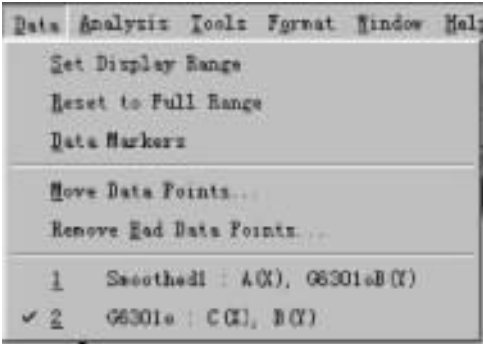


图 4.3 Graph 的 Data 菜单命令

4.2 使用 Worksheet 制图

Origin 提供了多种制图途径,最基本的是根据 Worksheet 制图。根据 Worksheet 制图也有多种方法,下面分别介绍。

4.2.1 Worksheet 数据的选择

一个 Worksheet 数据组实际是一个一维数列,包含文本或数值。每个数据组是 Worksheet 的一列,可以标记为 WorksheetName_ColumnName。列有惟一的属性设置: X, Y, Z, L (标签), X 误差, Y 误差或 Disregarded (无关列), 列的设置参考第 3 章。可以选中某一 Y 列进行制图,对应的横坐标是其前面最近 X 列。但有时候需要用不相连的列进行制图;可以使用 Ctrl 键,如选中 X1 列和 Y2 列,Origin 将 X1 列设置为横坐标, Y2 列设置为纵坐标进行制图;如选中 X1 列、Y2 列和 Y3err 列, Origin 将 X1 列设置为横坐标, Y2 列设置为纵坐标, Y3err 列设置为 Y2 列误差值进行制图。

如果选择列中的部分数据制图,可以直接用鼠标选中这些数据,或选中开始数据的单元格。选择 Edit| Set as Begin, 然后选中结尾数据单元格, 选择 Edit| Set as End, 这两个命令也可从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择。

4.2.2 激活 Worksheet 数据制图

选中要绘制的 Worksheet 数据, 选择 Plot| Graph 类型, 或直接单击 Graphs 工具条中相应的制图模板命令按钮, 就可以制图了, 如图 4.4 所示。在这里不必选中相应的 X 列。

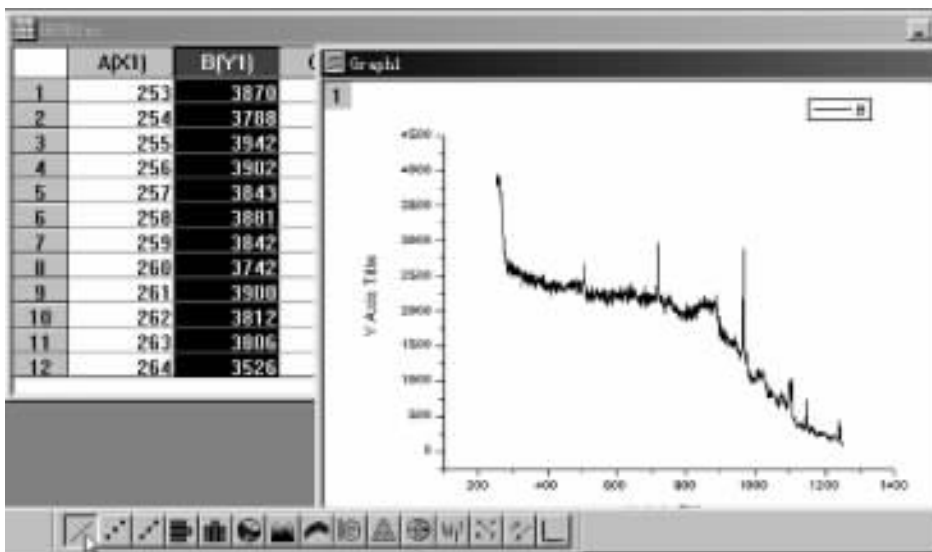


图 4.4 单击 Line 按钮制图窗口

假如在 Worksheet 中没有 X 列, Origin 会将行号 i 默认为 X 数值。如果在设置了无 X 列的情况下, 要在 Worksheet 中设置 X 列, 则激活 Worksheet, 选择 Format | Set Worksheet X, 打开图 3.18 所示的对话框进行设置。如果没有设置 X 序列, Origin 会默认初始值和递增值均为 1。

如果同时选中几个 Y 列, Origin 则将它们设置为一组图形, 具有同样的图形样式。

4.2.3 不激活 Worksheet 数据的情况下制图

如果没有激活 Worksheet 数据, 可以使用 Select Columns for Plotting 对话框进行制图, 如图 4.5 所示。打开该窗口的方法如下:

- 选择 Plot | Graph 类型;
- 单击 Graphs 工具条中的制图模板命令按钮;
- 按下 Alt 键双击 Graph 窗口中左上角的图层标记;
- 在 Graph 窗口左上角的图层标记上右击鼠标, 从快捷菜单中选择 Plot Associations 命令;
- 双击 Graph 窗口中左上角的图层标记, 打开 Layer n 对话框, 单击该对话框中的 Plot Associations 命令按钮;
- 激活 Graph 窗口的情况下, 选择 Graph | Add Plot to Layer | Graph 类型。

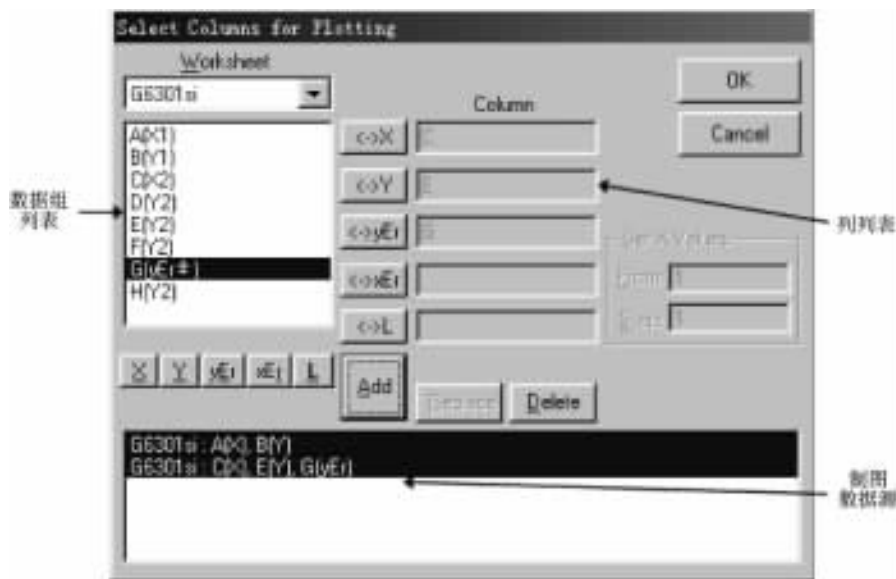


图 4.5 Select Columns for Plotting 对话框

通过 Select Columns for Plotting 对话框可以使用 Worksheet 数据进行制图。

- 从 Worksheet 下拉列表中选择将要绘制的 Worksheet 名称;
- 从数据组列表中选中数据组, 单击 **<->X** 或其他按钮, 将其输入到右边相应的列列表中, 设置为相应的数据源, 如果要去掉该操作, 再单击 **<->X** 或其他按钮; 如果选中 X 列, 而单击了 **<->Y**, 则将该列设置为纵坐标;
- 单击 Add 按钮, 将这组数据添加到下面的制图数据源文本框中, 如果列列表中没有数

据的话,则将数据组列表中选中的数据组添加到文本框中;

- 如果要将对列设置为其他数据源,则单击  等按钮,比如将 A(X1) 设置为 Y 列,在数据组列表选中该列,然后单击  按钮;
- 如果选中的 Y 列没有对应的 X 列,可以在 Set X Value 组中进行设置;
- 如果想去掉某组数值,可在文本框中选中,然后单击 Delete 按钮。

将数据组设置好后,单击 OK 按钮,就可以将数据图形化了。图形化的数据包括文本框中的所有数据组、列表中的数据组和数据组列表中激活的数据组。

注意:在文本框中数据组显示的格式是:Worksheet 名称:[初始值/步长(X)] C(X), E(Y), G(yEr), E(L)。其中的“初始值/步长(X)”在没有 X 列的情况下才出现。

从数据组列表中选择数据组时,可以使用 Ctrl 键同时选中几组数据,但每次最多只能选中一个 X 列,并且该 X 列作为所有其他列的横坐标值。

4.3 直接在 Graph 窗口中制图

Origin 提供了多种方法,直接往 Graph 窗口中添加图形,包括直接导入数据、使用层对话框导入数据和用鼠标拖动等方法。

4.3.1 将单个 ASCII 文件导入到 Graph 窗口中

激活 Graph 窗口选择 File| Import ASCII| Single File,或单击 Standard 工具条中的 Import ASCII 按钮 ,打开 Import ASCII 对话框,其操作步骤和第 3 章中的将 ASCII 文件导入到 Worksheet 窗口中的操作类似。Origin 将文件的第一列默认为 X 列,而将其他的所有列默认为 Y 列,导入到 Graph 窗口中。

Origin 还提供了自动显示导入文件的标题的功能,该操作如下:

- 在导入文件前,单击 Tool 工具条中的 Text Tool 按钮 ,然后在 Graph 窗口中合适的地方单击鼠标,打开文本控制框,在 Graph 窗口中生成文本标签;
- 在文本框中键入 header,然后将鼠标在其他地方单击;
- 按下 Alt 键,双击 header 文本,打开 Label Control 对话框,在 Object Name 文本框中键入 header;
- 单击 OK 按钮,关闭对话框。

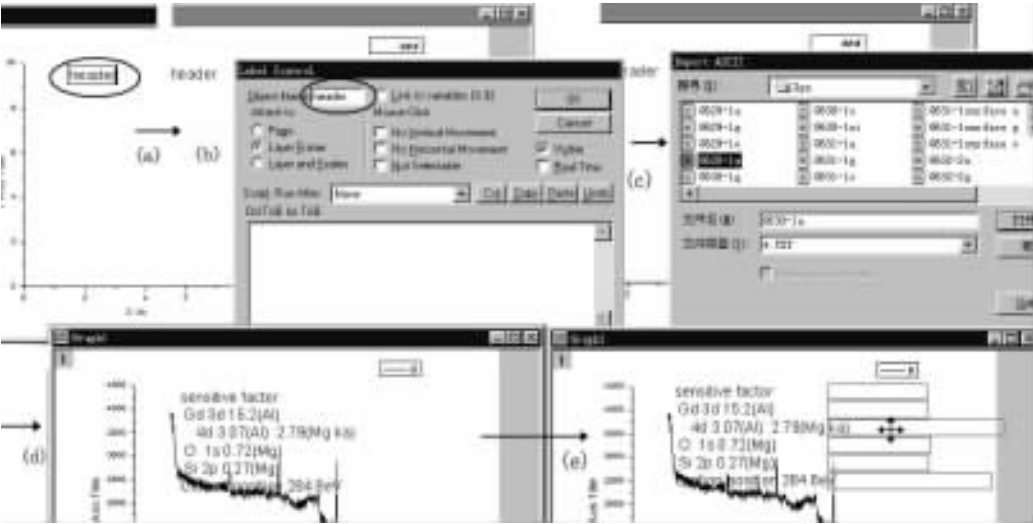
这时导入含有标题的 ASCII 文件,将在 header 文本处自动显示标题。该过程如图 4.6 所示。

4.3.2 将多个 ASCII 文件导入 Graph 窗口中

激活 Graph 窗口,选择 File| Import ASCII| Multiple Files 或单击 Standard 工具条上的 Import Multiple ASCII 按钮 ,打开 Import Multiple ASCII 对话框,如图 4.7 所示。

注意:该对话框可以使用户将数据导入 Graph 窗口或 Worksheet 窗口中。如果选中 Import each selected file into a new worksheet 复选框,则将数据导入 Worksheet 窗口;否则将数

据导入 Graph 窗口。



(a)键入 header;(b)双击打开 Label Control 对话框键入 header;
(c)打开 Import ASCII 对话框;(d)导入带标题的数据图形;(e)拖动标题到合适的位置

图 4.6 自动导入标题设置



图 4.7 Graph 窗口 Import Multiple ASC II 数据对话框

选中文件,双击鼠标或单击 Add File(s)按钮,将该文件添加到下面的文件列表窗口中。如果想去掉该窗口中的文件,那么先选中再单击 Remove File(s)按钮。

在该对话框中用户可以指定制图设置,Plot Designation Column 设置在 Origin 的 list of

selected files 文件中。Origin 的默认设置为 XY1, 如果想改变这种设置, 那么将鼠标放在相应文件的 Plot Designation Column, 变成小手, 单击鼠标, 会出现选项下拉列表, 如图 4.7 所示, 用户可以选择。Origin 提供选项包括:

- XY1 Origin 将文件的所有列制图, 假定第一列为 X 值, 其他所有列为 Y 值进行制图, 其中的 1 意思是后面的字符 Y 对其他所有的列进行重复设置。
- DXY1 Origin 导入文件的所有列, 并假定第一列的数值为 Disregarded(无关列), 假定第二列为 X 值, 其他所有列为 Y 值进行制图, 其中的 1 意思是后面的字符 Y 对其他所有的列进行重复设置。
- XY Origin 导入文件的第一列和第二列, 并分别设置为 X 和 Y 值。
- XY2 Origin 导入文件的所有列, 假定第一列为 X1 值, 第二列为 Y1 值, 第三列为 X2 值, 第四列为 Y2 值, 如此类推。其中的 2 表示字符 X 和 Y 对其他列进行重复设置。
- XYE Origin 导入文件的前三列, 并分别设置为 X, Y 和 Y error 值。
- XYZ Origin 导入文件的前三列, 并分别设置为 X, Y 和 Z 值。

另外, 用户也可以使用下列符号进行设置:

- X X 值;
- Y Y 值;
- Z Z 值;
- D disregarded 值——不导入该列的数值;
- E Y error 值;
- H X error 值;
- L 标签。

用户进行了设置后, Origin 就根据这些设置导入数值并制图。如果列数多于设置, 则将重复设置。

用户可以使用鼠标右键的快捷菜单选择 Apply Plot Designation...to All, 将选定的设置应用于所有的文件, 以节省设置时间, 如图 4.8 所示。该菜单同时提供了显示文件路径命令。

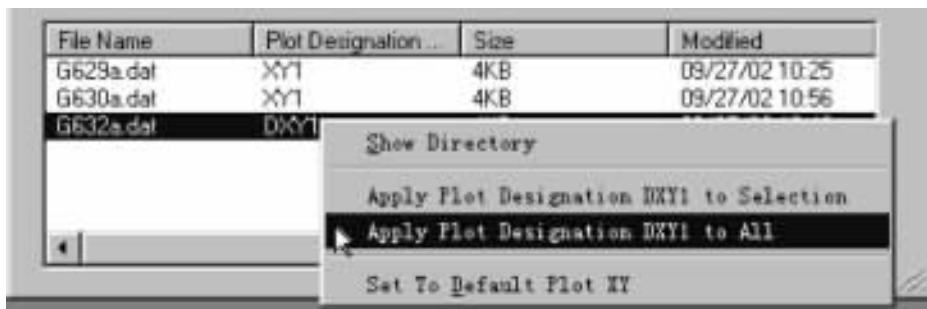


图 4.8 将选定的设置应用于所有的文件

4.3.3 使用 Layer n 对话框导入数据

使用 Layer n 对话框可以将 Origin 文件中现有的 Worksheet, Excel 工作簿或 Matrix 数据添加到 Graph 窗口中。双击 Graph 窗口左上角的图层标记, 打开 Layer n 对话框, 如图 4.9 所示。



图 4.9 Layer 1 对话框

当前可用的制图数据组出现在 Available Data 列表中,选中其中的一组或几组数据,单击  按钮,将选中的数据导入到右边的 Layer Contents 列表中;如果去掉某组数据,那么从 Layer Contents 列表中选中,单击  按钮。

注意:虽然在 Available Data 列表中列出了 Project 文件中所有的数据组,在添加到 Layer Contents 列表中时用户需要考虑到 Graph 模板。例如,如果当前的制图模板是 2D scatter,用户就不应该将含有 Z 列或 Matrix 数据添加到 Layer Contents 列表中;否则,会导致不必要的错误。

使用 Layer n 对话框导入数据时,Origin 会使用默认的制图模板。如果用户自己生成了模板,Origin 首先会查找用户定制的模板;如果没有,Origin 显示按照默认的制图模板格式制图。

下面介绍 Layer n 对话框中各个部分的功能。

- Available Data 列表包括 Project 文件中所有的用于制图的数据组,包括 Worksheet 列、临时数据组、Matrix 和 Excel 工作簿列等。
- 单击 Delete 按钮,将删除 Available Data 列表中激活的数据组,同时删除相应的 Worksheet 中列的数据。
- 选中 Sort 复选框,Available Data 列表中数据组按照字母先后顺序排列,不选中的话,按照数据组生成的先后顺序排列。
- 选中 Show current folder only 复选框,则 Available Data 列表只显示当前激活的 Project 文件夹中的数据组,不选中,则显示 Project 文件中的所有数据组。
- Layer Contents 列表中显示了用户选中的所有用于制图的数据组。
- Up 和 Down 按钮,这两个按钮是让用户向下或向下移动 Layer Contents 列表中选中的数据组的。Layer Contents 列表中的数据次序决定了 Graph 窗口中的制图次序,列表中最上面的数据组首先在 Graph 窗口中制图,从上往下依次制图。Layer Contents

列表中数据组从上到下的次序,为 Graph 窗口中图形从后到前的次序。要想使某组数据图形出现在 Graph 窗口中的最上面,则将该数据组移动到列表中最下面。

- Layer Properties 按钮,单击该按钮,打开 Plot Details 对话框,用户在该对话框中可以编辑层及图形的显示属性。该窗口将在后面详细介绍。
- Plot Associations 按钮,单击该按钮,打开 Select Columns for Plotting 对话框,如图 4.5 所示。但如果当前激活的是 3D 制图模板,该按钮处于不激活状态。
- Group/Ungroup 按钮,该按钮只有在 Layer Contents 列表中同时选中两个以上数据组时才处于激活状态,单击该按钮可以组合或解除组合选中的数据组。该功能可以自动设置组合后数据组的制图颜色和线条类型等。
- Edit Range 按钮,选中 Layer Contents 列表中一个数据组时,激活该按钮,单击该按钮,打开 Plot Range 对话框,如图 4.10 所示,在这里指定 Worksheet 的开始和结尾行,编辑数据组在 Graph 窗口中的显示范围。
- Show Range 复选框,选中该复选框,则会显示 Layer Contents 列表中的所有数据组当前的显示范围,在数据组后面添加[数字:数字],如图 4.9 中的 g6301si_d[1:500],表示制图时的数据范围。
- Rescale on OK 复选框,选中该复选框,当关闭 Layer n 对话框进行制图时,Origin 将根据数据组的范围重新定标 Graph 窗口中的坐标轴;如果不选,Origin 保留当前的坐标轴刻度设置。

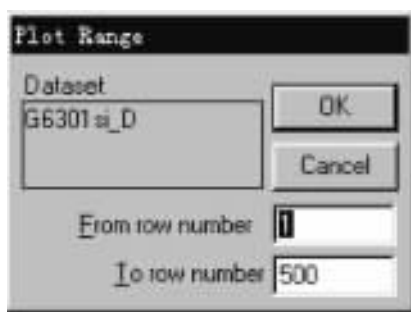


图 4.10 Plot Range 对话框

4.3.4 选中 Worksheet 数据的情况下制图

如果已经选中了 Worksheet 数据,激活 Graph 窗口,选择 Graph | Add Plot to Layer | Graph 类型,那么就可以将选中的数据进行制图了。这种方法尤其适合于使用部分 Worksheet 数据制图。

4.3.5 使用 Draw Data 工具制图

Origin 中,可以使用 Tool 工具条中的 Draw Data 按钮进行制图,方法如下:

- 单击 Tool 工具条中的 Draw Data 按钮.
- 在 Graph 窗口中的合适位置,此时鼠标变成形状,单击鼠标,在 Data Display 工具中显示当前位置的坐标值,双击鼠标,生成一个点;
- 单击 Tool 工具条中的其他按钮退出制图模式。

使用 Draw Data 制成的图形可以和其他方式制成的图形一样进行分析处理。

使用 Tool 工具条中的 Draw Data 按钮制成图形的数据组以 Drawn_b 形式进行命名的,其中的 n 是 1,2,3 等数字。要显示这组数据的话,在 Graph 窗口的绘图区右击鼠标,从快

捷菜单中选择 Go to Drawn, 或双击图形, 在打开的 Plot Details 对话框中单击 Worksheet 按钮, 这样就打开了一个 Worksheet 窗口包含生成的图形的数据。

4.3.6 用鼠标将文件数据拖入 Graph 窗口中

用户可以直接将 ASCII 和 Thermo Galactic SPC 数据文件用鼠标拖到 Graph 窗口中, 并可以对其选项进行修改, 方法和将文件拖到 Worksheet 窗口类似, 具体方法参考第 3 章。

Origin 还提供了鼠标拖动添加其他文件类型的功能。当拖动时, Origin 检查 Origin 文件夹中的 DOFILE. OGS 脚本文件, 主要查找文件中的 [OnOpenExtension] 部分, 其中的 Extension 是文件的扩展名, 当用户拖动文件时, Origin 路由该文件处理导入文件的扩展类型。

用鼠标也可以将 Worksheet 中的数据拖动到 Graph 窗口中。选中 Worksheet 中的数据, 将鼠标放在选中的数据边上, 等鼠标变成  形状, 按下左键, 拖动到 Graph 窗口中, 然后释放鼠标, 就完成了制图过程。

在拖动制图时, Origin 根据列的设置决定如何制图, 比如用鼠标将 Y 列的部分数据拖动到 Graph 窗口, Origin 将使用该列和对应的 X 列进行制图。如果没有 X 列, Origin 将行号作为 X 值按照默认的模板进行制图。

如果用户拖动了几个 Y 列的数据, Origin 将作为整体进行制图, 调整显示属性。

当然用鼠标拖动方法制图的模板也可以进行设置, 选择 Tools| Options, 打开 Options 对话框中的 Graph 选项卡, 在 Drag and Drop Plot 下拉列表中进行选择, 如图 4.11 所示。

- Line, Scatter 或 Line+Symbol, 生成 Line, Scatter 或 Line+Symbol 图形;
- Current, 使用 Graph 模板生成图形。

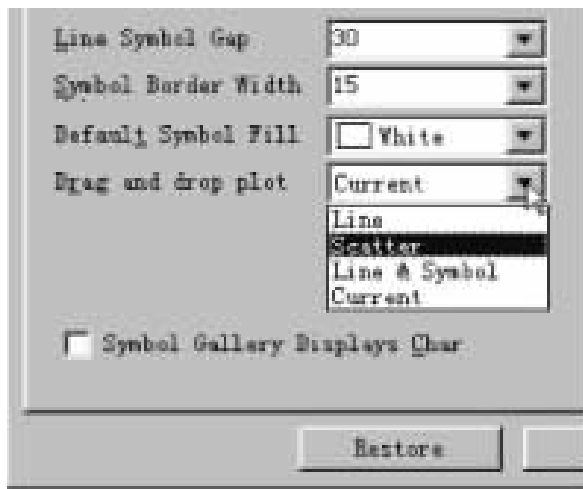


图 4.11 Options 对话框中 Graph 选项卡

4.3.7 添加误差线

Origin 提供了三种方法添加误差线:

- ① 激活 Graph 窗口, 选择 Graph| Add Error Bars, 添加误差线;

- ② 使用 Select Columns for Plotting 对话框中的   按钮, 设置为误差列;
 - ③ 从 Worksheet 列中进行设置。
- 使用 Add Error Bars 命令添加误差线

即使当前的 Worksheet 没有误差列, 也可以用该命令添加误差线, 激活 Graph 窗口, 选择 Graph | Add Error Bars, 打开 Error Bars 对话框, 如图 4.12 所示。

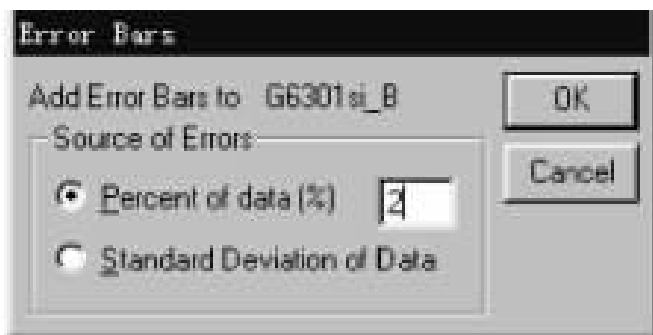


图 4.12 Error Bars 对话框

在该对话框中提供了两种误差线的计算方法:

- Percent of data (%) 选项, 根据每个点数值的百分比计算出误差线的大小。在后面的文本框中添入合适的数值就可以了, 比如 2, Origin 计算 Y 数值的 2% 来作为误差值, 添加到 Graph 窗口中, 并且同时在 Worksheet 的相应列 (这里是 B 列) 的右面添加误差列。如图 4.13 所示。
- Standard Deviation of Data 选项, Origin 根据每个制图数据点计算出标准差, 添加到 Graph 窗口中, 并在 Worksheet 的相应列的后面右面添加误差列。

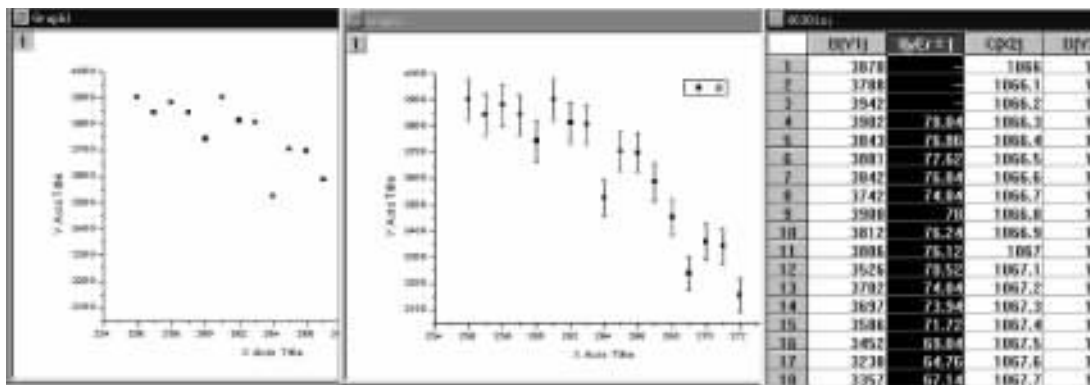


图 4.13 添加误差线前后比较

- Select Columns for Plotting 对话框添加误差线

利用 Select Columns for Plotting 对话框可以将 Worksheet 中的数据设置为误差值, 打开 Select Columns for Plotting 对话框, 如图 4.5 所示, 其设置方法参考 4.2.3 小节中的说明。

- Set an X/Y error 命令设置误差线

先在 Worksheet 窗口中将某列设置为误差列, 然后使用 Layer n 对话框将其添加到 Graph 窗口中。

4.3.8 屏蔽曲线中的数据

在图形中如果个别数据点属于奇点, 在分析或拟合过程中想滤掉, 或是仅分析图形中的部分数据, 那么 Mask 工具条可以帮助实现这一功能。被屏蔽的数据既可以是单个点, 也可以是一个数据范围。

在激活 Graph 窗口的情况下, 只有曲线是 scatter 或 line+symbol 模板格式时才能使用 Mask 工具。若在 Origin 窗口中没有该工具条, 则选择 View | Toolbars, 在弹出的 Custom Toolbar 对话框中选中 Mask 工具条复选框。

屏蔽曲线中数据点的操作步骤如下:

- ① 激活 Graph 窗口, 单击 Mask 工具条中的 Mask Range 命令按钮, 将鼠标放入 Graph 窗口中, 变成形状, 同时在曲线的两端出现数据选择标志;
- ② 用鼠标移动, 此时在 Data Display 中显示数据点的坐标, 选择好范围后, 双击鼠标, 或按 Enter 键, 则选中的数据点变成红色, 同时 Worksheet 窗口中相应的数据所在的单元格变成红色背底, 那么在分析过程中不包括这些数据点, 如图 4.14 所示;

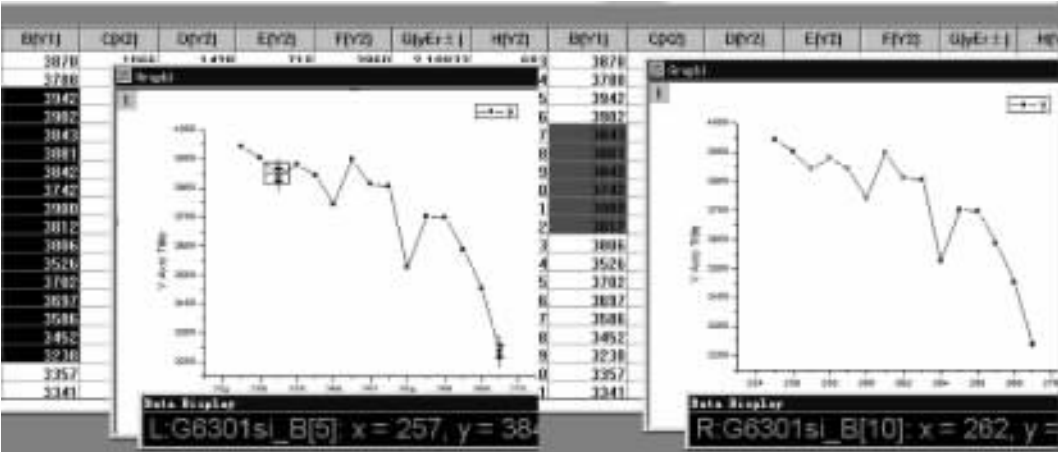


图 4.14 屏蔽前后数据点的比较

- ③ 单击 Mask 工具条中的 Change Mask Color 命令按钮, 被屏蔽的数据点变成绿色, 再单击依次变为其他颜色;
- ④ 单击 Mask 工具条中的 Hide/Show Masked Point 命令按钮, 则被屏蔽的数据点隐藏, 如图 4.15 所示, 再次单击该按钮, 显示屏蔽的数据点。其他按钮工具的功能参考附录 A。

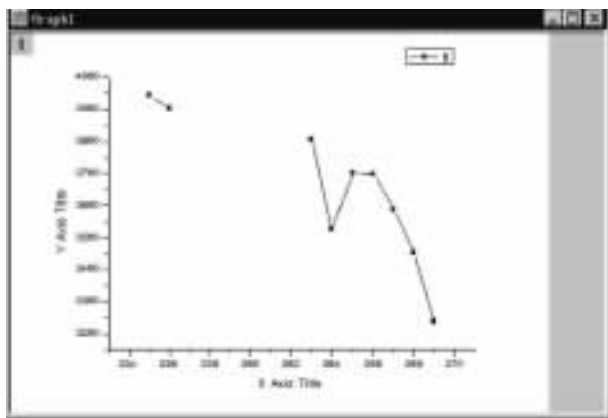


图 4.15 隐藏被屏蔽的数据点

4.3.9 数据浏览

Origin 的 Tools 工具条提供了几种工具,用来浏览、选择曲线上的数据。

● 数据的选择

Data Selector(数据选择)工具的功能是选择数据曲线的一段,进行分析处理。

- 单击 Tools 工具条中的 Data Selector 命令按钮 , 则该标志出现在数据曲线的两端,此时如果 Data Display 工具没有打开,则会自动打开。
- 为了突出感兴趣的数据段,移动数据选择标志,方法有:①用鼠标拖动标志,移动到合适的位置;②先用键盘的左右键选择相应的左右数据选择标志,Ctrl+左右键可以将选定的数据选择标志向左右移动一个数据点,Ctrl+Shift+左右键一次移动 5 个数据点。
- 使用 Esc 键或单击 Tool 工具条中的 Pointer 按钮  退出选择状态。这时  标记变成  形状,如图 4.16 所示,这时分析操作只对选中的数据范围起作用。
- 要隐藏选中范围以外的曲线部分,选择 Data | Set Display Range。
- 要取消选中部分曲线,选择 Data | Reset to Full Range。

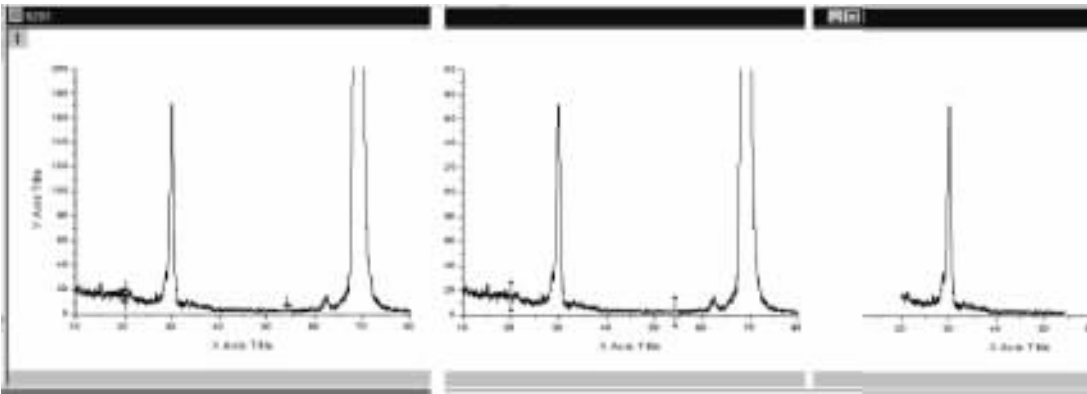
● 数据读取

Data Reader(数据读取)工具的功能是显示曲线上选定点的 X,Y,Z 的坐标值。

- 单击 Tools 工具条中的 Data Reader 命令按钮 , 鼠标变成  形状,如果 Data Display 工具没有打开的话会自动打开;
- 用鼠标选择曲线上的点,则在 Data Display 框内显示选定点的坐标值,如图 4.17 所示;
- 增加  标志中间十字的大小,按 Space 键;
- 可以使用键盘上的左右键移动选中数据位置;
- 使用 Esc 键或单击 Tool 工具条中的 Pointer 按钮  退出选择状态。

Data Display 工具的内容含义如下:

- Smoothed7 为数据分析类型,表示平滑,A6291 为相应的 Worksheet 名称,B 为列



(a)调整 Data Selector 命令按钮后 (b)退出选择状态 (c)隐藏选中范围以外的曲线部分

图 4.16 选中曲线数据范围

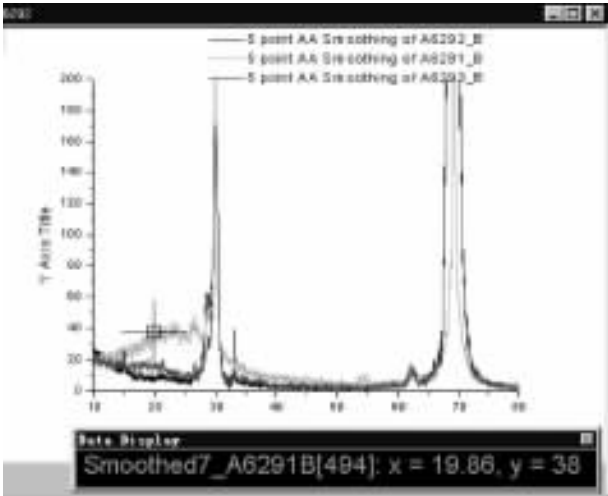


图 4.17 Data Reader 工具及 Data Display 工具

的名称;如果曲线为原始数据,该部分表示为 A6291_B;

- 494 为数据点的序号;
- $X=19.86, Y=38$ 为该数据点的坐标值。

● 屏幕读取

Screens Reader(屏幕读取)工具的功能是显示屏幕上任意选定点的 X, Y 坐标值。

- 单击 Tools 工具条中的 Screens Reader 命令按钮, 鼠标变成形状;
- 用鼠标单击屏幕上任意点,则在 Data Display 框内显示选定点的坐标值,如图 4.18 所示;
- 增加标志中间十字的大小,按 Space 键;
- 使用 Esc 键或单击 Tool 工具条中的 Pointer 按钮退出选择状态。

● 局部放大和恢复

用户有时希望仔细观察感兴趣的某一段数据曲线,尤其是在数据点很多的情况下更是如此。

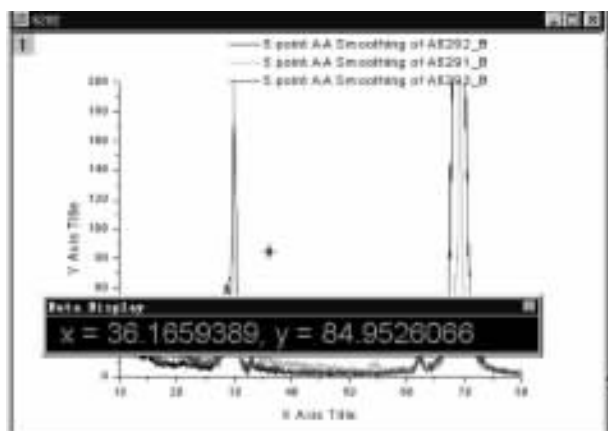


图 4.18 Screens Reader 工具

- 单击 Tools 工具条中的 Zoom In 命令按钮, 鼠标变成形状;
- 按下鼠标左键并拖动, 在 Graph 窗口中感兴趣的地方画一个矩形, 如图 4.19 左图所示;
- 释放鼠标, 完成图形放大操作, 同时坐标轴重新定标, 如图 4.19 右图所示;

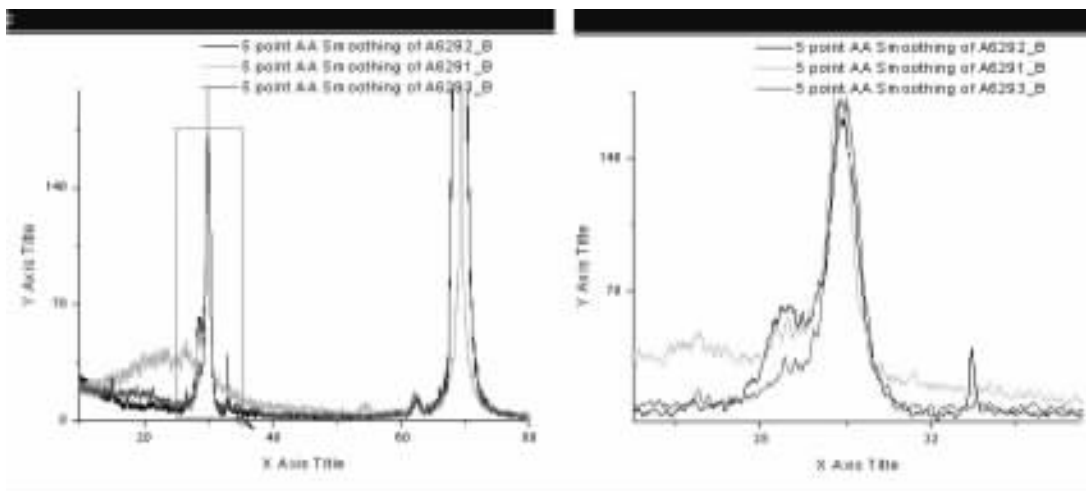


图 4.19 选择数据区域及其放大后的曲线

- 如果在放大的图形中还需要放大某部分, 可以重复上面的操作;
- 要恢复到原来的视图, 单击 Tools 工具条中的 Zoom Out 命令按钮, 或双击 Zoom In 命令按钮。在执行多次放大操作的情况下, 单击按钮恢复到上一次的放大操作, 双击按钮, 恢复到图形的初始状态;
- 如果要在新窗口中显示放大的图形, 按住 Ctrl 键拖动鼠标画矩形框, 那么 Origin 打开 Enlarged Graph 窗口显示放大部分, 并在原图中将放大部分用阴影显示, 如图 4.20 所示;
- 如果想改变放大部分的位置或放大区域的大小, 用鼠标拖动矩形或调整其大小,

则在 Enlarged 窗口中也作相应的改动；

- 分析结束后,选中图中的矩形并删除。

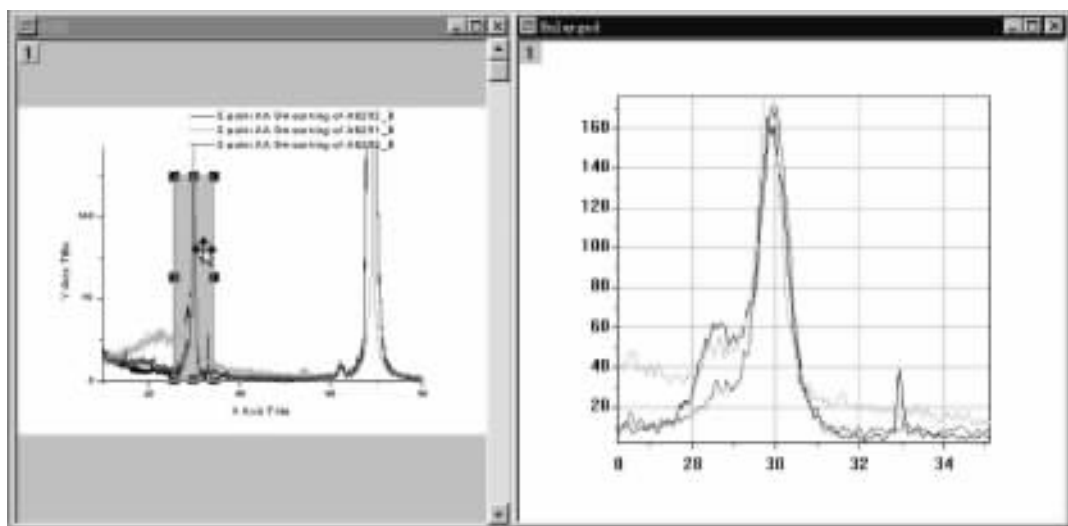


图 4.20 在新 Enlarged 窗口中预览放大的图形

● 缩 放

如果想在同一 Graph 窗口中显示数据图形及其放大部分,就可以使用 Zoom(缩放)工具 。

- 选中相应的 Worksheet 数据列；
- 单击 2D Graphs Extended 工具条中的 Zoom 按钮 , Origin 打开一个带有两个图层的 Graph 窗口,图层 1 显示整条数据曲线,图层 2 显示放大的曲线部分,由图层 1 中的矩形选框决定；
- 用鼠标可以移动矩形框的位置或调整矩形框的大小,图层 2 中显示也作相应的调整,如图 4.21 所示。

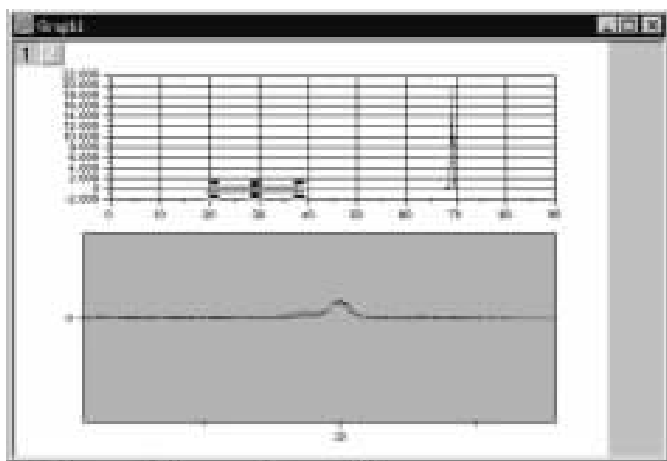


图 4.21 数据曲线的放大

● Zoom In 和 Zoom Out 工具

在 Graph 窗口中显示放大整个图形。

- 单击 Graph 工具条中的 Zoom In 按钮 ，然后单击 Graph 窗口中合适的位置，Origin 放大页面，如果想看到其他地方的图形拖动滚动条，如图 4.22 所示；
- 缩小图形，单击 Zoom Out 按钮 ；
- 恢复到原来状态，单击 Whole Page 按钮 。

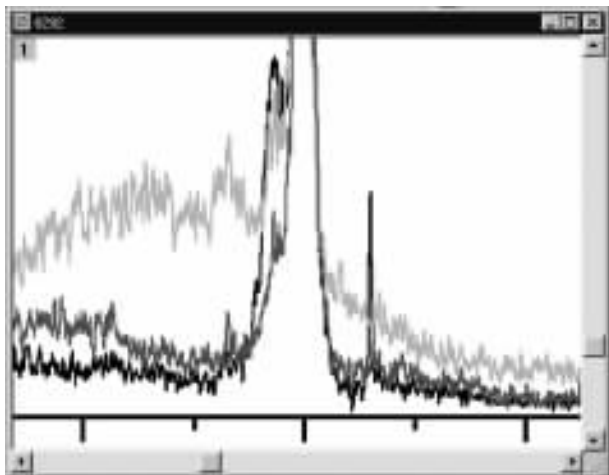


图 4.22 在 Graph 窗口中放大图形

4.4 线性拟合

线性拟合是一种特殊的曲线拟合。如果激活了 Worksheet 窗口并选中了 Y 列，Origin 将该列默认为因变量，而将对应的 X 列默认为自变量。如果激活了 Graph 窗口，则回归分析只针对激活的数据曲线，拟合后，Origin 生成一个拟合数据隐藏的 Worksheet 窗口，在 Graph 窗口中制图并将拟合结果显示在 Results Log 窗口中。

当激活 Graph 窗口进行线性拟合或非线性拟合时，首先激活要拟合的曲线，在菜单命令 Data 下面列出了窗口激活层中的所有数据组，前面带“√”的为当前激活的数据组。

选择好数据组后，如果必要的话，还要使用 Tool 工具条中的 Data Selector 按钮  选择要拟合的数据范围。

4.4.1 线性回归拟合

将选中的数据点拟合为直线，选择 Analysis | Fit Linear，那么 Origin 将曲线拟合为直线，以 X 为自变量，Y 为因变量，回归拟合的函数形式为：

$Y = A + BX$ ，其中 A, B 为参数，由最小二乘法确定。

A 为截距， $A = \bar{Y} - B\bar{X}$ ，其中 $\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$ ， $\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i$ 。

$$B \text{ 为斜率, } B = \frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}。$$

拟合后 Origin 生成一个隐藏的拟合数据 Worksheet 文件,在 Graph 窗口中制图,并将拟合日期、拟合方程以及一些相应的参数显示在 Results Log 窗口中,如图 4.23 所示。
这里只有一条曲线,若同一层中有几条曲线,则该操作只对激活的曲线进行拟合。

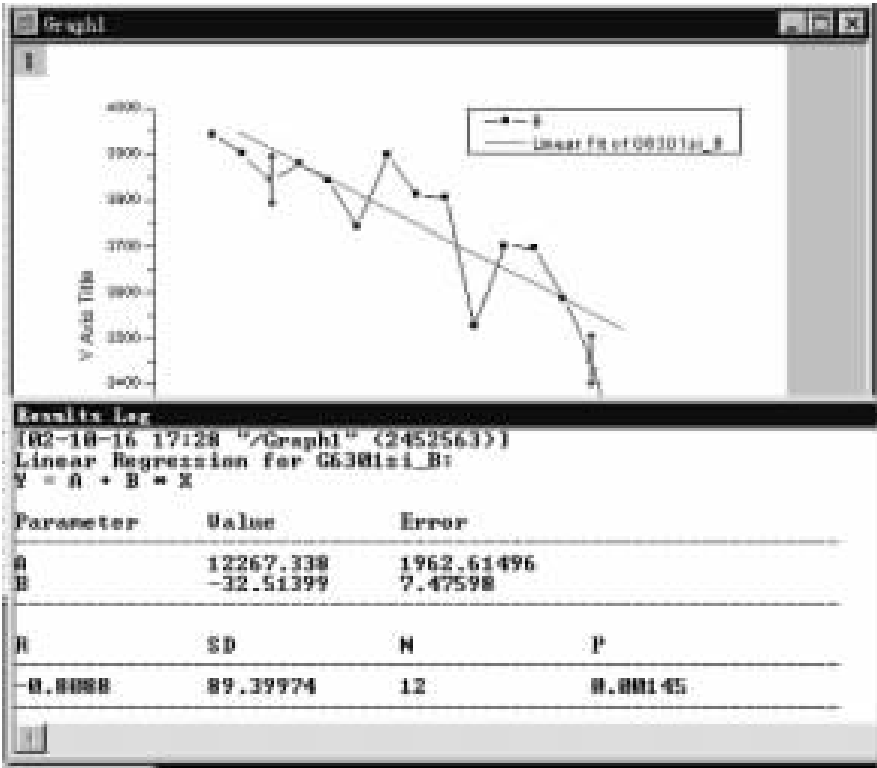


图 4.23 线性回归拟合及其结果记录

在 Results Log 窗口中的每个条目都包含日期/时间、文件位置、分析类型和计算结果。

- A 截距及其标准误差；
- B 斜率值及其标准误差；
- R 相关参数；
- N 数据点数目；
- P 概率值；
- SD 拟合的标准差,标准差定义为: $\sqrt{\sum_{i=1}^N [Y_i - (A + BX_i)]^2 / (N - 2)}$ 。

注 为了与 Origin 7.0 软件相一致,本书叙述中,若是窗口和菜单中的名称,则和软件保持一致,不区分正斜体,采用正体;若是变量,则在行文中采用斜体;在制图时,采取与软件相一致的坐标 XYZ 轴书写方式。

4.4.2 多项式回归

选择 Analysis| Fit Polynomial, 打开 Polynomial Fit to...对话框, 用户在对话框中指定多项式的阶(Order, 允许值为 0~9)、拟合曲线绘制的数据点数、拟合曲线 X 的最大值和最小值以及选择是否在 Graph 窗口中显示拟合公式, 如图 4.24 所示。

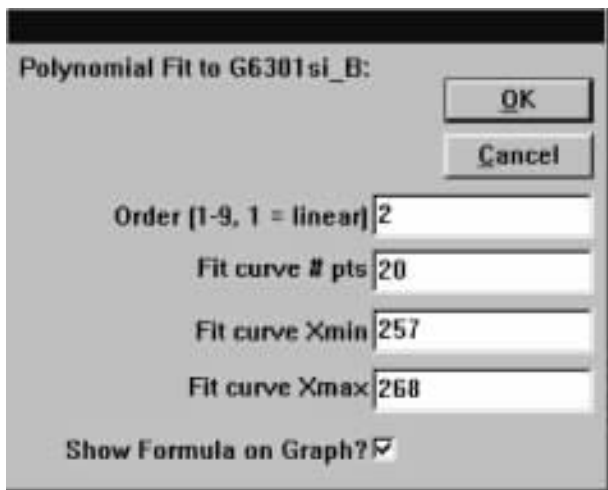


图 4.24 多项式拟合对话框

多项式的形式是 $Y = A + B_1X + B_2X^2 + B_3X^3 + \dots + B_kX^k$, 单击 OK 按钮拟合后, 生成 Worksheet 文件, 在 Graph 中制图并在 Results Log 窗口中显示参数, 如图 4.25 所示。

- A, B_1, B_2 等 参数值及其标准误差;
- R-Square $R\text{-Square} = (SYY - RSS) / SYY$;
- N 数据点数目;
- P 概率值;
- SD 拟合的标准偏差。

最后用鼠标将图例和公式拖动到合适的位置。

对于给定的数据组 $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, N, x$ 为自变量, y 为因变量, 假定剩余误差 $res_i = y_i - (b_0 + b_1x_i + b_2x_i^2 + \dots + b_kx_i^k)$ 符合均值为 0、方差为 σ_i^2 的高斯分布, 并令 $w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$, 根据最小二乘估计原理, 回归系数应使得 χ 函数平方最小 $\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(res_i)^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^N w_i (res_i)^2$ 。定义下列变量:

$$sxy = \sum_{i=1}^N w_i x_i y_i, sxx = \sum_{i=1}^N w_i x_i^2, syy = \sum_{i=1}^N w_i y_i^2, sx = \sum_{i=1}^N w_i x_i, sy = \sum_{i=1}^N w_i y_i$$

$$SXY = \sum_{i=1}^N w_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}), SXX = \sum_{i=1}^N w_i (x_i - \bar{x})^2, SYY = \sum_{i=1}^N w_i (y_i - \bar{y})^2$$

其中的平均值为 $\bar{x} = \frac{sx}{w_{tot}}, \bar{y} = \frac{sy}{w_{tot}}, w_{tot} = \sum_{i=1}^N w_i$, 相关系数为 $r = \frac{SYY}{\sqrt{SXY} \sqrt{SYY}}$ 。

拟合的参数可以表达为矩阵形式: $b = (A^T A)^{-1} A^T Y$, 其中的系数为:

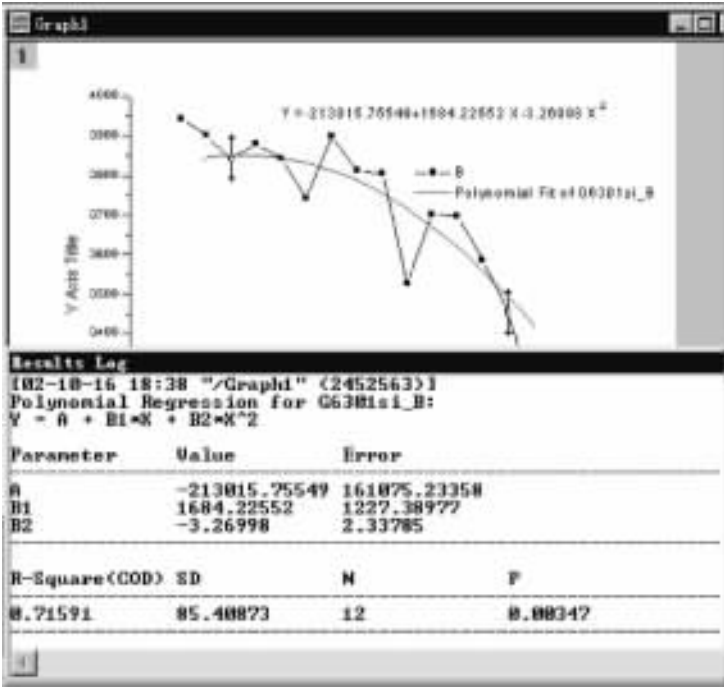


图 4.25 多项式回归拟合及其结果记录

$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & \dots & \frac{x_1^k}{\sigma_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{1}{\sigma_n} & \dots & \frac{x_n^k}{\sigma_n} \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \sigma_1 \\ \vdots \\ y_n \\ \sigma_n \end{bmatrix}$$

剩余误差的平方和为 $RSS = \sum_{i=1}^N W_i (res_i)^2$, 那么标准差为 $SD = \sqrt{\frac{RSS}{n - (k + 1)}}$

4.4.3 多重回归

多重回归是针对 Worksheet 数据而言的。选中一列或几列, 选择 Statistics| Multiple Regression, 打开确认对话框, 单击 OK 按钮执行多重回归分析。

多重回归分析表达式为: $Y = A + B_1 X_1 + B_2 X_2 + \dots + B_k X_k$, Origin 将列的自变量默认为相应的 X 列, 将分析的结果及变量统计分析表显示在 Results Log 窗口中。

- A, B₁, B₂ 等 参数值及其标准误差;
- t-Value 检验参数是否为 0, t 是参数/标准误差;
- P 概率值;
- R-Square $R\text{-Square} = (SYY - RSS) / SYY$;
- Adj. R-Square $Adj. R\text{-Square} = 1 - \frac{(1 - R\text{-Square})(N - 1)}{N - k - 1}$;
- Root-MSE Root-MSE 是标准偏差。

对于给定的数据组 (Y(i), X₁(i), X₂(i) ... X_k(i)), i = 1, 2, ... N, 所有的 X 列为自变量, Y

列为因变量,拟合模型为: $Y = b_0 + b_1 X_1 + \cdots + b_k X_k$ 。假定剩余误差 $res_i = y_i - (b_0 + b_1 x_{1i} + b_2 x_{2i} + \cdots + b_k x_{ki})$ 符合均值为 0、方差为 σ_i^2 的高斯分布,极大似然估计系数通过 χ 函数最小平方 $\chi^2 = \sum_{i=1}^N (res_i)^2$ 得到。

拟合的参数可以表达为矩阵形式: $b = (A^T A)^{-1} A^T Y$, 其中的系数为:

$$b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{nl} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

剩余误差的平方和为 $RSS = \sum_{i=1}^N (res_i)^2$, 那么标准差为 $SD = \sqrt{\frac{RSS}{n - (k + 1)}}$

4.4.4 线性拟合工具

除了上面的操作外,Origin 还提供了线性拟合工具。选择 Tools| Linear Fit, 打开 Linear Fit 工具, 单击 Operation 标签, 进入操作选项卡, 如图 4.26 所示。



图 4.26 Linear Fit 工具的 Operation 和 Settings 选项卡

● Linear Fit 工具的 Operation 选项卡

- 若选中 Through Zero 复选框, 则进行初始回归分析; 若不选, 则执行标准线性回归分析。
- 选中 Fix 复选框, 按照文本框中指定斜率值进行拟合; 若不选, 执行标准线性回归分析。该选项和 Through Zero 复选框不能同时选中。
- 选中 Error as Weight 复选框, 使用误差值作为权重。如果激活的是 Worksheet 窗口, 必须选中一列 Y 误差列; 如果激活的是 Graph 窗口, 图中必须有误差线。
- 当选中 Error as Weight 复选框时, 就激活了 Use Reduced Chi² 复选框, Use

Reduced Chi² 复选框只对拟合过程中的误差参数有影响,而对拟合过程和其他参数没影响。如果不选 Use Reduced Chi² 复选框(推荐用此设置),误差参数默认为 $\text{SQRT}(\text{cov}_{ii})$; 如果选中此复选框,则误差参数为 $\text{SQRT}(\text{cov}_{ii} * (\text{ChiSqr}/\text{DOF}))$ 。

- 选中 Confidence Bands 复选框,拟合时同时绘制数据上、下可信范围,如图 4.27 所示。可信范围的计算方法为: $\hat{Y}_{X_0} \pm t(1 - \frac{\alpha}{2}, n - 2)s\{\hat{Y}_{X_0}\}$, 其中的 $s\{\hat{Y}_{X_0}\} =$

$$\text{MSE} \left[\frac{1}{n} + \frac{(X_0 + \bar{X})^2}{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2} \right], \hat{Y}_{X_0} \text{ 是 } X_0 \text{ 无偏估计的期望值。}$$

- 选中 Prediction Bands 复选框,拟合时同时绘制数据上、下预期范围。预期范围的计算方法为: $\hat{Y}_{X_0} \pm t(1 - \frac{\alpha}{2}, n - 2)s\{pred\}$, 其中的 $s\{pred\} = \text{MSE} + s^2\{\hat{Y}_{X_0}\}$, $\hat{Y}_{X_0}$ 是 X_0 无偏估计的期望值。该范围大于可信范围,如图 4.27 所示。

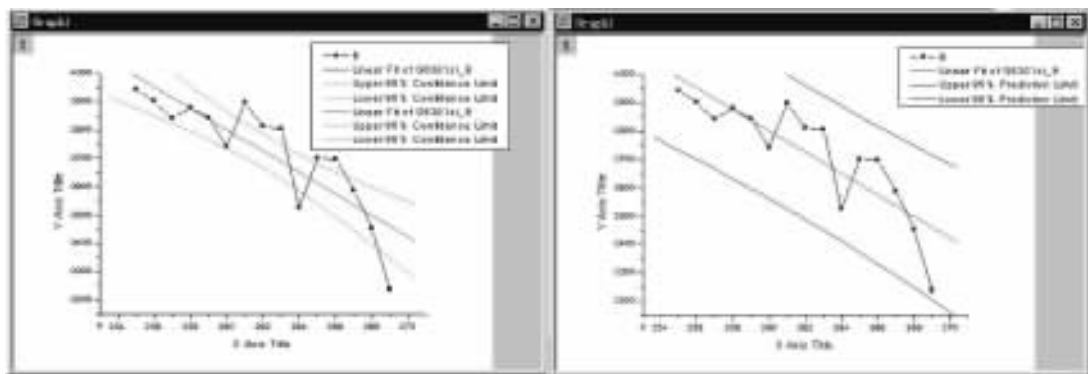


图 4.27 选择 Confidence Bands(左) 和 Prediction Bands (右)复选框后的拟合结果

- 单击 Fit 按钮,Origin 根据设置进行线性回归拟合。
- Find X 和 Find Y 按钮,如果在 Find X 文本框中输入 X 值,单击 Find Y 按钮,则会输出对应的 Y 值;相反,如果输入 Y 值单击 Find X,则会输出对应的 X 值。输出结果是 Origin 根据拟合公式计算的,输入的数据可以在 Graph 图形的显示范围外。

● Linear Fit 工具的 Settings 选项卡(如图 4.26 所示)

- 在 Points 文本框中填入拟合直线点的个数。
- Range 文本框中的数字表示 Graph 窗口中拟合直线在两端多于曲线 X 值范围的百分数,比如本例的 X 范围是 255~269,填入的 Range 是 10,Graph 窗口中显示的拟合直线 X 最小值是 $255 - (269 - 255) \times 10\% = 253.4$,最大值是 $269 + (269 - 255) \times 10\% = 270.4$,如图 4.27 所示。
- 在 Confidence 文本框中填入可信值,为可信范围或预期范围,图 4.27 中的可信范围和预期范围都是 95%。
- 选中 Apparent Fit 复选框,Origin 将根据现有的坐标刻度,按照指数衰减进行直

线拟合,并按照对数刻度进行制图。

- 选中 Span X Axis 复选框,计算拟合直线在整个 X 轴坐标范围内进行,并在整个范围内进行制图。
- 选中 Residual Data 复选框,则在相应的 Worksheet 窗口中生成两列,包含数据的 Fit(Y)列和包含 Residual(剩余误差)的 Residual(Y)列。
- 选中 Fit All Curves 复选框,拟合本层中的所有曲线。
- 在 Statistics Output 中选中 Simple 单选按钮的话,在 Results Log 窗口中只显示简单的拟合结果,包括截距、斜率、标准误差、R(correlation coefficient——相关系数)、标准偏差、拟合图形的点数和 P 值。
- 若在 Statistics Output 中选中 Advanced 单选按钮,在 Results Log 窗口中会显示所有的拟合结果,除了上面介绍的外,还显示 t-检验值和 ANOVA(analysis of variance,方差分析)列表。

选择 Tools| Polynomial Fit,打开 Polynomial Fit 工具,单击 Operation 标签,进入操作选项卡,如图 4.28 所示。其中的命令和 Linear Fit 工具的命令相同,这里就不再赘述了。

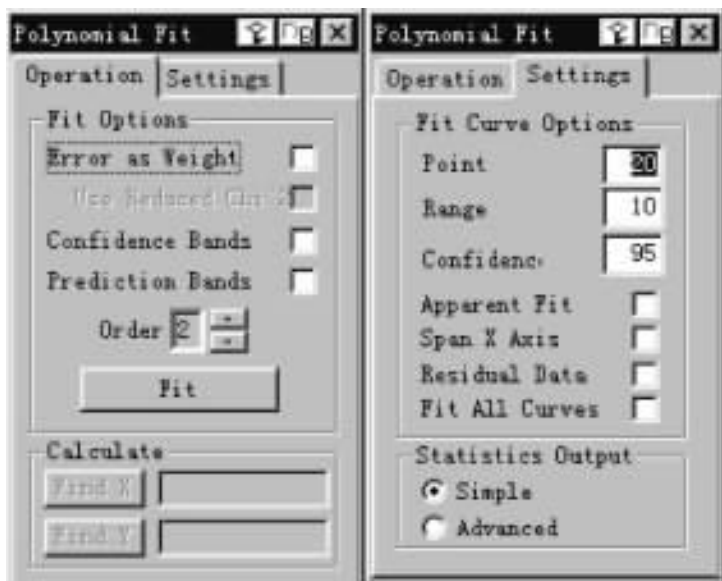


图 4.28 Polynomial Fit 工具的 Operation 和 Settings 选项卡

4.5 函数制图

Origin 提供了函数定义并将函数制图的功能,在 Function Graph 窗口中进行。可以使用 Origin 中的标准模板或自定义模板制图。

4.5.1 在 Graph 窗口中绘制函数曲线

激活 Graph 窗口,选择 Graph| Add Function Graph,打开 Plot Details 对话框如图 4.29

所示,对话框左边的是 Graph 窗口各个图形元素的树形结构,同时出现函数图标。下面介绍右边 Function 选项卡各个按钮及文本框的功能。

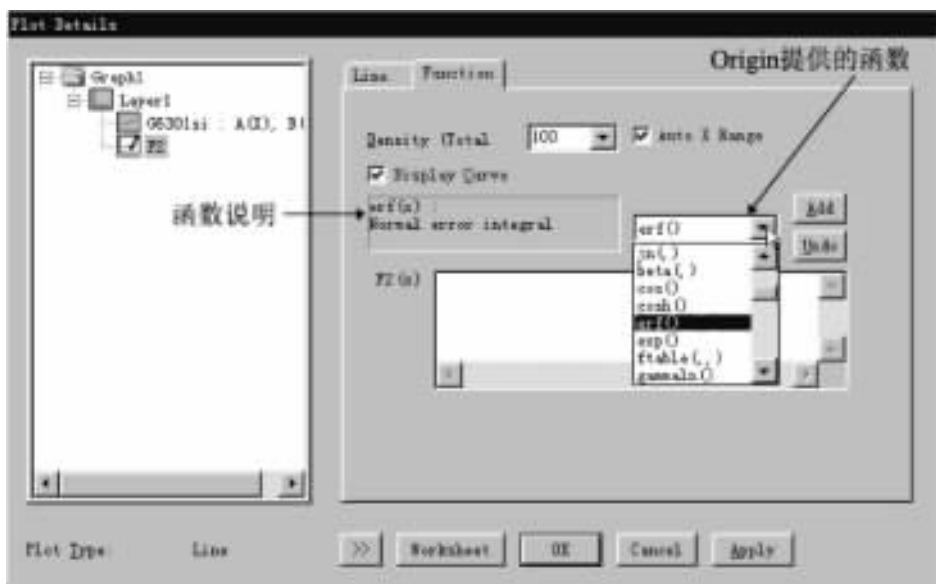


图 4.29 Plot Details 对话框中的 Function 选项卡

- Density (Total Points)后面的下拉列表中指定函数图形绘制的点数。
- Auto X Range 和 Display Curve 复选框供选择 Graph 窗口中函数预览的范围。
- 在函数控制框的下拉列表中,Origin 提供了大量的数学函数和统计函数,选中其中的一个,就在左边的提示框中出现该函数的说明。选中函数后,单击 Add 按钮,该函数就出现在 Fn(x)文本框中。除了 Origin 提供的函数外,用户可以直接在 Fn(x)文本框中使用 Origin 能够识别的操作符键入函数,或使用自定义的函数。
- 最后单击 OK 按钮完成函数制图。

4.5.2 在 Function Graph 窗口中制图

在 Function Graph 窗口中制图,首先单击 Standard 工具条中的 New Function 按钮 , 打开 Function graph 窗口和 Plot Details 对话框中的 Function 选项卡。

在 Function Graph 窗口中,用户可以通过双击鼠标或右击鼠标进行编辑图形中的组成部分,也可以使用窗口上面的四个按钮进行编辑。

- 单击 New Function Button 按钮,打开 Plot Details 对话框中的 Function 选项卡,在 Fn(x)本框中键入著名 RKKY 函数 $-(\sin(x)-x * \cos(x))/x/x/x/x$,单击 OK 按钮。
- 单击 Rename Button 按钮,打开重命名文本框,在文本框中键入 RKKY。
- 单击 Polar/Cartesian 按钮,图形在笛卡儿坐标系和极坐标系之间转换。若当前是极坐标系,单击 Set Angular Range 按钮打开 Angular Range 对话框,编辑起始和结尾角度及递增步长值,如图 4.30 所示。另外两个按钮   分别是表示极坐标图形沿顺时针和逆时针方向显示。

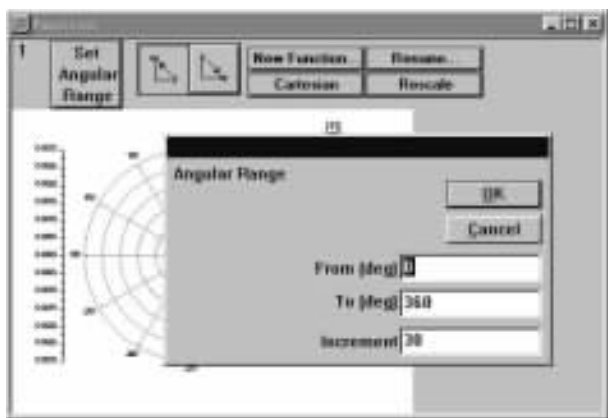


图 4.30 极坐标系及 Angular Range 对话框

- 单击 Rescale 按钮,将重新调节坐标刻度。如果需要的话,还得对图形进行调整,最后的显示效果如图 4.31 所示。

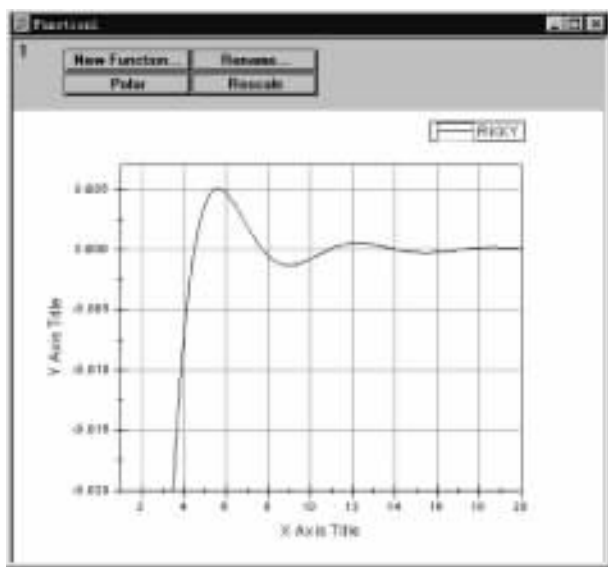


图 4.31 RKKY 函数的 Graph 图形

4.5.3 根据函数生成数据组/点

根据函数生成的曲线描述了函数,但没有相应的数据,用户可以根据需要生成数据组。

在函数曲线上右击鼠标,从快捷菜单中选择 Make Dataset Copy of Function,在打开的 Name the dataset image of Function 对话框中键入 Y 数据组的名称,默认格式为 Worksheet-Name_ColumnName,比如 RKKY_test,单击 OK 按钮,生成 FuncCopy Graph 窗口,图形从 Function Graph 窗口中导入。此图和前面介绍的 Graph 图形类似,其隐含的数据点个数为在 Density (Total Points)设置的个数。

在生成的 FuncCopy Graph 窗口中的图形上右击鼠标,从快捷菜单中选择 Create Work-

sheet DatasetName,Origin 生成一个 Worksheet 窗口来显示图形的 Y 数据组,要显示对应的 X 列,选择 View| Show X Column。X 列数值的递增密度和起始值由 Density (Total Points) 指定函数图形的点数和 Auto X Range 和 Display Curve 复选框中的显示范围决定的。

4.6 分类数据制图

Origin 支持 X 列/Y 列的分类数据制图,制图之前,选中一列,选择 Column| Set as Categorical 或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Set as Categorical。

如果 X 列为分类数据,Origin 生成的 Graph 图形使用分类列作为 X 轴并按照字母顺序标定 X 轴刻度,Y 值绘制在相应的 X 标记处,如图 4.32 所示。

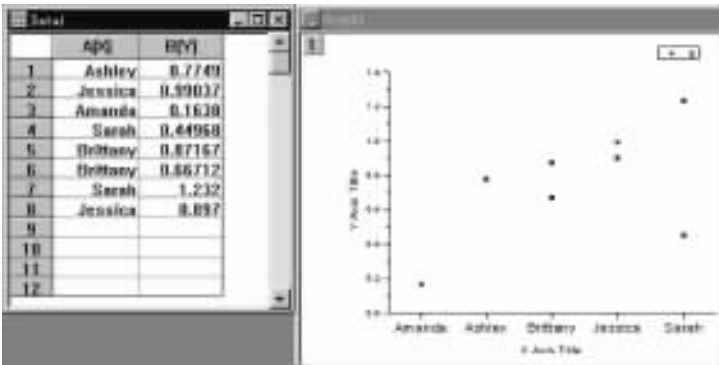


图 4.32 X 分类列制图

如果 Worksheet 中包含有 Y 分类列,并且只有这一个 Y 列的话,用户可以将此列制图,恰好是图 4.32 图形的 X 轴、Y 轴的交换。但如果其中还有其他列的话,用户可以将分类列影射到图形中的数据点上,采用不同的符号、颜色和大小等加以区分。

如图 4.33 中已经将 A(X)和 B(Y)列制成了散点图。为了将这些数据对应的不同的分类列 C(Y)加以区分,打开 Plot Details 对话框中的 Symbol tab 选项卡,在 Shape 和 Symbol Color 下拉列表中编辑形状和颜色,如图 4.34 所示。使用 C 分类列作为符号的颜色和形状,这样就将列中的不同标志区分出来了,如图 4.35 所示。

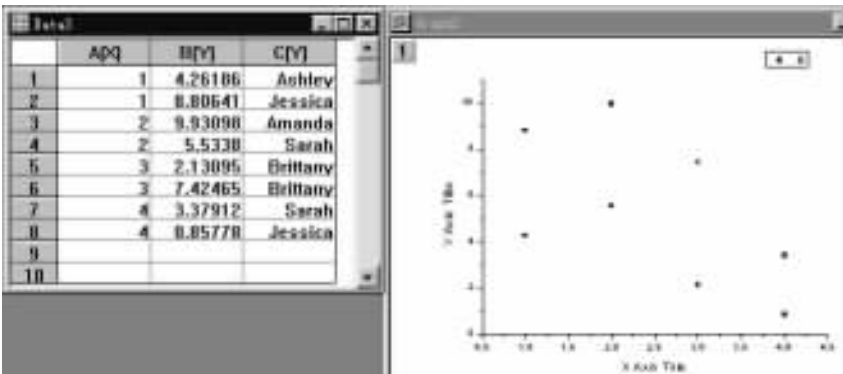


图 4.33 A(X)和 B(Y)列的散点图

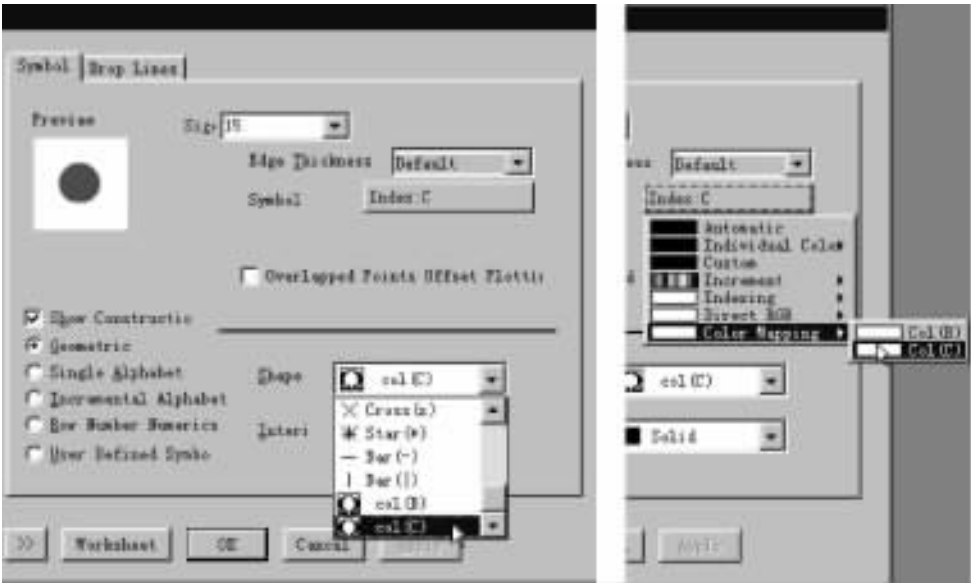


图 4.34 将符号的形状和颜色影射到 C 列

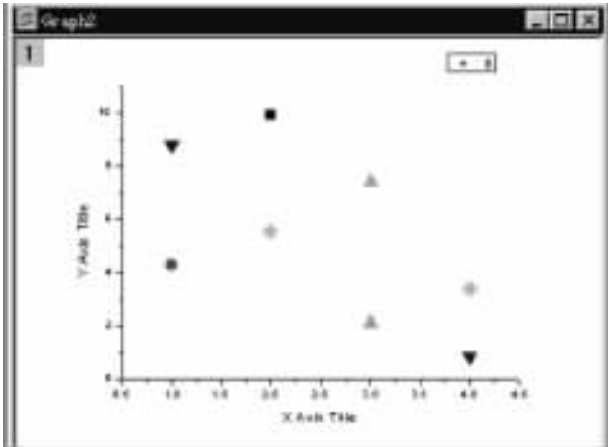


图 4.35 影射后的 Graph 图形

4.7 Graph 模板

Origin 7.0 提供了大量的制图模板,这些模板可以帮助用户很好地进行数据分析,实现数据图形的多种用途。本节就二维图形模板的基本特点和绘制方法做简单介绍。

4.7.1 二维折线、散点、折线+符号图

这类图形是 Origin 中最基本的图形,利于显示数据之间的变化规律。包括多种类型,如折线图、散点图、两端线段图、阶梯图等,下面分别予以说明。

数据要求:要求 Worksheet 中至少有一个 Y 列(或其中的一部分),如果没有设定与该列相关的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值,即将行号作为 X 值。

绘图方法:选中数据,在 Plot 下拉菜单中选择要绘制的图形类型,或直接单击 2D Graphs 工具条或 2D Graphs 扩展工具条中相应的按钮(详细说明参考附录 A)。

- Line(折线图) 将点之间用线段连接起来,如图 4.20 所示,模板文件为 LINE.OTP。
- Scatter(散点图) 只将点用符号标记出来,如图 4.32 所示,模板文件为 SCATTER.OTP。
- Line+Symbol(折线+符号图) 将点用符号标记并用线段连接起来,如图 4.23 所示,模板文件为 LINESYMB.OTP。
- 2 Point Segment(两点线段图) 在连续的两点之间以线段连接,下一组连续的两点则没有相连,数据点以符号显示,如图 4.36 所示,模板文件为 LINESYMB.OTP。

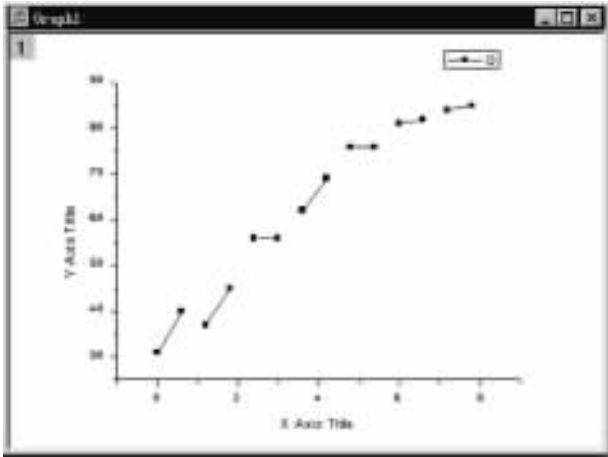


图 4.36 两点线段图

- 3 Point Segment(三点线段图) 在连续的三个数据点之间以线段相连,接着与下一个点之间断开,然后又是三个数据点相连,数据点以符号显示,如图 4.37 所示,模板文件为 LINESYMB.OTP。

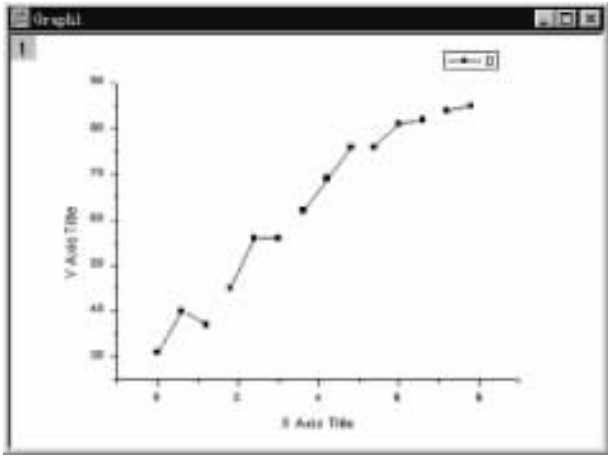


图 4.37 三点线段图

- Horizontal Step(水平阶梯图) 每两个数据点之间由一水平阶梯线相连,两点间是起始为水平线结尾为垂直线的直角连线,数据点不显示,如图 4.38 所示,模板文件为 LINE.OTP。

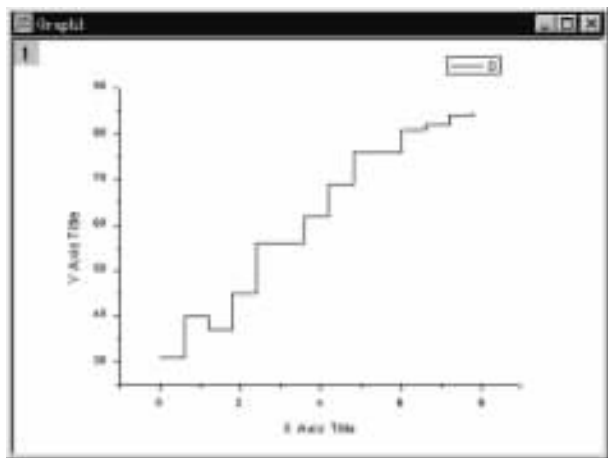


图 4.38 水平阶梯图

- Vertical Step(垂直阶梯图) 与水平阶梯图相反,即两点之间是起始为垂直线结尾为水平线的直角连线,如图 4.39 所示,模板文件为 LINE.OTP。

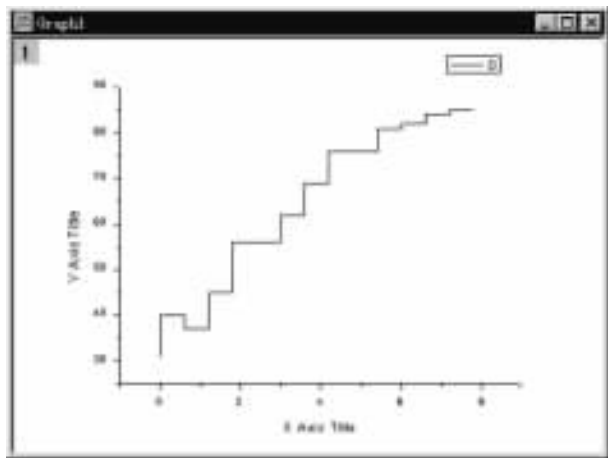


图 4.39 垂直阶梯图

- Vertical Drop Line(垂线图) 数据点以符号显示,并与 X 轴以垂线相连,用以体现不同数据点的大小差异,如图 4.40 所示,模板文件为 DROPLINE.OTP。
- Spline Connected(样条曲线图) 数据点之间以样条曲线连接,数据点以符号形式显示,如图 4.41 所示,模板文件为 LINESYMB.OTP。
- Line Series(系列线图) 该类型要求至少选中两个 Y 列数据(或部分数据)。制图时,Origin 会自动生成一个隐藏的 Worksheet 窗口——LineSeriesn,该 Worksheet 包含两列,其中一列是所选 Y 列的序号(1,2,3…),另一列是单元格的数值。图形是将相应的

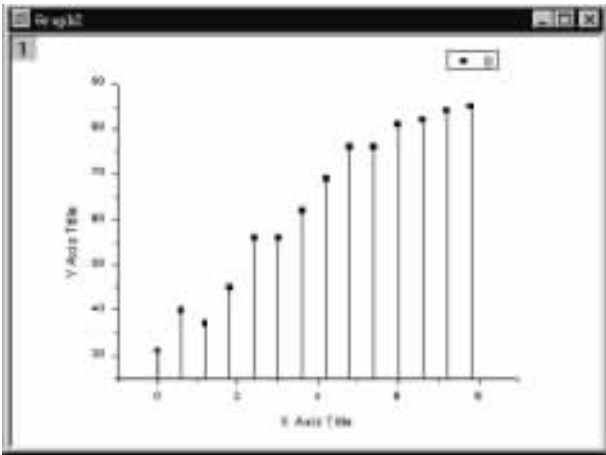


图 4.40 垂线图

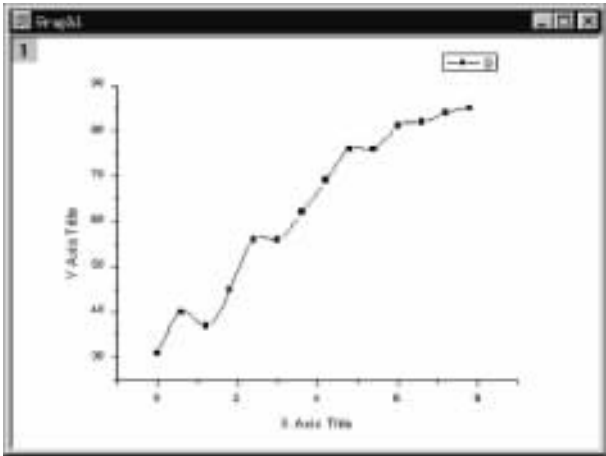


图 4.41 样条曲线图

Y 列值连接起来,如图 4.42 所示。模板文件为 LSER2.OTP。

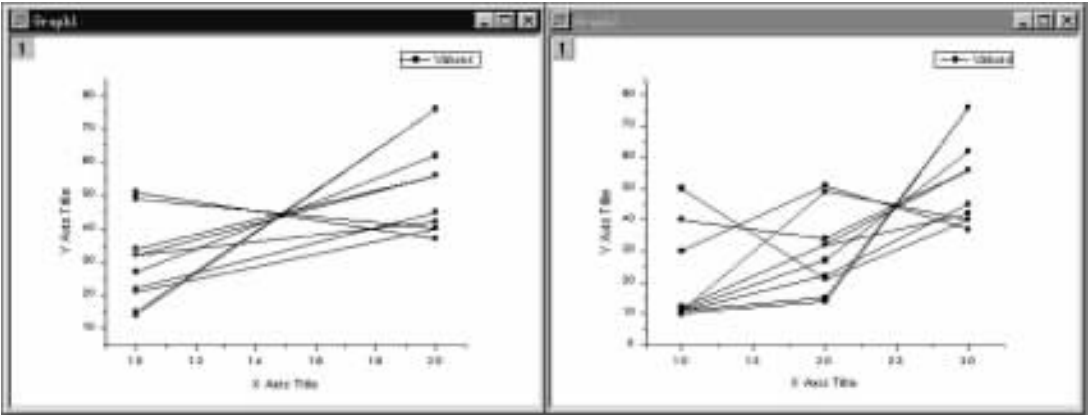


图 4.42 选中两列和三列后的系列线图

4.7.2 二维柱状、条状图

这类图形利于显示数据之间大小比较。

数据要求:要求 Worksheet 中至少有一个 Y 列(或其中的一部分),如果没有设定与该列相关的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值,即将行号作为 X 值。

绘图方法:选中数据,在 Plot 下拉菜单中选择要绘制的图形类型,或直接单击 2D Graph 工具条或 2D Graph 扩展工具条中相应的按钮(详细说明参考附录 A)。

- Bar(二维条状图),Y 值是以水平条的长度来表示的,此时的纵轴为 X。条的宽度是固定的,其中心为相应的 X 值,如图 4.43 所示。模板文件为 BAR.OTP。

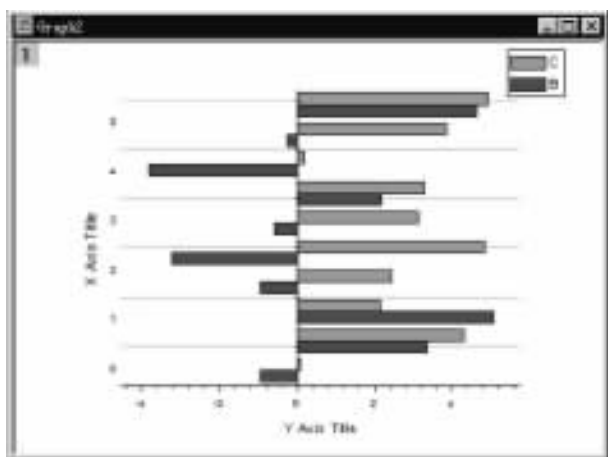


图 4.43 条状图

- Column(二维柱状图),Y 值是以柱体的高度来表示的,柱宽度是固定的,其中心为相应的 X 值,如图 4.44 所示。模板文件为 COLUMN.OTP。

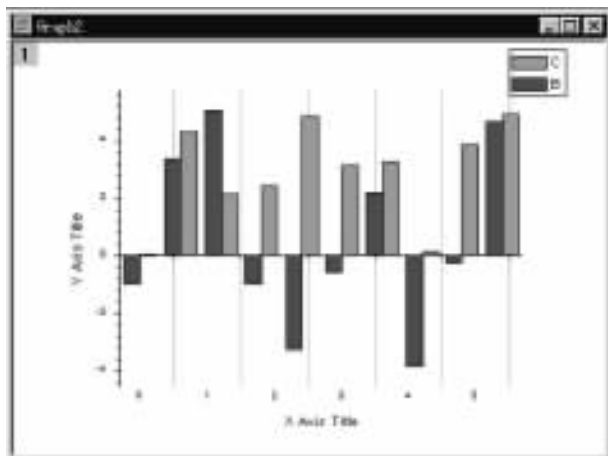


图 4.44 柱状图

- Floating Bar(浮动条状图),该图需要至少两个 Y 列,以条上的各点来显示 Y 值,条的首末端分别对应同一个 X 值的 Y 值的初值和末值,其余的 Y 值按比例显示在条中,如图 4.45 所示。模板文件为 FLOATBAR.OTP。

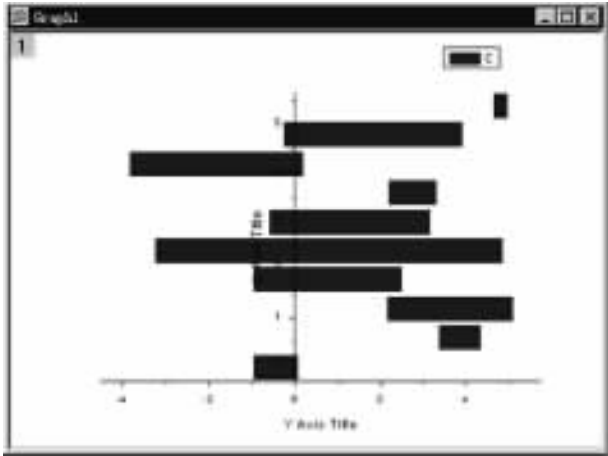


图 4.45 浮动条状图

- Floating Column(浮动柱状图),该图至少需要两个 Y 列,以柱上的各点来显示 Y 值,柱的首末端分别对应同一个 X 值的 Y 值的初值和末值,其余的 Y 值按比例显示在条中,如图 4.45 所示。模板文件为 FLOATBAR.OTP。
- Stack Bar(堆垒条状图),对应于每个 X 值,Y 值以条的长度表示,X 轴为纵轴,条的宽度确定,对多个 Y 列,条之间会产生堆垒,后一个条的起始端是前一个条的终端,如图 4.46 所示,要去掉重叠,选择 Graph | Stack Grouped Data in Layer。模板文件为 BAR.OTP。

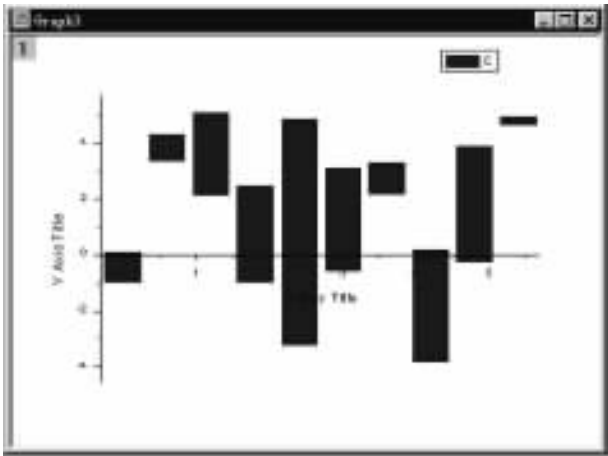


图 4.46 浮动柱状图

- Stack Column(堆垒柱状图),对应于每个 X 值,Y 值以柱的高度表示,柱的宽度确定,对多个 Y 列,条之间会产生堆垒,后一个柱的起始端是前一个柱的终端,如图 4.47 所示,要去

掉重叠,选择 Graph| Stack Grouped Data in Layer。模板文件为 COLUMN. OTP。

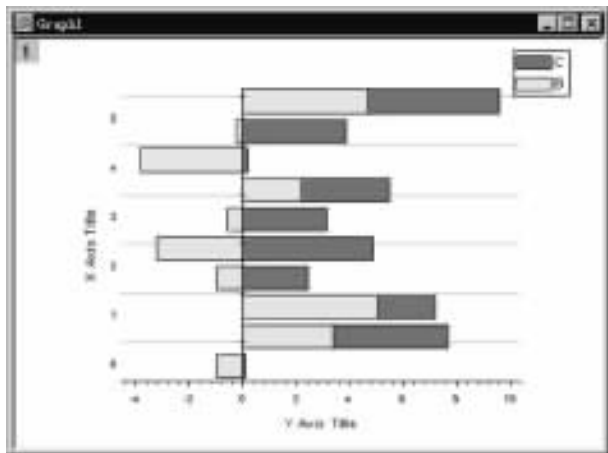


图 4.47 堆垒条状图

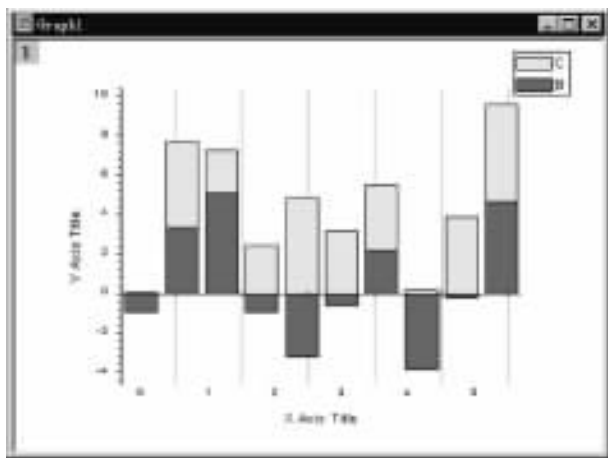


图 4.48 堆垒柱状图

4.7.3 面积图、极地图、瀑布图

这类图形利于显示不同数据组之间的大小比较。

数据要求:要求 Worksheet 中至少有一个 Y 列(或其中的一部分),如果没有设定与该列相关的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值,即将行号作为 X 值。

绘图方法:选中数据,在 Plot 下拉菜单中选择要绘制的图形类型,或直接单击 2D Graph 工具条或 2D Graph 扩展工具条中相应的按钮(详细说明参考附录 A)。

- Area(面积图),Y 值构成的曲线与 X 轴之间被自动填充,若选中多个 Y 列时,不同列之间依照先后顺序堆叠,即后面列是以前面列为基线制图的,如图 4.49 所示,要取消这种依赖关系,即后面的列以 X 轴为基线制图,取消菜单命令 Graph| Stack Grouped Data in Layer 的选择。模板文件为 AREA. OTP。
- Fill Area(填充面积图),该图需要两个 Y 列数据。两条数据曲线之间的区域被填充,

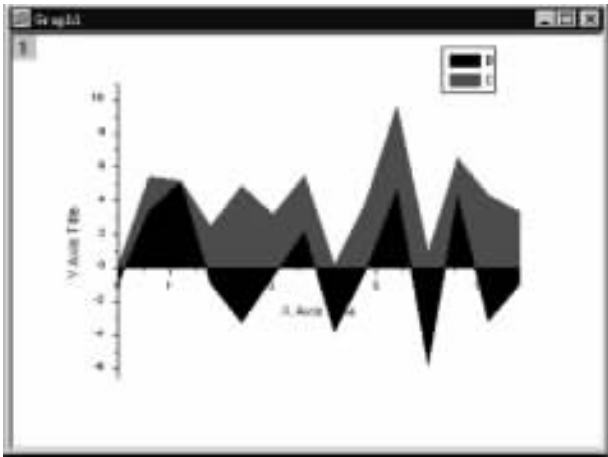


图 4.49 面积图

如图 4.50 所示。模板文件为 FILLAREA.OTP。

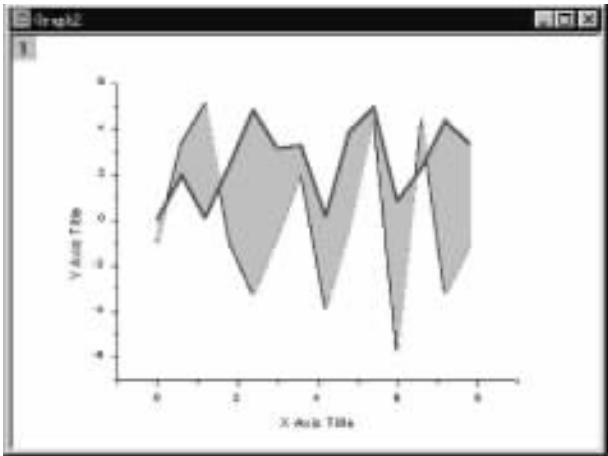


图 4.50 填充面积图

- Polar(极坐标图),该图中 Y 值是离原点的距离,X 值是角度的大小。在 Graph 图形中由三个按钮的操作来设置的,单击  按钮,打开对话框设置极坐标的角度范围($0\sim 360^\circ$)和角度递增量;  两个按钮用来设定极坐标的正反方向和起始位置;  用来设定径向轴的范围(以 0 或 Y 中的值为原点,也可以通过坐标轴任意设定),如图 4.51 所示。模板文件为 POLAR.OTP。
- 2D Waterfall(二维瀑布图),该图是在相似条件下对多个数据组进行比较的理想工具,具有三维效果,可以使用户观察到 Z 方向的变化,每个数据组都在 X 和 Y 方向上作出一定的偏移后绘制的曲线图,如图 4.52 所示的一组 X 射线衍射谱的比较(对此感兴趣的读者可参考文献 Jian-ping Zhou, et al., IEEE Transaction on Magnetics, 37 (2001)3844-3849)。在 Graph 图形中由三个按钮的操作来设置各条曲线之间的位置关系,单击  按钮,打开对话框调节偏移量,单位为坐标轴的百分比;单击

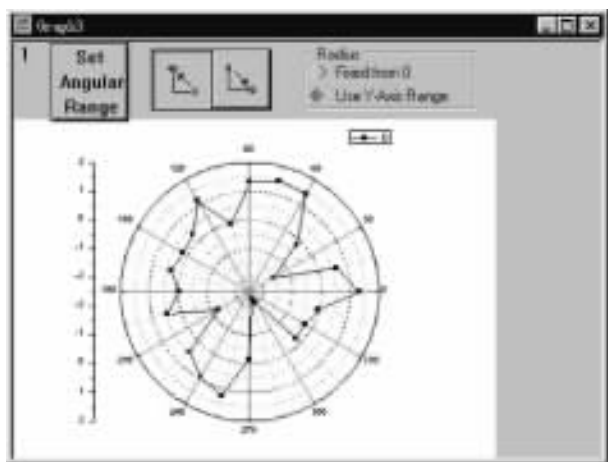


图 4.51 极坐标图

Reverse Order... 按钮改变曲线的排列次序; 单击 **Fill Area...** 按钮, 打开对话框, 选中 **Enable Fill** 复选框, 就可以实现对数据曲线区域的填充, 并可以从 **Fill with color** 下拉列表中选择合适的颜色。模板文件为 WATERFAL.OTP。

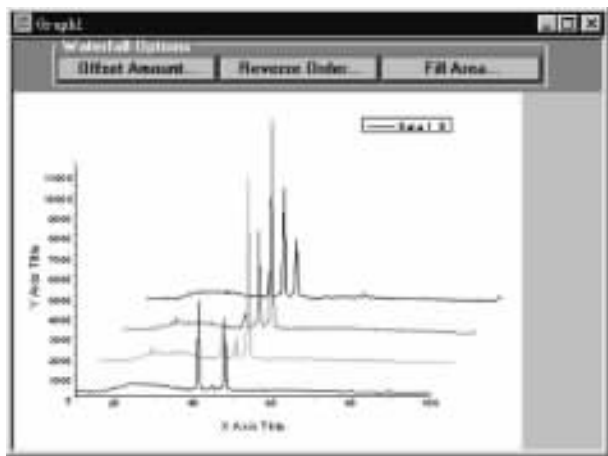


图 4.52 二维瀑布图

- Pie(饼图), 该图只能选择一列 Y 值, 将所选的 Y 列值求和, 算出每个值所占的百分比 (如果遇到负数, 视为正数), 然后根据这些百分比制图, 并在图中标出所占的百分比, 如图 4.53 所示。模板文件为 PIE.OTP。
- Smith 图, 这是 Origin 7.0 的新功能, 如图 4.54 所示, 模板文件为 SMITHCHT.OTP。可以通过 **Plot Details** 和 **Axes** 对话框像其他图形那样定制图形, 对于 Smith 图来说, 还提供了 **Smith Chart** 工具, 单击 **Graph** 图形右上角的  按钮, 打开图 4.55 所示的 **Smith Chart** 对话框。执行 **Normalization** 组中 **Factor** 的因子可将这组数据规格化; 如果在图形中有多条曲线, 则可以从图标的快捷菜单中选中其他的数据组, 然后单击 **Update** 按钮, 在 **Current Active DataSet** 组中显示所选中的数据组, 且所有的操作都

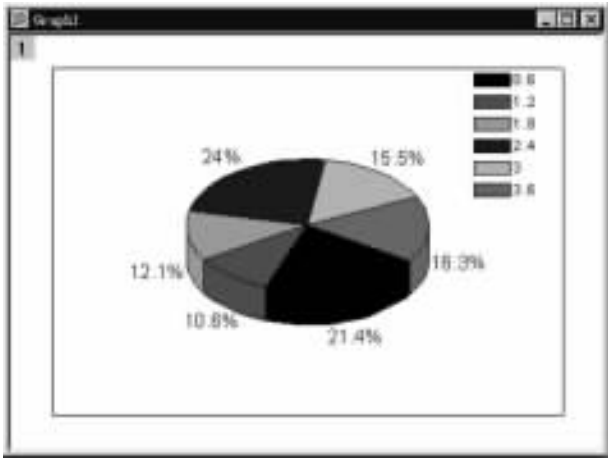


图 4.53 饼图

是针对这个激活的数据组的,其中的 R 代表实部, X 代表虚部;单击 Convert Data to Mag/Angle 按钮可将激活的数据转换成 Mag/Angle(长度/角度)格式,并将相应的数据添加到 Worksheet 中;单击 Reinterpret Data as Mag/Angle 将激活数据按照 Mag/Angle(长度/角度)格式制图,并将数据转换成 R/X 格式;单击 Reverse R Axis 按钮,反转 Smith 图实轴的方向;在 Constant SWR Circle 中指定点的位置,选择圆圈的点密度和线的颜色,单击 Add 按钮添加 SWR 圆圈。

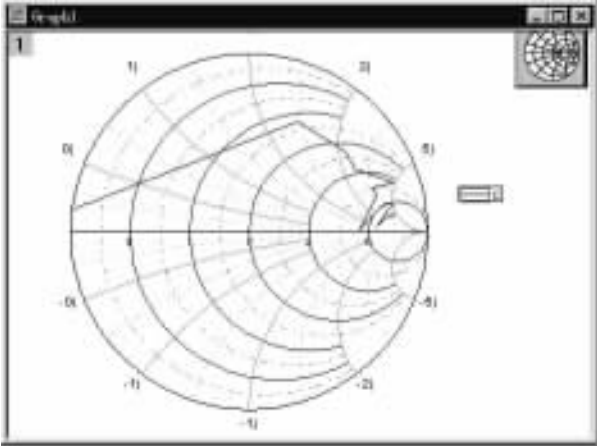


图 4.54 Smith 图



图 4.55 Smith Chart 对话框

4.7.4 其他图形模板

除了上面介绍的常用的图形模板外,Origin 还提供了其他的图形模板,包括彩色映射图、泡沫图、三角图等。

- Color Mapped(彩色映射图),要求 Worksheet 中两个 Y 列值,如果没有设定与该列相对应的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值。然后选择 Plot | Bubble/Color Mapped | Color Mapped 或单击 2D Graphs Extended 工具条中的 Color Map 按钮,进行制图。每一行的两个 Y 值决定了数据点的显示状态,左边 Y 列为数据点的位置,右边 Y 列控制数据点的符号和颜色,Origin 从右边 Y 列中找到最大值和最小值,然后生成 8 种均匀分布的颜色,每种颜色代表一定的数据范围,如图 4.56 所示。模板文件为 SCATTER.OTP。

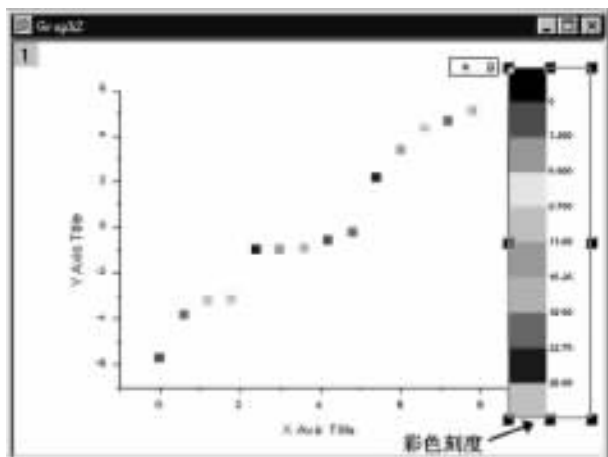


图 4.56 彩色映射图

- Bubble(泡沫图),要求 Worksheet 中两个 Y 列值,如果没有设定与该列相对应的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值。选择 Select Plot | Bubble/Color Mapped | Bubble 或单击 2D Graphs Extended 工具条中的 Bubble 按钮,进行制图。左边的 Y 列为数据点的位置,右边 Y 列为数据点符号的大小,如图 4.57 所示。模板文件为 SCATTER.OTP。

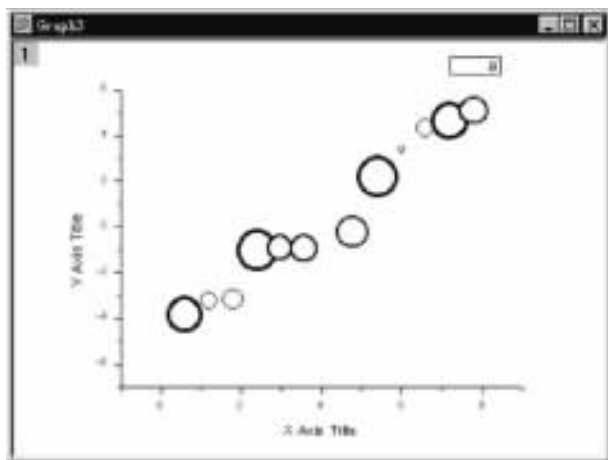


图 4.57 泡沫图

- Bubble and Color Map(彩色泡沫图),要求 Worksheet 中三个 Y 列值,如果没有设定与该列相对应的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值。然后选择 Select Plot| Bubble/Color Mapped| Bubble+Color Mapped 或单击 2D Graphs Extended 工具条中的 Bubble+Color Mapped 按钮,进行制图。此类图形是上两种图形的综合,第一列为数据点的位置,第二列为数据点符号的大小,第三列为数据点的颜色,如图 4.58 所示。模板文件为 SCATTER.OTP。

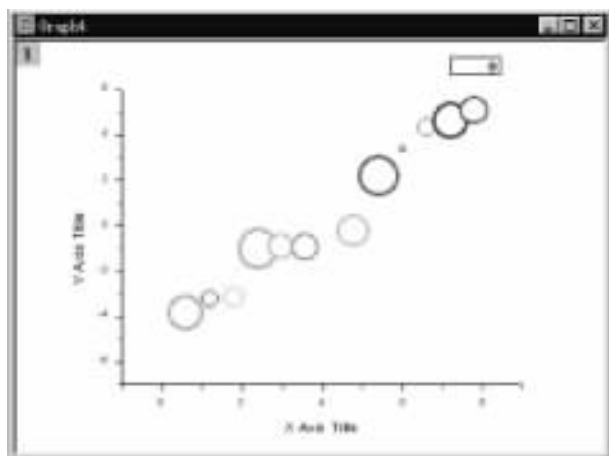


图 4.58 彩色泡沫图

- X, Y, Angle, Magnitude Vector(X,Y,角度,长度矢量图),要求选中 Worksheet 三个 Y 列值,如果没有设定与该列相对应的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值。然后选择 Plot| Vector XYAM 或单击 2D Graphs 工具条中的 Vector XYAM 按钮,进行制图。第一个 Y 列为矢量末端的 Y 坐标值,第二个 Y 列为矢量的角度(以弧度表示),第三个 Y 列为矢量的长度(若负值只标出箭头而没有长度,可以在 Plot Details 对话框中设置长度的显示比例),如图 4.59 所示。模板文件为 VECTOR.OTP。

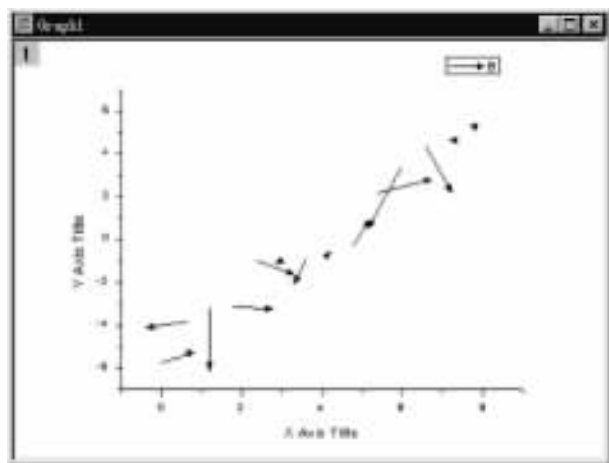


图 4.59 X,Y,角度,长度矢量图

- X,Y,X,Y Vector(X,Y,X,Y 矢量图),要求选中 Worksheet 中两组 X、Y 列,其中的一组为矢量的起始端,另一组为末端(这是默认的设置,也可以根据用户的需要进行更改)。然后选择 Plot| Vector XYXY 或单击 2D Graphs 工具条中的 Vector XYXY 按钮,进行制图,如图 4.60 所示。模板文件为 VECTXYXY.OTP。

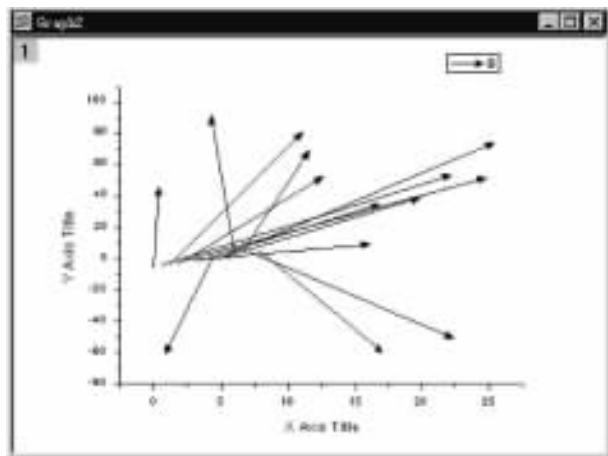


图 4.60 X,Y,X,Y 矢量图

- High-Low-Close Charts,要求 Worksheet 中三个 Y 列值,然后选择 Plot| High-Low-Close 或单击 2D Graphs 工具条中的 the High-Low-Close 按钮,进行制图。左边 Y 列为高值,中间 Y 列为低值,右边 Y 列为相近值,该图显示了给定 X 值情况下的高值与低值、相近值的对比关系,高值与低值相连,相近值用短横线表示,如图 4.61 所示。模板文件为 HLCLOSE.OTP。

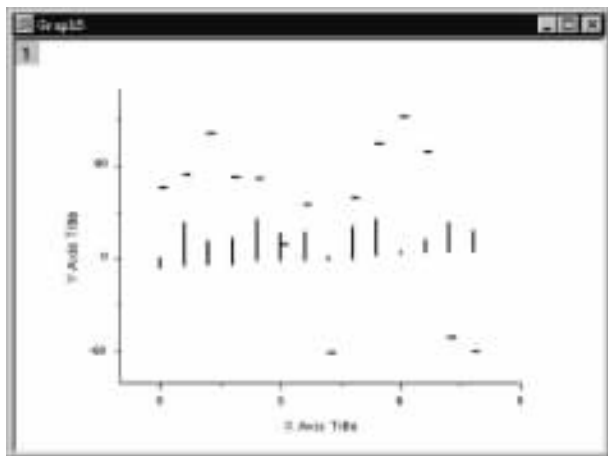


图 4.61 High-Low-Close Charts

- Ternary(三角图),要求 Worksheet 中一个 Y 列值和一个 Z 列值,如果没有设定与该列相对应的 X 列,Origin 会提供 X 的默认值。然后选择 Plot| Ternary 或单击 2D Graphs 工具条中的 Ternary 按钮,进行制图。该图用来表示三个组元(X,Y,Z)之

间的相互比例关系,每行的 X、Y、Z 数据组成一个数据点。Origin 假定每行数据是归一化的,即 $X+Y+Z=1$,如果没有归一化,制图时 Origin 会提示将数据归一化,并代替 Worksheet 中原来的数据,图中的显示尺度都是按照百分比显示的,如图 4.62 所示。模板文件为 TERNARY.OTP。

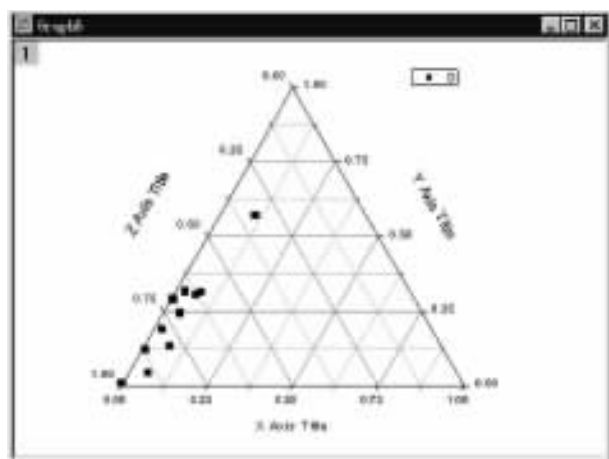


图 4.62 三角图

4.8 个性化 Graph 图形

Origin 允许个性化图形的每个部分,包括曲线的类型、坐标轴的比例及名称等,以便于区分不同曲线,给出合理的标注说明。

4.8.1 个性化数据曲线

个性化数据曲线,是个性化 Graph 图形的重要组成部分,有多种途径可以作出个性化数据曲线,其中最重要的是对 Plot Details 对话框的操作。对不同类型的数据曲线,Plot Details 对话框的内容是不同的,要打开 Plot Details 对话框,进行以下操作:

- ① 双击数据曲线或图例中的曲线标志;
- ② Graph 窗口中右击鼠标,从弹出的快捷菜单中选择 Plot Details 命令,或单击前面带“√”的数据组,如图 4.2(d)所示;
- ③ 激活 Graph 窗口,选择 Format | Plot;
- ④ 激活 Graph 窗口,按下 Ctrl 键,然后选择 Data 中的任何一个数据组。

Plot Details 对话框类似于图 4.29,对话框左侧窗口中的选项决定了右侧可以控制的内容,包括 Graph 页面、层和数据曲线。在该窗口下面的 Plot Type 下拉列表中包含 Line, Scatter, Line+Scatter 和 Column/Bar 四个选项,这些选项可以改变曲线的类型(也可以直接选中曲线,单击 2D Graphs 或 2D Graphs Extended 工具条中的按钮实现改变曲线的类型)。选择不同的曲线类型,右面的对应标签也不同,单击 >> 按钮,显示 Plot Details 对话框的缩略图。

● Line 选项卡

当曲线类型是 Line 或含有 Line 时,Plot Details 对话框中出现 Line 选项卡,如图 4.63 所示。



图 4.63 Plot Details 对话框的 Line 选项卡

① Connect 下拉列表中为数据点之间的连接方式,部分类型和 4.7.1 小节中介绍的曲线类型效果基本相同,除此以外还包括:

- B-Spline,对于坐标点 $(X_{(i)}, Y_{(i)}), i=1, 2, 3, \dots, n$, Origin 根据立方 B-Spline 生成光滑曲线,和样条曲线不同的是该曲线不要求必须通过原始数据点 $(X_{(i)}, Y_{(i)})$,但要通过第一和最后一个数据点,对数据 X 也没有特别的要求。B-Spline 曲线是通过下列公式计算得到的。

$$X_i(t) = \frac{1}{6} [(-t^3 + 3t^2 - 3t + 1)X_{(i-1)} + (3t^3 - 6t^2 + 4)X_{(i)} + (-3t^3 + 3t^2 + 3t + 1)X_{(i+1)} + t^3 X_{(i+2)}]$$

$$Y_i(t) = \frac{1}{6} [(-t^3 + 3t^2 - 3t + 1)Y_{(i-1)} + (3t^3 - 6t^2 + 4)Y_{(i)} + (-3t^3 + 3t^2 + 3t + 1)Y_{(i+1)} + t^3 Y_{(i+2)}] \text{ 其中 } 2 \leq i \leq n-2, 0 < t < 1.$$

- Bezier, Bezier 曲线和 B-Spline 曲线接近,曲线将四个点分成一组,通过第一、第四个点,而不通过第二、第三个点,如此重复,由下列表达式拟合曲线。

$$X(t) = (-t^3 + 3t^2 - 3t + 1)X_{(1)} + (3t^3 - 6t^2 + 3t)X_{(2)} + (-3t^3 + 3t^2)X_{(3)} + t^3 X_{(4)}$$

$$Y(t) = (-t^3 + 3t^2 - 3t + 1)Y_{(1)} + (3t^3 - 6t^2 + 3t)Y_{(2)} + (-3t^3 + 3t^2)Y_{(3)} + t^3 Y_{(4)}$$

② Style 下拉列表中的各项为线条的类型,包括实线、虚线等,可以在 Options 对话框中选择虚线的显示效果(参考 2.8.2 节)。

③ Width,调节线条宽度,线条的宽度单位为 1point=1/72 英寸。

④ Color,调节线条颜色,颜色按照一定的顺序排列,可以通过程序数字调取。

⑤ 若选中 Fill Area Under curve 复选框,且从下面相应的下拉列表中选中 Normal 则将曲线和 X 轴之间的部分填充;若选中 Inclusive Broken by Missing Values,Origin 根据第一和最后一个点生成一条基线,填充曲线和基线之间的部分;若选中 Exclusive Broken by Missing

Values, 恰好和第二种填充情况相反。

⑥ 若选中 Gap to Symbol, 则显示符号和线条之间的间隙; 若不选, 则激活下面的两个线条显示方式选项, 以确定连线在符号的前面还是在符号的后面。

● Symbol 选项卡

当曲线类型是 Scatter, Bubble 或含有 Scatter 时, Plot Details 对话框中出现 Symbol 选项卡, 如图 4.64 所示。

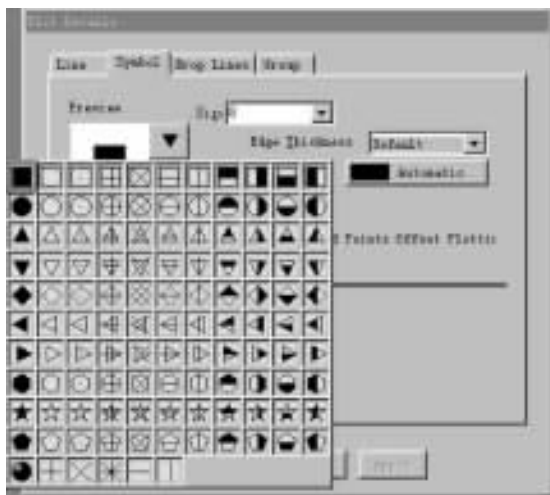


图 4.64 Plot Details 对话框的 Symbol 选项卡

- 单击 Preview 后面的下三角按钮, 打开符号库, 如图 4.64 所示, 其中的符号按照一定的顺序排列, 可以通过程序数字来调取。如果选中了 Options 对话框 Graph 选项卡中的 Symbol Gallery Displays Characters 复选框的话, 会显示更多的字符符号。
- 在 Size Combination 下拉列表中可以选符号的大小, 如果选中了某个 Worksheet 列的话, 则将此列作为符号的大小, 并在后面出现 Scaling Factor 选项, 符号大小和列中数字的比例, 类似于泡沫图。
- Edge Thickness 下拉列表, 当选择的符号为空心时, 该选项为符号的边宽和半径的比例, 以百分比表示。
- Color 按钮, 该按钮根据不同的选择, 可以是符号的颜色按钮, 可以是符号边框颜色按钮, 还可以是符号填充色按钮, 单击可以从中选择合适的颜色。
- Overlapped Points Offset Plotting 复选框, 如果在曲线中有重合的数据点, 选中此复选框, 则重复的数据点在 X 方向上错位显示。
- 选中 Show Construction 复选框, 会出现一些相应的复选框, 供用户选择符号及相应的设置, 包括几何符号、希腊符号、递增希腊符号、行号和自定义符号。

● Drop Lines 选项卡

当曲线类型是 Scatter 或含有 Scatter 时, Plot Details 对话框中出现 Drop Line 选项卡, 如图 4.65 所示。如果绘制的是垂线图, 则打开此对话框时自动选中 Vertical 复选框。

- 用户可以选中 Horizontal 或 Vertical 复选框, 也可以同时选中, 添加垂线和水平



图 4.65 Plot Details 对话框的 Drop Lines 选项卡

线,三维图形中也可以添加平行于 Z 轴的直线。选中后,就激活了下面控制线条的样式、宽度和颜色选项。

- 如果选中 Skip Points 复选框并在后面添入数字(大于 1),比如 3,则只显示第 1、第 4...个数据点。

● Group 选项卡

当 Graph 图形中有几条曲线,并且是作为一组制图时(参考 4.3.3 小节),Plot Details 对话框中出现 Group 选项卡,如图 4.66 所示。

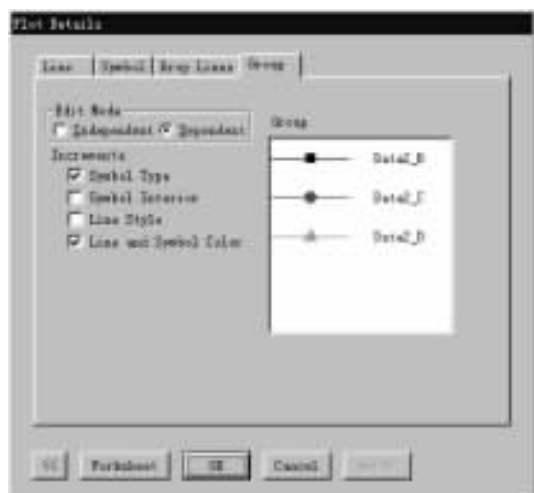


图 4.66 Plot Details 对话框的 group 选项卡

- 若选中 Independent 复选框,则几条曲线之间没有依赖关系;若选中 Dependent,则几条曲线之间具有依赖关系,并激活下面的几个选项。
- 选中 Symbol Type 复选框,当用户从符号库中选定了一个符号时,Origin 将以此符号为开头,几组数据点的符号按照以下次序依次出现:方形、圆形、正三角、倒三

角、菱形、左三角和右三角等；如果不选此复选框，则几条曲线中的符号相同。

- Symbol Interior 复选框，如果用户选择的是实心符号，不选此复选框，则所有的符号都是实心的；选择此复选框，第一条曲线中的符号是实心的，其他的符号为内部加点。如果选择的是空心符号，则所有的符号中心加点。
- 选中 Line Style 复选框，线的样式按照以下次序依次出现：Solid, Dash, Dot, Dash Dot 和 Dash Dot Dot 等；不选此复选框，则线条样式相同。
- 选中 Line and Symbol Color 复选框，线和符号颜色按照以下次序以依出现：黑、红、绿和蓝等；不选此复选框，则线和符号的颜色相同。

● Pattern 选项卡

当 Graph 图形为条状图、柱状图、堆叠条状图、堆叠柱状图、饼图和极图等时，在 Plot Details 对话框中出现 Pattern 选项卡，如图 4.67 所示。



图 4.67 Plot Details 对话框的 Pattern 选项卡

- Border 组，可以选择条、柱等边的颜色、样式和宽度，若选中递增颜色选项的话，则按照黑、红、绿、蓝等颜色的次序出现。
- Fill 组，可以选择填充色，填充条纹的样式、条纹的颜色和条纹的宽度等。
- 从 Preview 中可以预览到装饰好的条柱等样式。

如果图形是三维条状图和柱状图时，该选项卡变为 XY、YZ 和 XZ Faces 选项卡。

● Spacing 选项卡

当 Graph 图形为条状图、柱状图、堆叠条状图、堆叠柱状图、饼图和极图等时，在 Plot Details 对话框中出现 Spacing 选项卡，如图 4.68 所示。

- Gap Between Bars 下拉列表调整条/柱的间隙宽度，为条/柱的百分比。
- 当几组数据同时制图时，会激活 Overlap 下拉列表，调整不同数据图形条/柱之间的叠加比例。
- 如果是三维 XYY 图形的话，会出现 Bar Thickness 下拉列表，来调节条/柱的厚度。

● Pie Geometry 选项卡

当 Graph 图形为饼图时，在 Plot Details 对话框中出现 Pie Geometry 选项卡，如图 4.69 所示。



图 4.68 Plot Details 对话框的 Spacing 选项卡



图 4.69 Plot Details 对话框的 Pie Geometry 选项卡

- 3D View 组中的 View Angle 文本框设置饼图的显示角度, 90° 为二维图形; Thickness 文本框为饼的厚度, 用直径的百分比来表示。
- Starting Azimuth 文本框(单位为角)设置图的起始位置, 如选中 Counter Clockwise 复选框则按逆时针显示。
- Rescale 文本框设置饼的大小, 为边框的百分比, Horizontal 决定了饼的水平位置。
- 从 Explode Wedge 列表中选中某个部分, 在下面的 Displacement 中填入适当的数字, 则该部分从饼图脱离出来。

● Labels 选项卡

Labels 选项卡也是用来定制饼图的, 如图 4.70 所示。

- Format 组, 选中 Values 复选框, 则在 Graph 图形中将 Worksheet 中的数值作为标签显示; 选中 Percentages 复选框, 则显示各数值所占的百分比; 选中 Categories



图 4.70 Plot Details 对话框的 Labels 选项卡

显示对应的 X 数值。

- Position 组,选中 Associate with Wedge 复选框,Dist. from Pie Edge 文本框中的数字决定了标签离饼的距离,用饼半径的百分比来表示。

● Vector 选项卡

Vector 选项卡用来定制 XYAM 和 XYYX 矢量图,如图 4.71 所示。

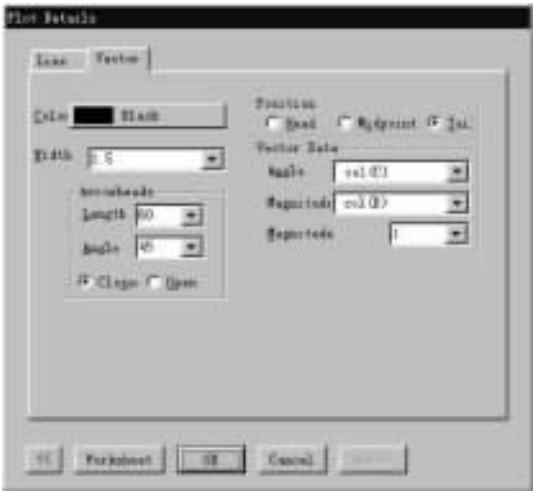


图 4.71 Plot Details 对话框的 Vector 选项卡

- 从 Color 按钮中选择矢量的颜色。
- 从 Width 下拉列表中选择矢量线的宽度。
- Arrowheads 组中,Length 为箭头的长度;Angle 为箭头的宽度;选择 Closed,则填充箭头;选择 Open,则箭头无填充色。
- Position 组(只应用于 XYAM),选中 Head,则箭头出现在矢量的起始处;选中 Midpoint(中间),则箭头出现在矢量中间;选中 Tail,则箭头出现在矢量末尾。

- Vector Data 组(只应用于 XYAM),其中的 Angle 选项决定了矢量的角度,可以是某列,也可以是某个固定值。Magnitude 选项中决定了矢量的长度,第二个 Magnitude 选项为和原始长度的相对比例,避免原始长度太大或太小。
- End Point 组(只应用于 XYXY),在这里选择矢量的末端点,一般选择包含 X 的列作为 Y 末尾点,选择包含 Y 的列作为 Y 末尾点。

● Error Bar 选项卡

如果数据中有误差列的话,Plot Details 对话框中出现 Error Bar 选项卡,如图 4.72 所示。



图 4.72 Plot Details 对话框的 Error Bar 选项卡

- Style 组中,在 Color 下拉列表中选择合适的颜色,若选择 Automatic,则和数据曲线的颜色保持一致;从 Line 和 Cap 下拉列表中选择误差线的宽度和帽子的宽度;选中 Through Symbol 复选框,则误差线穿过数据点;选中 Apply to Layer 复选框,则将该设置应用于该层的所有误差线。
- Direction 组中,选择 Plus 复选框,显示数据点上方的误差线,选中 Minus 复选框,显示数据点下方的误差线,否则误差线为 0;选中 X Error Bar 复选框,误差线在 X 方向上显示;选中 Absolute 复选框,将正的 Y 误差值绘制在数据点的上方,将负 Y 误差值绘制在数据点的下方;选中 Relative 复选框,将正的 Y 误差值绘制为离开 0 点,将负 Y 误差值绘制为指向 0 点。

对于其他图形来说还有 Color Map 选项卡(可参考第 7 章)、Number Formats 选项卡等,由于使用的不多,这里就不再介绍了。

4.8.2 个性化坐标轴

二维 Graph 图形的每个图层包含一组 X,Y 坐标轴,三维 Graph 图形的每个图层包含一组 X,Y,Z 坐标轴,其属性可以通过坐标轴对话框进行更改,要打开该对话框,可以进行如下操作:

- 双击坐标轴、坐标轴分格,坐标轴标签;
- 右击坐标轴、坐标轴分格,坐标轴标签,从快捷菜单中选择 Scale, Tick Labels 或 Prop-

erties;

- 在图层中右击鼠标,从快捷菜单中选择 Axis;
- 选择 Format | Axes | Axis Type 或 Format | Axis Tick Labels | Axis Tick Label Type。

打开坐标轴对话框后,就可以修改当前选中的坐标轴了,坐标轴名称显示在对话框的标题上,如 X Axis-Layer 1,同时在左边的 Selection 列表中标记出选中的坐标轴,在这个列表中也也可以选择层中其他的坐标轴,选中后,坐标轴显示在对话框的标题处,如图 4.73 所示。

- Tick Labels 选项卡

Tick Labels 选项卡如图 4.73 所示。



图 4.73 Tick Labels 选项卡

- Selection 列表中,有 Bottom, Top, Left 和 Right (三维图形时还会有 Front 和 Back)选项,默认情况下,Bottom 和 Top 为 X 轴,Left 和 Right 为 Y 轴,Front 和 Back 为 Z 轴,选中某项,就可以对之进行个性化设置了。
- 选中 Show Major Labels 复选框,显示主要刻度标签,该项也可以在 Tick Labels 和 Minor Tick Labels 选项卡中选择。
- 从 Type 下拉列表中选择合适的标签类型,包括 numeric, text from data set, time, date, month, day of week, column headings 和 tick indexed, Origin 默认的类型和 Worksheet 中的数据类型保持一致。
- Format 下拉列表调整字体的格式,Type 的类型不同,该下拉列表选项也不同(参考表 3.1 和 3.2)。
- Font, Color, Bold, Point 是用来调整字体、颜色、加粗、大小的。
- 标签数字被 Divide By 文本框中的数字去除,将结果显示在标签处。
- Set Decimal Places 文本框中的数字为标签的小数点位数。
- 在 prefix/Suffix 中键入字符,变为标签的前缀/后缀,如单位 mm, “°”, eV 等。
- 在 Apply 组中,可以选择将 Font, Color, Point, Bold 应用于 This Layer (本层)、This Window (本窗口)或 All Windows (当前 Project 的所有窗口)。

- Scale 选项卡

Scale 选项卡如图 4.74 所示。

- Selection 列表中,有 Horizontal 和 Vertical (三维图形会出现 Z Axes)选项,默认



图 4.74 Scale 选项卡

情况下, Horizontal 为 X 轴, Vertical 为 Y 轴, 选中某项, 对之进行编辑。

- 在 From 和 To 文本框中分别键入坐标轴的起始点和结尾点, 改变坐标轴范围, 也可以使用 Zoom In 和 Axis Zoom Out 按钮改变坐标轴刻度。
- Type 下拉列表, 从中选择坐标轴刻度的类型, 包括: ① Linear 为标准线性刻度; ② log10 为对数刻度, $X' = \lg(X)$, 该方式有利于显示不同数量级之间的数据, Origin 7.0 不同于以前的版本, 如果数据处于同一数量级, 则以线性刻度显示; ③ Probability 为高斯累积分布反向表示, 以百分比表示, 所有数值必须在 0~100 之间, 刻度范围为 0.000 1~99.999, 如高斯累积分布为 S 形曲线, 用 Probability 刻度的话, 则变成一条直线, 该刻度在概率直方图中会用到; ④ Probit 和 Probability 刻度类似, 不同之处在于 Probit 刻度为线性的, 刻度递增单位正好是标准差, 刻度 5 表示平均, 刻度 6 为一个标准差等; ⑤ Reciprocal 为倒易刻度, $X' = 1/X$; ⑥ Offset Reciprocal 为补偿倒易刻度, $X' = 1/X + 273.14$, 273.14 为 0℃ 时热力学的温度, 在研究温度特性时非常有用; ⑦ Logit, $\text{logit} = \ln[Y/(100-Y)]$; ⑧ ln, 自然对数坐标; ⑨ log2, 以 2 为底的对数坐标。
- Rescale 下拉列表, 从中选择坐标刻度规则, 包括: ① Manual, 如果改变了坐标轴刻度, 如使用放大工具, 不重新标定坐标轴刻度; ② Normal, 使用放大工具时重新标定坐标轴刻度; ③ Auto, 与 Normal 选项相同, 如果必要的话, 自动重新标定坐标轴刻度以满足数据点的需要; ④ Fixed From/Fixed To, 固定坐标轴的开始/结尾点, 如果要改变开始/结尾点的话, 只能通过上面介绍的 From/To 文本框进行修改。
- Increment 文本框, 选中并键入坐标轴递增步长。
- # Major Ticks 文本框, 选中并键入要显示的坐标刻度数量, 如键入 5, 只显示 5 个主要坐标刻度。
- # Minor 文本框, 键入主要坐标刻度之间要显示的次坐标刻度的数目, 如键入 2, 在两个主要坐标刻度之间显示 2 个次坐标刻度。
- First 文本框在大部分 Graph 图形中没有用, 是针对日期刻度的, 指定起始刻度的位置。

● Title & Format 选项卡

Title & Format 选项卡如图 4.75 所示。



图 4.75 Title & Format 选项卡

- Show Axis & Ticks, 选中该复选框, 显示坐标轴及刻度。
- 在 Title 文本框中键入坐标轴标题。
- 分别从 Color, Thickness (pts) 和 Major Tick Length 下拉列表中选择坐标轴的颜色、宽度和刻度的长度。
- Major 和 Minor 下拉列表选项控制主/次刻度的显示方式, 包括里、外、无、里外。
- Axis 位置下拉列表控制坐标轴的位置, 对不同的坐标轴(位置)是不同的, 对 Bottom 来说包括: ① Bottom, 在底部; ② % from Bottom, 偏离默认的位置, 在下面的文本框中填入数字(百分比表示), 正数偏离中心, 负数移向中心; ③ At Position =, 指定 X 轴一个位置。

● Minor Tick Labels 选项卡

Minor Tick Labels 选项卡如图 4.76 所示。

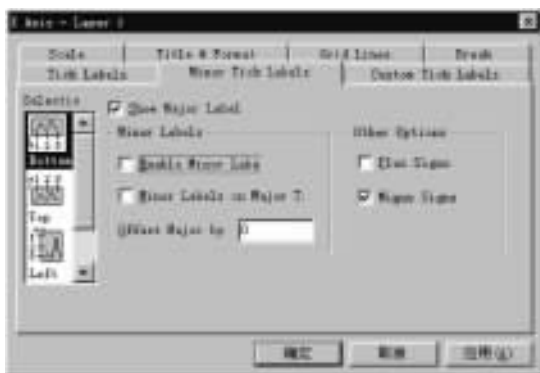


图 4.76 Minor Tick Labels 选项卡

- 选中 Show Major Label 复选框, 显示坐标轴标签, 并激活其他选项。
- Minor Labels 组中, 选中 Enable Minor Labels 复选框, 显示次刻度标签; 选中 Minor Labels on Major Ticks 复选框, 在主刻度处显示主刻度标签和次刻度标签, 这样两个标签就重叠在一起, 可以在下面的 Offset Major by % 文本框中键入数字, 使二者错开。

- Other Options 组中,选中 Plus Signs 复选框,在正数标签前面显示“+”号,选中 Minus Signs 复选框,在负数标签前面显示“-”号。

● Custom Tick Labels 选项卡

Custom Tick Labels 选项卡如图 4.77 所示。



图 4.77 Custom Tick Labels 选项卡

- Rotation 文本框中的数字(单位为度)表示坐标轴标签旋转一定的角度,正数逆时针旋转,负数顺时针旋转。
- Tick to 下拉列表为标签的对齐方式,包括:① Select Center (Default),标签的中间对齐坐标轴刻度;② Next to Ticks,标签的左边对齐刻度;③ Center Between Ticks,标签在相邻的刻度之间。
- 选中 Labels Stay with Axis 复选框,保证刻度标签总是邻近坐标轴,否则标签会在默认的位置,不随坐标轴移动。
- 在 Offset in % Point Size 中填入数字,控制刻度标签和坐标轴的位置关系。
- Special Ticks 组控制是否显示标签,包括:① Auto,使用默认的标签显示设置;② Hide,隐藏指定的标签;③ Show,在没有显示的情况下,显示指定的标签;④ Manual,显示文本框中的坐标值。

● Grid Lines 选项卡

Grid Lines 选项卡如图 4.78 所示。



图 4.78 Grid Lines 选项卡

- 选中 Major Grids 复选框,显示主格线,即通过主刻度平行于另一坐标轴的直线,然后从下面的下拉列表中选择线的颜色、类型和宽度。
- 同样可以选中 Minor Grids 复选框,显示次格线。
- Additional Lines 组中,选中 Opposite 复选框,则在选中轴的对面显示直线,本例中是在顶部,选中 $Y=0$ 复选框,在 $Y=0$ 处显示直线。

● Break 选项卡

Break 选项卡如图 4.79 所示。



图 4.79 Break 选项卡

- 选中 Show Break 复选框,在坐标轴上显示断点,并激活本选项卡中的其他选项。
- 在 Break Region 中填入坐标轴上断点的起始点和结束点。
- 在 Break Position 填入断点在坐标轴上的位置,图中填的是 35。
- 选中 Log10 Scale After Break 复选框,断点后面的坐标为对数坐标。
- 在 Scale Increment 中分别填入断点前后坐标刻度的递增步长。
- 在 Minor Ticks 中分别填入断点前后主刻度之间的次刻度的数目。
- 单击“确定”按钮,生成带有 Break 的 Graph 图形,如图 4.80 所示。

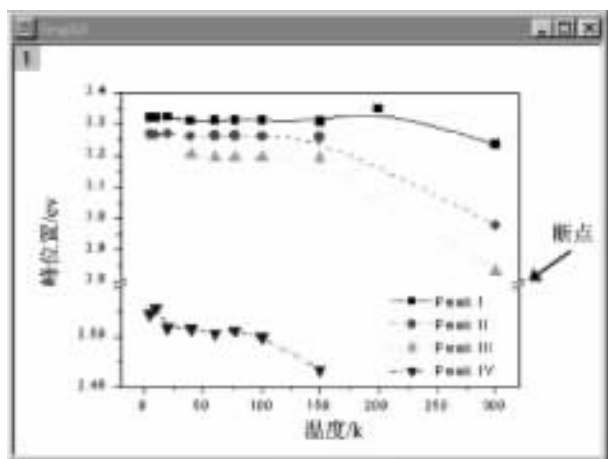


图 4.80 带有 Break 的 Graph 图形

4.8.3 图例和时间

Legend(图例)由图标和文本说明构成,用以区分图中的不同曲线。当制图时,会自动添加图例,但如果在添加其他图形时,不会更新图例(如果在 Plot Details 对话框的 Legends 选项卡中选中了 Auto Update 的话,会自动更新的,但这只能是针对一个 Graph 自动更新)。可以通过下列方法生成或更新图例:

- 选择 Graph| New Legend;
- 单击图例,从右击弹出的快捷菜单中选择 New Legend 命令。

这两个命令是给激活的图层中添加图例的,如果已经有了图例的话,则更新此图例。

图例中默认文本是对应的 Worksheet 列标题,如 ,双击图例变成 ,就可以进行编辑了,可以直接删除“%(1)”键入新内容,也可以使用 Origin 提供的替代符号,使用替代符号的前提是在 Label Control 对话框中选中 Link to Variables (% , \$)复选框,替代符号有:

- 如果想显示 Worksheet 中的某个数字,使用%(Worksheet 名称,列名称,行名称)格式,如%(data1,3,5),则在图标的后面显示 data1 中第 3 列第 5 行单元格中的内容;
- %(DataListPosition,@d),主要的的数据设置名称;
- %(DataListPosition,@c),列名称;
- %(DataListPosition,@w),Worksheet 名称;
- %(DataListPosition,@l),列标签中的所有内容;
- %(DataListPosition,@u),列标签中前两行内容,放在一行中显示,第二行加括号。

这些替代符号同样适用于添加文本。

若从图例右击弹出的快捷菜单中选择 Properties…命令,可以打开文本控制对话框,Origin 7.0 以前的版本就是在这个文本中编辑文本的。Origin 使用特殊的换码顺序符号 \L(DataListPosition)表示曲线图标,其中的 DataListPosition 为数据列表中的数据位置(图 4.2(a)快捷菜单的下端)。

如图 4.81 所示,图例的某些属性可以通过 Plot Details 对话框的 Legends 选项卡进行修改,选择 Format| Page 或在 Graph 窗口的灰色部分双击鼠标,打开 Plot Details 对话框,在左边窗口中选中 Graph,然后选中 Legends 标签,编辑图例。

- 选中 Full dataset name 复选框,图标后面的文本显示完整名称,为 Worksheet_column 格式。
- 选中了 Auto Update 复选框,图层中的数据曲线更新时,图标也自动更新。
- 如果图层中有几组数据的话,选中 Indicate Active Dataset 复选框,那么就可以通过单击曲线图标来选择该组数据,被选中的数据曲线图标带有小方框。
- Symbol Width 文本框中的数字可以控制图标的大小,为字体大小的百分比,如 200 表示为字体大小的 2 倍。

对于彩色映射图来说,还可以往图层里添加彩色刻度,选择菜单命令 Graph| New Color Scale 或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 New Color Scale 命令,则在图层上出现彩色刻度(如图 4.56 所示),双击该刻度或从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Properties 命令,打开 Color Scale Control 对话框,对该刻度进行个性化操作。

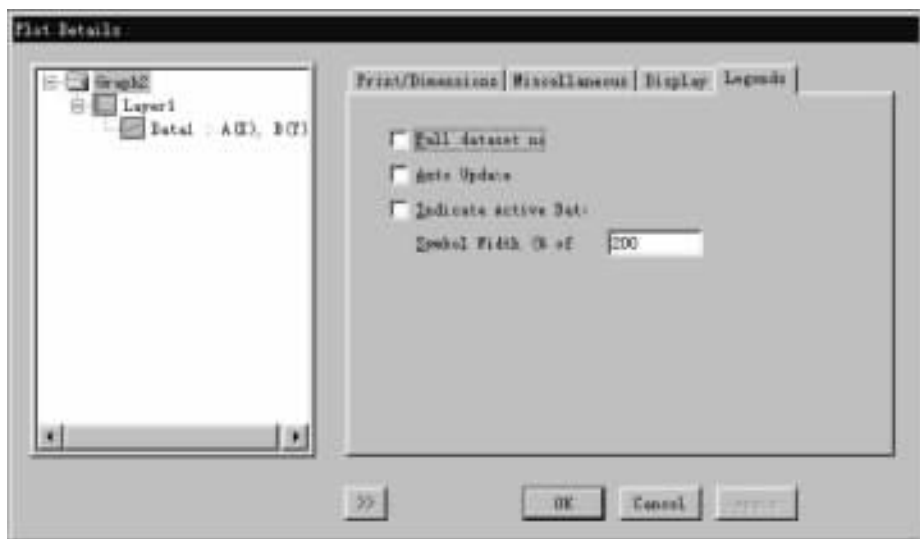


图 4.81 Plot Details 的 Legends 对话框

4.8.4 添加文本、时间、箭头线或其他注释

为了使图形更加直观、清楚,可以在图形中添加文本(Text)、时间(Time)、箭头(Arrow)、线条(Line)等标注和说明。

● 添加编辑文本说明

右击鼠标从快捷菜单中选择 Add Text 命令或单击 Text Tool 按钮 ,然后再在希望添加的地方单击鼠标即可打开文本框进行编辑。用户可以直接在文本框中输入字符,使用鼠标拖拉、放大/缩小或等中间出现  后旋转文本框,同时激活 Format 和 Style 工具条,其用法和其他程序中编辑文本时的用法类似,也可参考附录 A。直接在 Graph 窗口中编辑文本是 Origin 7.0 的新功能,就像 Photoshop 7.0 一样。

如果要输入其他符号的话,从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择命令 Symbol Map,打开 Symbol Map 符号库进行选择,如图 4.82(a,b)所示。如果用户经常用到某个符号,比如 α ,可以生成该符号的快捷键。选中 α ,右击鼠标从弹出的快捷菜单中选择 Assign Shortcut,打开 Assign Shortcut 对话框,选中的字符已经出现在字符串文本框里,从 Key 下拉列表中选择快捷键,单击 Add 按钮,该符号的快捷键就出现在下面的窗口列表中,如图 4.82(c,d)所示。若要删除,只要选中,按下 Delete 键即可。

在文本框中还可以计算简单的数学表达式,前提是在 Label Control 对话框中选中 Link to Variables (%,\$) 复选框,格式为 \$(expression),如在文本框中键入 The value of X is \$(pi^2),显示为 The value of X is 9.8696。

当然和编辑图例一样,也可以使用 Text Control 对话框编辑文本,选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 Properties...或 Ctrl+双击鼠标,打开 Text Control 对话框,如图 4.83 所示。

- 在 Background 下拉列表中选择文本的背景。
- 在 RotateCombination 复合框中选择或键入文本旋转的角度(单位为 $^{\circ}$)。
- 在 Size 复合框中选择或键入文本字体的大小。

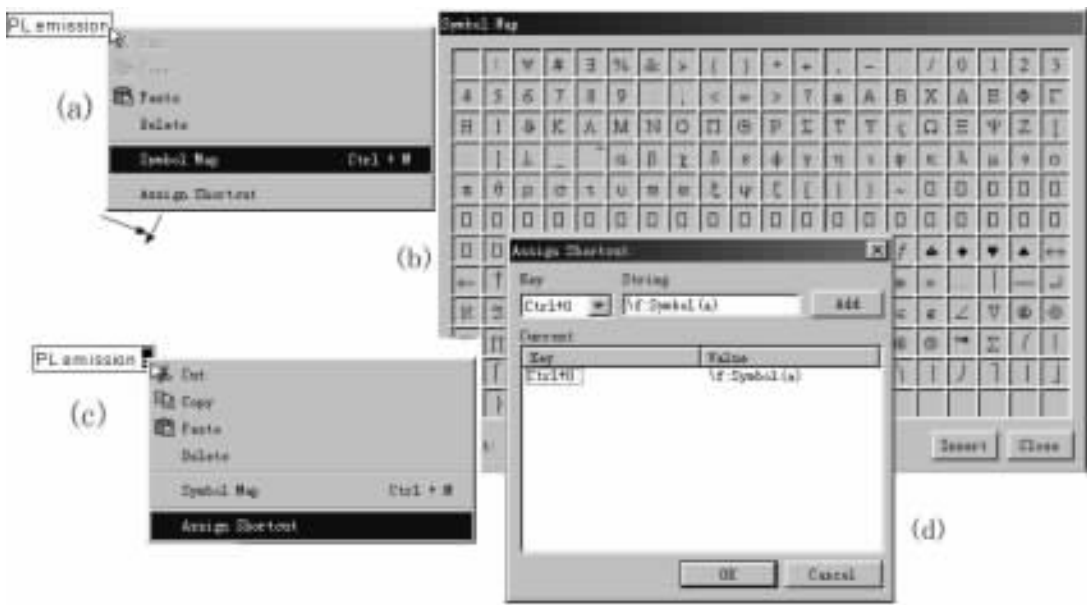


图 4.82 添加其他符号及其生成快捷键

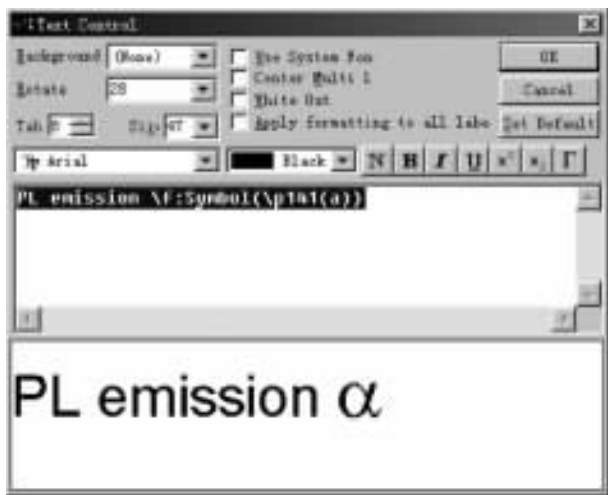


图 4.83 Text Control 对话框

- 在字体下拉列表中选择合适的字体。
- 选中 Use System Font 复选框,使用系统默认的字体,前面设置的字体无效。
- 选中 Center Multi Line 复选框,几行字处于中间对齐模式。
- 选中 White Out 复选框,分开文本中每行的白色背景。
- 选中 Apply formatting to all labels in layer 复选框,将此设置应用于图层中的所有文本。
- 后面的几个按钮是用来设置字体的颜色和格式的,包括粗体、斜体、上下标等。

● Label Control 对话框

选中对象然后选择 Format| Label Control 或 Alt+双击鼠标,就可以打开 Label Control 对话框,如图 4.84 所示,该对话框可以控制标签、文本和下面要介绍的绘制直线、图形属性等。

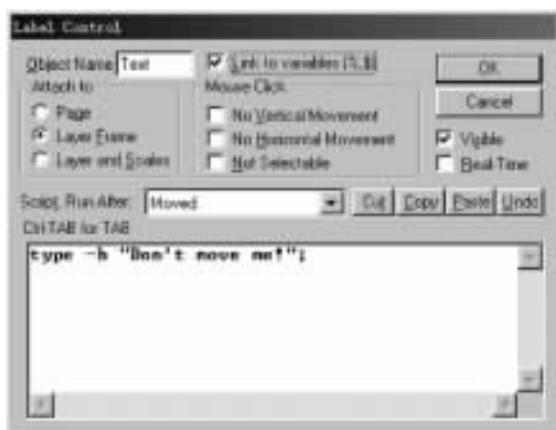


图 4.84 Label Control 对话框

- 在 Object Name 文本框中键入对象名称,该名称在执行程序脚本时很有用,对于单个对象,Origin 已经添加了默认的名称。
- Attach to 组中,提供了几个选项,可以将对象和页面、层、层刻度联系起来,在执行移动、改变页面等大小时,对象随之一起改变。
- 选中 Link to variables (%,\$)复选框,支持文本中的替代符号“%()”和换码符号“\”。
- Mouse Click 组中,选中 No Vertical Movement 复选框,只允许水平移动对象;选中 No Horizontal Movement 复选框,只允许垂直移动对象;选中 Not Selectable 复选框,不能使用 Alt 编辑对象。若编辑对象,则选择菜单命令 Edit| Button Edit Mode;若要退出该模式,则仍然选择该命令。
- 清除 Visible 复选框,Graph 中不显示对象,要编辑对象,则选择菜单命令 Edit| Button Edit Mode。
- 选中 Real-Time 复选框,实时更新标签。
- Script, Run After 下拉列表中提供了执行下面窗口中脚本命令的具体环境,其中的 None 为不执行脚本,其他选项为进行相应的操作时执行脚本命令:Bottom up,单击对象时执行;Moved,移动对象时执行;Sized,改变对象大小时执行等。

下面举例简单说明脚本命令的使用:

- 选中文本框,选择 Format| Label Control,打开 Label Control 对话框;
- 在 Script, Run After 下拉列表中选中 Moved;
- 在脚本窗口中键入: type-b "Don't move me !";
- 单击 OK 按钮。

这样,当移动文本框时,就会弹出 Don't move me ! 提示信息。

● 文本中的换码顺序符号

在图 4.83 中已经知道,文本框中输入 \f;Symbol(\p141(a)),则显示框中显示希腊字母

α, 其中的“\”为换码顺序符, 后面为控制字符命令, 括号中的字符就会做相应的改变。如果使用 Text Control 对话框中的格式按钮, Origin 会自动添加格式为“\控制字符(文本)”的命令。用户也可以指定命令, 下面以“PL\控制字符(emission)”为例, 说明 Origin 的格式命令, 如表 4.1 所列。

表 4.1 换码顺序符号命令

控制符号	显示效果	说 明
PL\v(emis\ision)	Plemis\sion	显示中间的反斜杠
PL\+(emission)	PL ^{emission}	上标格式
PL\-(emission)	PL _{emission}	下标格式
PL\=(sion, emis)	PL ^{emis} _{sion}	上下标格式
PL\i(emission)	PL emission	斜体显示
PL\b(emission)	PL emission	粗体显示
PL\g(emission)	PL $\epsilon\mu\sigma\sigma\iota\upsilon$	希腊符号
PL\ab(emission)	PL ^{emission}	显示上划线
PL\ad(emission)	PL [•] emission	上面显示小圆点
PL\f;fontname(emission)	PL [•] emission	改变字体, 其中的 fontname 代表字体名称, 这里是 Arial

注意: 如果在 Graph 窗口中编辑, 则不支持反斜杠控制符。

● 添加日期/时间标记

可添加日期/时间标记到 Graph 图形中, 以便于管理。单击 Graph 工具条中的 Data & Time 按钮, 则 Origin 将日期时间标记添加到 Graph 图形中, 格式为“02-12-9 11:03:16”, 可以打开 Text Control 修改字体、颜色、大小等。

● 添加线、箭头线及其他图形

添加直线或箭头, 单击 Tool 工具条 Line 按钮或 Arrow 按钮, 在 Graph 窗口中直接绘制即可, 若绘制水平或垂线, 则画线时按下 Shift 键。

绘制曲线箭头的话, 单击 Tool 工具条 Curved Arrow tool 按钮, 然后在 Graph 窗口中单击鼠标四次, 沿着这四个点, 按照 Bezier 曲线绘制成一条箭头曲线; 单击 Polyline tool 按钮, 绘制折线, 双击鼠标或按下 Esc 键结束绘制; 单击 Freehand Draw tool 按钮, 按下鼠标左键绘制任意线。双击曲线, 打开 Object Properties 对话框, 编辑其显示效果, 如图 4.85 所示, 该对话框包括四个选项卡:

- Line 选项卡, 可以编辑线的颜色、形状、宽度, 还可以设置直线为水平或垂直;
- Arrow 选项卡, 可以设置线的开头/结尾处箭头形状、大小等;
- Coordinates 选项卡, 指定线的起始、结尾位置, 该功能可以将直线指定到某一水平位置, 如从 unit 下拉列表中选中 Scale, 在 Begin 中添入 $X=0, Y=1$, 在 End 中添入 $X=10, Y=1$, 则在 $Y=1$ 处绘制出平行于 X 轴的直线;
- Control 选项卡, 如图 4.85 所示, 在 Name 文本框中显示对象的名称, 用户可以根

据需要键入自己的名称;在 Attach to 组中,可以选择该线和 Graph 中的某个组件联系在一起,移动组件时随着一起移动;选中 Visible 复选框,显示对象并可以选中,去掉该选择,不显示对象,此时要编辑对象的话,选择 Edit | Button Edit Mode,退出编辑仍然选择此命令;选中 Selectable 复选框,可编辑对象,去掉该选择,不能编辑对象,若此时编辑对象,则选择命令 Edit | Button Edit Mode,退出编辑仍然选择此命令;Disable 组中提供了激活和取消水平移动、旋转、编辑等功能。



图 4.85 Object Properties 对话框

同样单击 Tool 工具条中的其他按钮,可以添加方框、圆和椭圆等图形,这时的 Object Properties 对话框会包含 Border, Fill Pattern 和 Dimensions 选项卡,其用法比较简单,就不再介绍了。对于绘制好的图形除了使用 Object Properties 对话框进行编辑外,还可以在 Graph 窗口中直接进行以下操作。

- 旋转和拖动。单击选中对象,在对象周围出现黑方点,就可以直接拖动对象了,将鼠标放在边框的点处,使之变成“↔”形状,就可以缩放对象了;单击对象,然后再单击(不是双击),在对象中间出现⊕,周围的方点变成圆点,将鼠标移至角上变成带箭头的半圆弧线,就可以旋转图形;再单击鼠标,变成三角点,此时只能拖动对象;再单击鼠标,变成紧贴对象的方点,可以单独修改对象中点的位置,如图 4.86 所示。

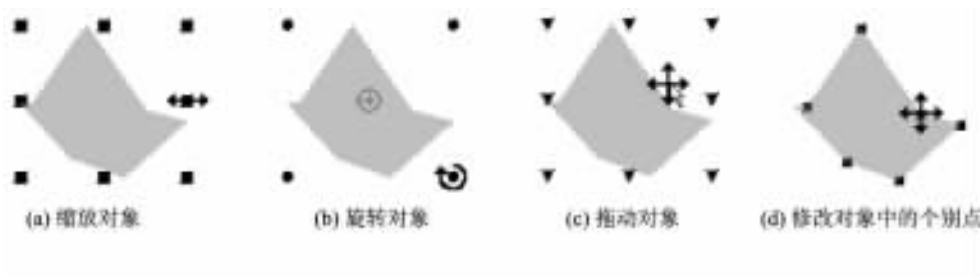


图 4.86 在 Graph 窗口中编辑对象

- 组合和对齐对象。按下 Shift 键,选中几个对象,单击 Object Edit 工具条 Group 按钮 ,组合对象,对于组合的对象,单击 Ungroup 按钮 取消组合。利用 Object Edit 工具条中的其他按钮还可以进行对齐、统一宽度和高度、使对象提前或退后等操作。
- 隐藏对象,选择 View| Show| Labels 可以隐藏显示对象。

4.8.5 更改 Graph 的显示效果

Origin 有两种主要的显示效果,最大化对象和减少刷新时间,Origin 提供的这些显示模式的目的是方便图形的整体预览和增加刷屏速度,这些显示预览包括以下几种模式。

- 打印模式 选择 View| Print View 或选择在页面边上右击鼠标弹出的快捷菜单 Print View 命令,这种显示模式就是打印机最后打印的效果图形。
- 页面模式 选择 View| Page View,这种显示模式屏幕刷新速度较快,但不能精确地确定文本在窗口中的位置。
- 窗口模式 选择 View| Window View,这种显示模式将图形展宽,添满整个 Graph 窗口,此时不能显示窗口外灰色区域的标签和按钮等。
- 草稿模式 选择 View| Draft View,这种显示模式的刷屏速度最快,页面自动调整大小,添满 Graph 窗口,以方便用户编辑感兴趣的部分,但这种模式不能旋转页面。
- 全屏模式 选择 View| Full Screen,全屏显示图形,单击鼠标退出显示模式。这种显示模式将图形添满整个显示屏,只是预览,不能在此模式中编辑,按钮也不能显示出来。

显示模式也可以通过 Miscellaneous 选项卡来选择,另外该选项卡也提供其他功能,选择 Format| Page 或在 Graph 窗口的灰色部分双击鼠标,打开 Plot Details 对话框,在左边窗口中选中 Graph1,选择 Miscellaneous 选项卡,如图 4.87 所示。

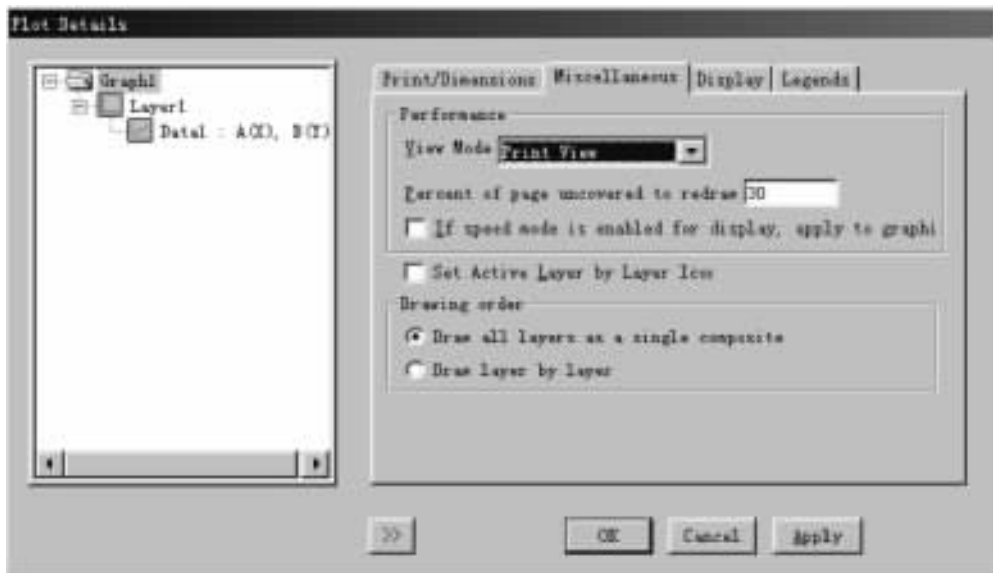


图 4.87 Plot Details 对话框的 Miscellaneous 选项卡

- 在 View Mode 下拉列表中选择 Graph 窗口的显示模式,包括 Print View,Page View, Window View 和 Draft View。
- 当 Graph 窗口未激活,部分隐藏在其他窗口后面,在 Percent of page uncovered to re-draw page 文本框中填入一阈值,如果未被覆盖部分超过该值,移动前面窗口时,后面窗口刷新;如果未被覆盖部分低于该值,移动前面窗口时,后面窗口不刷新。
- 用户在导出图形或将图形复制到剪贴板时,选中 If speed mode is enabled for display, apply to graphic export as well 复选框可以激活加速模板。
- 选中 Set Active Layer by Layer Icon Only Check Box 复选框,使得只能通过单击图层标记激活该层。

Plot Details 对话框中的 Legends 选项卡在前面已经介绍过了,Print/Dimensions 选项卡是用来控制页面尺寸的,Display 选项卡是用来控制页面的显示的,下面予以分别介绍。

● Print/Dimensions 选项卡

Print/Dimensions 选项卡如图 4.88 所示。



图 4.88 Print/Dimensions 选项卡

- Dimensions 组中,在 Units 下拉列表中指定单位,在 Width 和 Height 文本框中填入页面的宽度和高度。对于通过模板绘制的图形来说,选中 Set to printer dimension when opened from a template 复选框,自动更正页面尺寸适应打印机驱动器。
- 如果图形尺寸小于打印尺寸的话,打印时被放置在左上角位置;如果大于打印尺寸的话,则分页打印;清除 Width 和 Height 复选框,按照 Dimensions 组中的长宽设置进行打印;选中 Width 和 Height 复选框,会自动调整,以适应页面。
- 选中 Print CropMarks 复选框,显示不在打印页面区域上的标记。

● Display 选项卡

Display 选项卡如图 4.89 所示。

- Background 组中可以设置页面的颜色,如果选中了 None,图形被复制到剪贴板时,背景为透明的。在 Base Color 下拉列表中选中一种颜色后,激活 Gradient 下拉列表,从中可以选择颜色渐变,选中后,激活下面的 Gradient 控制框,包括从上到



图 4.89 Display 选项卡

下、从左到右、中间到周围等颜色渐变方式。

- 如果坐标轴上有断点,图形是 Line 或 Line+symbol,则参考 4.8.2 小节 Break 选项卡,选中 Connect line across Axis Break 复选框,将断点两端的曲线连接起来。
- 如果曲线中缺少了一个或几个点,图形是 Line 或 Line+symbol 的话,曲线会在缺少点处断开,选中 Connect line across Missing Data 复选框,将曲线连到一起。

4.9 Graph 的输出

选择 File| Export Page,将 Graph 图形导出为图片格式的文件,可以直接插入到其他应用程序中,这时不能应用 Origin 进行编辑,只能使用目标应用程序工具进行编辑,具体可参考 8.3 节 Layout 页面的输出。

4.9.1 Graph 之间的切换

如果想将一个 Graph 窗口中的图形复制到另一个 Graph 窗口中,则可以选择 Edit| Merge All Pages,或者使用剪贴板将图片粘贴到其他 Graph 窗口中。

4.9.2 输出到其他程序中

有两种方法可以将 Graph 图形插入到其他应用程序:一种是将 Graph 图形复制到其他程序中,数据就相应地保存到目标应用程序;另一种是链接到目标应用程序,这时数据仍然保存在 Origin 文件中。

使用剪贴板将 Graph 图形粘贴到其他应用程序中,可以单独保存 Graph 窗口,也可以不保存。选择 Edit| Copy Page,则将 Graph 窗口中的图形复制到剪贴板,可以粘贴到其他程序中去,如 Word,在 Word 窗口选择“粘贴”,即可将图形作为 Origin 文件粘贴到 Word 页面中,成为其中一个对象。下面就来谈谈图形在 Word 中粘贴的问题。

如果选择“编辑”|“选择性粘贴”，弹出“选择性粘贴”对话框，如图 4.90 所示。选中“粘贴”复选框，在窗口中选择“Origin Graph 对象”，则在说明部分出现：将“剪贴板”中的内容插入到您的文档中，以便您可以用“Origin Graph”来编辑它。单击“确定”按钮，完成粘贴过程，其效果和直接选择粘贴命令相同。

如果在“选择性粘贴”对话框中选择“图片”，则在说明部分出现：以“图片（此格式对于打印到高质量打印机而言要好于位图格式，而且“图片”格式占用的空间比较少，Word 可以绘制得更快）”的形式插入“剪贴板”的内容。这时插入的图形不能使用 Origin 工具编辑，是图形格式。

如果在对话框中选择的是“粘贴链接”复选框，则在说明部分出现：以“图片”的形式插入“剪贴板”的内容。“粘贴链接”可以创建访问源文件的快捷方式，以便将对源文件的修改反映到您的文档中。这样，对源文件的任何修改都会对 Word 文档中的图形作相应的改动。

如果在对话框中选择“显示为图标”复选框，则在目标文件中只显示 Origin 图标 ，而不显示具体 Graph 图形。



图 4.90 “选择性粘贴”对话框

4.9.3 将 Graph 图形插入其他应用程序中

下面以将图形插入到 Word 软件为例来说明将 Graph 图形插入到其他应用程序中的操作，对于不同的软件来说，其方法不同，需要参考应用程序使用指南。

在 Word 中选择“插入”|“对象”，打开“对象”对话框，如图 4.91 所示。从对象类型列表中选择 Origin Graph，单击“确定”按钮，同时启动 Origin，进入 Graph 界面进行编辑，在 Word 窗口中显示该 Graph 图形。

如果单击“由文件创建”标签，单击“浏览”按钮，找到目标文件，可以将已有的 *.OGG 文件直接插入到 Word 文档。

将 Graph 图形复制或插入到其他应用程序中（如 Word）后，双击该图形，可以直接进入到 Origin 界面进行编辑。在编辑的过程中，选择“File”|“更新目标文件”，就可以更新 Word 中的图形了，也可以不选择此命令，完成修改后直接关闭 Origin；或选择“File”|“退出并回到目标文件”，就可以将修改后的图形直接保存到 Word。

如果想要直接在其他应用程序中编辑 Graph 图形的话，选中 Option 对话框 Graph 选项卡中的 Enable OLE In-place Activation 复选框（参考 2.8.2 小节的 Graph 选项卡），但这样，

Origin 中的许多命令不能用,建议用户不要使用该模式。



图 4.91 Word 中插入“对象”对话框

4.9.4 打 印

打印是最常见的输出方法之一。与其他应用程序一样,打印操作比较简单,选择 File | Print,就可以执行打印操作了。本节重点介绍 Origin 图形打印的特有之处。

● 元素显示控制

Origin 提供了菜单命令来控制 Graph 窗口中各元素的显示,在 Graph 窗口中显示的元素都可以打印输出;相反,如果元素没有显示在 Graph 窗口中,就不能打印出来,所以在打印前要选择其显示属性。

选择 View | Show 打开其子菜单,如图 4.92 所示,选项前面带“√”的表示该选项已经被选中,图 4.58 的 Graph 图形按照该选项的显示效果如图 4.93 所示。



图 4.92 元素显示控制子菜单

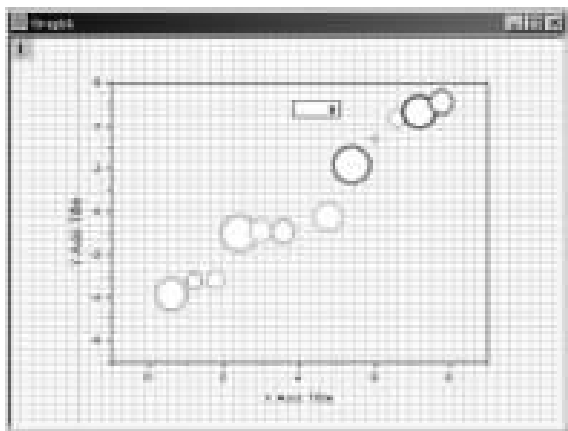


图 4.93 控制显示元素

● 页面设置

与其他应用程序类似,对页面的设置步骤如下所述。

选择 File | Page Setup,打开页面设置对话框,如图 4.94 所示,在这里可以选择纸张的大小和方向等。

如果在这里更改了页面的方向的话,Origin 会自动更新 Plot Details 对话框 Print/Dimensions 选项卡中页面的设置。



图 4.94 “页面设置”对话框

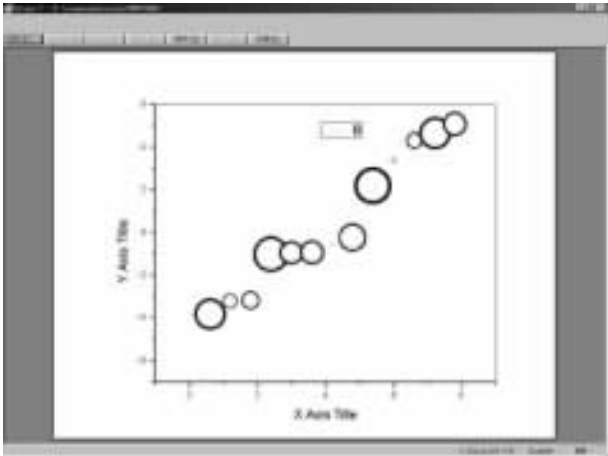


图 4.95 “打印预览”窗口

● 打印预览

与其他应用程序一样,Origin 提供了打印预览功能。可以通过打印预览查看 Graph 页面中图形的位置是否合适,是否符合打印纸的要求,各元素是否处于适当的位置等。

Origin 有两种预览模式:Print Preview(打印预览)和 Print View(打印显示)模式。

选择 View| Print View,进入打印显示模式,该模式可以使用所有 Origin 工具进行编辑,参考 4.8.5 小节。

选择 File| Print Preview, 转换到打印预览窗口, 如图 4.95 所示。在此显示模式下不能编辑 Graph 图形, 但显示了打印页面效果, 包括页边距, 窗口顶部为工具栏, 包括“放大”和“缩小”等命令按钮, 用来调节显示比例。

退出打印预览模式, 单击“关闭”按钮或按下 Esc 键。

● 打 印

设置好页面, 得到满意的显示效果后, 就可以打印了。Origin 使用 Windows 默认的打印机进行打印。

激活要打印的子窗口, 选择 File| Print 或右击子窗口的标题栏, 从快捷菜单中选择 Print (图 4.2(b)), 打开 Print 对话框, 如图 4.96 所示。

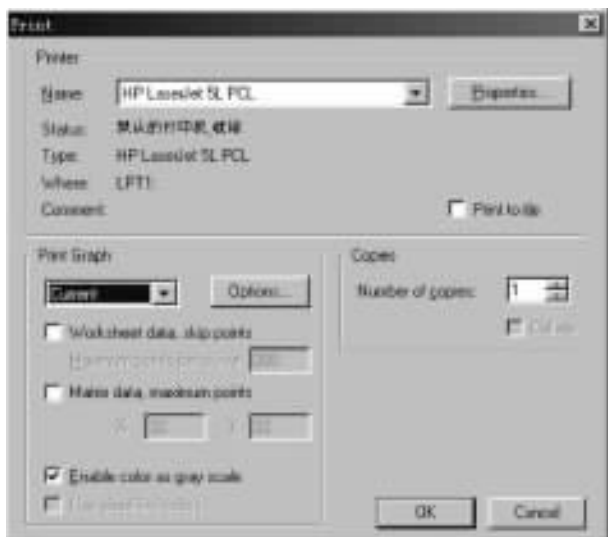


图 4.96 激活 Graph 窗口时的 Print 对话框

注意: 单击 Standard 工具条上的 Print 命令按钮 , Origin 将按照系统默认的设置直接打印当前激活的子窗口。

如果要在 Project 管理器文件夹中打印子窗口, 首先选中该子窗口的图标, 右击鼠标, 从快捷菜单中选择命令 Print Windows, 则 Origin 将按照系统默认的设置直接打印该窗口。

注意: Windows 包括两种字体显示方式: 矢量字体和 TrueType 字体。

矢量字体包括 Roman, Modern 和 Script 三种, 根据需要使用软件设置字体的特征。

TrueType 字体也包括三种: Arial, Times New Roman 和 Symbol, 这些字体是可伸缩的, 打印的效果和显示器上看到的完全相同, 这些字体可以通过 Windows 控制面板进行设置。

由于在 Graph 个性化过程中, 可伸缩字体通常会随着页面大小调整而改变其大小、旋转方向, 建议用户使用 TrueType 字体。

- Printer 组, 在 Name 下拉列表中选择打印机, 如果没有要选择的打印机, 则可以在 Windows 的打印机中添加。单击 Properties 按钮打开打印机属性对话框, 从中设置纸张、图形和字体等属性。选中 Print to File 复选框, 可以把所选的窗口打印到文件, 创建 PostScript 文件。
- 在 Copies 组的 Number of copies 下拉列表中选择要打印的份数, 默认的设置 1。

- Print Graph 组,当激活的窗口为 Graph 或 Layout 窗口时,对话框如图 4.96 所示。在 Print Graph 下拉列表中给出了三个选项:Current, All open 和 All,分别表示打印 Project 中当前激活的、所有打开的和 Project 中所有的 Graph, Function graph 和 Layout 页面。
- Worksheet data, Skip points 复选框,控制打印图形上曲线的点数,以提高打印速度。选中该复选框,激活 Maximum points per curve 文本框,在此指定打印每组数据曲线的最大点数,如果数据点的个数小于指定的数目时,此设置不起作用;如果数据组中点数超过规定的数目时,Origin 不打印多余部分点,在数据组中均匀取值,该设置不影响 Worksheet 中的数据 and 显示器上的显示方式,但会影响到虚线和阴影的打印效果。同样,如果 Matrix 中包含了大量的数据点时,Matrix data, maximum points 控制打印其图形时的最多点数。
- 当使用黑白打印机时,Enable color as gray scale 复选框激活,选中该复选框,Origin 将彩色图形输出到打印机,映射为灰度图形打印;如果不选此复选框,Origin 将非白颜色均视为黑色,输出黑白图形。当使用多于两种颜色的打印机时(不一定是彩色打印机),激活 Use simplified colors 复选框,清除此复选框,Origin 将彩色图形输出到打印机,打印机根据其最佳功能来打印图形;选中此复选框,Origin 按照使用黑白打印机选中 Enable color as gray scale 复选框时的方式打印灰度图。
- 单击 Options 按钮,打开 More Print Options 对话框,如图 4.97 所示。在 Graph Page Size 组中显示了当前 Graph 页面大小,页面大小和该页面 Plot Details 中 Print/Dimensions 选项卡中指定的大小相同。Printer Page Size 组显示了打印页面的尺寸,如果图形小于打印纸,则将图形打印在纸的左上角;如果大于打印纸,则多页输出;但如果选中 Width 和 Height 复选框的话,则按照纸的大小打印。要在打印纸上对未打印部分做出标志的话,则选中 Print Cropmarks 复选框。

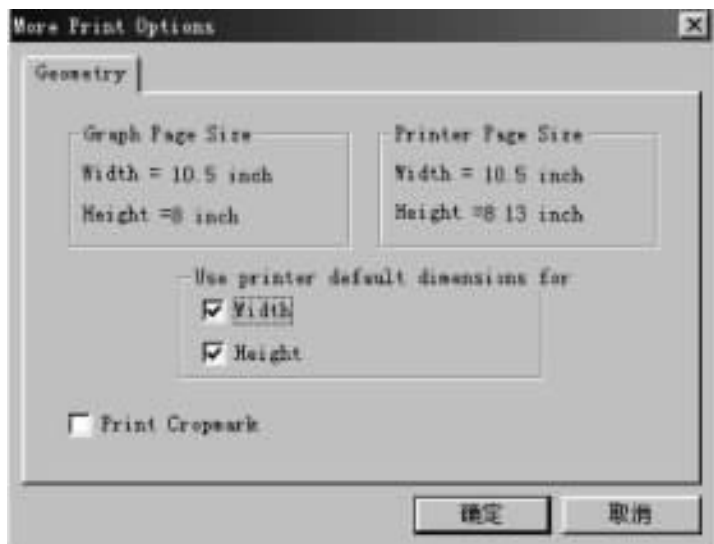


图 4.97 More Print Options 对话框

- 当激活窗口为 Worksheet 或 Matrix 时,Print Graph 组变为 Print,如图 4.98(a)所示,选择 Selection 复选框,则可以指定行和列的起始和结束序号,打印某个范围内的数据。
- 当激活窗口为 Excel 工作簿时,Print Graph 组变成“范围”如图 4.98(b)所示,Origin 提供了两组选择打印范围的方法:①范围,可以选择打印全部工作簿,也可以选择打印页码的范围;②打印,可以打印选定区域、选定的工作簿或整个工作簿。
- 当激活的窗口为 Note 窗口时,Print Graph 组变成“打印范围”如图 4.98(c)所示,从中可以选择打印全部内容或页码范围。

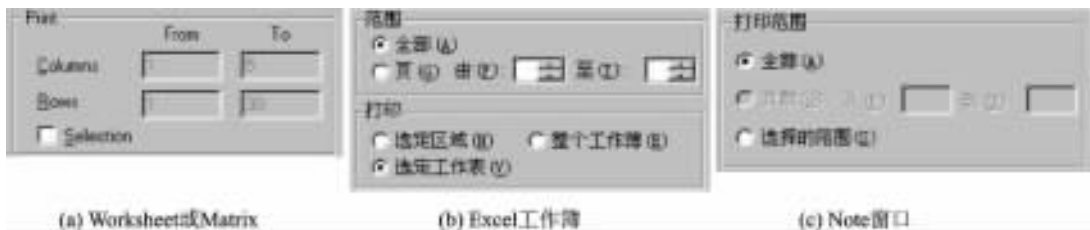


图 4.98 激活不同窗口时的 Print 窗口 Print Graph 组显示

● 保存为打印文件

PostScript 文件是一种文件生成语言,PostScript 打印机包含解释 PostScript 编码的驱动器并提供了直接打印文件的方式。操作步骤如下:

- 在图 4.96 的 Print 对话框中选择一台 PostScript 打印机;
- 选中 Print to file 复选框;
- 单击 OK 按钮,打开“印出到文件”对话框,如图 4.99 所示,选择合适的文件和路径,单击“保存”按钮,就可以将选定窗口保存为指定的打印文件了。



图 4.99 “印出到文件”对话框

第 5 章 Origin 中的 Excel

如果用户计算机中安装了 Excel 97 或更高级的版本,就可以在 Origin 中进行 Excel 操作了,这样就可以充分地将 Excel 的电子表格功能和 Origin 的强大制图功能有机地结合起来。

本章的主要内容:

- Excel 工作簿给 Origin 界面带来的变化;
- 根据 Excel 工作簿中的数据制图;
- Origin 中 Excel 工作簿的管理;
- 使用 Origin 7.0 中 Excel 可能遇到的问题。

5.1 Excel 工作簿给 Origin 界面带来的变化

在 Origin 7.0 界面中可以打开 Excel 工作表,这要求用户的计算机同时装有 Microsoft Excel 应用程序(Microsoft Office 97 或更高级版本),在这里可以完成几乎所有 Excel 工作。

打开 Excel 工作表后,菜单栏包括三个 Origin 菜单:File,Plot 和 Window,其他菜单均转变为 Excel 菜单命令,这时 Window 下拉菜单命令中添加了一些其他 Origin 7.0 窗口下拉菜单中的命令,比如 Option 和 Toolbar 等,另外附加的一项命令是 Create Matrix,将选中的 Excel 数据转换成 Matrix 数据。

相应地,在工具栏中出现 Excel 的工具条,具有 Excel 编辑、插入和计算等功能,如图 5.1 所示。

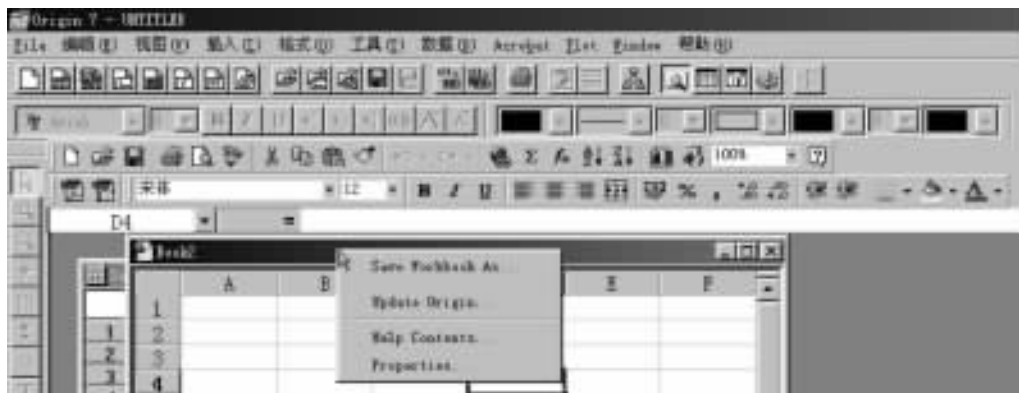


图 5.1 在 Origin 7.0 中打开 Excel 工作簿

此时,Origin 会提供 Origin 和 Excel 的快捷菜单,在工作簿中的快捷菜单和在 Excel 中相同,在工作簿标题栏处的快捷菜单如图 5.1 所示,包括:

- Save Workbook As 保存该工作簿,打开保存为 Excel 文件提示对话框;
- Update Origin 在下列情况下更新 Origin:①如果已经用工作簿的一个电子表格的数据制图,重命名了这个表格后,该命令打开对话框,更新图形数据和源数据表之间的关系;②如果包含数据的工作簿窗口,或其他包含工作簿数据的窗口不能正确显示数据的话,该命令可以使之重新显示;
- Help Contents 打开 Origin 帮助文件;
- Properties 打开 Workbook Properties 对话框,进行重命名和指定保存工作簿格式操作。

5.2 利用 Excel 工作簿数据制图

Excel 工作簿是 Origin 的一个子窗口,可以进行重命名、重排、保存和删除等操作,其操作和其他子窗口操作一样。对于电子表格的操作可参考有关 Excel 的图书,这里就不再介绍了,重点介绍 Excel 工作簿数据和 Origin 制图的有机结合部分。

在 Origin 中,有多种方法使用 Excel 工作簿数据制图,包括在新 Graph 窗口中制图或将数据添加到现有的 Graph 窗口中。下面是几种常用的方法。

5.2.1 对话框法

这种方法是利用 Select Data for Plotting 对话框来选择工作簿数据,是 Origin 默认的选择。该窗口可以用鼠标调整大小,如果清除了 Options 对话框中 Excel 选项卡的 Default Plot Assignments 复选框,可以通过下列步骤进行制图。

- 激活 Excel 工作簿,单击 2D Graphs,2D Graphs Extended 或 3D Graphs 工具条上的制图按钮,打开 Select Data for Plotting 对话框,如图 5.2 所示。

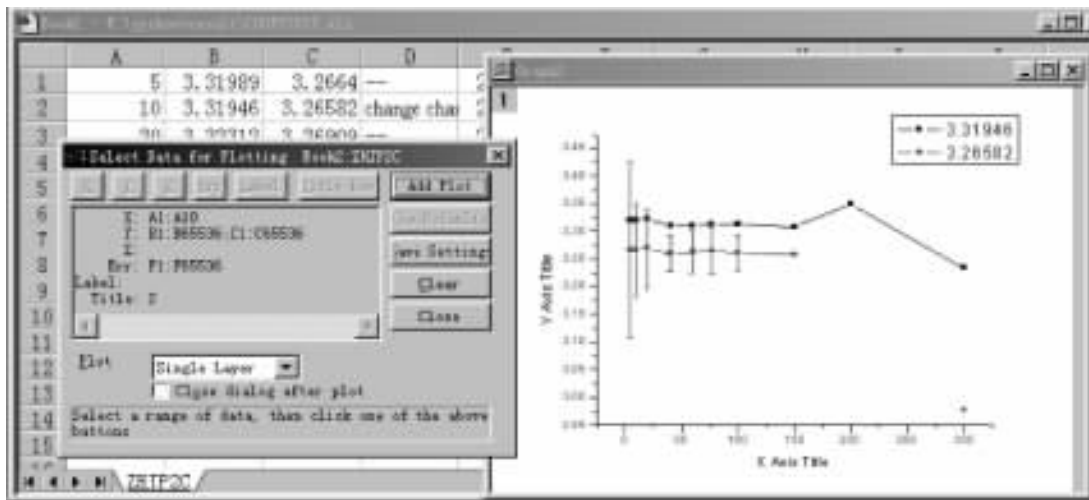


图 5.2 使用 Select Data for Plotting 制图

- 选中 Excel 工作簿中的列或列的一部分,单击 Select Data for Plotting 对话框中的 X 按钮,将其设置为 X。
- 用同样的方法可以设置 Y 或 Z 列,如果按下 Ctrl 键或 Shift 键,可以同时选中多个列,也可以设置误差列、标签和图例。
- 如果要修改选项的话,重新选择数据,单击按钮。
- 如果选择多个 Y 列或 Z 列的话,激活 Plot 下拉列表,从中选择将图形绘制在一层中 (Single Layer),绘制在多层中 (Multiple Layers),或是绘制在多个窗口中 (Multiple Pages)。
- 如果打开该对话框后,想要改变工作簿的话,选中另外一个工作簿,Plot 按钮变成了 Change Book 按钮,单击可以实现改变工作簿。
- 如果激活了 Graph 窗口的话,Plot 按钮变成了 Add Plot 按钮,单击该按钮可以将选中的数据添加到激活的 Graph 窗口中。
- 如果选中了数据而没有选择制图类型的话,会激活 Use Defaults 按钮,单击该按钮按照默认的模板制图,参考第 2.8.2 小节的 Excel 选项卡。
- 单击 Plot 按钮,结束制图。

在对话框中,命令按钮下面的文本框显示出了选择的数据类型和范围。如 X:A1:A10 表示 A 列的第 1 行到第 10 行设置为 X,如果选中整个 A 列的话,显示为 A1:A65536。

5.2.2 激活数据用默认的方式制图

这种方式简化了制图步骤,不需要对话框,只要在工作簿中激活了数据,然后选择制图命令或单击相应的制图命令按钮就可以制图了,但要确信激活数据的设置。该方式不是 Origin 默认的制图方式,需要在 Options 对话框的 Excel 选项卡中选中 Default Plot Assignments 复选框(参考 2.8.2 小节)。

这种情况下选择数据的时候需要注意和 Origin 内置的模板相搭配,具体说明如下:

- 选中一列数据,默认为 Y 列,并将 X 列设置为行号;
- 如果选中几列的话,最左边的列设置为 X 值,所有的其他列设置为 Y 值进行制图;
- 如果在选择几列时使用了 Ctrl 功能键,则这几列均为 Y 列,并将行号设置为 X 列进行制图。

以上三种情况适用于单击下列模板按钮或选择相应的菜单命令制图:二维折线、散点、折线+符号图、二维柱状、二维条状图、三维柱状图等。

对于双 Y 轴图形和 Fill area 图形来说,如果选中了两列,则均被默认为 Y 值,将行号设置为 X 值;如选中了三列,则第一列为 X 值,其他列为 Y 值。

对于 Floating bar/column 图形来说,按下 Ctrl 键选择几列,均为 Y 值,行号为 X 值;如果选择多于三列,则第一列为 X 值,其他列为 Y 值。

对于 Color map 或 Bubble 图形来说,选中两列,则均为 Y 值;选中三列,第一列为 X 值,其他列为 Y 值。

对于其他模板图形来说,用户可根据图形的特征结合上面介绍的选择方式进行选择。

5.2.3 拖放法

选中 Excel 工作簿中的数据,用鼠标将其拖动到 Graph 窗口中去,即可实现制图,但这种方法采用 X、Y 等默认设置(参考 5.2.2 小节)。

该方法需要一个打开的 Graph 窗口和激活的 Excel 窗口,图形的类型在 Options 对话框 Graph 选项卡的 Drag and Drop Plot 下拉列表进行设置,参考 2.8.2 和 4.3.6 小节。制图步骤如下:

- 选中 Excel 工作簿中的数据;
- 在选中的工作簿数据边缘按下鼠标,将数据拖动到 Graph 窗口中,释放鼠标,完成制图过程,如图 5.3 所示。

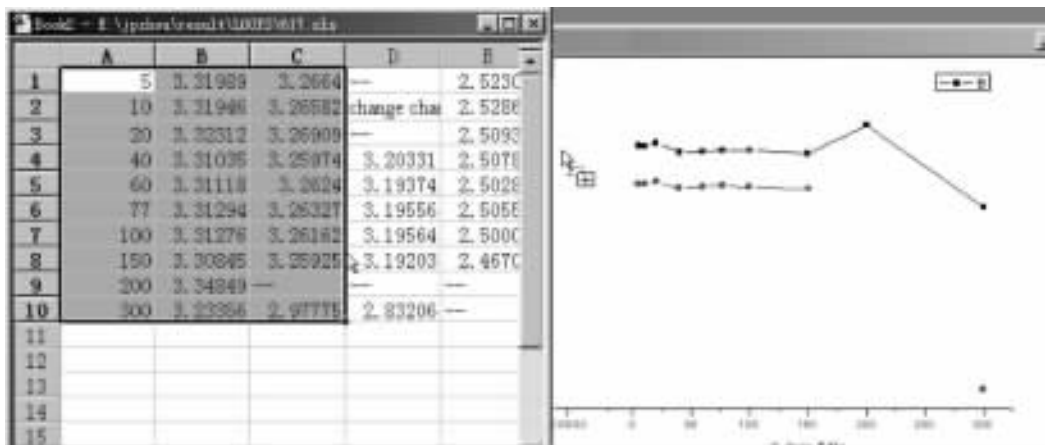


图 5.3 鼠标拖动制图

第 4 章中的大部分制图方法同样适用于 Excel,比如使用 Layer n 对话框、Select Columns for Plotting 对话框等,这里就不再详细介绍了。

注意:做过 X 射线结构分析的用户可能会遇到这样的问题,为了节约空间,计算机采集的数据不是按照列排列的,其排列方式和数学用表一样,读完一行再读下一行,这样的话,制图时读取数据就比较困难,这时可以使用 VBA(Visual Basic Application)程序解决,将数据读入 Excel 工作簿,在宏编辑器中执行下列程序即可。

```
Public Sub calculate()
    For i = 1 To 900
        For j = 1 To 5
            Me.Cells((i * 5 + j) - 5, 7) = Me.Cells(i, j)
            Me.Cells((i * 5 + j) - 5, 6) = 10 + 0.02 * ((i * 5 + j) - 5) - 0.02
        Next j
    Next i
End Sub
```

5.3 Origin 7.0 中 Excel 工作簿的管理

当 Origin 中有 Excel 工作簿窗口时, Excel 是通过链接到 Excel 软件生成的, 是 Origin 中一个特殊的窗口。

5.3.1 打开 Excel 工作簿

在 Origin 中可以打开一个已有的 Excel 工作簿, 也可以生成新工作簿。

打开 Excel 工作簿, 选择 File| Open Excel 或单击 Standard 工具条 Open Excel 按钮, 打开 Excel 对话框, 选择好文件, 单击“打开”按钮, 会弹出 Open Excel 对话框(图 2.34), 在该对话框中有两项选择:

- Open as Excel Workbook 选项, 用户可以在 Origin 环境中使用 Excel 电子表格的所有功能来处理数据, 也可以使用 Origin 工具进行制图, 分析数据; 保存 Project 文件时, 默认地保存文件为到源工作簿的链接, 更新 Excel 数据时, 会更新源文件的数据。
- Open as Origin Worksheet 选项, 作为 Origin Worksheet 打开, 不具备 Excel 电子表格功能, 没有和源工作簿链接, 更新数据时, 不会影响到源数据。如果在工作簿中有公式, 则只显示计算结果, 如果和其他工作簿有链接的话, 该链接会中断。

如果 Excel 工作簿中含有几个表格的话, 选中 Open as Origin Worksheet 选项, 会在 Worksheets 列表中显示出来供选择, 可以选择一个, 也可以使用 Shift 或 Ctrl 功能键选择多个。

生成新 Excel 工作簿, 选择 File| New 或单击 Standard 工具条 New Excel 按钮, Origin 会自动命名为 Book*n*, 该工作簿带有四个电子表格。

5.3.2 保存 Excel 工作簿

Excel 工作簿像其他子窗口一样, 可以单独保存, 扩展名为 *.XLS。选择标题栏的快捷菜单命令 Save Workbook As 或选择 File| Save Window, 打开保存对话框进行保存。

选择 File| Save Project 或单击 Standard 工具条 Save Project 按钮, 那么 Project 文件中的所有子窗口都随之一起保存。如果有 Excel 工作簿, 可以保存到 Project 文件中, 也可以保存为和 Excel 源工作簿的链接。

如果保存为源工作簿的链接, 那么该工作簿可以在 Origin 中进行修改, 也可以在其他软件中进行修改编辑, Origin 保存的只是到该文件的链接。

如果保存为 Project 内部文件, 该工作簿就成为 Project 文件的一部分, 只能通过打开 Project 文件才能打开该 Excel 工作簿数据。

5.3.3 将 Excel 工作簿保存为外部链接

默认情况下, Origin 打开的是已经存在的 Excel 工作簿, 则该工作簿保存为 Origin 的外部链接。

保存选项可以在 Workbook Properties 对话框中进行修改,从 Workbook 标题栏右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Properties 命令,打开 Workbook Properties 对话框,如图 5.4 所示。

- 在 Save As 组中选中 External 复选框,则在 File Name 组中显示出该文件完整路径。在 Windows Title 文本框中可以修改工作簿的名称。
- 选中 Update Automatically 复选框,当 Excel 工作簿在 Origin 中修改后保存时,修改后的文件会自动保存到 Excel 源文件,并且在其他程序中修改 Excel 工作簿后,会影响到 Origin 的 Project 文件。
- 在对话框下面的窗口列表中列出了电子表格名称。

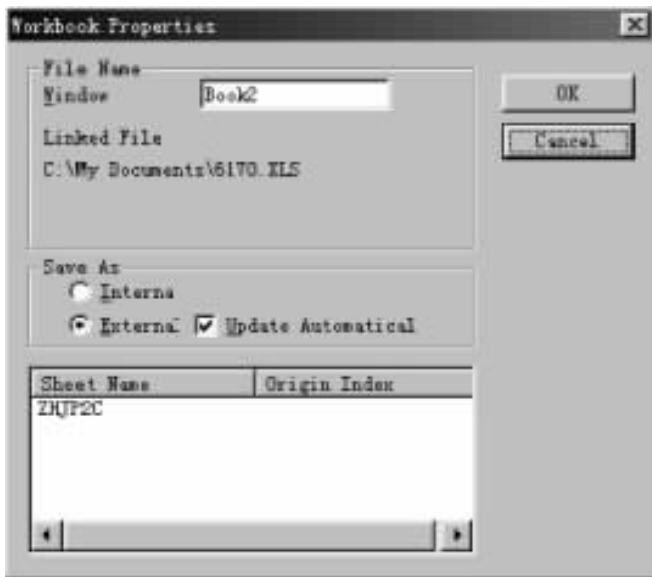


图 5.4 Workbook Properties 对话框

如果在 Options 对话框 Excel 选项卡的 Saving Excel Workbooks 下拉列表中选择了 Before Saving 或 Before Save Project As 选项,则保存 Project 文件时会弹出 Save Excel Workbooks 对话框,若要更新 Excel 工作簿数据,则必须选中该工作簿,如图 5.5 所示。

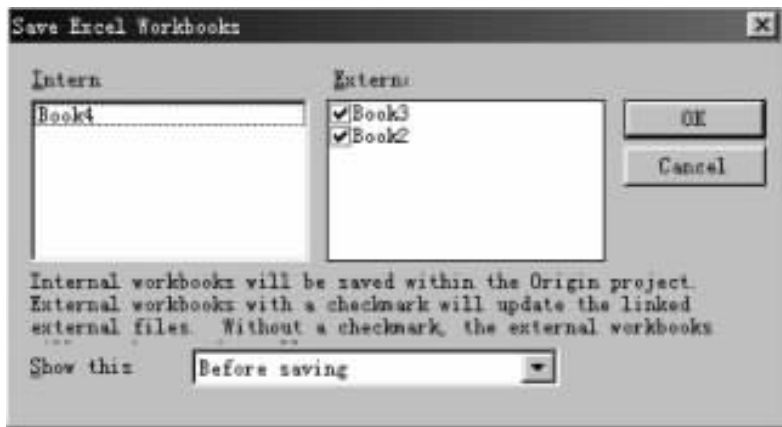


图 5.5 Save Excel Workbooks 对话框

Internal 列表中列出了 Project 中的子 Excel 窗口,右边的 External 列表中是和 Project 相链接的外部 Excel 文件。Show this 下拉列表中有三个选项:Never,Before Saving 和 Before Save Project As,参考 2.8.2 小节的 Excel 选项卡。

5.3.4 将 Excel 工作簿保存为 Project 内部文件

默认情况下,如果 Excel 工作簿是在 Project 文件中新建的,那么保存 Project 文件时该工作簿被保存为内部子文件。

如果 Excel 工作簿是 Project 文件的外部链接,则可以从图 5.4 的对话框中选中 Internal 复选框将其保存为内部文件,但是修改了的 Excel 不会保存到源文件,源 Excel 文件修改后也不会影响到 Project 文件。

5.4 Origin 7.0 中使用 Excel 可能遇到的问题

Origin 7.0 中的 Excel 并不是 Origin 自带的,而是通过调用 Excel 软件进行操作的,所以在使用过程中可能会遇到一些问题。

- 如果打开一个 Project 文件时,该文件含有一个外部 Excel 工作簿链接,但该 Excel 工作簿已经被移动或删除,这时会弹出找不到文件路径对话框,用户可以单击 Browse 按钮指定该文件的新路径,如果单击 Ignore 按钮,则出现只显示文件路径的空白 Excel 窗口,如图 5.6 所示。
- 在打开的窗口中有 Excel 工作簿,若退出 Origin 7.0 不能关闭,则使用 Ctrl+Alt+Delete 键,关闭 Excel 工作簿。
- 如果 Excel 工作簿不能正常显示,则在 Excel 工作簿的标题栏处右击鼠标,从快捷菜单中选择 Update Origin 命令。
- 如果不能在 Origin 7.0 窗口中打开 Excel 工作簿,则很可能是由于注册表中 Excel 某项系数出了问题,只要卸载 Excel,再重新安装就可以了。



图 5.6 Excel 源文件被删除后打开含有该文件 Project 文件时出现的对话框和窗口

第 6 章 多层 Graph

图层是 Origin 7.0 的一个重要的概念。一个 Graph 窗口允许有多个图层,可以高效地创建和管理多个曲线或图形对象。

本章介绍的主要内容:

- Origin 中多层工具的意义;
- 多层图形模板;
- 多层图形管理;
- 个性化 Graph 图层;
- 多层 Graph 图形举例。

6.1 多层工具及其意义

Graph 窗口至少包含一个图层,至多 50 个图层,每个图层均在 Graph 窗口的左上角有一个图层标记(图层标记上只能显示一位数字,如将 5、15、25 等均显示为 5)。图层可以在页面中独立地移动或更改其大小,如图 6.1 所示。

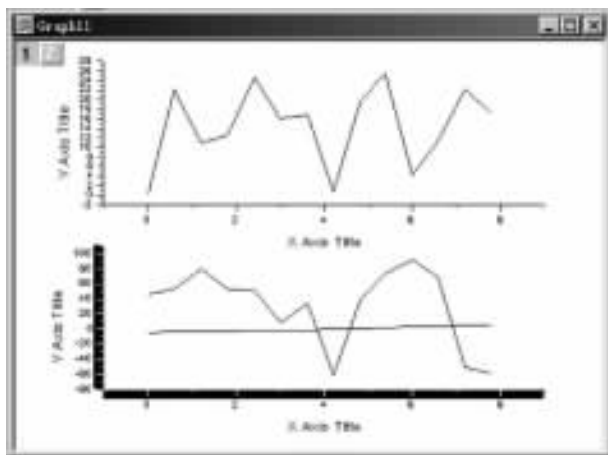


图 6.1 水平双屏图

每个图层至少包含三个要素:坐标轴、数据制图和与之相联系的文本或图标。这些要素可以显示或隐藏,Origin 将这些要素组合在一起,可以在 LabTalk 中设置其属性。

多层的意义如下:

- 通过多层可以使用不同的坐标尺度显示相同的数据,以突出曲线的某些特征;
- 在 Graph 窗口中绘制多个图形,合理地安排其位置;
- 在 Graph 窗口插入新图形。

如果 Graph 窗口中包含多个图层,对窗口的操作只能针对某个激活的图层,并且只能有一个激活的图层,激活图层的标记下陷。如果选择 View| Show| Active Layer Indicator,则激活图层的坐标轴处于高亮状态,如图 6.1 的图层 1 所示;选择 View| Show| Layer Icons 命令,可以调节显示/隐藏图层标志。这两个命令只针对当前激活的 Graph 窗口起作用。如果需要激活图层,方法如下:

- 单击该层的坐标轴;
- 单击该层的对象;
- 单击 Graph 窗口左上角该层的标记,标记下陷的图层为当前激活的图层。

在图层比较多的情况下,前两种操作并不能激活想要激活的图层。比如想要编辑图层 2 的坐标轴,但在双击图层 2 的坐标轴时常常打开其他图层的坐标轴编辑对话框。为了避免这种情况,选中 Plot Details 对话框 Miscellaneous 选项卡中的 Set Active Layer by Layer Icon Only Check Box 复选框(参考 4.8.5 小节),那么只能通过单击图层标记激活该层。

6.2 Origin 多层模板

Origin 7.0 自带了几个多层模板。选择数据(一般是一个 Worksheet 窗口中的多个 Y 列),只要单击 2D Graph Extended 工具条上相应的按钮,就可以将选中的数据在一个 Graph 窗口中绘制为多层图形了。

在制图之前,需要设置 Worksheet 列的属性,即是设置为 X 列还是设置为 Y 列,然后选择数据,该操作参考 3.4 节。

6.2.1 水平双屏图

如果数据中包含两组相关 Y 数列,但这两组数列之间又没有公用的 X 列,可以使用水平双屏模板制图。

该模板要求至少有一个 Y 列,最好是有两列,选中数据,选择 Plot| Panel| Horizontal 2 Panel 或单击 2D Graphs Extended 工具条中的 Horizontal 2 Panel 按钮 ,即可制图,如图 6.1 所示。其模板文件是 PAN2HORZ.OTP。

选中的 Y 列为偶数时,在两层中平均分配数据组图形;如果选中的 Y 列个数为奇数时,第 1 层中要比第 2 层中多一组数据。

6.2.2 垂直双屏图

垂直双屏图和水平双屏图模板对数列的要求及图形外观都是类似的,区别仅在于前者的

图层是两行一列的排列方式,后者是两列一行的排列方式,如图 6.2 所示。其模板文件是 PAN2VERT.OTP。

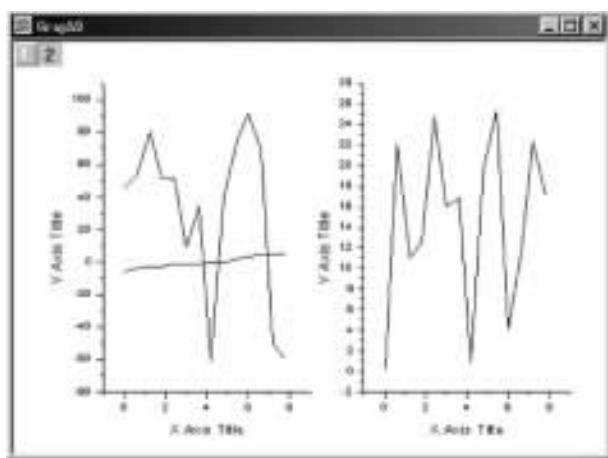


图 6.2 垂直双屏图

6.2.3 双 Y 轴图

如果数据中两个因变量数列具有相同的自变量数列,使用双 Y 轴图形模板制图比较理想。

选中两个 Y 列(可以选中相应的 X 列,如果不选,Origin 按照默认的方式设置 X 列,参考第 3 章),选择 Plot | Special Line/Symbol | Double Y 或单击 2D Graph Extended 工具条上的 Double Y Axis 按钮,即可制图,其模板文件是 DOUBLEY.OTP。

如图 6.3 所示,矫顽力和饱和磁化强度随氮流量变化(周剑平等,材料研究学报,6(2000) 647~651)使用模板绘制的图形。

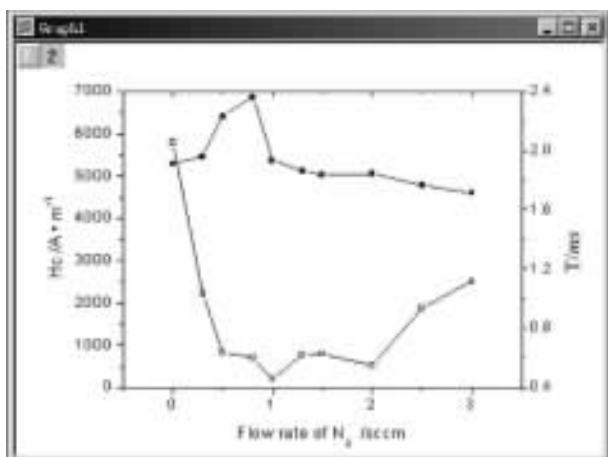


图 6.3 双 Y 轴图

如果选中的 Y 列多于两个,则最后一列在第 2 层中制图,其他列均在第 1 层中制图。

该模板图形中的两层是相互链接的,第 2 层中的 X 轴一一对应链接到第 1 层的 X 轴,这可以修改,参看 6.2.4 小节。

6.2.4 堆垒多层图

如果数据中包含几组相关 Y 数列,但这两组数列之间又没有公用的 X 列,可以使用堆垒多层模板制图。

该模板要求至少有一个 Y 列,最好是有两列以上。选中数据,选择 Plot| Panel| Stack 或单击 2D Graphs Extended 工具条中的 Stack 按钮 ,即可制图,如图 6.4 所示。其模板文件是 STACK.OTP。

每个 Y 数据列在 Graph 窗口中绘制为一层图形,各层堆垒在一起,Worksheet 中的 Y 列从左到右按照次序绘制到各个图层里,Graph 窗口中最下面的为第 1 层,从下到上分别为第 1,2...等层。

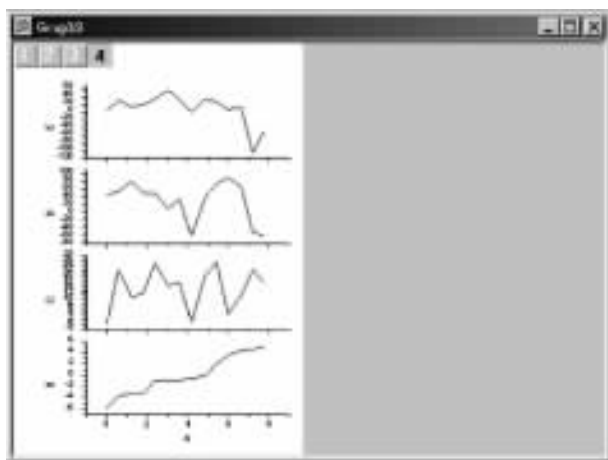


图 6.4 堆垒多层图

6.2.5 四/九屏图形

如果数据中包含四组相关 Y 数列,但这两组数列之间又没有公用的 X 列,可以使用四屏图形模板制图。

该模板要求至少有一个 Y 列,最好是有四列,选中数据,然后选择 Plot| Panel| 4 Panel 或单击 2D Graphs Extended 工具条中的 4 Panel 按钮 ,即可制图,如图 6.5 所示,图形安排为两行两列。其模板文件是 PAN4.OTP。

九屏图形和四屏图形完全类似,需要的数据列为 9 列,Graph 窗口中的图形为三行三列,如图 6.6 所示。模板文件是 PAN9.OTP。

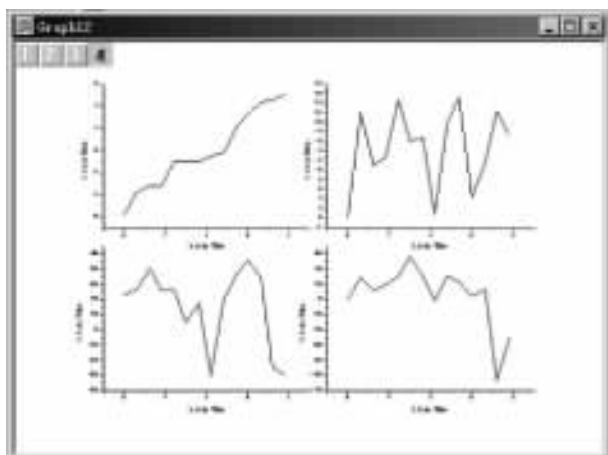


图 6.5 四屏图形

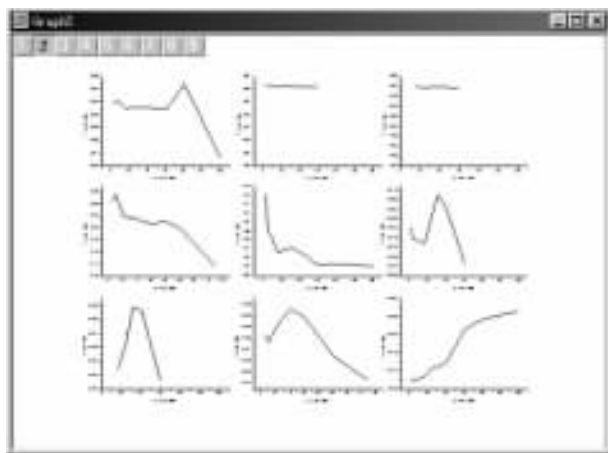


图 6.6 九屏图形

6.3 多层图形管理

管理 Origin 文件,可以使用 Origin 窗口下面的 Project 管理器。其使用方法和 Windows 资源管理器一样,但对于 Graph 窗口中的图层管理,就不能使用这个窗口了。

6.3.1 添加层

Origin 提供了多种方法为 Graph 添加新层,有以下几种方法。

● 添加独立的新层

该方法添加的新层和已有的层之间没有链接关系,添加的新层按照 Origin 默认的大小和位置显示在 Graph 窗口中,激活 Graph 窗口,进行下列操作:

➤ 选择 Edit | New Layer(Axes) | (Normal) | Bottom X + Left Y;

- 在 Graph 窗口的边上右击鼠标,从快捷菜单中选择 New Layer(Axes) | (Normal) : Bottom X + Left Y 命令;
- 选择 Tools | Layer,打开 Layer 对话框,如图 6.7 所示,在 Add 选项卡中单击添加普通 XY 层按钮 ;
- 选择 Edit | Add & Arrange Layers,打开图 6.8 所示的 Total Number of Layers 对话框进行添加。



图 6.7 Layer 对话框

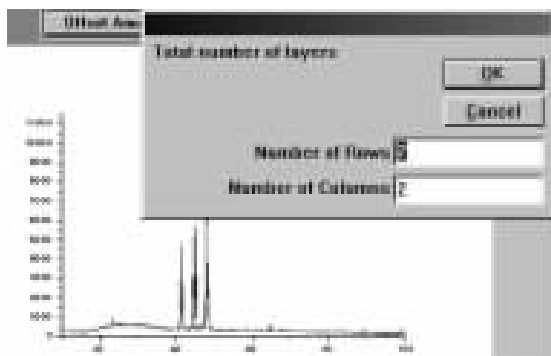


图 6.8 Total number of layers 对话框

● 添加含有链接的新层

该方法添加的新层只和 Graph 窗口中激活的层有链接关系,添加的层为激活层的子层,添加后,子层变为激活层。

注意:子层的层序号必须大于母层的层序号,如 Layer2 不能作为 Layer1 的母层,只能作为 Layer1 的子层。

当层之间存在链接关系时,比如 Layer 3 链接到了 Layer 1,那么 Layer 3 叫作 Layer 1 的子层,Layer 1 叫作 Layer 3 的母层,子层总是链接到母层。当母层移动或改变大小时,子层也作相应的更新,但子层移动或改变大小时,母层不变。

添加含有链接的新层的方法如下:

- 选择 Edit | New Layer(Axes) | (Linked): Top X + Right Y 添加含有顶部 X 轴和右边 Y 轴的图层,或单击 Layer 对话框中的  按钮;
- 选择 Edit | New Layer(Axes) | (Linked): Top X 添加含有顶部 X 轴的图层,或单击 Layer 对话框中的  按钮;
- 选择 Edit | New Layer(Axes) | (Linked): Right Y 添加含有右边 Y 轴的图层,或单击 Layer 对话框中的  按钮。

● 利用 Layer 对话框添加新层

选择 Tools | Layer,打开 Layer 对话框,在 Add 选项卡中单击添加层按钮实现层的添加。若单击  按钮在 Graph 的右上角添加子层,单击  按钮在 Graph 的右上角添加子层,同时使用母层数据制图。

在该对话框中还可以使用 X/Y Scale 下拉列表设置坐标轴的刻度类型,设置方式和 4.8.2 小节中 Scale 选项卡的坐标轴类型设置相同。

● 使用剪贴板添加新层

选中要复制的图层,选择 Edit | Copy,然后在要粘贴的 Graph 窗口中选择 Edit | Paste 即可。如果没有激活图层而选择 Edit | Copy Page 的话,粘贴到 Graph 窗口中图形为图片格式。

● 使用 LabTalk 添加层

在 Script 窗口中键入 LabTalk 命令:

```
layer-n
```

然后按 Enter 键,就给激活的 Graph 窗口中添加新层,其大小和位置是 Origin 默认的。

● 使用 Extract to Layers 按钮生成新层

该按钮的功能是将单层 Graph 窗口中的几组数据曲线转换成多层图形,我们以图 4.52 的瀑布图为例说明这种图形转换过程:

- 激活 Graph1 窗口(该窗口中最少有两组数据组,该例中有四组);
- 单击 Graph 工具条上的 Extract to Layers 按钮 ,弹出 Total number of layers 对话框,如图 6.8 所示,同时,瀑布式的图形重叠在一起,由于本例中有四组数据,故行和列的默认值均为 2;
- 保留默认值,单击 OK 按钮,弹出 Spacings in % of Page Dimension 对话框,设置图层之间的间距和边距,如图 6.9 所示;

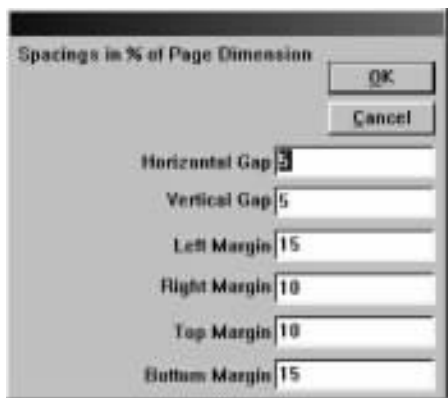


图 6.9 Spacings in % of Page Dimension 对话框

- 保留对话框的默认值不变,单击 OK 按钮,Origin 按照给定的参数,绘制出两行两列图形,如图 6.10 所示。由于开始使用的是瀑布图形模板,在左上角没有显示图层标志,若要显示,则选择 View | Show | Layer Icons。

6.3.2 删除层和隐藏层

选中要删除的层,按 Delete 键完成删除层操作,或在层标记处右击鼠标,从快捷菜单中选择 Delete Layer 命令(图 4.2a)。

为了缩短刷屏时间,或使用户集中注意力编辑某个图层,可以将 Graph 窗口中其他图层隐藏起来。要隐藏图层,在层标记处右击鼠标,从快捷菜单中选择 Hide Layer 命令(图 4.2a)。如果取消菜单命令 View | Show | All Layers 选择,则在 Graph 窗口中只显示激活的层。

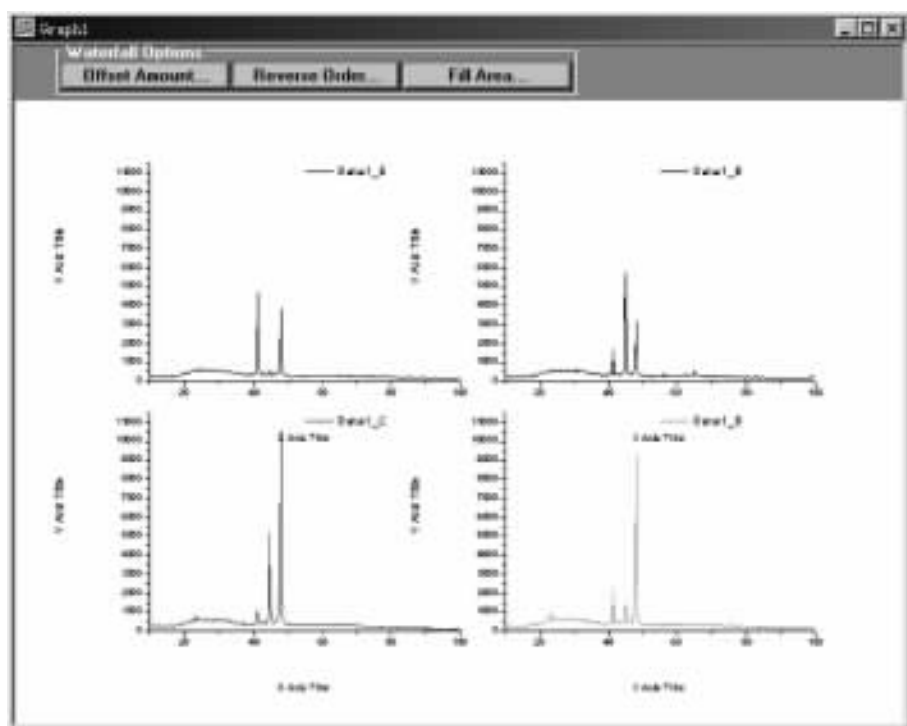


图 6.10 使用 Extract to Layers 按钮将四组数据的单层图形绘制成四层图形

6.3.3 合并 Graph 窗口

Origin 可以将几个单层的 Graph 窗口合并到一个多层的 graph 窗口中, 以将图 4.57~图 4.59 合并到一起为例, 说明合并图层的步骤。

- 将这三个 Graph 窗口显示在 Origin 窗口中, 其中的一个可以在其他窗口的上面, 但不能合并隐藏的 Graph 窗口和最小化的 Graph 窗口。
- 选择 Edit | Merge All Graph Windows 或单击 Graph 工具条上的 Merge 按钮 , 弹出询问是否保留旧的 Graph 窗口, 如图 6.11 所示。
- 单击“是”按钮, 保留旧的 Graph 窗口; 如果单击“否”按钮, 则将旧的 Graph 窗口全部删除, 出现含有三层的 Graph 窗口, 同时出现 Total number of layers 对话框, 类似于图 6.8。
- 单击 OK 按钮, 由于我们选择了三个 Graph 窗口, 出现提示框, 问是否多生成一层, 如图 6.12 所示。



图 6.11 是否保留旧的 Graph 窗口

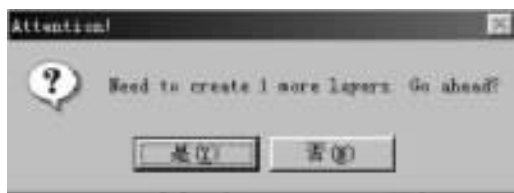


图 6.12 是否多生成一层 Graph 图形

- 单击“是”按钮,弹出 Spacings in % of Page Dimension 对话框,设置图层之间的间距和边界,类似于图 6.9。
- 保留对话框的默认值不变,单击 OK 按钮,Origin 按照给定的参数,绘制出两行两列 Graph 图形,如图 6.13 所示,将三个 Graph 窗口中的图形合并到了—个窗口中,并含有一个空白层。

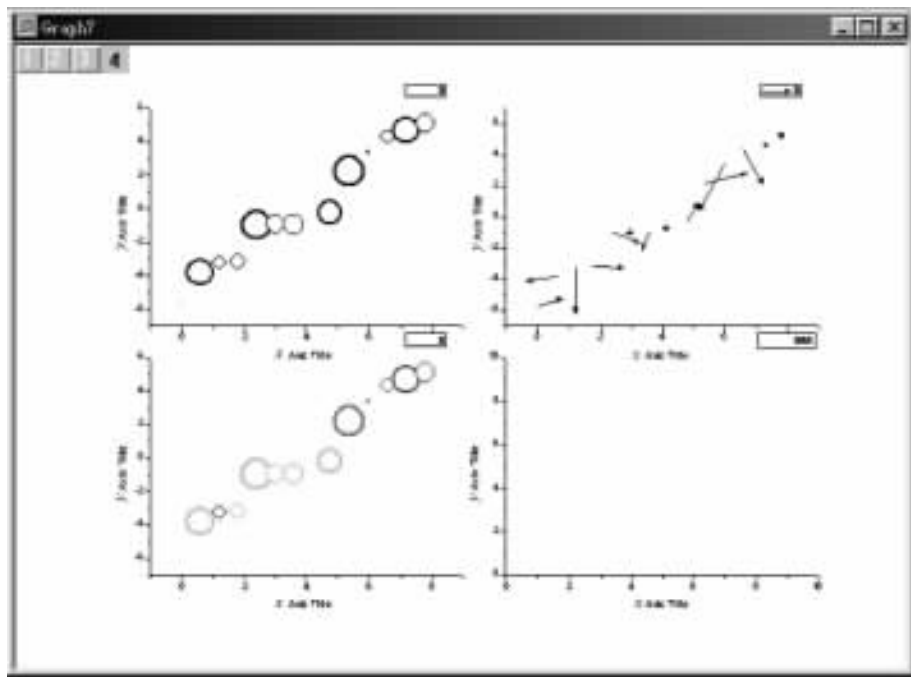


图 6.13 将三个 Graph 窗口中的图形合并到了—个窗口中

合并前如果某个 Graph 窗口中有几个层,并且这些层之间或坐标轴之间有链接,合并后的 Graph 图形仍保持这些链接。合并后各层图形之间的位置可以使用 Layer 工具进行重排,参考 6.3.5 小节。

6.3.4 将多层 Graph 图形导入多个 Graph 窗口中

选中一个多层 Graph 窗口,单击 Graph 工具条上的 Extract to Graphs 按钮 ,即使 Graph 窗口中的层之间有链接,这些层都被提取到新生成的单个 Graph 窗口中。Origin 不保存原来的 Graph 窗口,并取消原窗口中层之间的链接关系。

6.3.5 Layer 中的 Arrange 使用

单击图 6.7 中的 Arrange 标签,打开该对话框,如图 6.14 所示。使用该对话框可以轻松地完成许多工作,包括安排窗口中的层位置,设置页面维数,交换层的位置等。

● 控制按钮

在该对话框上面的三个控制按钮是控制层之间的排列方式的,单列按钮  将各层图形安排为—列,在该按钮后面的文本框中可以设置图层之间的间隙。激活图 6.13 的 Graph 窗口,

然后单击单列按钮 ，则图形单列排列，如图 6.15 所示。

单行按钮  则所有的图层都排列成一行；阵列按钮  将图形按阵列排列显示，在该按钮后面的文本框中可以设置阵列的行数和列数。如果清除了 Add New Layers 复选框，Origin 按照指定的行和列安排图层，但不生成新层；如果选中了此复选框，Origin 按照指定的行和列安排图层，并将所缺的图层补上空白层。

● Margins 组

该组编辑页边距，修改后，单击上面三个控制按钮进行更新。

● Move Layers 组

在 A 和 B 文本框中添入层号，单击 Swap Layers A and B 按钮，交换这两层的位置，单击 Move Layer A to B 按钮，将 A 层移动到 B 层位置。



图 6.14 Layer 中的 Arrange 选项卡

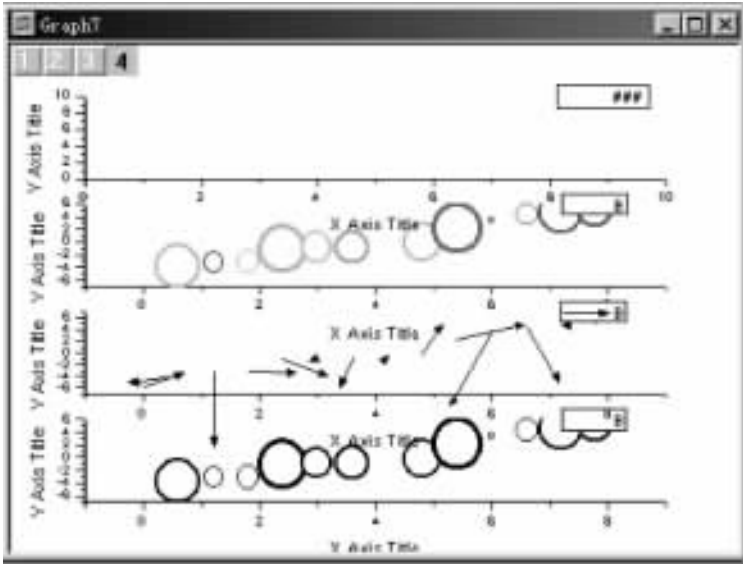


图 6.15 将四层图形排列成一行

6.4 个性化 Graph 图形

Origin 允许个性化多层图形，包括图形在 Graph 窗口中的位置和图例等，以便于区分不同层，给出合理的标注说明，使图形美观大方。

6.4.1 个性化图层的显示属性

个性化图层的显示属性,也可以通过 Plot Details 对话框实现,在该对话框的左边窗口中选中层,如图 6.16 所示,则在左边出现 Background,Size/Speed 和 Display 标签。

● Background 选项卡

该选项卡包含两个下拉列表,在 Color 下拉列表中选择背景颜色,默认是无背景颜色,表现为透明。在 Border 下拉列表中可以选层层的边框,边框加在层的边上,可以单独修改边框的大小和位置。

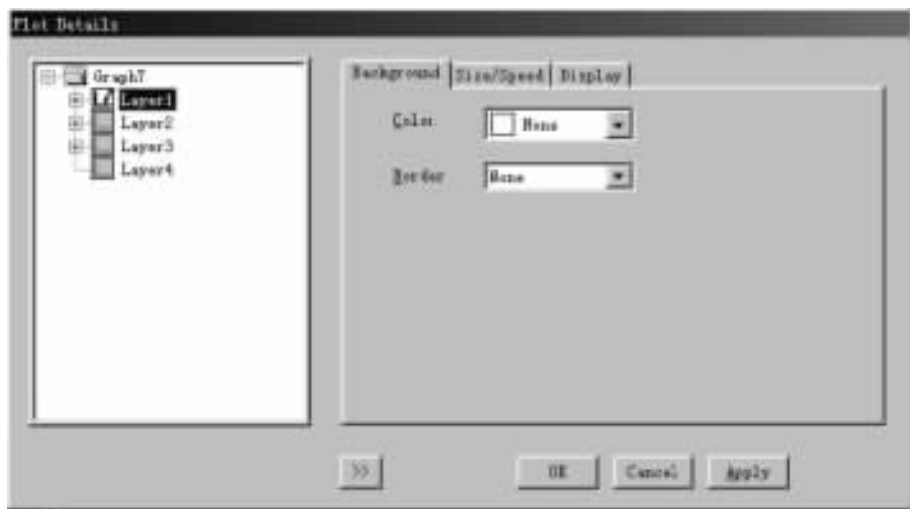


图 6.16 Plot Details 对话框的 Background 选项卡

● Size/Speed 选项卡

该选项卡是用来调整层的大小和位置的,如图 6.17 所示。

- 在 Layer Area 组中,可以调整层到页边的距离(Left 和 Top 文本框)和层的大小(Width 和 Height 文本框),Unit 下拉列表可以改变前面 4 个数字的单位,单位包括页面的百分比、英寸、厘米、像素等类型。默认的单位是页面的百分比(% of Page),如果是子层,则默认的单位是母层的百分比(% of Linked Layer),这个单位使用户方便地调整层与层、层与页面之间的比例关系。如果单位改变了,Left, Top, Height 和 Width 文本框中的数字也作相应的更新,以保证层的大小不变。
- Origin 提供了两种方式提高 Graph 窗口的刷屏速度。

① 图像缓冲,可以在 Graphic Image 下拉列表中选择 Raster 来提高刷屏速度,也可以从图层的快捷菜单中的 Display Caching 选项来选择(图 4.2d)。对于三维图形还可以选择 Vector 提高刷屏速度,如果选择 None 的话,只有在移动和更改 graph 窗口的大小时才刷屏。

② 控制曲线数据点数,在 Speed Mode, Skip Points if needed 组中控制。另外还可以通过隐藏暂时不需用的图层、隐藏图例来提高刷屏速度。

其实,可以直接使用鼠标拖动的方式来改变图层的大小:单击坐标轴,使图层显示边框,将鼠标放在边框的点上,就可以直接拖动了,参考图 4.1。拖动时同时按下 Ctrl 键,则图层按长

宽的比例缩放。

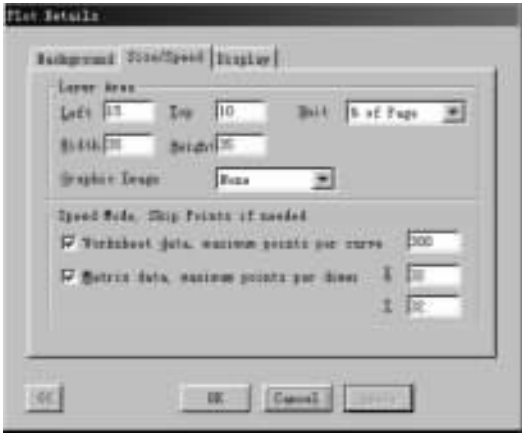


图 6.17 Plot Details 对话框的 Size/Speed 选项卡

● Display 选项卡

该选项卡是用来更改是否显示层中的坐标轴、坐标轴标签和图例等内容,如图 6.18 所示。

- 当层更改大小时,Scale Elements 组决定了层中的元素如坐标轴、坐标轴标签、符号和图例等内容如何随之一起更改。如果选中 Scale With Layer Frame 复选框,层中的元素随层按比例缩放;如果选中了 Fixed Factor 复选框,并在后面的文本框中添入数字,为显示大小和原始尺寸的比例关系,这时这些元素不随层的大小而改变。



图 6.18 Plot Details 对话框的 Display 选项卡

- Show Elements 组是用来调节是否显示坐标轴、坐标轴标签以及数据的,其中是否显示坐标轴和坐标轴标签也可以通过个性化坐标轴得到控制,参考 4.8.2 小节。
- 在 Data Drawing Options 组中,选中 Clip Data to Frame 复选框,隐藏层边框外面的数据曲线部分,相应地激活 Clipping Margins (%) 文本框,添入曲线在层边框内的显示范围。如添入 5,则边框内距离边框 5% 的曲线部分被隐藏;若添入 -5,则边框外距离边框 5% 以外的部分被隐藏。当数据点符号和坐标轴重叠时,选中

Data on Top of Axes 复选框,数据点显示在坐标轴的上面;取消该复选框,坐标轴显示在数据点的上面。当数据点符号和层中的网格线重叠时,选中 Grid on Top of Data 复选框,网格线显示在数据点符号的上面,否则网格线显示在数据点符号的下面。

6.4.2 层和坐标轴的链接

在多层 Graph 图形中,可以将层之间设置链接。这样子层的位置和大小就可以随着母层改变了。

在图 4.16 的左边窗口中若选中其他层,这里选中 Layer2,则会出现一个 Link Axes Scales 选项卡,如图 6.19 所示。



图 6.19 Plot Details 对话框的 Link Axes Scales 选项卡

- 在 Link To 下拉列表中可以选将要链接的母层,选择 Layer1,同时激活其他选项,设置坐标轴刻度链接关系。
- 在 Link Axes in Child Layer to 组中生成子层和母层的坐标轴链接,可以设置成一对一或其他形式,当母层的坐标轴进行修改时,则子层的坐标轴也作相应的更改。选中 None 复选框,取消坐标轴之间的链接;选中 Straight (1 to 1)复选框,子层和母层具有相同的坐标刻度;选中 Custom 复选框,并激活下面的 X1=文本框和 X2=文本框,在 X1=文本框中指定子层坐标轴的起点,在 X2=文本框中指定母层坐标轴的终点。
- 单击 Size/Speed 标签,在 Units 下拉列表中选中 % of Linked Layer,单击 OK 按钮,这时,当调整 Layer1 的大小和位置时,Layer2 也作相应的调整,子层和母层之间就完全链接起来了。

6.4.3 调整层的位置

对于多层图形,Origin 可以调整图层位置和显示方式。

- 使用 Add & Arrange Layers 对话框重排图层

选择 Edit| Add & Arrange Layers,打开 Total number of layers 对话框(图 6.8),在其中

的文本框中键入图层要重排的行数和列数,比如将两行一列图形重排成两列一行格式,单击 OK 按钮,打开图 6.9 的 Spacings in % of Page Dimension 对话框,添入图层之间的距离,就可以完成对图层重排。如果对重排后的图形不满意,可以重复上面的操作。

注意:如果重排后的图层数大于当前的图层数,Origin 会提示是否生成新层,单击“否”按钮,则会空出图层位置,例如,在图 6.13 中的图层 4 位置为空白;如果调整前图层之间有链接,则调整后会保持所有的链接关系。

也可以使用 Layer 对话框 Arrange 选项卡中的控制按钮进行重排,使用 Arrange 选项卡不仅可以控制层的排列方式,还可以调整层之间的间隙和页边距,参考 6.3.5 小节。

● 交换/重叠图层

使用 Layer 对话框 Arrange 选项卡中的 Swap Layers A and B 按钮工具(如图 6.14)可以交换 Graph 图形中的任意两层的位置,交换后的图层保持原来的层号不变,如果被交换的层中有链接的话,Origin 保持这种链接不变,但如果其中的一个层是其他层的母层,且其子层在 Plot Details 对话框 Size/Speed 选项卡中的 Unit 下拉列表中选择的是 % of Linked Layer,Origin 会将其改为 % of Page。

如果单击 Arrange 选项卡中的 Move Layer A to B 按钮,就会将层 A 移动到层 B 的位置,必要的话,Origin 会改变层 A 的大小,以适应层 B 的位置,两层在同一位置,层数较大的图层显示在层数较小的图层上面。

如果要改变层号,则使用 LabTalk 命令:

```
page.reorder(Layer1, Layer2)
```

● 改变层的位置

除了使用 Plot Details 对话框 Size/Speed 选项卡 Layer Area 组中的文本框调整层的位置外,还可以用鼠标直接拖动图层。可以激活层,使层边框处于高亮状态,直接使用鼠标拖动的方式调整层的大小和位置。

在拖动时,为了把握图层所处的位置,选择 View | Show | Axis/Object Grid,在 Graph 窗口中显示网格线作为拖动层的位置标准。若要调整网格线的稠密程度,则在 Options 对话框的 Page 选项卡中进行,参考 2.8.2 小节。

如果要求层的边框在网格线上,则选择 Format | Snap Axes to Grid。

6.4.4 个性化图例

默认情况下,Origin 7.0 在每个图层都创建并显示一个图例(legend)。在创建图例时,也是针对某一层图形而言的,如图 6.13 和图 6.15。但在多层中,这种显示方式比较零乱,用户可以改变这种默认方式,把所有图例都集中在一起,便于管理和比较。

Origin 使用 \L(LayerNumber, DataPlotNumber) 语句生成其他层的图例,但该语句不支持在 Graph 页面内编辑,必须在 Text Control 对话框中才能编辑该语句。下面以图 6.13 为例,介绍多层个性化图例步骤。

- 在其中的一个图例上右击鼠标,从快捷菜单中选择 Properties 命令,打开 Text Control 对话框。

- 文本框中显示的是当前的文本 \L(1) %(1),输入下列内容覆盖它:

```
\l(1.1) Bubble Graph
```

\l(2.1) Vector Graphs

\l(3.1) Bubble and Color Map Graph

在对话框的预览框中显示图例的显示内容,如图 6.20 所示。单击 OK 按钮关闭对话框。

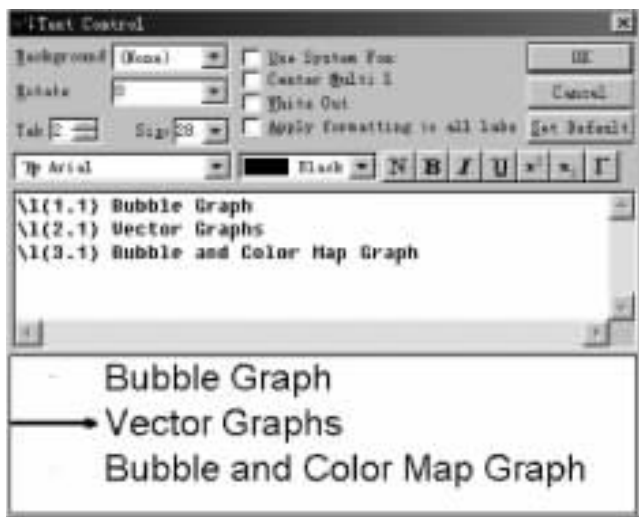


图 6.20 使用 Text Control 对话框编辑多层图例

- 把编辑好的图例拖动到合适的位置并删除 Graph 页面中的其他图例。

另外 Origin 提供了一个语句,可以完全脱离数据曲线的类型设置图例,该语句为:

`\L(O(SymEdgeColor,Sym,Fill,Size,ColorLn,LineStyle,Gap,LnWidth,SymFillColor))`

其中的各个句法的含义如下。

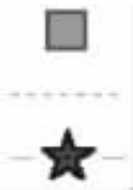
- SymEdgeColor 为图例中符号边缘的颜色序号,1 表示黑色,2 表示红色等,这些颜色与序号的对应关系在颜色调色板中,使用 Format | Color Palette 命令可打开该调色板,参考 2.8.3 小节。
- Sym 是符号的形状,0 表示无符号,1 表示方形,2 表示圆形,3 表示正三角,4 表示倒三角,5 表示菱形,6 表示“+”,7 表示“×”,8 表示星号“*”,9 表示短横“-”,10 表示短竖“|”,11 表示数字,12 表示大写字母,13 表示小写字母,14 表示右箭头,15 表示左三角,16 表示右三角,17 表示六边形,18 表示五角星,19 表示五边形,20 为圆球形。
- Fill 为符号的内部填充状况,0 表示实心,1 表示空心,2 表示中间有小圆点,3 表示中空,4 表示中间有“+”,5 表示中间有“×”,6 表示中间有短横“-”,7 表示中间有短竖“|”,8 表示填充上半部,9 表示填充右半部,10 表示填充下半部,11 表示填充左半部。
- Size 是符号的大小。
- ColorLn 为线的颜色,颜色与数字的对应关系和 SymEdgeColor 中的表示方法相同。
- LineStyle 为线的样式,0 表示实线,1 表示虚线,其对应关系参考 Plot Details 对话框 Line 选项卡中的 Style 下拉列表,参考 4.8.1 小节。
- Gap 为线和符号之间的间隔,添入的数字为符号直径的百分比。
- LnWidth 为线宽,单位为像素,0 表示不显示线。
- SymFillColor 为符号的填充颜色,颜色与数字的对应关系和 SymEdgeColor 中的表示

方法相同。

例如在 Text Control 对话框中键入：

```
\l(o(2,1,1,30,0,0,0,0,3))  
\l(o(0,0,0,0,3,2,0,5,0))  
\l(o(4,18,2,30,5,1,30,3,2))
```

则在 Graph 窗口中显示为：



6.5 保存 Graph 为模板文档

模板文件只存储制图的信息和设置,不保存数据和曲线。当下次再创建类似的图形时,只选择工作簿数据列和制图模板即可。

保存 Graph 窗口为模板文件的步骤如下：

- 右击 Graph 窗口的标题栏,从快捷菜单中选择 Save template as 命令,或选择 File | Save template as 打开“另存为”对话框,如图 6.21 所示；

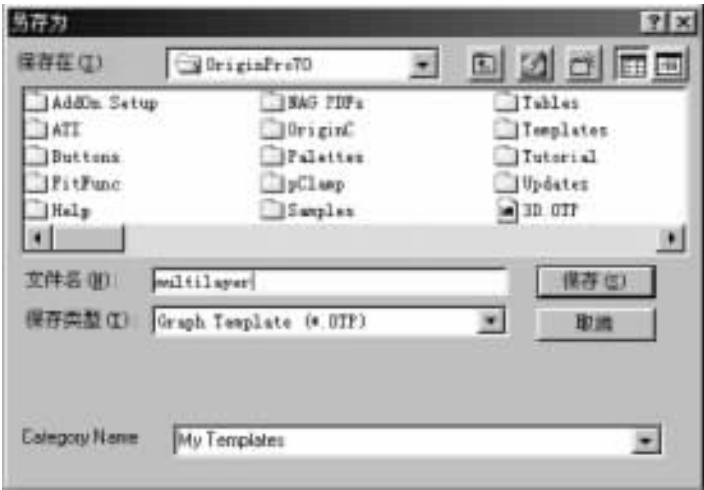


图 6.21 保存为模板文档窗口

- 在文件名文本框中键入模板文件名 multiplayer,模板文件的扩展名是 *.OTP；
- 单击“保存”按钮,就把当前激活的 Graph 窗口保存为模板文档了。

如果要使用该模板制图,先按模板要求设置数据列,单击 2D Graph 工具条上的 Template 命令按钮,打开图 2.43 的窗口,在 Category 列表中选中 my templates,则在 template 列表中出现 multiplayer 模板,单击 Plot 按钮即可制图。

6.6 多层 Graph 图形举例

从第 3 章开始已经介绍了不少使用 Origin 制图的方法及技巧,这里以例子的形式将前面的内容融会贯通,提高用户的实战能力。该图形取自 Jian-ping Zhou, et al., Journal of Magnetism and magnetic Materials, 238(2002)L1-L5 图 2,为一组 X 衍射曲线,如图 6.22 所示。

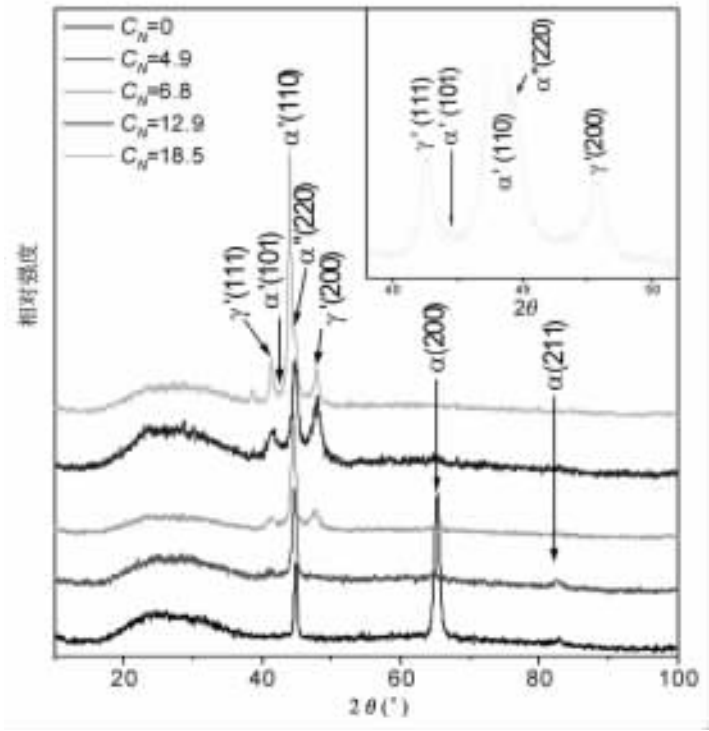


图 6.22 多层 Graph 图形例子

该图有 5 条曲线,横坐标相同,右上角的图形为 Layer5 $C_N=18.5$ 的部分放大显示。这样的多层 Graph 图形无法套用前面介绍的模板。实际上,我们在工作中遇到的大部分需要处理的图形都无法使用现成的 Graph 模板。所以在本节中以此图为例,介绍绘制复杂 Graph 图形的技巧和方法。

6.6.1 导入数据

首先打开 Origin 7.0,选择 File| Import| Multiple ASCII 命令或单击 Standard 工具条中的 Import Multiple ASCII 按钮 ,打开 Import Multiple ASCII 文件对话框(图 3.11),为了便于文件管理,选择 Import each file as 下拉列表中的 New Worksheet,将文件导入到不同的 Worksheet 中,单击 OK 按钮,导入数据,如图 6.23 所示。

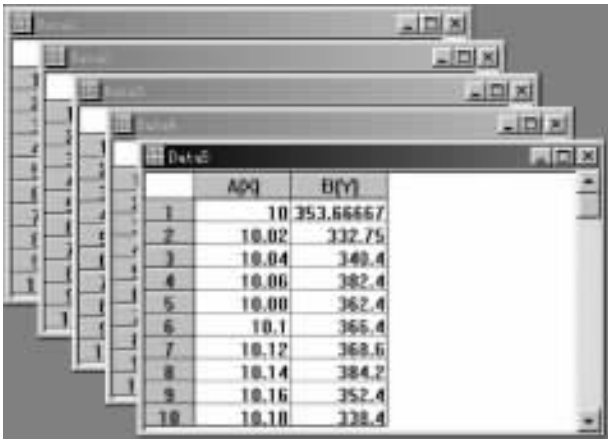


图 6.23 将多组数据导入不同的 Worksheet 中

6.6.2 多层图形中添加数据

激活 Data1 窗口选中 B(Y)列,单击 2D Graph 工具条中的 Line 按钮,生成一个 Graph 图形。这里由于数据很多,所以选择折线图,如图 6.24 所示。

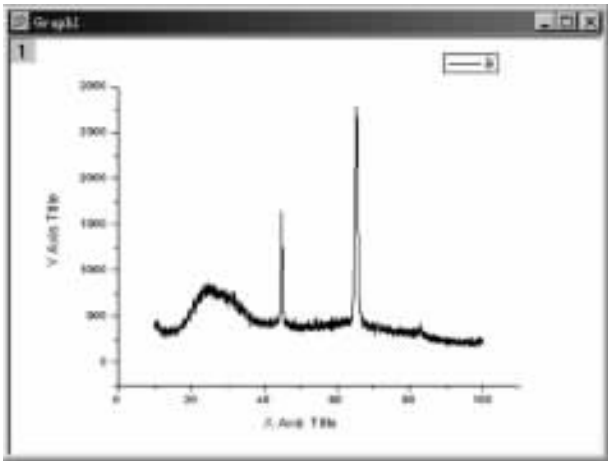


图 6.24 添加 Data1_b 的 Graph 窗口

选择 Tools| Layer,打开 Layer 对话框(图 6.7),单击添加 XY 层按钮四次,使 Graph 窗口成为含有 5 个图层的图形。

双击 Graph 窗口左上角图层 2 标记,打开 Layer2 对话框(参考图 4.9),在 Available Data 列表中选中 Data2_b,单击添加按钮,把 Data2_b 数据列添加到 Layer Contents 列表中,单击 OK 按钮,完成 Layer2 的数据添加。用同样的方法将 Data3_b,Data4_b 和 Data5_b 分别添加到 Layer3,Layer4 和 Layer5。

因为对 Data5_b 中部分区域感兴趣,需要放大,则激活 Layer5,其左上角的图层标志下陷,然后单击 Layer 对话框中的按钮添加 Layer5 的子层,同时用 Layer5 的数据 Data5_b 制

图,如图 6.25 所示。

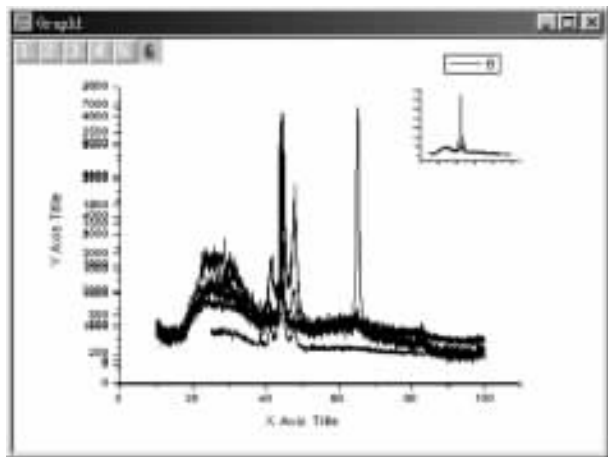


图 6.25 给多层中添加数据

6.6.3 设置层之间的链接

由于 Layer1~Layer5 的横坐标是相同的,可以将他们设置成链接,便于修改。按下 Ctrl 键双击 Layer2 打开 Plot Details 对话框,单击 Link Axes Scales 选项卡 (参考图 6.19),在 Link 下拉列表中选择 Layer1,并选中 Link Axes in Child Layer to 组中 X Axis Link 的 Straight (1 to 1)复选框,而对 Y Axis Link 中的选项 None 保持不变。同样在左边的窗口列表窗口中选中 Layer3,Layer4 和 Layer5,进行同样的设置。

Layer6 已经是 Layer5 的子层了,并与 Layer5 具有同样的数据,这里只对 $39^{\circ}\sim 51^{\circ}$ 范围内的数据感兴趣,则在 Link Axes in Child Layer to 组 X Axis Link 中选择 Custom 复选框,并在下面的文本框键入 $X1=39$ 和 $X2=51$ 。

这时只改变了 Layer6 图形,其他图形不变,如图 6.26 所示。

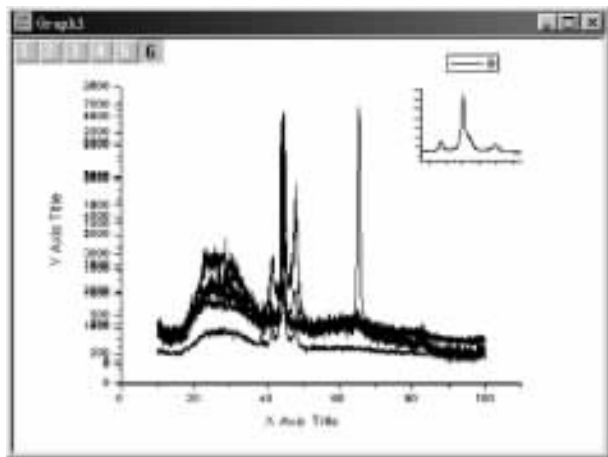


图 6.26 设置链接后的 Graph 图形

6.6.4 个性化图层

这时的图形仍然是叠加在一起的,需要将他们分开,利用层的位置功能可以实现。

单击 Plot Details 对话框的 Size/Speed 选项卡,在 Layer Area 组中保持 Left, Width 和 Height 默认值不变,针对不同的层(可以从坐标的窗口列表中选择,参考图 6.16),Layer1 ~ Layer5 的 Top 值分别设为 45, 35, 25, 15 和 5, Unit 单位保持 % of Page 不变。

Layer6 是和 Layer5 链接的,将其值设置为 Left=50, Width=50, Height=50, Top=15, Unit 保持 % of Linked Layer 不变。这时设置好的 Graph 图形如图 6.27 所示。

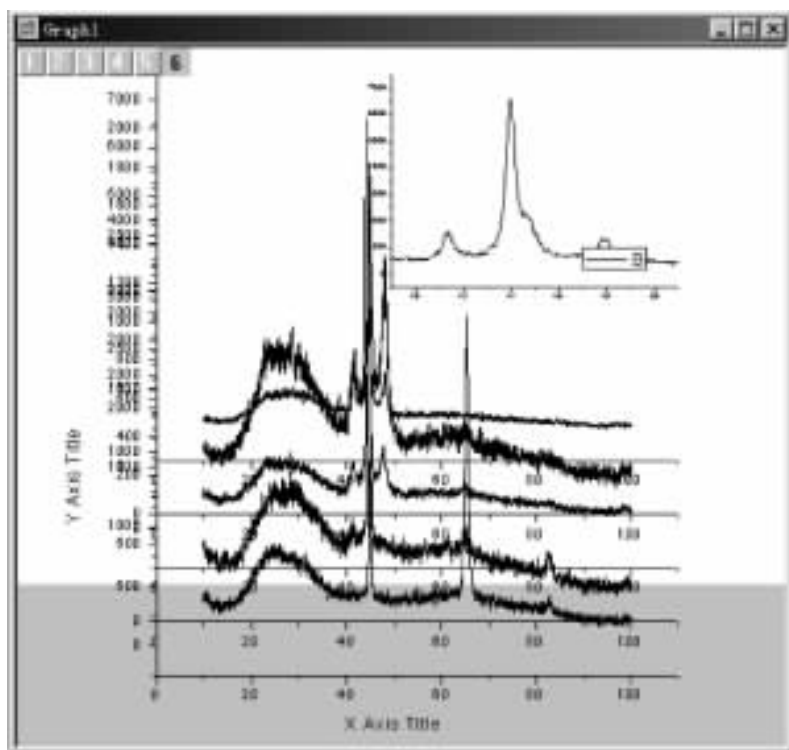


图 6.27 设置图层后的 Graph 图形

6.6.5 个性化坐标轴

数据变化范围为 $10^{\circ} \sim 100^{\circ}$, 但为了全面起见, Origin 默认的坐标轴范围总是大于数据值。前面已经设置了坐标轴链接, 所以对 X 轴的设置只要对 Layer1 操作即可。

双击 Layer1 横坐标轴, 打开 X Axis Layer 1 对话框(参考图 4.74), 在 Scale 选项卡中将其起始值设为 10, 结尾值设置为 100, 递增步长(Increment)为 20, 单击“确定”按钮, 这样 Layer1 ~ Layer5 的横坐标就都设置好了。

对纵坐标的设置比较复杂。由于其衍射强度是相对的, 所以不必设置统一的坐标, 可以根据其美观性和图形要表现的目的进行设置。设置好的 Graph 图形如图 6.28 所示。

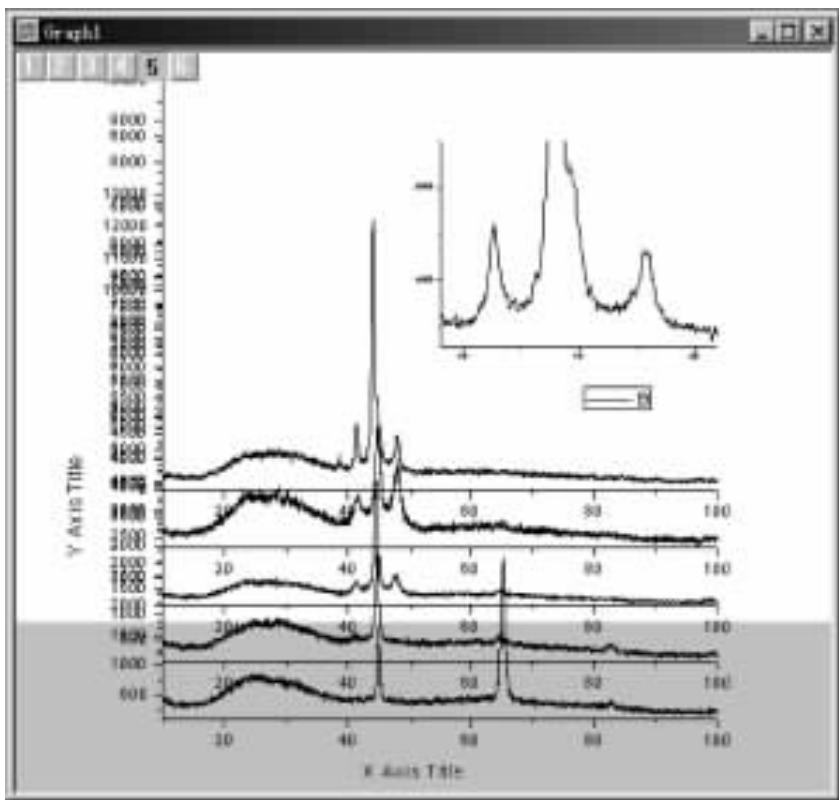


图 6.28 设置坐标轴后的 Graph 图形

6.6.6 个性化显示

图每层都有各自的坐标轴,其实我们只保留其中的一个就可以了。打开 Plot Details 对话框 Display 选项卡,针对 Layer2~Layer4,取消 Show Elements 组中的 X Axes 和 Y Axes 复选框的选择(参考图 6.18),不显示其坐标轴。

为了区别不同的数据曲线,将其设置成不同的颜色,使用 Plot Details 对话框的 Line 选项卡(参考图 4.63),将数据曲线分别设置为黑、红、绿、蓝、青。

然后进一步设置 Layer1、Layer5 和 Layer6 的坐标轴。双击 Layer1 纵坐标轴,打开 Y Axis Layer 1 对话框,取消 Minor Tick Labels 选项卡中 Show Major Label 复选框的选择(图 4.76),不显示纵坐标标签;在 Title & Format 选项卡的 Major 和 Minor 下拉列表中选中 None,不显示刻度;选中 Selection 列表中的 Right,也做同样的设置。

针对 Layer5 和 Layer6 做类似的设置,Layer5 显示顶部的横坐标和左右的纵坐标,但不显示刻度和标签;Layer6 底部的横坐标显示刻度和标签,其他坐标轴不显示刻度和标签,只显示坐标轴。设置好的 Graph 如图 6.29 所示。

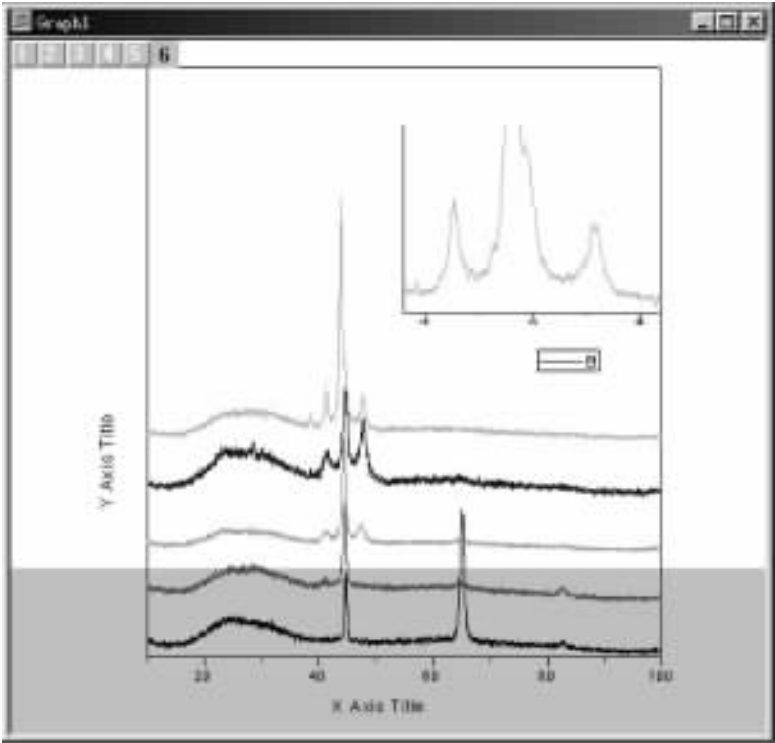


图 6.29 个性化显示设置后的 Graph 图形

6.6.7 添加文本说明

最后更改坐标轴说明,添加文本说明和箭头线,添加箭头线时为了保证竖直,按下 Shift 键。

选中图例,右击鼠标选择快捷菜单 Properties,打开 Text Control 对话框,在 Background 下拉列表中选择 None(参考 4.8.4 小节),在文本框中键入:

$\backslash l(1.1) \backslash i(C \backslash (N)) = 0$
 $\backslash l(2.1) \backslash i(C \backslash (N)) = 4.9$
 $\backslash l(3.1) \backslash i(C \backslash (N)) = 6.8$
 $\backslash l(4.1) \backslash i(C \backslash (N)) = 12.9$
 $\backslash l(5.1) \backslash i(C \backslash (N)) = 18.5$

其中的“ $\backslash i$ ”和“ $\backslash$ ”分别表示斜体和下标(见表 4.1 所列),可以通过 Text Control 对话框中的  和  按钮实现。这样就完成了对文件的编辑。

6.6.8 保存文件

选择 File| Save Project 或单击 Standard 工具条 Save Project 按钮 ,保存编辑好的文件。

用 Layout 页面或使用 Copy Page 命令直接导出图形,如图 6.22 所示。

以上步骤不是一成不变的,用户可以根据习惯改变某些操作步骤,如可以将数据导入到一个 Worksheet 窗口中,个性化时也可以使用其他窗口的功能。

第 7 章 三维 Graph

Origin 支持三种类型数据的三维制图功能：

- XYY Worksheet 数据；
- XYZ Worksheet 数据；
- Matrix 数据。

但是，三维表面图和等高图只能由 Matrix 数据创建。本章的主要内容：

- Matrix 简介；
- 3D Graph 模板；
- 个性化 Graph；
- 扫描图形。

7.1 Origin 中的 Matrix

Matrix(矩阵)和 Worksheets 是 Origin 7.0 中两个重要的数据存储结构,Worksheets 中的数据可以生成 2D 和 3D 图形,但要生成三维表面图和等高图只能由 Matrix 数据创建,Origin 可以将 Worksheets 和 Matrix 相互转换。

Matrix 和 Worksheets 的不同之处在于其每个单元格都有默认的 X、Y、Z 关系。列号和行号中含有默认的 X、Y 值,X 是相对于 Matrix 列号的递增序列,Y 是相对于 Matrix 行号的递增序列,单元格中为 Z 数值,要显示 X、Y 数值的话,选择 View| Show X/Y,如图 7.1 所示。

Matrix					
	1	2	3	4	5
1	1.58295	1.54353	1.51877	1.43027	1.28
2	1.02129	1.06187	1.03731	0.94861	0.00
3	0.52358	0.56417	0.5394	0.4509	0.30
4	0.13788	0.17847	0.1537	0.0652	-0.08
5	-0.03659	0.004	-0.02077	-0.10927	-0.25
6	0.04506	0.08564	0.06088	0.02762	-0.17
7	0.36182	0.4024	0.37764	0.28914	0.14
8	0.83219	0.87278	0.84802	0.75952	0.61
9	1.33518	1.37577	1.351	1.2625	1.11
10	1.74136	1.78195	1.75718	1.66868	1.52

Matrix					
	5	-4.74353	-4.48718	-4.23077	-3.974
-10	1.58295	1.54353	1.51877	1.43027	1.28
-9.4871	1.02129	1.06187	1.03731	0.94861	0.00
-8.9743	0.52358	0.56417	0.5394	0.4509	0.30
-8.4615	0.13788	0.17847	0.1537	0.0652	-0.08
-7.9487	-0.03659	0.004	-0.02077	-0.10927	-0.25
-7.4359	0.04506	0.08564	0.06088	0.02762	-0.17
-6.9230	0.36182	0.4024	0.37764	0.28914	0.14
-6.4102	0.83219	0.87278	0.84802	0.75952	0.61
-5.8974	1.33518	1.37577	1.351	1.2625	1.11
-5.3846	1.74136	1.78195	1.75718	1.66868	1.52

图 7.1 显示 X/Y 数值前后的 Matrix 显示效果

Matrix 的基本操作,如新建和打开,可参考第 2 章中的相关章节,这里重点介绍 Matrix 不同于其他窗口的特殊操作。

7.1.1 Matrix 数值设置

Matrix 中的数据既可以导入,也可以通过一些函数命令进行自动设置。实际上对 Matrix 数值设置和基本操作是执行 Matrix 菜单命令或其子命令。

● 导入数据

将数据导入到 Matrix 中,选择 File| Import ASCII 或单击 Standard 工具条 Import ASCII 按钮,打开 Import ASCII 对话框,选中要导入的数据,单击“打开”按钮即可。

导入到 Matrix 窗口中的数据均默认为 Z 值,用户再设置 X、Y 值后即可制图。

● 设置 Matrix 数据属性

Origin 可以设置 Matrix 中的数据类型、格式和显示方式。激活 Matrix 窗口,选择 Matrix | Set Properties,打开 Matrix Properties 对话框,如图 7.2 所示。

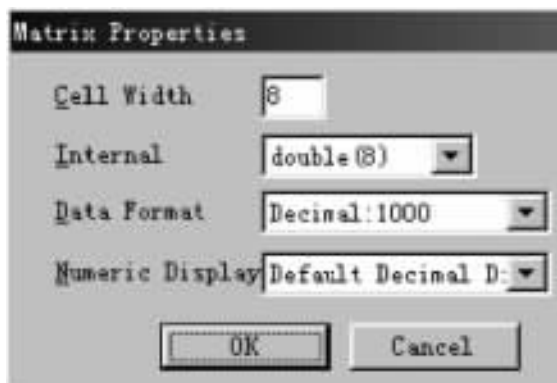


图 7.2 Matrix Properties 对话框

- 在 Cell Width 文本框中设置单元格的宽度,单位为字符数。
- 在 Internal 下拉列表中设置单元格数值的最大位数,默认设置为 Double(8),为每个数提供了 8 个字节的存储空间。Float(4),Int(4),Short(2)和 Char(1)分别提供了 4,4,2 和 1 字节的存储空间。
- 从 Data Format 下拉列表中可以选择数值的显示格式(参考表 3.2)。
- 在 Numeric Display 下拉列表中有三个选项,这些选项决定了 Matrix 单元格中数字的显示方式。① 默认的 Default Decimal Digits 选项显示 Matrix 单元格中所有数字位数,该位数在 Options 对话框的 Numeric Format 选项卡中设置(参考 2.8.2 小节);② Set Decimal Places 选项控制小数点后面数字的显示,选中该选项后,激活该选项的文本框,该文本框中的数值决定了显示小数点后面的位数,如果不填,Origin 使用默认值,这时 Options 对话框中关于数字显示的设置不起作用;③ Significant Digits 选项控制有效数字的位数,选中该选项后,在其后面的文本框中键入想要显示的有效数字的位数。

● 设置 Matrix 的 X、Y 值

前面已经介绍了, Matrix 中的 X/Y 值隐含在列号/行号中, 这些可以根据用户的需要进行设置, 选择 Matrix| Set Dimensions, 打开 Matrix Dimensions 对话框, 如图 7.3 所示。

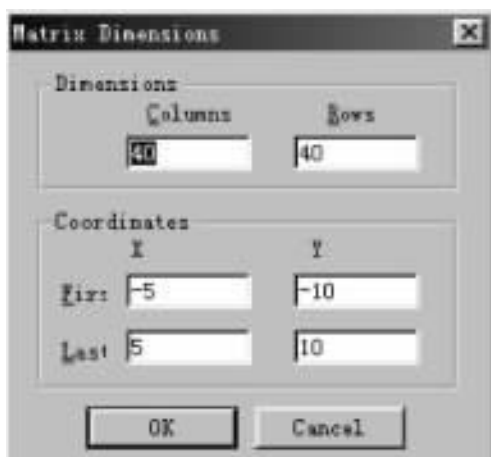


图 7.3 Matrix Dimensions 对话框

- 在 Dimensions 组中设置 Matrix 行数和列数。
- 在 Coordinates 组中设置 X 和 Y 的起始值和结尾值。

Matrix 中的 X 和 Y 值是递增序列, Origin 根据总列数和起始、结尾 X 值设置各个 X 值, 根据总行数和起始、结尾 Y 值设置各个 Y 值, 默认数值分别是 Columns=32, Rows=32, First=1, Last=10, First=1, Last=10。

图 7.3 中是设置的数值, 其对应的 X 、 Y 值如图 7.1 所示。

● 设置 Matrix 的 Z 值

除了设置 Matrix 的 X 、 Y 值外, 用户也可以设置 Z 值, 即单元格中的数值。选择 Matrix| Set Values, 打开 Set Matrix Values 对话框, 如图 7.4 所示。



图 7.4 Set Matrix Values 对话框

- 首先设置 Matrix 的行和列的范围, 当打开 Set Matrix Values 对话框时, 默认的值是当前 Matrix 的全部范围。在图 7.3 中已经设置了行和列均为 40, 所以这里的

行(用 i 表示)和列(用 j 表示)的范围均为 $1 \sim 40$, 用户可以根据需要进行更改, 那么 Matrix 的数值就被添加到指定的范围内。

- 在 $\text{Cell}(i, j)$ = 文本框中设置函数, Origin 7.0 在 Add Function 下拉列表中提供了大量的函数供用户选用, 选中一个就会在上面的提示框中出现该函数的说明(参考 4.5.1 小节), 用户可以根据需要选择函数, 然后单击 Add Function 按钮添加函数。
- 选中 Compile as Origin C and Treat x^y as $\text{pow}(x, y)$ 复选框后, 用户就可以使用 Origin C 语句来表示函数了。当单击 OK 按钮执行函数语句遇到错误时, 会打开 Script 窗口输出错误信息。

在 $\text{Cell}(i, j)$ = 文本框中的函数设置, 可以使用 Origin 的函数库, 用户也可以使用合法的语句进行设置, 但需要注意的是, 在表达式的后面不能用分号。例如在图 7.4 中设置的函数是 $\sin(x) + \sin(y)$, 其对应的 Matrix 值显示在图 7.1 中。

● 预览 Matrix 数据

如果 Matrix 的数据很多, 则只能在窗口中显示出部分数据, 使用窗口右边和下边的滚动条可以预览其他数据。

也可以选择 View | Go to Row, 打开 Go to Row 对话框, 添入要预览的行, Matrix 直接显示出该行。

● 个性化 Matrix 显示属性

和 Worksheet 一样, Matrix 的显示属性也可以更改。在 Matrix 窗口左上角的格子里双击鼠标, 打开 Matrix Display Control 对话框, 在这里可以更改 Matrix 的显示属性, 参考 3.1.1 小节。

7.1.2 Matrix 基本操作

对 Matrix(矩阵)的操作包括矩阵的转置、旋转、翻转、收缩、扩展、平滑和积分等。

● Matrix 的转置

选择 Matrix | Transpose, 将 Matrix 的行转换成列, 将列转换成行, 即将 $\text{Cell}(i, j)$ 转换成 $\text{Cell}(j, i)$ 。

● Matrix 的逆

选择 Matrix | Invert, 求矩阵的逆矩阵 $\text{Cell}(i, j)^{-1}$, $\text{Cell}(i, j) \cdot \text{Cell}(j, k)^{-1} = \delta_{i,k}$, 要求矩阵为行数和列数相等的方阵。

● Matrix 的旋转和翻转

选择 Matrix | Rotate90 使得矩阵翻转 90° , 即将 $\text{Cell}(i, j)$ 转换成 $\text{Cell}(j, m-i+1)$, 其中的 m 是总行数。

选择 Matrix | Flip H 使得矩阵水平翻转, 即将 $\text{Cell}(i, j)$ 转换成 $\text{Cell}(i, n-j+1)$, 其中的 n 是总列数。

选择 Matrix | Flip V 使得矩阵竖直翻转, 即将 $\text{Cell}(i, j)$ 转换成 $\text{Cell}(m-i+1, j)$, 其中的 m 是总行数。

● Matrix 的收缩

选择 Matrix | Shrink, 打开 Shrink into 1×1 for Every 对话框, 在其中填入收缩因子。如要将 40 列 30 行的矩阵收缩成 20 行 10 列的矩阵, 则在行和列因子文本框中分别填入 2 和 3。

如果不能被因子整除,则取整数部分+1。Matrix 收缩后单元格中的数值是收缩前相应几个单元格数据的平均。

● Matrix 的扩展

选择 Matrix| Expand,打开 Expand for Every Cell 对话框,在其中填入行和列的扩展因子,即可扩展 Matrix。扩展后 Matrix 单元格中的数据是按照双线性插值法添加的。

● Matrix 的平滑

选择 Matrix| Smooth,弹出提示对话框,单击“确定”按钮,Origin 执行下列操作:

- 如果矩阵中的行/列数目小于 32,Origin 先以因子 2 来扩展矩阵,然后以因子 2 收缩矩阵;
- 如果矩阵中的行/列数目大于 32,Origin 先以因子 2 来收缩矩阵,然后以因子 2 扩展矩阵。这时平滑后的矩阵可能和原来矩阵的行/列数目不同,例如矩阵的列数是 35,收缩后的列数是 18,再扩展后的列数是 36。

● Matrix 的积分

选择 Matrix| Integrate,Origin 执行 X 、 Y 的二重积分,计算 Matrix 定义下的体积,并将结果输出到 Script 窗口中。

7.1.3 Matrix 和 Worksheet/Excel 相互转换

要将 Matrix 转换为 Worksheet,有下列两种方法。

- 直接转换。激活窗口 Matrix,选择 Edit| Convert to Worksheet| Direct,生成名称为 Data n 的 Worksheet 窗口,并将 Matrix 所有的数据导入到 Worksheet 窗口中,行列次序不变。默认情况下,第一列设置为 X 列,其他列设置为 Y 列,如图 7.5 的 Data1 窗口所示,是由图 7.1 的矩阵直接转换成的。

图 7.5 Matrix 转换成 Worksheet 三种不同方式

- 生成 XYZ 列 Worksheet,激活窗口 Matrix,选择 Edit| Convert to Worksheet| XYZ 打开,Convert Matrix to Worksheet 对话框,如图 7.6 所示。在 Conversion Type 下拉列表中有两个选项:X Constant 1st,表示首先排列 X 值;Y Constant 1st 表示首先排列 Y 值。在 Matrix 窗口中对应 X 、 Y 值的单元格数值放置在 Worksheet 中相应的 X 、 Y 值后面,如图 7.5 所示。Data2 为生成 XYZ 列 Worksheet 并选择 X Constant 1st 选项,Data3 为生成 XYZ 列 Worksheet 并选择 Y Constant 1st 选项。

要将 Worksheet 转换为 Matrix,也有几种方法,采用哪种方法,决定于 Worksheet 的数据

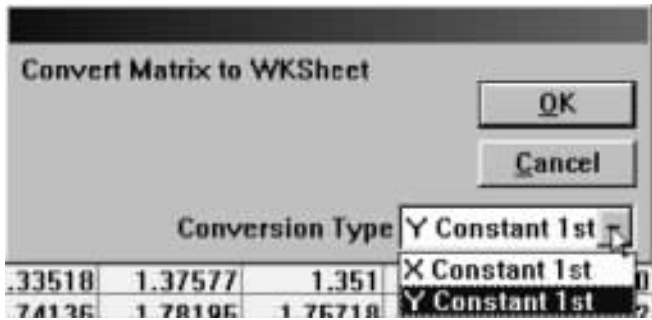


图 7.6 Couvert Matrix to Worksheet 对话框

类型。

- 直接转换。激活窗口 Worksheet, 选择 Edit| Convert to Matrix| Direct, 生成一个新 Matrix 窗口, 并将 Worksheet 中的数据一一对应地转换到 Matrix 窗口中, 保持同样的行和列。如果激活的是 Excel 工作簿, 则选择 Window| Create Matrix 将 Excel 工作簿转换成 Matrix。该操作是将 Matrix 直接转换成 Worksheet 的逆操作, 如果对图 7.5 中的 Data1 执行该操作的话, 则转换成图 7.1 的 Matrix。
- 扩展列转换。Worksheet 中的数据导入到 Matrix 窗口时, 将 Worksheet 的一列数据扩展成几列数据, 这对行数有限的 ASCII 数据文件存储很有用。选择 Edit| Convert To Matrix| Expand Columns, 打开 Expand for every row 命令框, 制定要将 ASCII 数据文件每列扩展成 Matrix 的列数, 单击 OK 按钮, Origin 按照一行一行的顺序将数据读入到 Matrix 窗口中。如图 7.7 是将图 7.5 中的 Data3 转换成 Matrix, 在 Expand for every row 命令框中键入的是 2。

Matrix2							
	1	2	3	4	5	6	
1	-5	-10	1.50295	-4.74359	-10	1.54353	Cell(2,3) 数据
2	-4.40710	-10	1.51077	-4.23077	-10	1.43027	
3	-3.97436	-10	1.28382	-3.71795	-10	1.08899	
4	-3.46154	-10	0.85854	-3.20513	-10	0.60751	Cell(8,3) 数据
5	-2.94872	-10	0.35234	-2.69231	-10	0.1097	
6	-2.4359	-10	-0.10454	-2.17949	-10	-0.27638	
7	-1.92300	-10	-0.39457	-1.66667	-10	-0.45139	
8	-1.41026	-10	-0.44312	-1.15385	-10	-0.37031	
9	-0.89744	-10	-0.23771	-0.64103	-10	-0.054	
10	-0.38462	-10	0.16882	-0.12821	-10	0.41617	
11	0.12821	-10	0.67100	0.38462	-10	0.91922	

图 7.7 将 Data3 按扩展列的方式转换成 Matrix(扩展因子为 2)

- 2D 区间(Binning)转换。在做物理测量时经常遇到这样的问题: 比如在粒子物理中记录粒子在某区间出现的频数, 记录结果为给出空间位置, 即 X 和 Y 值。如果需要知道在某个位置范围($\Delta X, \Delta Y$)内粒子出现的频率, 就需要将采集的数据转换成 Matrix。首先选中 Y 列, 和它相对应的 X 列作为 X 值, 然后选择 Edit| Convert to Matrix| 2D Binning, 打开 Create Bin Matrix 对话框, 在对话框中出现默认的转换限制, 单击 OK 按钮生成 Matrix, 行为 X 值, 列为 Y 值, 单元格中的数为在该范围内出现的频率。如

图 7.8 所示,其中的 Graph 图形是 Data2 的散点图,图中的 Cell(3,1)和 Cell(9,3)表示该网格中点数和 Matrix 中的相应单元格数值相对应,Matrix 窗口下面设置为 Create Bin Matrix 对话框中的默认限制。

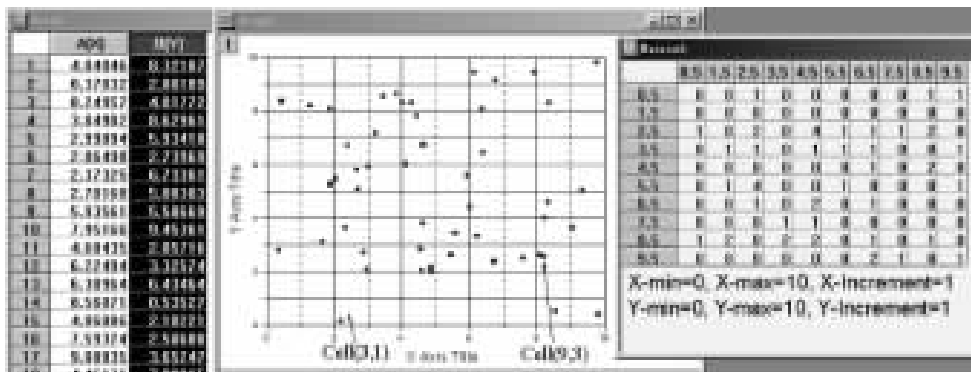


图 7.8 使用 2D Binning 方法将 Worksheet 转换成 Matrix

- 转换 Regular XYZ 数据。该方法要求 Worksheet 数据具有下列特点:每个 X 值必须对应数目相同的多个 Y 值;每个 Y 值必须对应数目相同的多个 X 值;其 XY 图形特征是有规律的锯齿状。选择 Edit| Convert to Matrix| Regular XYZ, Origin 首先检测是否有多个相同的 (X, Y) 值,如果有的话,将它们对应 Z 值的平均作为单元格 Cell(X, Y)的 Z 值。实际上,该操作是将 Matrix 转换成 XYZ 列 Worksheet 的逆过程,针对图 7.5 中的 Data2 和 Data3 执行该操作,就可以转换成图 7.1 的 Matrix。
- 转换 Sparse XYZ 数据。该方法可以生成 3D 条状图,在指定点 (X, Y) 的条高度为 Z 值。该方法和有序 XYZ 数据的转换方法类似,并将不全的 (X, Y) 对应的 Z 值设置为空。选中 Z 列,选择 Edit| Convert to Matrix| Sparse XYZ, 打开 Gridding Parameters 命令框,其中的参数是按照 Worksheet 中的数据特点设置的,单击 OK 按钮,转换成矩阵,如图 7.9 所示,行号为 Y 值,列号为 X 值,并将所缺的数据在单元格设置为空。

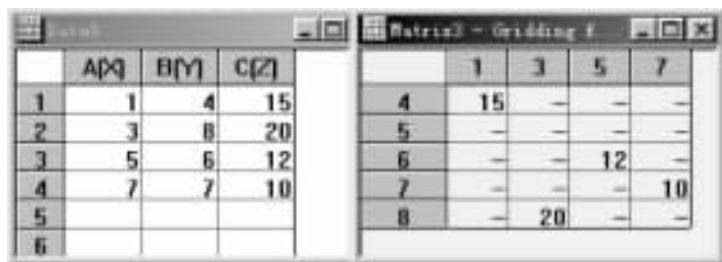


图 7.9 使用 Sparse XYZ 命令将 Data4 转换成 Matrix3

- 转换随机 XYZ 数据。如果 Worksheet 数据不能用前面介绍的方法转换,可以使用随机数据法。选中 Z 列,选择 Edit| Convert to Matrix| Random XYZ, 弹出 Random XYZ Gridding 工具框,如图 7.10 所示。从 Select Gridding Method 下拉列表中选择合适的方法,不改变默认的参数设置,单击 OK 按钮,即可转换成 Matrix,同时使用原始数据制成 XYZ 图,如图 7.11 所示。



图 7.10 Random XYZ Gridding 对话框

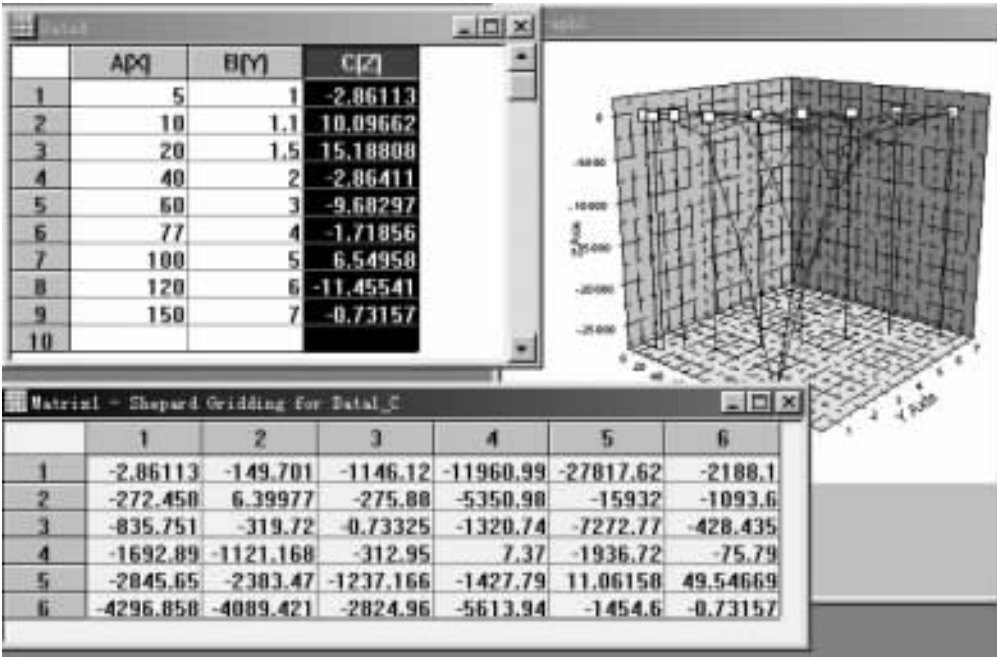


图 7.11 使用 Random XYZ 命令将 Data1 转换成 Matrix

读者也可参考文件 OriginPro70\Samples\Analysis\Worksheet to Matrix, 里面有各种转换的详细说明。

7.1.4 保存 Matrix 窗口

选择 File| Save Window As 打开保存对话框, 默认的扩展名为 *. OGM, 将 Matrix 窗口及其数据一起保存。

选择 File| Save Template As, 默认的扩展名为 *.OTM, 只保存 Matrix 窗口及其中的格式和数据关系, 而不保存数据。

7.2 生成三维图形

现在就可以使用 Worksheet 和 Matrix 来绘制三维图形(3D Graph 模板)了。3D 图形包括 3D XYY, 3D XYZ, 3D 表面图和等高 Graph。前两种模板需要 Worksheet 数据, 后两种需要 Matrix 数据。本节简单介绍三维图形模板的基本特点和绘制方法。

7.2.1 3D XYY Graph

这类图形利于显示数据之间的变化规律, 尤其是几组数据之间的比较, 且具有立体感。包括 3D 条形图、3D 带形图、3D 墙形图和 3D 瀑布图。

数据要求: Worksheet 中至少有一个 Y 列(或其中的一部分), 如果没有设定与该列相关的 X 列, Origin 会提供 X 的默认值, 即将行号作为 X 值。

绘图方法: 选中数据, 在 Plot 下拉菜单中选择要绘制的图形类型, 或直接单击 3D Graphs 工具条上的相应按钮(详细说明参考附录 A)。

- 3D 条形图(3D Bar Graph)。Y 值为条形的高度, 每个条都有固定的宽度, 其颜色按照红、绿、蓝的顺序变化, 并将 Y 值的标签标在旁边作为 Z 轴, 如图 7.12 所示, 模板文件为 BAR3D.OTP。

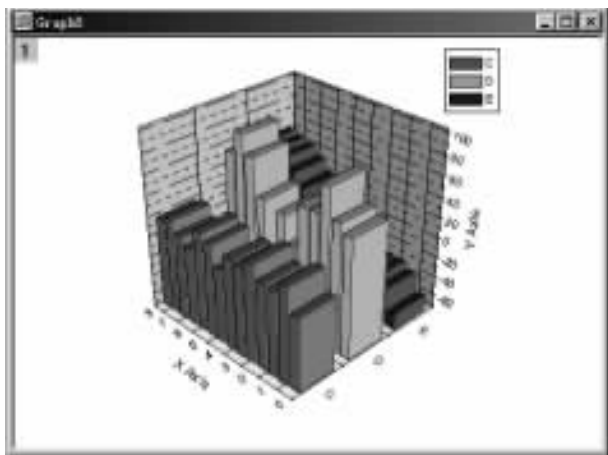


图 7.12 3D 条形图

- 3D 带形图(3D Ribbon Graph)。Y 值为带子的高度, 每个带子都有固定的宽度, 并将 Y 值的标签标在旁边作为 Z 轴, 如图 7.13 所示, 模板文件为 RIBBON.OTP。
- 3D 墙形图(3D Wall Graph)。Y 值为墙的高度, 每个墙都有固定的厚度, 并将 Y 值的标签标在旁边作为 Z 轴, 如图 7.14 所示, 模板文件为 WALLS.OTP。
- 3D 瀑布图(3D Waterfall Graph)。该图类似于 3D 墙形图, 但没有厚度, 且均为白色, 如图 7.15 所示, 模板文件为 WATER3D.OTP。

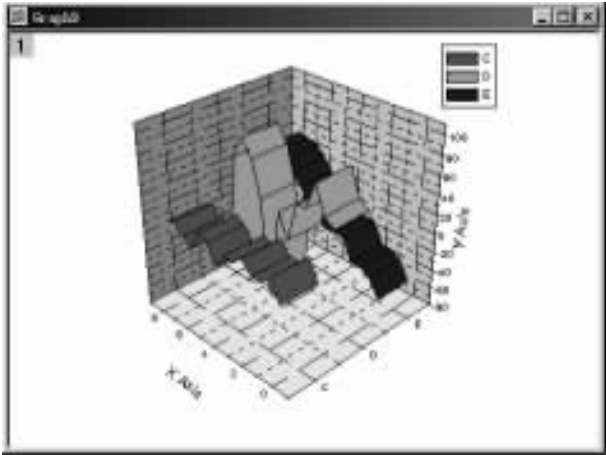


图 7.13 3D 带形图

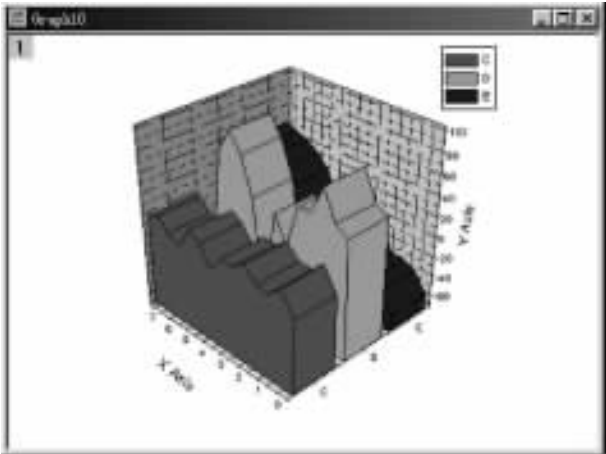


图 7.14 3D 墙形图

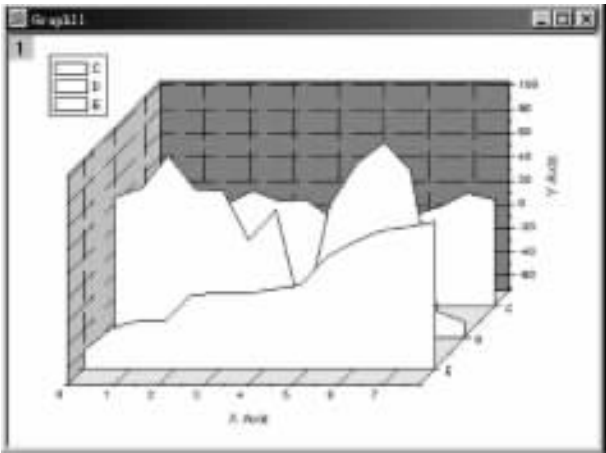


图 7.15 3D 瀑布图

7.2.2 3D XYZ Graph

这类图形利于显示数据 X, Y, Z 之间的变化规律, 包括 3D 散点图和 3D 投影图。

数据要求: Worksheet 中至少有一个 Y 列和 Z 列(或其中的一部分), 如果没有设定与该列相关的 X 列, Origin 会提供 X 的默认值, 即将行号作为 X 值。

绘图方法: 选中数据, 选择 Plot | 3D XYZ | 3D Scatter/Plot | 3D XYZ | 3D Trajectory, 或直接单击 3D Graphs 工具条 3D Scatter Plot 按钮  或 3D Trajectory 按钮 .

- 3D 散点图(3D Scatter Graph)。用散点的形式将 X, Y, Z 之间的数量关系表示出来, 如图 7.16 所示, 模板文件为 3D. OTP。

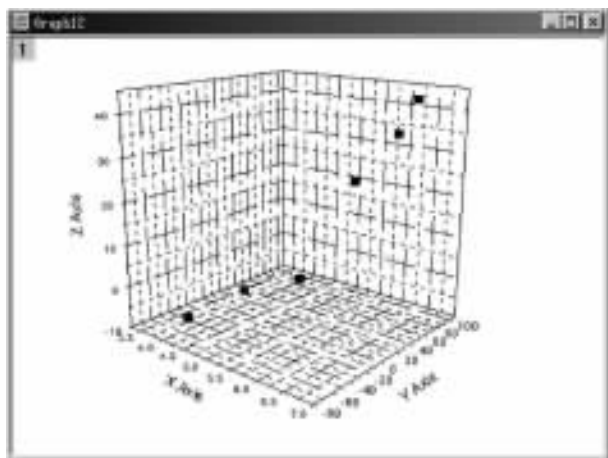


图 7.16 3D 散点图

- 3D 投影图(3D Trajectory Graph)。为散点+线的 3D+XY 面投影线的图形, 如图 7.17 所示, 模板文件为 TRAJECT. OTP。

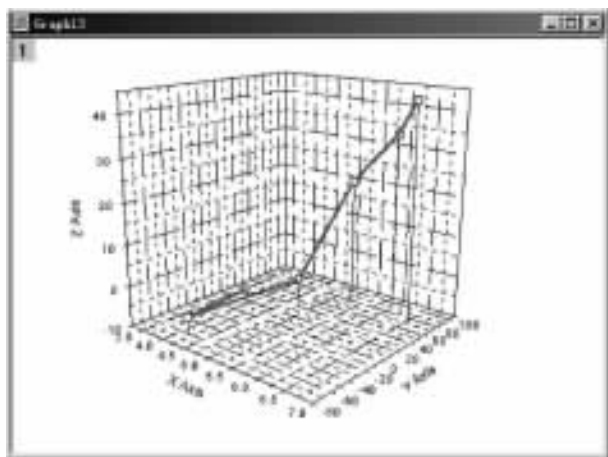


图 7.17 3D 投影图

这类图的个性化方法同二维图形类似,但在 Plot Details 对话框左边的窗口的 Data 中除了原始数据外,还包含显示 XY , YZ 和 ZX 面的投影选项。在这里不仅可以定制空间数据点的特性,还可以定制投影点的特性。若在右面的窗口中选中 Data 图标,则出现 Edit Control 选项卡,用户可以方便快捷地设置数据点及其投影之间的关系。有三个选项:All Together,数据点和三个方向上的投影具有相同连线和符号等特征,可以进行整体编辑;Fully Independent,各元素之间相互独立,逐个编辑不同的元素;Original Independent of Projections,数据点和其投影分开,分别编辑,但三个方向上的投影是相互联系的。

7.2.3 3D 表面图

这类图形是根据 Matrix 来制图的。如果说前两种图是表现空间曲线的话,那么这类图形是用来表现空间曲面的,包括 3D 条形表面图、3D 彩色填充表面图、3D 彩色映射表面图、3D 线条表面图、3D 线框表面图、3D X 恒定有基线表面图和 3D Y 恒定有基线表面图。本节的数据来源为图 7.1 Matrix 中的数据。

- 3D 彩色填充表面图(3D Color Fill Surface)。选择 Plot | 3D Color Fill Surface 或单击 3D Graphs 工具条 3D Color Fill Surface 按钮  进行制图。Origin 根据 X, Y, Z 坐标值确定点在 3D 空间中的位置,将各点以直线相连,这些网格线就确定了 3D 表面图,并用某种颜色填充。默认的颜色为上表面黄色、下表面暗黄色、网格线黑色,如图 7.18 所示。这些设置可以在 Plot Details 对话框中进行修改,模板文件为 MESH.OTP。

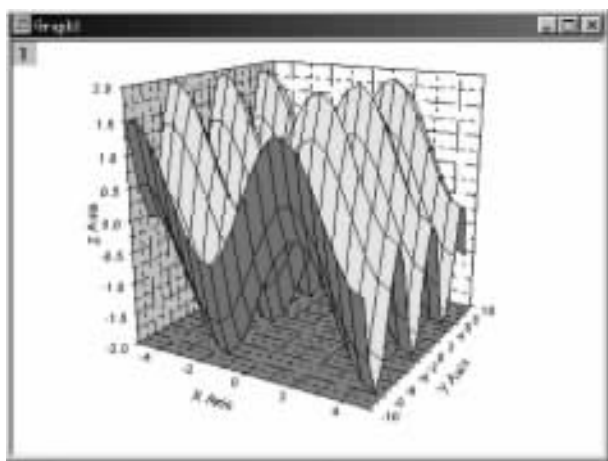


图 7.18 3D 彩色填充表面图

- 3D 彩色映射表面图(3D Color Map Surface)。选择 Plot | 3D Color Map Surface 或单击 3D Graphs 工具条 3D Color Map 按钮  进行制图。这类图形和 3D 彩色填充表面图类似,只不过上表面填充的颜色为与 Z 值相对应的一系列变化的颜色,并加有白色等高线,如图 7.19 所示。这些默认的设置可以在 Plot Details 对话框的 Color Map 选项卡中进行修改,模板文件为 CMAP.OTP。
- 3D 线框表面图(3D Wire Frame Surface)。选择 Plot | 3D Wire Frame 或单击 3D

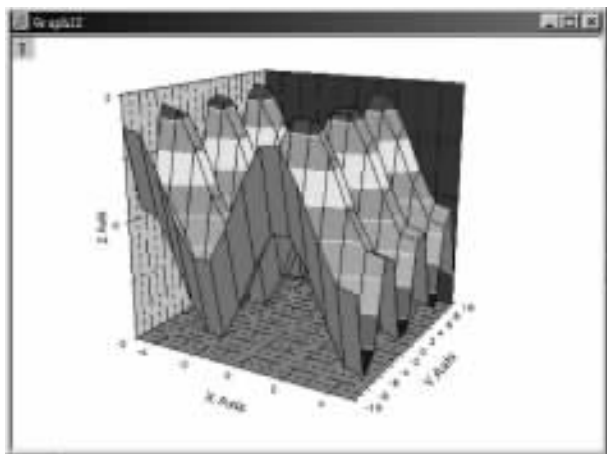


图 7.19 3D 彩色映射表面图

Graphs 工具条 3D Wire Frame 按钮  进行制图。Origin 根据 X, Y, Z 坐标值确定点在 3D 空间中的位置, 将各点以直线相连, 这些网格线就确定了 3D 表面(不用颜色填充表面), 默认的网格线颜色为蓝色, 如图 7.20 所示。模板文件为 WIREFRM. OTP。

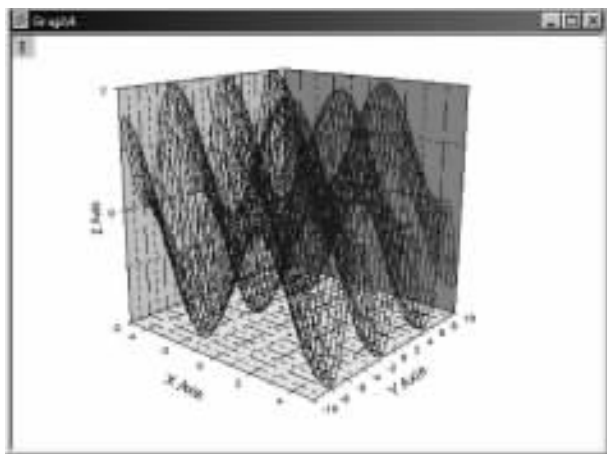


图 7.20 3D 线框表面图

- 3D 线条表面图(3D Wire Surface)。选择 Plot | 3D Wire Surface 或单击 3D Graphs 工具条 3D Wire Surface 按钮  进行制图。Origin 根据 X, Y, Z 坐标值确定点在 3D 空间中的位置, 将各点以直线相连, 这些线称为主线, 在相邻的主线中间插入直线称为辅线, 所有这些网格线确定了 3D 表面。默认情况下, 主线之间有两条辅线, 主线为黑色, 辅线为绿色, 如图 7.21 所示。模板文件为 WIREFACE. OTP。
- 3D X 恒定有基线表面图(3D X Constant with Base Surface)。选择 Plot | 3D X Constant with Base 或单击 3D Graphs 工具条的 3D X Constant with Base 按钮  进行制图。不同的 X 取值确定了平行于 YZ 面的一系列平面, 在每个平面上, 不同的 Z 值描绘的点连成一条曲线, 所有的这一系列曲线构成 3D 表面图。默认设置是上表面为黄

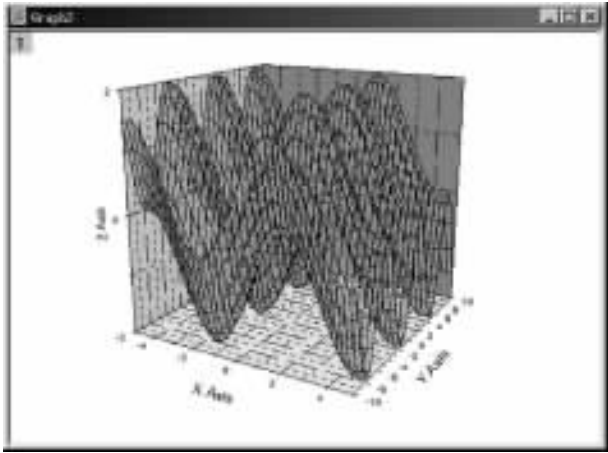


图 7.21 3D 线条表面图

色、曲线为黑色、X 侧壁为绿色,如图 7.22 所示。模板文件为 XCONST.OTP。

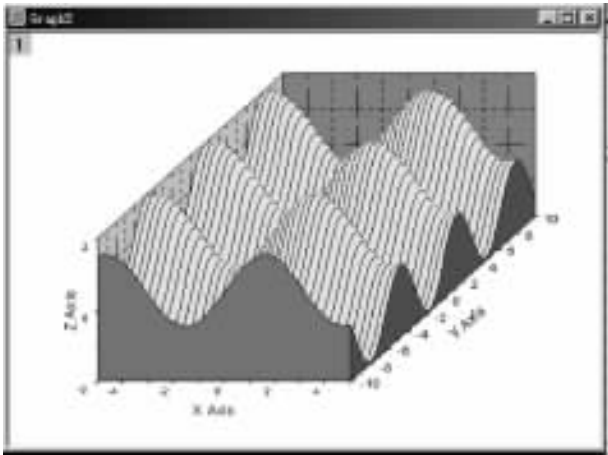


图 7.22 3D X 恒定有基线表面图

- 3D Y 恒定有基线表面图(3D Y Constant with Base Surface)。选择 Plot| 3D Y Constant with Base 或单击 3D Graphs 工具条的 3D Y Constant with Base 按钮  进行制图。此图和图 7.22 类似,不同之处在于所有的平面平行于 XZ 面,如图 7.23 所示。模板文件为 YCONST.OTP。
- 3D 条形表面图(3D Bar Surface)。选择 Plot| 3D Bars 或单击 3D Graphs 工具条的 Matrix 3D Bars 按钮  进行制图。X,Y 的值确定了数据点在 XY 坐标平面上的位置,Z 值确定该位置条的高度,条的上端构成了 3D 表面图。默认的颜色设置是条的边框为黑色,条的表面填充色是递增的序列,依次是白、浅灰、灰、浅黄、浅蓝、浅洋红、深灰、黑和红等,如图 7.24 所示。模板文件为 3DBARS.OTP。

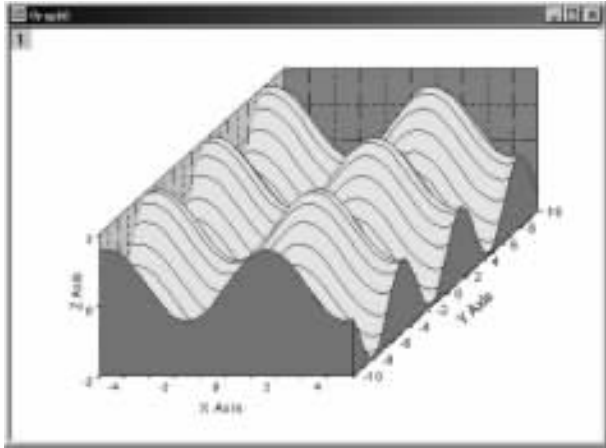


图 7.23 3D Y 恒定有基线表面图

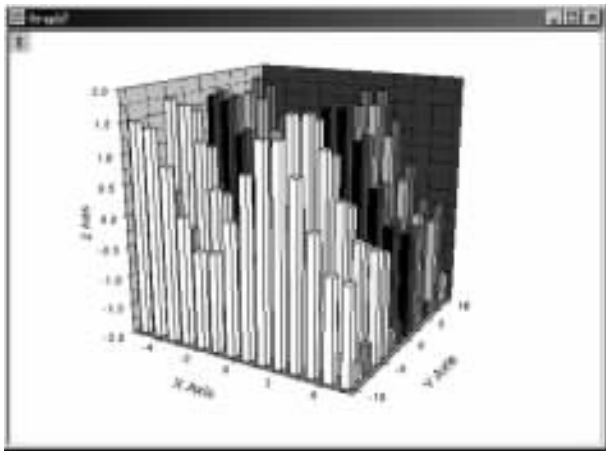


图 7.24 3D 条形表面图

7.2.4 等高 Graph

这类图形也是根据 Matrix 来制图的,利用二维图形表现三维效果,是 Matrix 的表面图,可以理解为从 Z 方向上来看 3D 彩色映射表面图,包括灰度映射等高线图、带有数字标签的黑白线条等高线图和彩色填充等高线图。

- 灰度映射等高线图(Gray Scale Map Contour)。选择 Plot| Contour Plot| Gray Scale Map 或单击 3D Graphs 工具条的 Gray Scale Map 按钮  进行制图。在 XY 坐标平面上,不同 Z 值范围的数据点用不同的灰度表示,形成灰度映射等高线图,如图 7.25 所示。模板文件为 CONTGRAY.OTP。

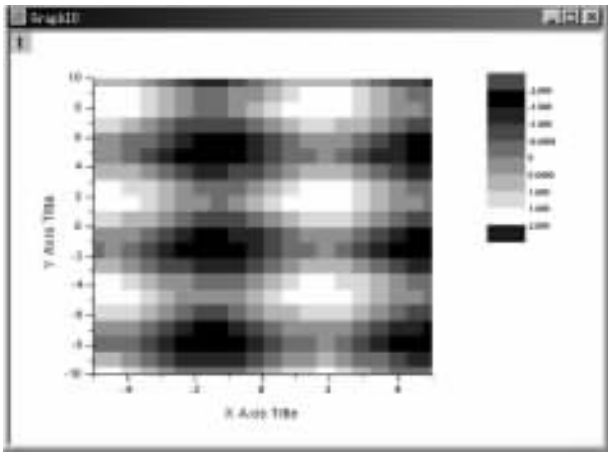
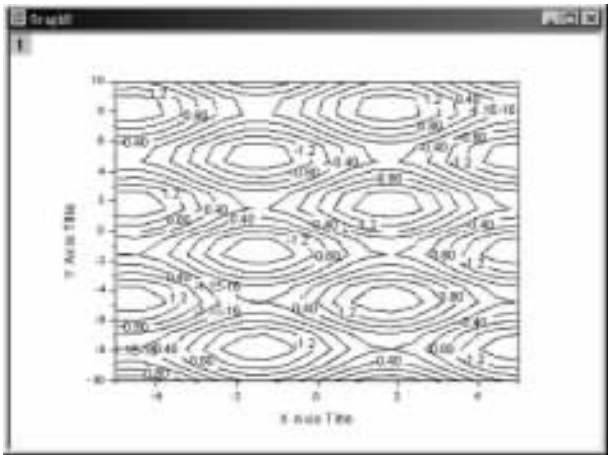


图 7.25 灰度映射等高线图

- 带有数字标签的黑白线条等高线图(Black and White Lines with Labels Contour)。选择 Plot | Contour Plot | Contour-B/W Lines + Labels 或单击 3D Graphs 工具条的 Contour B/W Lines 按钮进行制图。在 XY 坐标平面上,相同 Z 值数据点连成一条封闭的曲线——等高线,并在曲线上标出 Z 值。默认的设置 为白底黑线,如图 7.26 所示。模板文件为 CONTLINL.OTP。



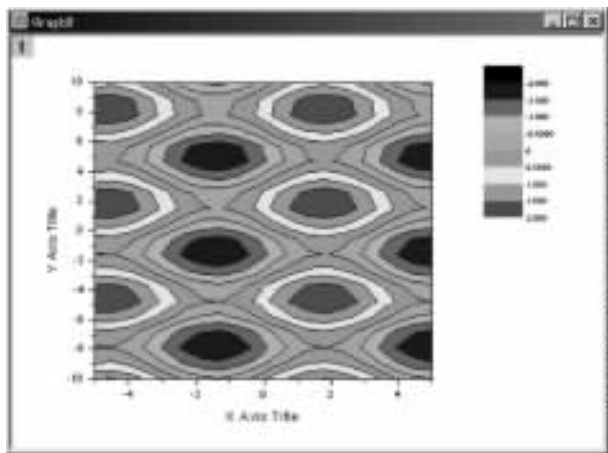


图 7.27 彩色填充等高线图

7.3 个性化 3D Graph

上面介绍了三维图形的几个模板及其绘制方法,下面介绍个性化三维图形。根据 Worksheet 绘制个性化图形可参考 4.8 小节,这里重点介绍根据 Matrix 绘制的 3D 表面图和 3D 等高图。

7.3.1 3D 等高图的个性化

3D 等高图是将 Matrix 映射到二维平面上,将不同的 Z 值用不同的颜色或灰度来区分,加上等高线,这些设置可以在 Plot Details 对话框中进行修改。

● Color Map/Contours 选项卡

在绘制等高图时,Origin 根据 Z 值的最大值和最小值将他们分成 8 份,并包括超出该范围的两个数值级别,共有 10 个颜色级别,如图 7.28 所示。在这里可以设置 Z 值的等级、填充色、等高线及其标签属性等,有下述三种情况。

- 编辑单个 Z 值等级。双击 Level 列内的某个数值,在数值后面出现光标,可以直接进行编辑。若要编辑单个 Z 值的颜色或等高线,则将鼠标放在 Fill 或 Line 下面的某个级别上,变成小手形状,分别打开 Fill 或 Line 对话框进行设置,如图 7.28 所示;若要显示某个级别的标签,则直接在该级别的 Labels 下面的方框内画“√”即可。
- 整体设置 Z 值的等级、颜色、等高线和标签。单击 Level, Fill, Line 和 labels 列的标题栏,分别打开 Set Levels, Fill, Contour Lines 和 Contour Labels 对话框,如图 7.29 所示,这 4 个对话框的介绍简述如下。

① Set Levels 对话框,如图 7.29 所示。在这里可以定制 Z 的最大值和最小值,单击 Find Min/Maxs 按钮,Origin 根据 Z 值自动设置最大/最小值;使用 Interval 或 Num. of Level 文本框可以调整颜色级别的总数和间隔;如果使用对数坐标的话,选中 Log Scale 复选框。

② Fill 对话框,如图 7.29 所示。选中 Limited Mixing 复选框并在 From 和 To 下拉列表

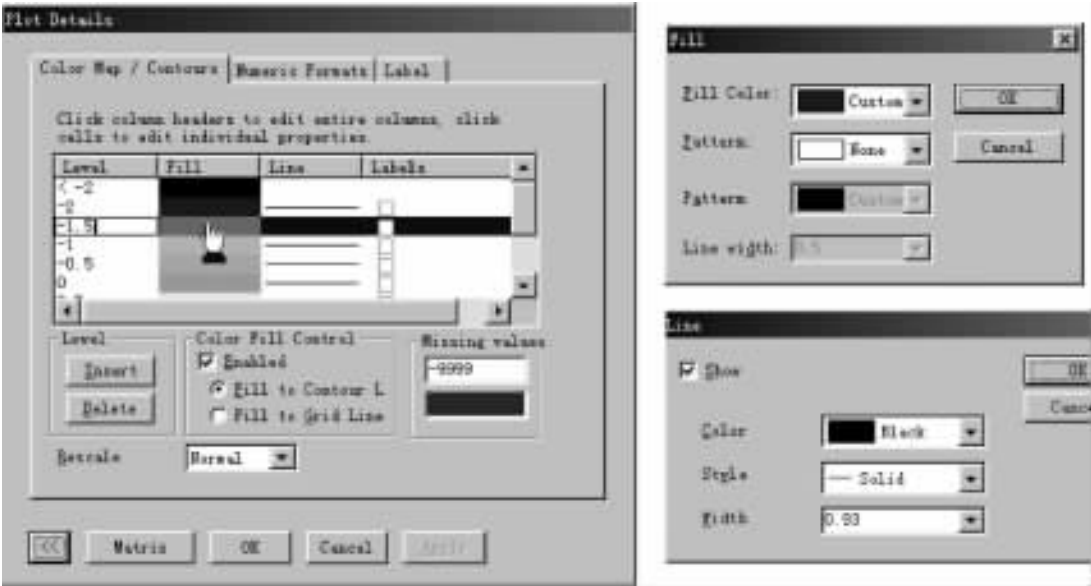


图 7.28 Color Map/Contours 选项卡及 Fill,line 对话框

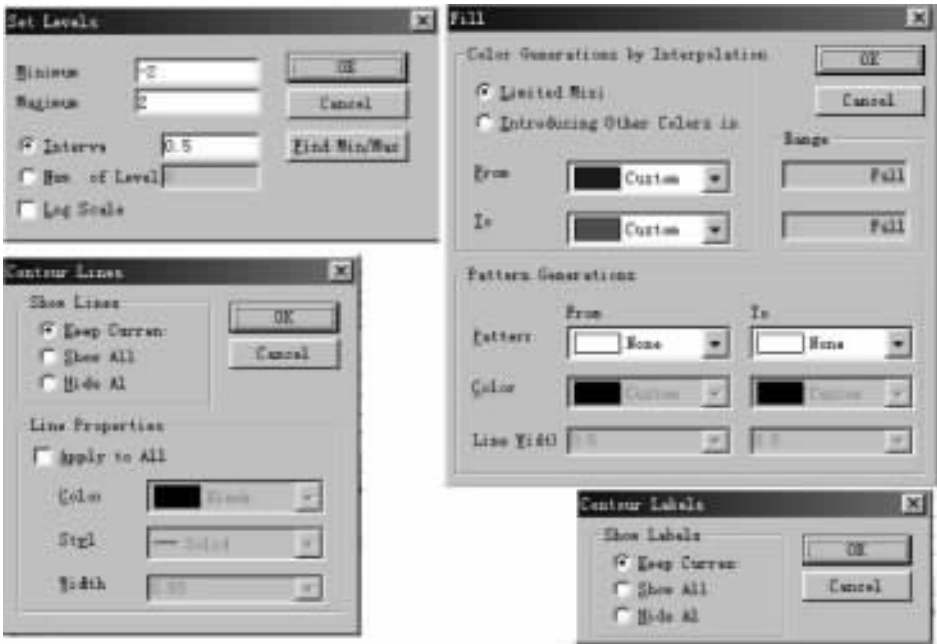


图 7.29 Set Levels,Fill,Contour Lines 和 Contour Labels 对话框

中选择起始和结束颜色,则彩色填充图中的颜色在这两种颜色之间变化;若选中 Introducing Other Colors in Mixing 复选框,允许图中出现其他颜色。便于区分不同的 Z 值。Pattern Generations 组可以设置填充的方式,包括斜线、网格线等。在 From 和 To 选择不同的样式,则填充连续变化,图 7.30 是 From 选择斜线 Medium,To 选择斜网格 Medium 后图 7.27 彩色填充图的显示效果;若选择相同,则该样式应用于所有样式级别。如果对某个数据段感兴趣,

选择了部分级别,则在 Range 组中出现选择的范围。

③ Contour Lines 对话框,如图 7.29 所示。这里可以设置是否显示等高线,等高线的样式、宽度和颜色等属性。

④ Contour Labels 对话框,如图 7.29 所示。用于设置是否显示等高线的标签。

➤ 编辑几个 Z 值的颜色、等高线和标签。用 Ctrl+单击的方法选中要编辑几个 Z 值的等级,再单击 Fill,Line 和 labels 列的标题栏进行设置。

注意:用户可以在 Graph 窗口的某个地方直接添加等高线标签。操作方法是在某等高线上右击鼠标,选择快捷菜单命令 Add Contour Label 即可;若要删除标签,则用鼠标直接拖走。

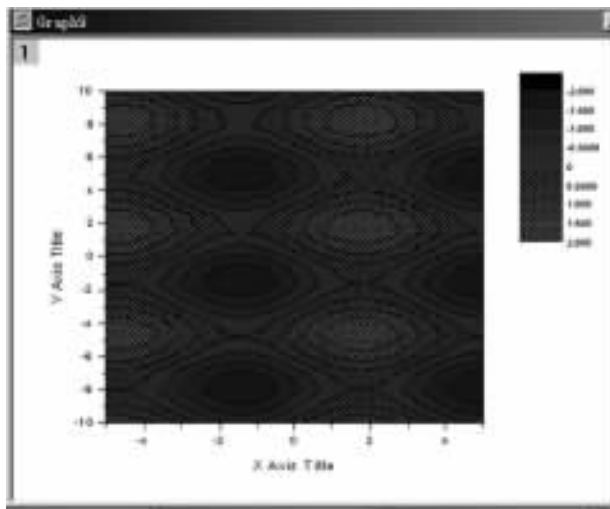


图 7.30 个性化后的彩色填充图

下面来说明 Plot Details 对话框 Color Map/Contours 选项卡中的其他功能。选中一个级别,单击 Insert 按钮,就可以在该级别的上面添加一个新颜色级别,该级别的数值为相邻两个数值的均值。如果单击 Delete 按钮,则删除该颜色级别;在彩色填充图中会自动选中 Color Fill Control 组中的 Enable 复选框,如果取消该选择,则无填充色,变成没有数字标签的等高线图。

当 Matrix 中的某个数值改变时,Rescale 模式用来控制是否更改 Color Map/Contours 选项卡中确立的颜色级别:Normal,Origin 将自动根据最大值和最小值将数值等分并和一定的颜色联系在一起;Manual,这时即使改变了 Matrix 中的数值,也不会改变 Color Map/Contours 选项卡中的颜色设置;Fixed From,保持最小值级别对应的颜色不变,根据 Matrix 更改其他颜色设置;Fixed To,保持最大值级别对应的颜色不变,根据 Matrix 更改其他颜色设置。

● Numeric Formats 选项卡

Numeric Formats 选项卡用来设置等高图中数字标签的显示方式,或彩色填充图上彩色级别图例中的数字显示方式,如图 7.31 所示。

➤ 数字格式组(Numeric Formats)。从 Format 下拉列表中选择数字标签的显示格式,包括 Decimal,Engineering 和 Scientific,其具体含义及阈值控制方式参考前面的章节。在 Divide by Factor 文本框中添入数字,则所有的颜色填充和等高线级



图 7.31 Numeric Formats 选项卡

别数字都除以这个数值然后显示在 Graph 中;在 Decimal Places 控制框中设置数字小数点后面显示的位数,在 Significant Digits 控制框中设置有效数字的位数;在 Prefix 和 Suffix 文本框中可以分别添入数字标签显示的前缀和后缀,前缀和后缀分别显示在数字标签的前面和后面。

- 标签标准 (Labeling Criteria) 组。当等高线图中有一部分数值大于设置值时, Min. Area 复选框中的数字是决定是否显示这部分数值标签的百分比。

● Label 选项卡

在 Label 选项卡中可以设置字体及其大小和颜色,可参考图 4.70。如果突出显示等高线图中标签的话,选中 White Out 复选框,这样不显示标签下面的部分等高线。

7.3.2 表面图的个性化

对于表面图形,使用 Plot Details 对话框可以进行个性化,包括坐标面、网格线和表面色等。

● Grids 选项卡

双击 3D 彩色填充表面图(或其他图形),打开 Plot Details 对话框的 Grids 选项卡,如图 7.32 所示。

在 Enable 下拉列表可以选择网格线的显示方式,包括 None, X Grid Line Only, Y Grid Line Only 和 Both X and Y Lines 四种选项。在 Grid Line Width 中选择网格线的宽度;在 Grid Color 中选择网格线的颜色;在 Front Color 中选择上表面的填充色;在 Back Color 中选择下表面的填充色。

对于 3D 线框表面图和 3D 线条表面图,会出现和此选项卡类似的 Wire Frame 选项卡,在 Grid Color 中多了几个选项,包括主网格线和辅网格线属性的设置。

● Side Walls 选项卡

该选项卡是用来设置填充表面图前面和右面的颜色的。前面的颜色指的是 XZ 平面上 $Y=0$ 时曲线的下面的部分。激活 Enable,可以选择合适的颜色;如果选择 None,则不填充。



图 7.32 Plot Details 对话框的 Grids 选项卡

在图 7.22 和图 7.23 中已经自动填充了前面和右面。

● 3D Bars 选项卡

对于 3D 条形表面图来说,需要使用 Bar 选项卡进行设置,如图 7.33 所示。在 Border Color 和 Border Width 下拉列表中分别设置长方条边的线条颜色和宽度;在 Bar Widths (%) 中设置 X/Y 方向上条的宽度,单位为 X/Y 坐标单位的百分比;在 Fill Color 组中设置填充色,选择 Same for All 复选框,则所有条的填充色都相同,在下拉列表中选择颜色,选择 Increment 复选框,则在 Y 方向上,条的颜色按照调色板上的颜色顺序递增,下拉列表中设置的颜色为起始颜色。



图 7.33 Plot Details 对话框的 Bars 选项卡

● Surface/Projections 选项卡

个性化 3D 彩色映射表面图比较复杂,除了前面介绍的颜色映射、网格线和数值格式等,还可以在 Surface/Projections 选项卡中设置表面及表面映射,如图 7.34 所示。

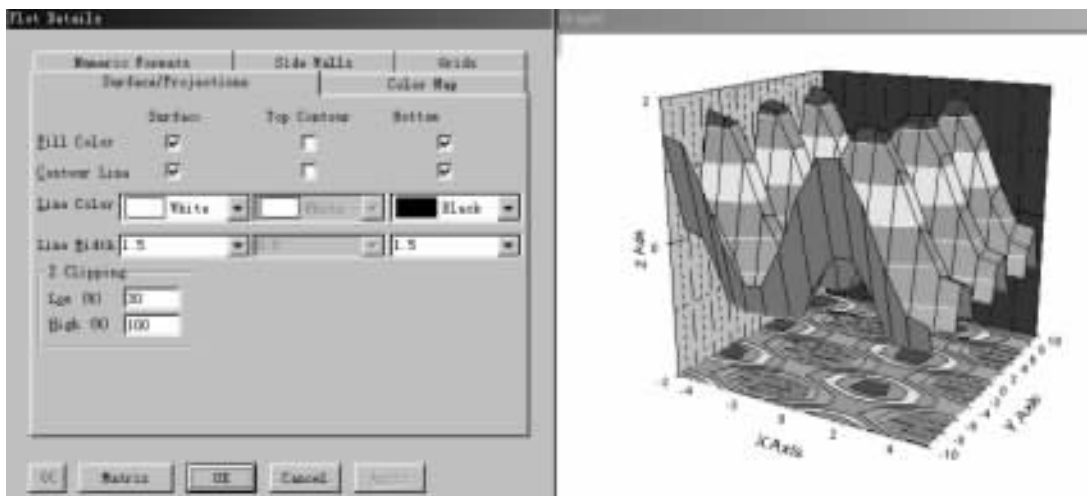


图 7.34 Surface/Projections 选项卡及其设置后彩色映射表面图的显示效果

在此选项卡中,有六个复选框,供用户选择,包括填充色和等高线,曲面、底部和顶部。这里选择的是显示曲线表面和底部的填充色和等高线,并将曲线表面的等高线设置为白色,底部等高线设置为黑色。如果为了突出显示曲面的某部分,可以在 Z Clipping 中进行设置。如果在 Low (%) 和 High (%) 文本框中添入 0,则显示整个图形;如果在 Low (%) 文本框中添入某一数值,则不会显示下面的部分图形(单位为 Z 轴的百分比)。这里设置为 30%,便于显示 XY 平面上的彩色等高映射线图,按照图中设置,图 7.19 的显示效果如图 7.34 所示。

7.3.3 改变 Graph 的显示效果

● 旋转 3D 图形

生成了 3D 图形后,Origin 会自动打开 3D 旋转(Rotation)工具条,如图 2.13 所示,其各个按钮的功能参考附录 A。

使用此工具条可以控制透视和三维的显示角度等,使图形的显示效果更佳。针对图 7.34 的 3D 彩色映射表面图和底面等高线图,进行如下操作:

- 设置 3D Rotation Angle  为 5°;
- 单击 3D 旋转(Rotation)工具条 Rotate counterclockwise 命令按钮 ,逆时针旋转 5°;
- 单击 3D 旋转(Rotation)工具条 Tilt Up 命令按钮 ,向上旋转 5°。

这时可以看到,经过逆时和上倾旋转以后,表面图和底面的等高线图不再重叠,如图 7.35 所示。

● 坐标轴的设置

三维图形坐标轴的个性化和二维类似,只不过 Selection 列表中多一项 Z 坐标轴选项。

另外还可以通过 Plot Details 对话框进行设置,在该对话框的左边窗口中选中 Layer,会出现 6 个选项卡,如图 7.36 所示。其中的 Background,Size/Speed 和 Display 选项卡已经在第 6 章中介绍过了,这里介绍剩下的 3 个选项卡,首先介绍 Axis 选项卡。

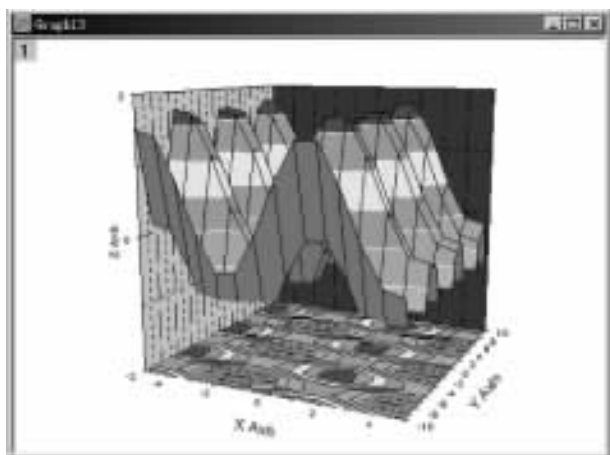


图 7.35 旋转后图形的显示效果



图 7.36 Plot Details 对话框的 Axis 选项卡

在 Axis 选项卡中的相应文本框里,可以直接设置各个坐标轴长度,单位为层框架的百分比,还可以设置各个坐标轴的旋转角度,单位为($^{\circ}$)。在 Perspective Angle 文本框中设置透视角度,限制在 $0^{\circ}\sim 30^{\circ}$ 范围内,这些设置和使用 3D 旋转(Rotation)工具条按钮的效果相同。

旋转 Graph 时,如果坐标轴刻度标签随着一起旋转,则选中 Rotate Labels 复选框。

● 投影效果的设置

用户可以改变 3D 图形的投影显示效果。在 Plot Details 对话框的 Miscellaneous 选项卡中完成,如图 7.37 所示。在 Projection 下拉列表中选择 3D 图形的投影方式:

- Perspective, 透视显示效果,即近大远小的显示方式;
- Orthographic, 正射显示效果,即远近大小相同的显示方式。

另外在 XY Clipping 组中可以像设置 Z 轴那样,在不改变坐标轴的情况下,使得 X/Y 方向上的部分图形不显示。

● 坐标面的设置



图 7.37 Plot Details 对话框的 Miscellaneous 选项卡

使用 Plot Details 对话框的 Planes 选项卡,如图 7.38 所示,用户可以设置三个坐标面 XY,YZ 和 ZX 的显示属性及前面坐标轴轮廓的显示。



图 7.38 Plot Details 对话框的 Planes 选项卡

- 当旋转 Graph 图形,后面的坐标面旋转到了前面,前面的坐标面旋转到了后面时,选中 Auto Position 复选框,Origin 会自动更改其显示属性,即显示旋转到后面的坐标面而隐藏旋转到前面的坐标面,同时自动更新%文本框中的数字。当然,用户也可以在这里指定坐标面的位置。在 Color 下拉列表中可以设置坐标面的颜色。
- 要显示前面坐标面的轮廓线,选中 Front Corner 组中的 Enable 复选框,然后再设置其颜色和宽度。

7.4 扫描图形

对于 3D 等高图来说,由于是用二维图形表现三维形貌,所以可以将多个数据组绘制到多层图形或单层图形中。其他类型的 3D 模板只能是绘制单层图形,如图 7.39 所示,是将两个 Matrix(其数据分别为两个半圆)绘制在一起表现一个圆。

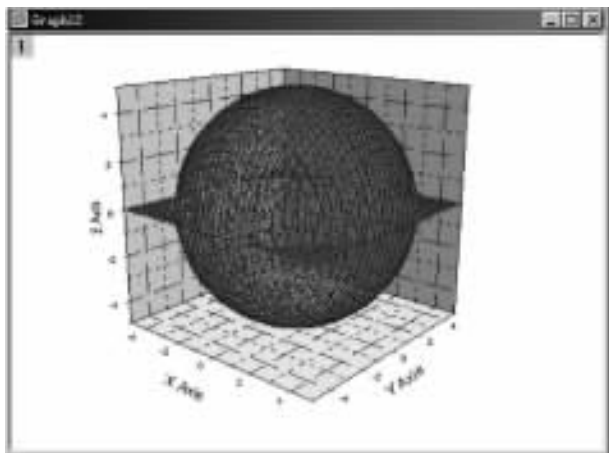


图 7.39 根据两组数据绘制的 3D 图形

另外一种制图方式,也是 Origin 7.0 的新功能,是 3D 扫描图。该功能可以将图形格式的二维图转换成数据格式的 Matrix,本节主要介绍这种图形。

7.4.1 数据的导入

Origin 7.0 提供了新的数据导入方式,格式为 *.bmp 的图形除了能够导入到 Graph 窗口外,还可以直接导入到 Matrix 窗口。

选择 File| Import Image 或直接用鼠标将 *.bmp 文件拖到 Matrix 窗口,此时在 Matrix 中显示为 DIB 位图(Device Independent Bitmap)。

如果对图片中的某个区域感兴趣,则选择 Tool 工具条上的 Rectangle Tool 按钮,在 Matrix 窗口中选择合适的区域,如图 7.40 所示,右击鼠标弹出三个快捷命令: Crop,将选中的区域代替原来的图形; Copy,复制选中区域; Create New,将选中区域在新 Matrix 窗口中显示。

Rectangle Tool 按钮有两个功能:一个是在窗口中绘制矩形,一个是选择 Matrix 窗口图形中感兴趣区域。这两个功能可用菜单命令 Tools| Region of Interest Tools 进行切换。

此时用户可以选择 View| Data Mode 将图像转换成数据,一旦转换成了数据,就不能返回到原始格式。图像转换为数据时,Origin 将每个像素转换为 RGB(Red, Green, Blue)值,然后在相应的 Matrix 单元格中显示出相应的灰度值;如果数据要转换回图像显示,选择 View| Image View, Origin 将单元格数值映射为灰度像素,显示为黑白图形。

用户也可以使用 Origin 提供的彩色调色板显示为彩色图形,但指定的调色板会修改图



图 7.40 将图片导入 Matrix 窗口并选择感兴趣区域

像。要显示为彩色图像,选择 View| Image View 将 DIB 转换为 Matrix 数据(也可以像上段介绍的那样,先转换为数据,再转换为图形),选择 Image| Palette| ...,这样就可以根据调色板来显示图形了。

使用调色板显示的 Matrix,用户可以使用 Tuning 工具调整其亮度和对比度。选择 Image| Tuning 打开如图 7.41 所示的 Tuning 对话框,在这里可以调整亮度和对比度,同时也改变了数值与调色板的映射关系。

7.4.2 制 图

要用数值制图,首先将原始数据图像转换成 Matrix 数据,然后进行下列操作,绘制成三种不同类型图形。



图 7.41 Tuning 对话框

- 映像图(Image Plot)。选择 Plot| Image Plot 或单击 3D Graphs 工具条的 Image Plot 按钮,即可将图形绘制到 Graph 窗口中。在 XY 坐标平面上,不同 Z 值范围的数据点用不同的灰度表示,类似于灰度映射等高线图,但分辨率要高得多,如图 7.42 所示。如果 Matrix 是数据显示模式,此操作同时将 Matrix 中的数据转换成灰度模式显示,若要显示 Matrix 中数据,则选择 View| Data Mode。
- 直方统计图(Histogram)。选择 Plot| Histogram,Origin 将统计 Matrix 中数据分布情况,然后制成频率统计直方图。横坐标为数值范围,纵坐标为出现的频率,如图 7.43 所示,并生成一个 Bin1 Worksheet 统计数据窗口。
- 剖面图(Profiles)。选择 Plot| Profiles,Origin 根据 Matrix 制图,并将 X,Y 方向上的投影绘制成统计曲线(该曲线实际是使用 Matrix 中对应的 Y,X 值的一行或一列数据绘制的),显示在 Graph 窗口中,如图 7.44 所示。用户可以拖动标线查看不同位置的

X,Y 投影统计值,也可以单击 **Arbitrary Line** 使用任意线预览投影。



图 7.42 Image 制图

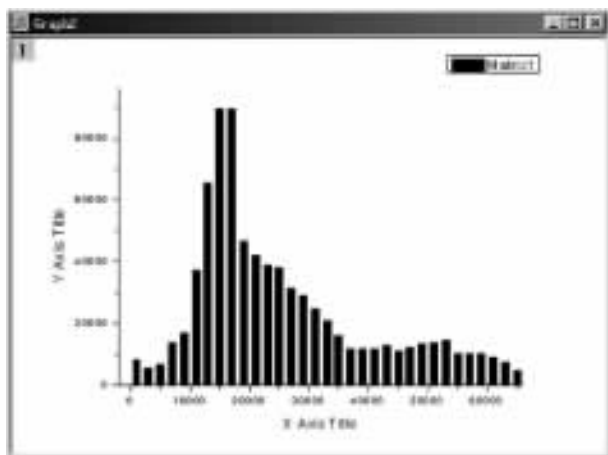


图 7.43 频率统计直方图

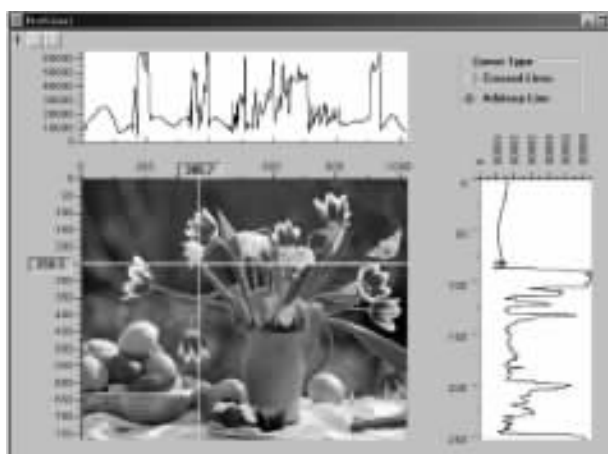


图 7.44 形貌投影图

7.4.3 图形导出

激活 Matrix, 选择 File| Export Image, 即可导出图形格式文件。

7.4.4 曲线转换为数据

3D 扫描图是 Origin 7.0 的新功能, 利用该功能可以将曲线转换为数据。实现该功能的基本思想是: *.bmp 格式的曲线图形有两种颜色, 将其导入 Matrix 中, 转换为数字显示模式, Z 有两个数值, 假定黑色曲线对应的数值为 0, 白色区域对应的数值为 1, 再转换成 Worksheet, 删除掉 Z 为 1 的数据点, 利用剩下的数据点绘制 X, Y 曲线, 就可以还原为曲线。方法如下:

- 将图形导入 Matrix, 并选择 View| Data Mode, 转换成数据显示模式;
- 选择 Edit| Convert to Worksheet| XYZ, 将 Matrix 换成 Worksheet;
- 选中整个 Worksheet, 选择 Analysis| Sort Range| Custom, 在 Nested Sort 对话框的 Nested Sort 列表框中将 Z 设置为升序排列的首要列, 将 X 设置为升序排列的次要列, 参考 3.5.1 小节, 这样就可以将 Z 为 1 的数据点合并到一起;
- 删除掉 Z 为 1 的数据点, 用剩下的数据绘制 X, Y 曲线, 必要的话, 使用加、减、乘、除运算对数据曲线进行缩放、移动, 就可以将曲线还原为数据。

第 8 章 Layout 的使用

Layout 页面是用来创建图形外观的(Presentation),可起到显示面板的作用。Project 中的图形窗口和数据窗口都可以在这里以图形格式显示,还可以向 Layout 页面中添加其他图形或文本注释,以加强其显示效果。Layout 页面中的图形可以复制到剪贴板或保存为图形格式的文件。

本章的主要内容:

- 把 Graph, Worksheet 及文本添加到 Layout 页面;
- 个性化 Layout 外观;
- 输出 Layout 页面。

8.1 把 Graph, Worksheet 及文本添加到 Layout 页面

单击 Layout 工具条中的按钮或选择相应的菜单命令,可以把 Graph 或数据窗口加入 Layout 页面中。

8.1.1 生成新 Layout 页面

选择 File| New 打开“新建”窗口,选择 Layout,即可生成新 Layout 页面,或直接单击 Standard 工具条上的 New Layout 命令按钮。此时版面是纵向的,选择 Edit| Rotate Page 或右击 Layout 页面的灰色区,在弹出的快捷菜单中选择 Rotate Page,如图 8.1(d)所示,使页面为横向显示。如果必要,可用鼠标调整页面的大小。

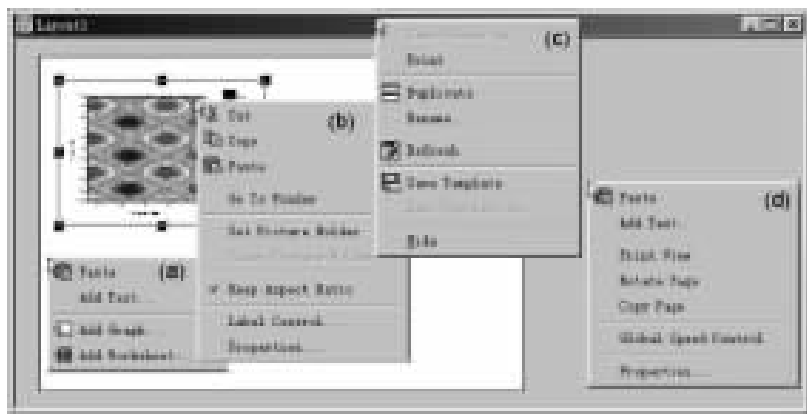


图 8.1 Layout 页面及其不同位置的快捷菜单

8.1.2 把图片和文本添加到 Layout 页面

当向 Layout 页面中添加 Graph 图形或 Worksheet 图形时,它们是作为图形格式加入的,其数据曲线或数据不能直接在 Layout 页面中编辑。

向 Layout 页面中添加 Graph 图形的步骤如下:

- 激活 Layout 窗口;
- 单击 Layout 工具条中的 Add Graph 命令按钮  或选择 Layout | Add Graph,打开 Select Graph Object 对话框,如图 8.2 所示;
- 选中 Graph 9,单击 OK 按钮;
- 拖动鼠标,在 Layout 页面中画一个方框,然后释放鼠标,Graph 9 就添加到了 Layout 页面中,如图 8.3 所示。如果在 Layout 页面中单击鼠标,则 Origin 按照默认的大小添加图形。

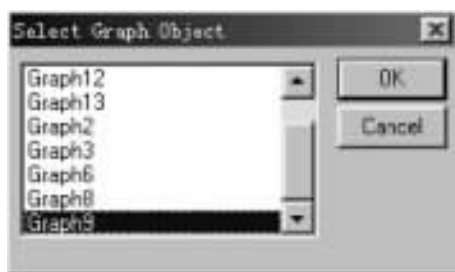


图 8.2 Select Graph Object 对话框

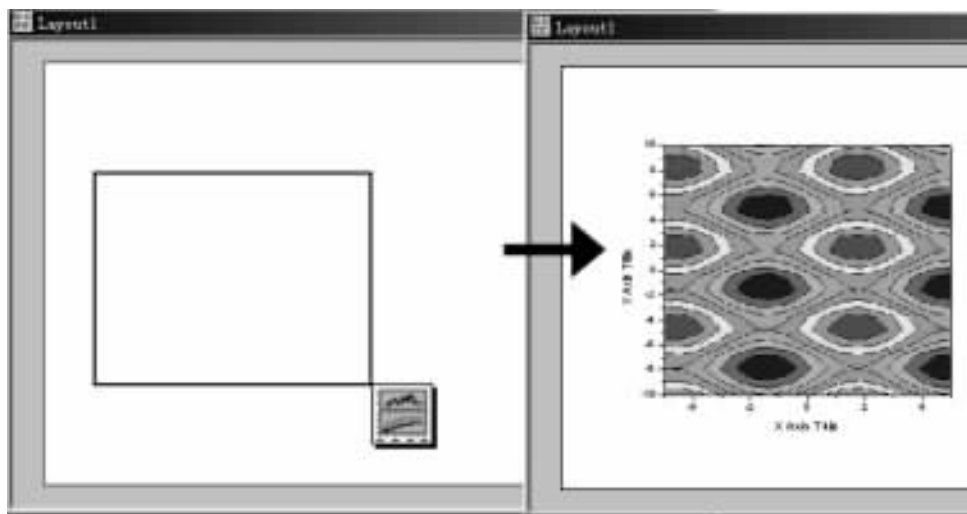


图 8.3 向 Layout 页面中添加图形

添加到 Layout 窗口中的 Graph 图形,包括 Graph 页面中显示的所有内容。该操作还可以通过剪贴板将图片复制到 Layout 窗口中,即在 Graph 窗口中选择 Copy Page 命令,然后复制到 Layout 窗口。

用同样的方法可以向 Layout 页面中添加 Worksheet 图形,将其网格线和单元格数值以图片的形式显示,但不显示其中的文本标签。

还可以直接向 Layout 页面中添加文本、线条或其他图形,编辑其属性,方法和往 Graph 窗口中添加文本和线条一样,参考 4.8.4 小节,这里就不再赘述了。

8.1.3 改变图片的内容

将 Graph 图形或 Worksheet 添加到 Layout 页面后,由于是以图形格式显示的,不能直接在 Layout 页面窗口中编辑,所以要更改图形内容的话,必须到源窗口中编辑。

选中图片,从右击鼠标弹出的快捷菜单中选择 Go To Window 命令,如图 8.1(b)所示,切换到源窗口进行编辑修改。然后激活 Layout 页面,会看到图形已经作了更改。如果没有改变,选择 Window| Refresh 或单击 Standard 工具条 Refresh 按钮进行刷新。

8.1.4 提高页面的刷新速度

如果 Layout 页面中的图片太多,则会影响其刷新速度。Origin 7.0 提供了两种方法提高 Layout 页面的刷屏速度:一种是显示图片的占位符,另一种是窗口改变预览方式。

● 显示图片的占位符

选中一个图片,选择 Layout| Set Picture Holder 或选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 Set Picture Holder(如图 8.1(b)所示),此时不显示图片,只显示其名称,以提高刷屏速度(如图 8.4 所示),可以移动和调整大小,也可以双击打开 Object Properties 对话框进行设置。要显示图片,则选择 Layout| Clear Picture Holder 或选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 Clear Picture Holder(如图 8.1(b)所示)。

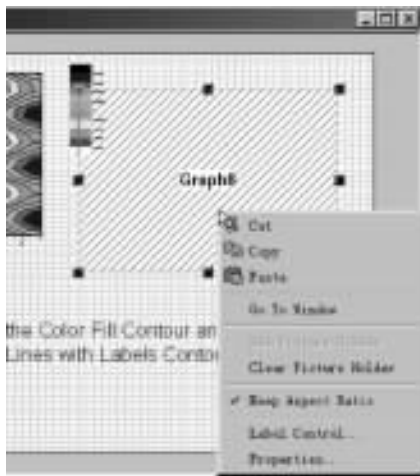


图 8.4 显示 Layout 页面图片的占位符

● 改变预览方式

Origin 7.0 提供了几种预览方式,其中的 Page View 预览方式比 Print View 预览方式刷屏速度快。如果用 Page View 预览方式,可以选择 Layout| Global Speed Control 或在 Layout 页面边上右击鼠标,选择快捷菜单命令 Global Speed Control(如图 8.1(d)所示)提高刷屏速度。

8.2 个性化 Layout 页面

Layout 页面中的对象是图形格式的,可以调整其大小、位置及其排列方式等,增强 Layout 页面的显示效果。

● 调整图形的位置和大小

对于 Layout 页面中的图片,可以像 4.8.4 小节中介绍的那样,调整其位置和大小,但不能旋转。在调整大小时为了保证原始图片长宽的比例,调整时按下 Ctrl 键,或选中图片右击鼠标弹出的快捷菜单 Keep Aspect Ratio 命令(如图 8.1(b)所示)。

图片的位置和大小也可以使用 Object Properties 对话框中的 Dimensions 选项卡进行

设置。

● 添加背景色

像其他对象一样,可以给 Layout 页面中的图片添加背景色。双击图片或选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 Properties,打开 Object Properties 对话框,单击 Image 标签,如图 8.5 所示。

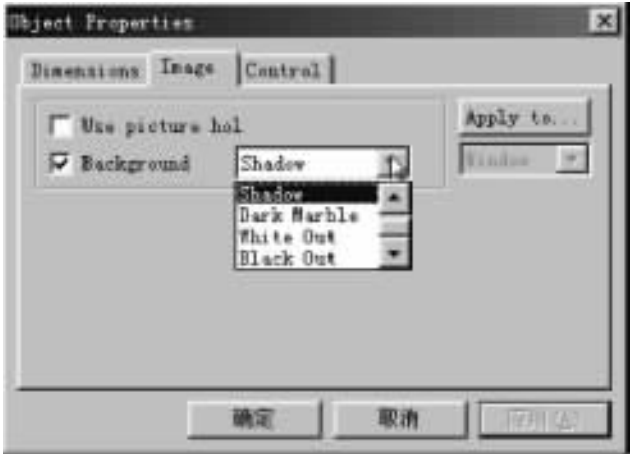


图 8.5 Object Properties 对话框的 Image 选项卡

选中 Background 复选框,从后面的下拉列表中选择合适的背景色。若单击 Apply to 按钮,则应用于窗口中的所有图片。

● 排列图片

Origin 7.0 提供了几种排列 Layout 窗口中图片的方法:

- 使用 Object Properties 对话框中的 Dimensions 选项卡;
- 使用 Object Edit 工具条;
- 使用网格线对齐图片。

由于前两种方法比较简单,可参考前面的章节和附录 A13。这里重点介绍使用网格线排列图片,排列过程如图 8.6 所示,操作步骤如下:

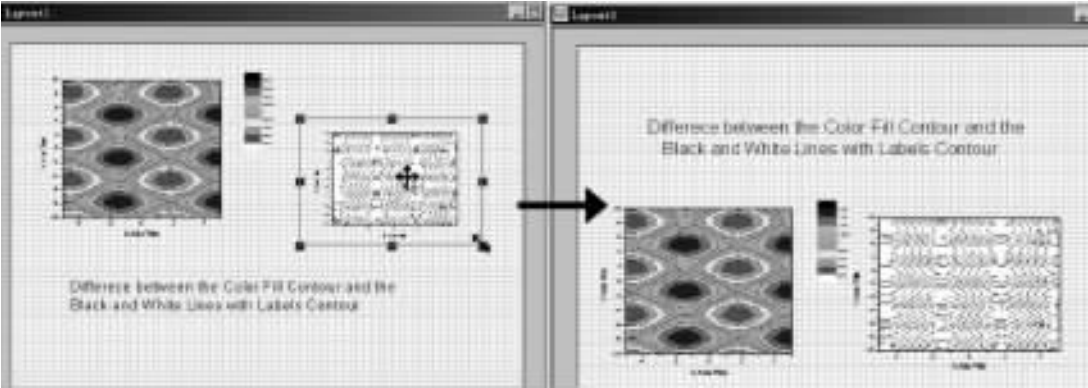


图 8.6 使用网格线排列图片及文本

- 激活 Layout 窗口,选择 View| Show Grid,显示 Layout 网格线;
- 选中图 8.1(b)中的快捷菜单命令 Keep Aspect Ratio,保证图片保持原始长宽比例;
- 选中图片,调整其位置和大小,如果同时选中几个图片,则按下 Shift 键,为了保证图片边框恰好在网格线上,选择 Format| Snap to Grid;
- 用同样的方法调整文本的位置和大小。

8.3 Layout 页面的输出

像 Graph 图形一样,Layout 页面图形也可以输出到其他应用程序中,但该页面中的图形是以图片的格式输出的。输出后的图形不能使用 Origin 工具编辑,但可以使用目标应用程序中的工具进行编辑。

8.3.1 使用剪贴板输出 Layout 页面

使用剪贴板复制 Layout 页面到其他应用程序中,比如 Word,可进行下列操作:

- 激活 Layout 窗口,选择 Edit| Copy Page 或快捷菜单命令 Copy Page(如图 8.1(d)所示);
- 在 Word 窗口中,选择“编辑”|“选择性粘贴”,打开“选择性粘贴”对话框,如图 4.90 所示,此时在对话框的窗口中只有“图片选项”;
- 选中“粘贴”复选框,单击“确定”按钮,就可以将图片粘贴到 Word 中了。

如果选中了“粘贴连接”复选框,就将源文件和目标文件连接到了一起,对源文件的任何修改都会更改目标文件中的图片内容。

8.3.2 输出 Layout 页面为图形格式文件

激活 Layout 窗口,选择 File| Export Page 就可以将文件保存为图形文件。

Origin 7.0 输出的图形文件分为两类:扫描图和矢量图。其支持 17 种格式的图形文件。

扫描图(Raster)是将图形分为固定尺寸的阵列,定义每个格中的颜色。这种格式的图形需要较大的存储空间,其文件大小和分辨率、颜色密度相关,但不需要标准的尺度。包括如下文件格式:Bitmap (*.BMP),Graphics Image Format (*.GIF),JPEG, Joint Photographic Experts Group (*.JPG),Zsoft PC Paintbrush Bitmap (*.PCX),Portable Network Graphics (*.PNG),Truevision Targa (*.TGA),Adobe PhotoShop (*.PSD),TIFF, Tag Image File (*.TIF),X-Windows Pix Map (*.XPM)和 X-Windows Dump (*.XWD)。

矢量图(Vector)包含了绘制图形文件的方法、大小和分辨率的信息。这种图形格式具有很好的尺度,但需要目标应用程序来解释。其文件大小和图形的复杂程度相关。包括如下文件格式:Adobe Illustrator (*.AI),Computer Graphics Metafile (*.CGM),AutoCAD Drawing Interchange (*.DXF),Encapsulated PostScript (*.EPS),Enhanced Metafile (*.EMF),Portable Document Format (*.PDF)和 Windows Metafile (*.WMF)。

如果输出的 Origin 图形比较简单、色彩较少,最好采用矢量(Vector)格式;如果图形复

杂、色彩丰富,最好使用扫描图(Raster)格式。

导出文件时使用什么格式,根据用户的需要来定。如果打印,则可选择*.TIF,*.TGA,*.ESP或*.PDF;如果用于发布Web页面,可选择*.JPG,*.GIF或*.PNG;如果要将图片插入到其他应用程序,可参照表8.1来选择图片的保存格式。

表 8.1 Origin7.0 保存格式和目标应用程序参照表

扩展名	格式类别	目标应用程序
*.AL	Adobe Illustrator (vector)	Abobe Illustrator
*.BMP	Bitmap (raster)	Windows Paint
*.CGM	Computer Graphics Metafile (vector)	Wordperfect
*.DXF	AutoCAD Drawing Interchange (vector)	AutoCAD
*.EMF	Enhanced Metafile (vector)	MS Office Applications
*.PCX	Zsoft PC Paintbrush Bitmap (raster)	PC Paintbrush
*.PDF	Portable Document Format (vector)	Adobe Acrobat
*.PSD	Adobe Photoshop (raster)	Adobe Photoshop
*.WMF	Windows Metafile (vector)	MS Office Applications

第 9 章 非线性拟合

对于许多实验数据和统计数据来说,为了描述不同变量之间的关系,进一步分析曲线特征,根据已知数据找出相应的函数关系,经常需要对曲线进行拟合。

Origin 可以对整条曲线拟合,也可以使用 Tools 工具条中的 Data Selector 命令按钮  选择一部分曲线进行拟合。如果 Graph 窗口的层中包含几条曲线,则只对选中的曲线拟合。

激活 Graph 窗口,Analysis 菜单下面提供了许多拟合方法,包括前面介绍过的线性拟合工具,这些拟合方法在运行速度和计算复杂程度上各不相同。拟合后,Origin 将拟合结果及剩余误差输出到 Results Log 窗口中。

本章的内容包括:

- Origin 7.0 常用的非线性拟合;
- 高级非线性拟合;
- 使用自定义函数拟合;
- 峰拟合模板(PFM)。

9.1 Origin 7.0 常用的非线性拟合

Origin 7.0 的 Analysis 菜单中提供了几种拟合函数,大部分拟合可以根据 Origin 的默认设置自动进行,不需要用户输入参数,简单易学。

当激活 Graph 窗口进行非线性拟合时,首先激活要拟合的曲线,在菜单命令 Data 下面列出了窗口激活层中的所有数据组,前面带“√”的为当前激活的数据组,或者在图层标记处右击鼠标(如图 4.2(a)所示),在快捷菜单中前面带“√”的为当前激活的数据组。

选择好数据组后,如果必要,还要使用 Tool 工具条中的 Data Selector 按钮  选择拟合的数据范围。

9.1.1 基本拟合函数

选择 Analysis,其下拉菜单中关于非线性拟合命令如图 9.1 所示。

各拟合命令的含义及表达式如表 9.1 所列,用户可以根据 Graph 曲线特征及函数曲线的特征选择合适的拟合函数。

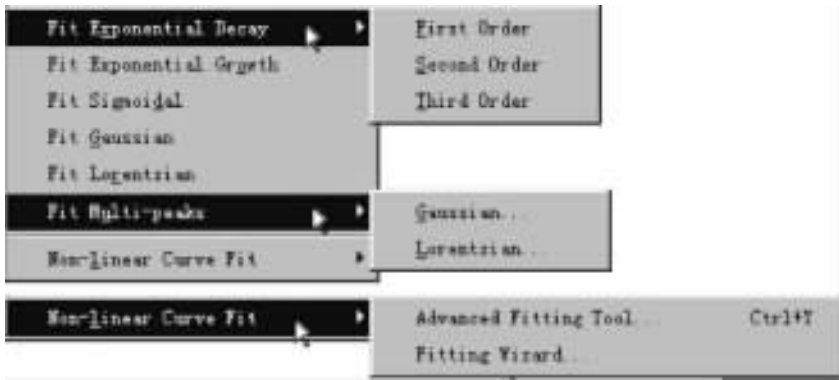


图 9.1 Analysis 菜单中非线性拟合命令

表 9.1 Origin 7.0 提供的拟合函数

名 称	含 义	函数及参数	函数文件
First Order Exponential Decay	一阶指数衰减拟合	$y = y_0 + A_1 e^{-(x-x_0)/t_1}$, A_1 是强度, t_1 是衰减因子, 如图 9.2(a) 所示	EXPDECY1.FDF
Exponential Growth	指数增长拟合	$y = y_0 + A_1 e^{(x-x_0)/t_1}$ A_1 是强度, t_1 是增长幅度, 如图 9.2(b) 所示	EXPGROW1.FDF
Gaussian	Gaussian 函数拟合	$y = y_0 + \frac{A}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$, A 为曲线下基线上积分总面积, x_0 为峰的中心, 函数的平均值, σ 为标准差, 2σ 约是半高宽的 0.849 倍, 如图 9.2(c) 所示	GAUSSAMP.FDF
Lorentzian	Lorentzian 函数拟合	$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \cdot \frac{w}{4(x-x_0)^2 + w^2}$, A 为曲线下基线上的积分面积, w 为半高宽, 如图 9.2(d) 所示	LORENTZ.FDF
Sigmoidal	S 拟合	$y = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(x-x_0)/dx}} + A_2$, x 轴为线性坐标时, 采用 Boltzmann 函数拟合。 A_1 为 y 始值, A_2 为 y 终值, dx 为宽度, y 在 x_0 处为 $(A_1 + A_2)/2$, 在 $(x_0 - dx, x_0 + dx)$ 范围内变化剧烈, 如图 9.2(e) 所示 $y = \frac{A_1 - A_2}{1 + (x/x_0)^p} + A_2$, x 轴为对数坐标时, 采用对数函数, 参数含义同上, 如图 9.2(f) 所示	BOLTZMAN.FDF LOGISTIC.FDF
Fit Multipeaks	多峰拟合	将曲线拟合成几个峰进行分析, 采用 Gaussian 或 Lorentzian 函数的拟合	
Non-linear Curve Fit	非线性曲线拟合	提供了大量的拟合函数, 还支持用户自定义函数	

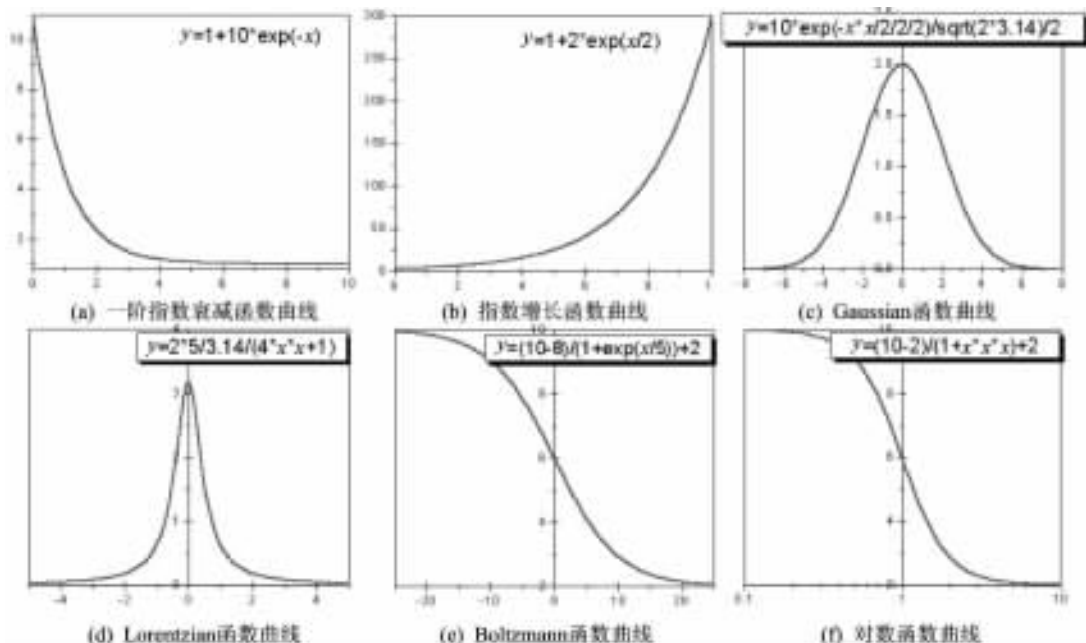


图 9.2 Origin 7.0 提供的基本拟合函数

另外,二阶指数衰减拟合和三阶指数衰减拟合函数分别为 $y = y_0 + A_1 e^{-(x-x_0)/t_1} + A_2 e^{-(x-x_0)/t_2}$ 和 $y = y_0 + A_1 e^{-x/t_1} + A_2 e^{-x/t_2} + A_3 e^{-x/t_3}$, 尽管只增加了几个参数,但比一阶指数衰减拟合复杂得多,要想获得理想的拟合效果,必须添入恰当的拟合参数。

9.1.2 拟合举例

下面给出一个多峰拟合例子,如图 9.3(a)所示,该曲线是 Gd 4d 的结合能谱。需要将它拟合成 6 个对称峰,首先减去曲线背底,过程如下:

- 假定背底为直线,选择 Analysis| Substrate| Straight Line,鼠标变成 ϕ 形状;
- 选择曲线中的合适点,如图 9.3(b)所示,双击鼠标,完成减去基线,如图 9.3(c)所示,同时 Worksheet 窗口中的数据也做相应的修改,参考 10.1.2 和 10.5.2 小节。

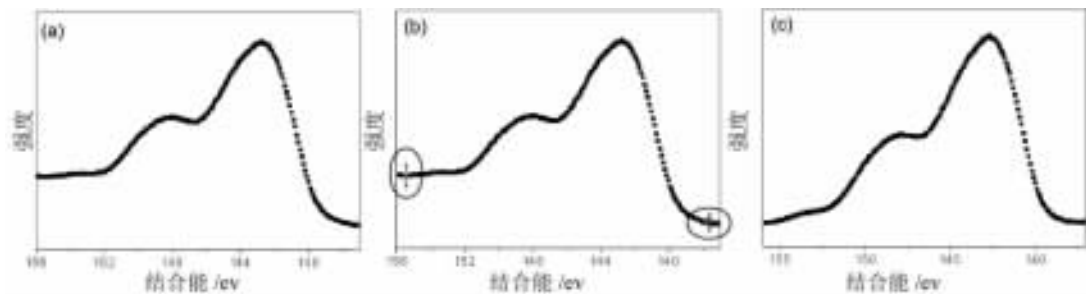


图 9.3 拟合前减去基线

然后进行拟合,拟合过程如下:

- 选择 Analysis| Fit Multi-peaks| Gaussian,打开 Number of Peaks 对话框,键入 6,如图 9.4(a)所示;

- 单击 OK 按钮,打开 Initial half width estimate 对话框,如图 9.4(b)所示,Origin 会根据积分值估计半高宽,键入 1.2;
- 单击 OK 按钮,转换到 Graph 窗口,鼠标变成 $\odot$ 形状,借助 Data Play 条,在曲线上的合适地方设置拟合峰位置,双击鼠标确定,如图 9.4(c)所示;
- 确定了 6 个峰位后,Origin 进行拟合,在原来散点图的基础上,添加了拟合曲线,其中的绿线是各个拟合峰,红线是拟合峰的叠加,与原数据点重合,同时在 Graph 窗口中还给出了一个文本标签,包括拟合类型、函数及剩余误差,如图 9.4(d)所示;
- 对图形个性化,添加必要的文本说明,如图 9.4(e)所示;
- 在结果记录窗口中给出了拟合日期、时间、绘图窗口、拟合模型及其公式、参数等,如图 9.4(f)所示;
- 将拟合数据复制到一个隐藏的名称为 NLSF 的 Worksheet 窗口中,如图 9.4(g)所示。

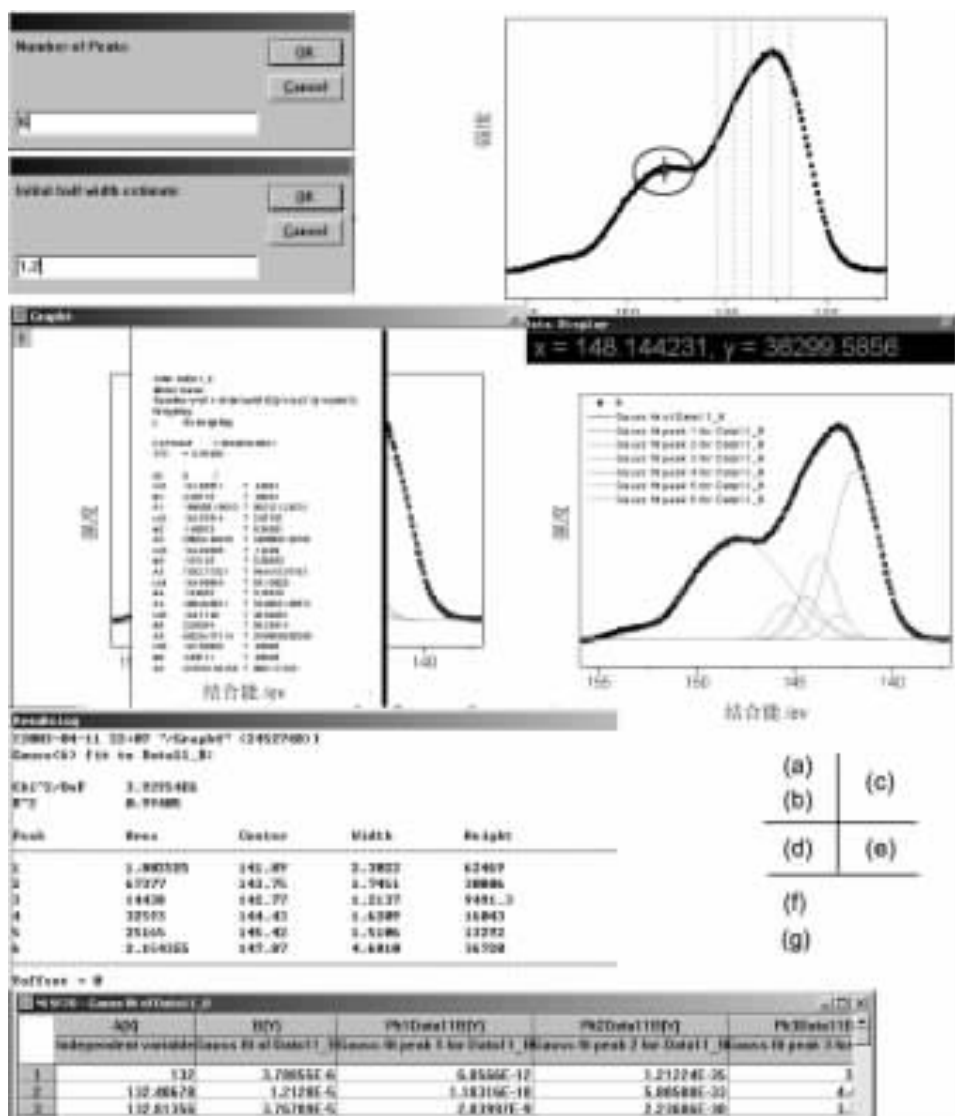


图 9.4 多峰拟合过程

9.1.3 S 拟合工具

除了第4章中介绍的线性拟合工具外,Origin 还提供了 S 拟合工具。选择 Analysis | Sigmoidal Fit 进行高级拟合,比选择 Analysis | Non-Linear Curve Fit | Advanced Fitting Tool 简单。拟合曲线类型依赖于 X 坐标轴刻度类型和 Settings 选项卡中的 Logged Data Fit Function 选项。

选择 Tools | Sigmoidal Fit, 打开 Sigmoidal Fit 工具,如图 9.5 所示,包含 Operation 和 Settings 两个标签。



图 9.5 Sigmoidal Fit 工具箱的 Operation 和 Settings 选项卡

● Operation 选项卡

- Asymptotes 组 在 Upper 和 Lower 对话框中键入拟合曲线的渐近线,相当于函数中的 A_1 和 A_2 ,如果选中相应的 Fix 复选框,在拟合过程 A_1 和 A_2 中为一常数。
- Parameters 组 在 Center 文本框中键入参数 X_0 值,在 Rate 文本框中键入参数 dx 或 p 值。如果选中相应的 Fix 复选框,在拟合过程中参数值不变。
- Simulate 按钮 激活 Graph 窗口,完成了参数设置后,单击此按钮,Origin 根据设置生成拟合函数,在 Plot Details 对话框的 Function 选项卡中可以查看此函数。
- Fit 按钮 单击此按钮,Origin 根据数据曲线更新没有选中 Fix 的参数,进行拟合。
- Calculate 组 当进行了拟合后,该选项激活,变为相应的数据组名称,在图 9.5 中为 For Data1_C,键入 X 值,单击 Find Y 按钮,不论此 X 是否在拟合曲线范围内,均可以从拟合曲线上找到相应的 Y 值。键入 Y 值,单击 Find X 按钮,如果该 Y 值超出了拟合曲线范围,在 Result Log 窗口中给出错误信息;如果在曲线中,恰好是其中的一个拟合点,给出相应的 X 值;否则采用插值法确定 X 值。

● Settings 选项卡

该选项卡用于设置拟合曲线特征。

- Settings 组中 指定拟合曲线的点数(Point 文本框),超出数据范围的拟合曲线部分(单位为百分比,Left,Right 文本框),在 Fit 文本框中输入要迭代的次数,若选中 Fit All Curves 文本框,拟合该层中所有数据曲线。Use Reduced Chi² 复选框只影响拟合过程参数报告误差,对拟合过程没有任何影响。
- Logged Data Fit Function 组 用来选择是使用 Boltzmann 函数还是使用对数函数进行拟合。如果 X 轴坐标刻度是对数的话,不管用户选择的是哪个函数,Origin 都使用对数函数拟合。
- Weighting 组 如果选择 Error Bars 复选框的话,Worksheet 中必须有 Y 误差列,或将误差列绘制到 Graph 图形中,这时 Origin 使用 $1/\text{errbar}^2$ 作为权重;若选中 Inverse Y 复选框,Origin 使用 $1/Y$ 作为权重。

9.1.4 拟合比较工具

选择 Tools| Fit Comparison,打开拟合比较工具,如图 9.6 所示。该工具用来比较使用同一拟合函数拟合的两个数据组,用 F 检验决定两组数据是否显著不同,是否代表同一样本,然后将结果输出到 Result Log 窗口中。

比较过程如下:

- 首先从 Datasets 中选择要比较的数据组,从 Category and Function 中选择使用的函数,单击 Compare 按钮;
- Origin 按照选定的函数对两组数据分别进行拟合,然后将两组数据叠加在一起再用同样的数据拟合,获得三组数据: SSR_1 和 DOF_1 , SSR_2 和 DOF_2 及 SSR_{combined} 和 DOF_{combined} ,其中 SSR 为数据点和拟合曲线差的平方和, DOF 为自由度;
- Origin 计算 $SSR_{\text{separate}} = SSR_1 + SSR_2$ 和 $DOF_{\text{separate}} = DOF_1 + DOF_2$;
- 再计算 $F = \frac{(SSR_{\text{combined}} - SSR_{\text{separate}}) / (DOF_{\text{combined}} - DOF_{\text{separate}})}{SSR_{\text{separate}} / DOF_{\text{separate}}}$ 和 $p = 1 - \text{invf}(F, (DOF_{\text{combined}} - DOF_{\text{separate}}), DOF_{\text{separate}})$

最后 Origin 根据 p 值决定两组数据是否显著不同,如果 p 大于 0.05,可以说数据组在 95% 的级别上显著不同,并将结果在 Result Log 窗口中输出,如图 9.7 所示。



图 9.6 Fit Comparison 工具

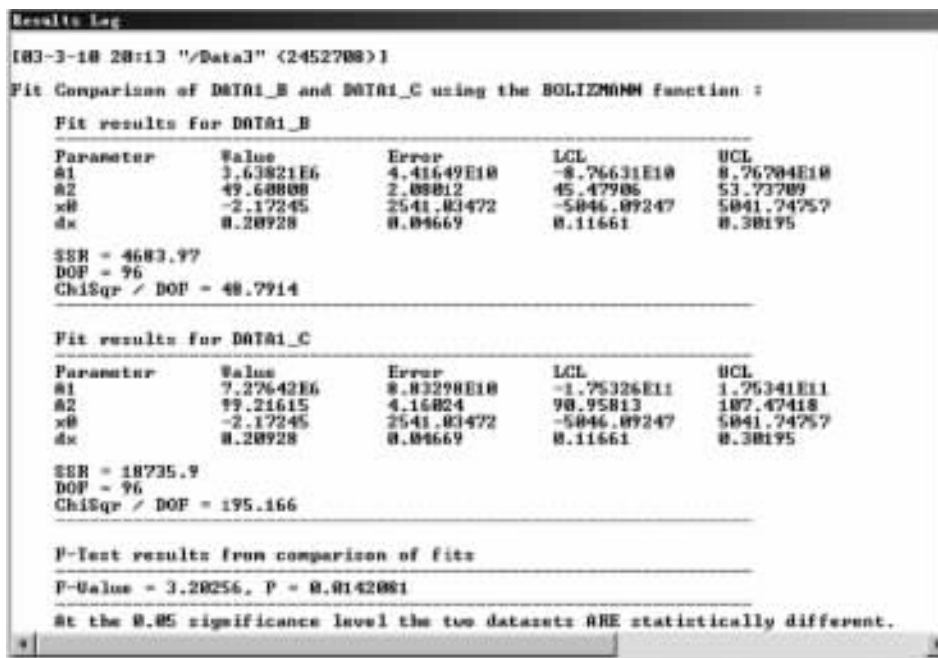


图 9.7 拟合比较结果

9.2 高级非线性拟合

前面介绍了 Origin 的基本拟合方法,除此之外,Origin 还提供了 NLSF 拟合(Nonlinear Least Squares Fitter,非线性最小平方拟合)。NLSF 是 Origin 中功能最强大、最复杂的数据拟合工具,包含了 200 个函数供用户使用,基本上满足不同研究领域的需要。该工具允许用户使用一个或一组数据进行拟合,可以设置 200 多个参数。NLSF 有两种模式:基本模式(Basic)和高级模式(Advance)。在基本模式界面中单击 More 按钮可切换到高级模式界面,在高级模式模式中单击 Basic 按钮可切换回基本模式界面。

9.2.1 NLSF 基本模式

和高级模式比较,基本模式提供的拟合函数较少,控制功能相对较弱,但界面简单,使用方便。该模式的功能包括:选择函数、选择数据组、执行拟合过程和 Graph 窗口中显示拟合结果。

● Select Function 对话框

激活 Graph 或 Worksheet 窗口,选择 Analysis| Non-linear Curve Fit| Advanced Fitting Tool,打开 Non-linear Curve Fit 中的 Select Function 对话框,选择基本模式,如图 9.8 所示。在左边的函数列表中显示了 Origin 提供的基本函数,选中一个函数,在右边的窗口中出现该函数的表达式,如图 9.8(a)所示;若选中 Curve 复选框,则出现该函数的曲线图,如图 9.8(b)所示,同时在下方的文本框中出现该函数的名称。

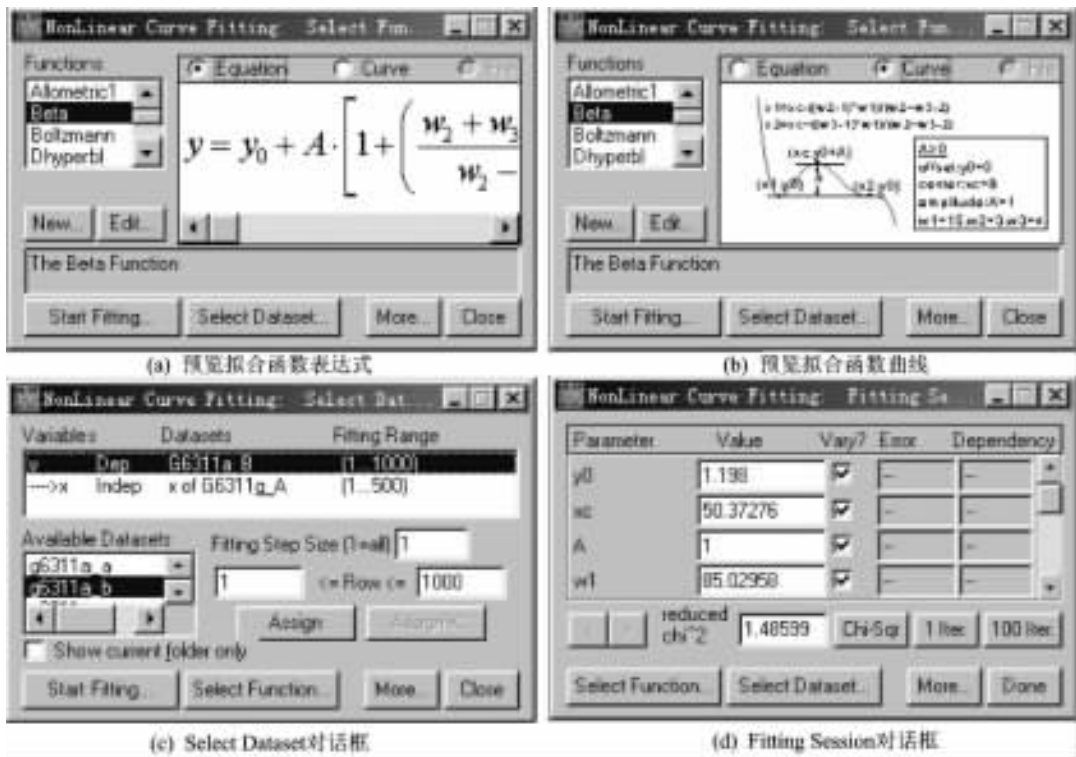


图 9.8 NLFS 基本模式

- 单击 More 按钮,切换到 NLFS 高级模式。
- 单击 Start Fitting 和 Select Dataset 按钮,分别打开 Select Dataset 和 Fitting Session 对话框。
- 单击 New 和 Edit 按钮,分别打开 Define New Function 和 Edit Function 对话框。

● Select Dataset 对话框

Select Dataset 对话框如图 9.8(c)所示。在上面的列表中包含如下信息:变量名称(Variables)、自变量还是因变量(Indep or Depend)、数据组(Datasets)及其范围(Fitting Range)。

Available Datasets 列表中列出了 Project 文件中所有的数据变量。

在 Fitting Step Size 文本框中指定拟合过程中需要跳过的数据点,如 3 表示拟合第 3、6、9 等数据点,1 表示使用所有数据点拟合。

单击 Start Fitting 和 Select Function 按钮,分别打开 Fitting Session 和 Select Function 对话框。

设置变量的方法如下:

- 先选中因变量,从 Available Datasets 列表中选中数据组,在“<= Row <=”文本框中键入数据范围,单击 Assign 按钮进行设置。一般情况下,设置了因变量后,该数据组相应的自变量就自动设置好了。
- 选中自变量,从 Available Datasets 列表中选中数据组,如果将该列数据设置为自变量,则单击 Assign 按钮;如果该列不是 X 列,想使用与该列相联系的 X 列作为自变量的话,单击 Assign X 按钮。

- 选择自变量时,“ $\leq \text{Row} \leq$ ”变为按钮,在其中进行设置行的范围,如“ $15 \leq \text{Row} \leq 80$ ”,只对 15~80 行之间的数据点进行拟合;单击该按钮,变成“ $\leq X \leq$ ”按钮,这样就可以设置 X 的范围了,如“ $1.2 \leq X \leq 8.5$ ”,只对 X 值在 1.2 和 8.5 之间的数据点进行拟合。

● Fitting Session 对话框

Fitting Session 对话框如图 9.8(d) 所示。

- Parameter Value 文本框随着拟合函数的不同而不同,列出了当前函数参数的初始值,从这些参数开始进行迭代。如果选中后面相应的 Vary 复选框,在迭代过程中根据需要进行修改,否则,保持这些参数不变。
- 如果至少迭代过一次,在 Error 列表中则出现其标准差。
- 在 Dependency 列表中显示参数依赖关系,如果选择 1,则其依赖关系最强。
- 单击 Chi-Sqr 按钮显示当前参数的 reduced χ^2 值,在每次迭代后该值自动更新,如果重新设置了参数想知道 reduced χ^2 值的话,需再单击 Chi-sqr 按钮。
- 单击 1 Iteration 按钮执行一次迭代,并输出所有新参数,单击 n Iterations 按钮迭代 n 次, n 值可以在高级模式中进行设置。单击“或”按钮可以找到前面或后面的 reduced χ^2 参数。

注意: χ^2 表示 χ^2 ,即数据点和拟合函数相应点差的平方和,Origin 通过迭代的方法使之最小。reduced $\chi^2 = \text{SQRT}(\text{cov}_{ii}(\text{Chi}^2/\text{DOF}))$ 。

9.2.2 NLFS 高级模式

高级模式可以设置拟合过程的所有细节,包括:定义 LabTalk 脚本或使用 Origin C 脚码初始化函数参数,自定义函数,指定权重方式,显示可信度、参数数据表和方差—协方差矩阵等,使用选定的函数拟合多个数据组。选择 Analysis| Non-linear Curve Fit| Advanced Fitting Tool,打开 Non-linear Curve Fit: Select Function 对话框,选择高级模式。

● Select Function 对话框

选择 Function| Select 或单击按钮 ,打开 Select Function 对话框,如图 9.9 所示。顶部为菜单栏和工具栏,下面左边为 Categories 列表,列表中包括:Origin 基本函数(Origin Basic Functions),色谱函数(Chromatography),指数函数(Exponential),S 函数(Growth/Sigmoidal),双曲函数(Hyperbola),对数函数(Logarithm),峰函数(Peak Functions),药理学函数(Pharmacology Functions),幂函数(Power Functions),有理函数(Rational Functions),光谱函数(Spectroscopy Functions)和波函数(Waveform Functions)共 12 类函数。每类中包括几个函数,共 200 多个函数,右边为 Functions 列表框,选择函数时,先在 Categories 列表中选择函数所在类别,然后再在 Functions 列表框中选择具体函数。

函数有三种显示方式,方程式、曲线和函数文件。通过窗口中间的 Equation, Sample Curve 和 Function File 可以进行切换,与 NLFS 基本模式类似,可以预览拟合函数的特征,但 NLFS 基本模式只包含 Origin Basic Functions 类中的函数,而高级模式增加了大量函数,还添加了强大的菜单命令功能,如 Category 和 Function 等。

● Control Parameters 对话框

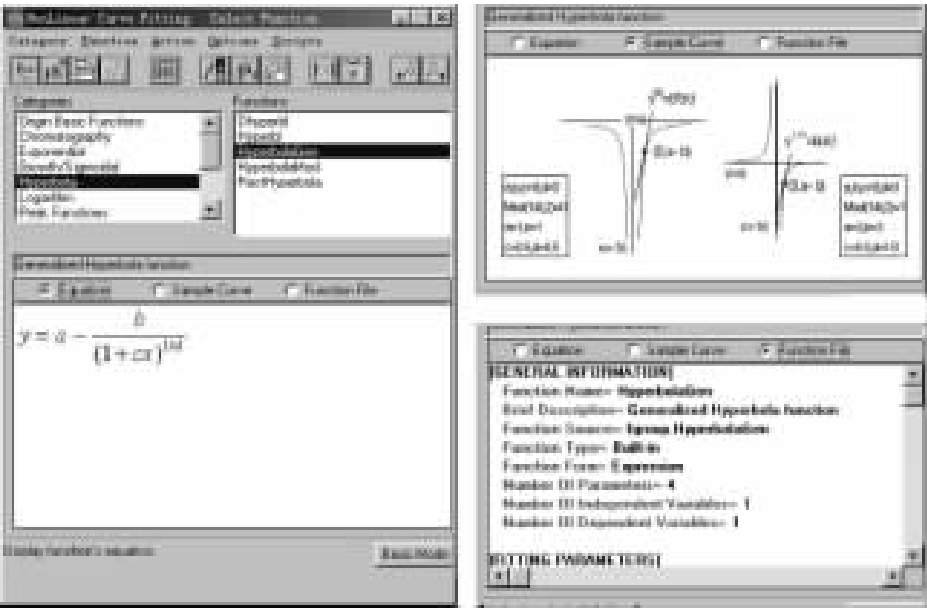


图 9.9 Select Function 对话框及其函数的不同显示方式

选择 Function| Control 或单击按钮 ，打开 Control Parameters 对话框，如图 9.10 所示，在该对话框中可以设置拟合过程中的数量属性，这些属性直接影响到拟合迭代。



图 9.10 Control Parameters 对话框

从 Max. Number of Iterations 下拉列表中指定 Fit Session 对话框中 n Iter 按钮的 n 值，此值是迭代的最多次数，这里将其设为 10。

- 容许限度(Tolerance)文本框。在 Fit Session 对话框中单击 n Iter 按钮时,最多执行 n 次 Levenberg-Marquardt 迭代,如果两次连续迭代的 reduced chi² 相对变化值小于 Tolerance 文本框中数值,则迭代到此为止;如果要继续迭代,再单击 1Iter 或 n Iter 按钮。
- Derivative Delta 组只对用户自定义的函数起作用,对内置函数不起作用,决定了偏微分的计算方法。对于自定义函数 f 参数 P_1 的微分为

$$\partial f / \partial P_1 = [f(x; P_1 + \Delta, P_2, \dots) - f(x; P_1, P_2, \dots)] / \Delta$$
 其中的 Δ 为增量。如果选中 Fixed Delta 复选框的话,Maximum 和 Minimum 文本框处于不激活状态;默认情况下不选此复选框,那么偏微分中的 Δ 值为当前的参数值乘以 Δ 文本框中的数值,这时 Maximum 和 Minimum 文本框中指定的值用来限制微分增量,防止其太大或太小。
- 从 Parameters Significant Digits 组中参数后面对应的下拉列表中选择合适的有效数字位数,若选择 Free,则使用当前的 Origin 设置。
- Weighting Method 下拉列表中有五个选项:No weighting, Instrumental, Statistical, Arbitrary data set 和 Direct Weighting,可以设置迭代过程中计算 reduced chi²时的权重方法(参考 9.4.10 小节)。

● Parameter Constraints 对话框

选择 Options| Constraints 或单击命令按钮,打开 Parameter Constraints 对话框,如图 9.11 所示。在该对话框中可以指定参数的限制方式。如果选择了限制方式,迭代过程中拟合器只采用符合限制条件的参数值,防止拟合过程不稳定而导致超出参数的定义域,比如函数 $y = A \exp(x/t)$,如果参数 t 为 0 时将导致函数无意义,定义 $t > 0.01$ 可解决这个问题。



图 9.11 Parameter Constraints 对话框

- Lower 和 Upper Bounds 组,选中相应参数前面或后面的复选框,可以设置其上限或下限,单击按钮  或  将其分别调换为小于“<”或小于等于“≤”。
- 在 General Linear Constraints 编辑框中可以设置参数的线性限制,假定参数为 a , b 和 c 等,需要注意:

- ① 允许的格式为 $a+2\times b\geq c\times 2-d, a<b<c$ 等;
- ② 如果多于一个限制条件,中间用分号隔开;
- ③ 换行用 Ctrl+Enter 复合键;
- ④ 限制关系必须为线性, $a^2>c, \sin(a)<c$ 等为非法关系;
- ⑤ 此编辑框中,认为<和≤相同,>和≥相同;
- ⑥ 允许使用复合关系,如 $a<b<c$ 相当于 $a<b, b<c$;
- ⑦ 系数必须为常数,如果是参数的话,必须赋予有效数值,如 $q=10, P1+q\times P2=10$;
- ⑧ 选中 Enabled 复选框,该编辑框中的设置有效。

● Before Fitting 对话框

执行 Fitting Session 对话框操作前编辑此对话框,设定开始非线性拟合时的操作。选择 Scripts| Before Fit 打开 Before Fitting 对话框,在 Scripts to Execute Before Fitting 文本框中使用 LabTalk 脚本编辑,必须选中 Enabled 复选框,该编辑起作用。

● After Fitting 对话框

选择 Scripts| After Fit 或单击命令按钮 ,打开 After Fitting 对话框,如图 9.12 所示,执行 Fitting Session 对话框操作后,在此对话框中编辑完成拟合时需要进行的操作。



图 9.12 After Fitting 对话框

- Fit Curve 组中,选中 Generate Fit Curve 复选框,在 Graph 窗口中显示拟合曲线;选中 Same X as Fitting Data 复选框,生成的拟合曲线自变量数据点和原数据点相同,将拟合曲线数据显示在 Worksheet 工作表中原数据的后面;选中 Uniform X,激活 Independent Inv. 组,生成新拟合曲线数据,拟合曲线数据显示在新 Worksheet 窗口中,在 Independent Inv. 组中设置自变量的范围及其数据点的个数。
- 选中 Write Parameters to Results Log 复选框,将拟合参数结果写在 Results Log 窗口中;选中 Paste Parameters to Plot 复选框,将拟合参数结果显示在 Graph 窗口的标签中。
- 在 After Fitting Scripts 文本框中使用 LabTalk 脚本编辑导出命令,如想将拟合结果以特殊的方式显示或显示在其他地方,均可以在这里实现,但要选中 Enabled 复选框该命令有效。

● Replicas 对话框

Origin 中某些函数,如 Lorentzian 和 Gaussian 等允许进行多峰拟合,这在 Replicas 对话框中可以实现。选择 Options|Replicas 或单击命令按钮,打开 Replicas 对话框,如 9.13 所示。要判断哪个函数允许多峰拟合,选中该函数,命令按钮处于激活状态,则该函数允许多峰拟合。



图 9.13 Replicas 对话框

该对话框是通过复制 Origin 内置函数完成多峰拟合的,不仅可以设置拟合峰的个数,还可以设置不同峰各自的参数。

- 从 Number of Replica 列表中选择函数拟合峰要复制的个数,如果想拟合 n 个峰

的话,从中选择 $n-1$ 。

- Replicate From 数值表示多峰拟合过程中开始替代哪个参数,如 Replicate From 数值为 2,Gaussian 函数中的参数依次为 Y0,XC,W 和 A,那么从第二个参数 XC 开始替代,所有的拟合峰都有同样的参数 Y0。
- Replica Size 是需要替代的参数个数,具体显示在 Parameter Sharing 列表中。
- 在 Parameter Sharing 列表中显示了需要替代的参数,如果要几个拟合峰具有相同的参数,则在该参数上双击鼠标,使其后面带有 Shared 标记。
- 选中 Generate Peak Curves During Each Iteration 复选框,每次拟合迭代后显示曲线。
- 选中 Peaks with Baseline 复选框,使所有拟合峰具有相同的基线。

9.2.3 拟合向导

Origin 还提供了 NLFS 拟合向导工具,该工具只提供了常用的拟合选项,操作简单。

选择 Analysis| Nonlinear Curve Fit| Fitting Wizard,打开 NLFS 拟合向导,如图 9.14 所示。单击 Next 和 Back 按钮或直接单击左边窗口中的图标,进行选择操作步骤,图标会随操作过程而变化其颜色。该向导包括 Select Data,Select Function,Peaks(只有选中峰函数时,才出现该页面),Weighting,Fitting Control 和 Results 页面,这些页面的操作及其功能和 NLFS 工具类似。在窗口右下脚有几个按钮,其功能如下:

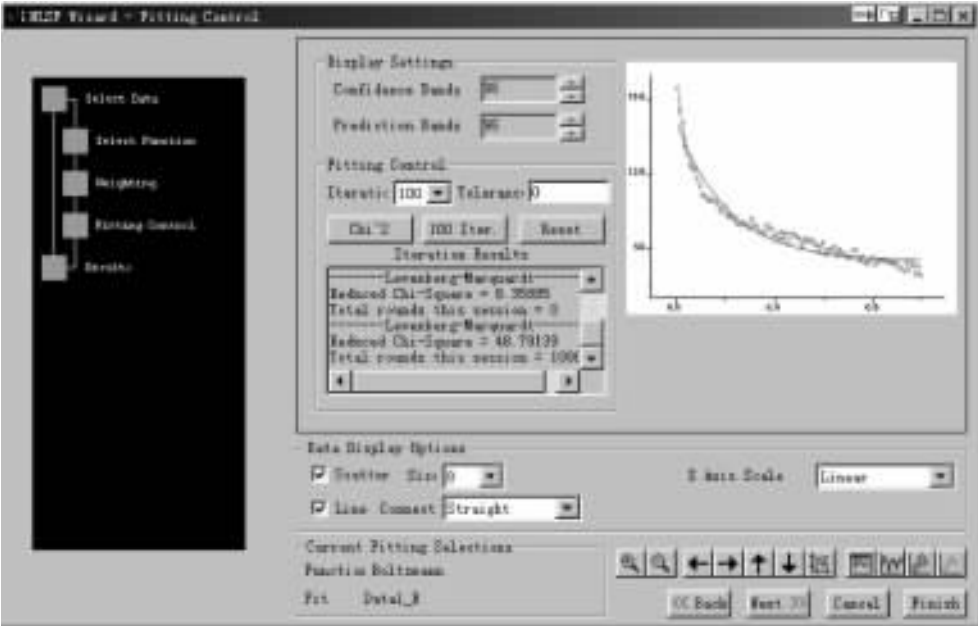


图 9.14 NLFS 拟合向导



,放大向导中的 Graph 图形,其他工具只有在放大后才激活;



,将放大后的图形返回到本次放大前的形状;



,左右上下滚动放大后的图形;

-  , 返回到图形的初始状态;
-  , 打开对话框设置初始参数值;
-  , 显示剩余误差图;
-  , 显示可信度;
-  , 显示预测度。

设置完毕后,单击 Finish 按钮执行拟合。

如果在 Result 页面中选中了 Save Fitting Session as a Procedure File 复选框再单击 Finish按钮的话,Origin 执行拟合并且打开 Button Settings 对话框,如图 9.15 所示。该对话框允许用户将当前的向导设置保存为一个新工具按钮,保存后该按钮就出现在 NLFS 拟合向导中,下次可以直接使用此函数及其设置。



图 9.15 Button Settings 对话框

9.2.4 NSLF 拟合过程中遇到的问题

非线性最小平方拟合(NSLF)实际是通过迭代过程,求得拟合参数变量,使得拟合函数和数据组之间的 reduced χ^2 最小,但在迭代过程中可能不收敛,不能实现 reduced χ^2 绝对最小。

● 相对极小值

迭代过程中不能实现 reduced χ^2 绝对最小,只能实现相对最小,这种情况不常见。这样用户就不知道是否得到了最佳函数参数,惟一可以做的是选择不同的初始参数值,看最后迭代的结果是否相同,如果相同的话,就可以确定其为最佳参数。

● 参数总是变化

有时候不论用户怎样选择初始参数,迭代过程总是不收敛,每次迭代后参数总是变化,甚至出现代数溢出现象,这可能是由于选择的函数不适合造成的,可以选择其他函数进行拟合。

● 定义的参数过多

比如函数 $y = A * \exp(x - x_0)$, 拟合过程中很难实现 reduced χ^2 最小,可以将其改为

$y = B * \exp(x)$, 其中 $B = A * \exp(-x_0)$, 这样我们就减少了一个参数, 将 A 和 x_0 两个变化因素变为一个参数 B , 避免了迭代过程中 A 和 x_0 变化的随意性。

● 数据没有规律

如果数据没有包含足够的信息来确定参数, 迭代的结果也不理想。比如用 Lorentzian 函数来拟合单调变化的数据曲线, NLSF 很难确定函数的中心位置和峰的宽度。

9.3 自定义函数拟合

自定义函数拟合是 Origin 强大拟合功能的集中体现, 本小节通过一个例子来介绍自定义函数的拟合过程。该例为硅基片注入金属钌后, 载流子浓度随深度的变化。

9.3.1 自定义拟合函数

Origin 允许用户使用 NLSF 拟合工具高级模式自定义函数, 定义后的函数就出现在拟合向导中供选择, 新函数可以放在已有的类别中, 也可以定义新类别。

选择 NLSF 菜单命令 Category| New, 在弹出的文本框中键入名称即可新建函数类别, 在这里选中 Origin Basic Function 类, 将新函数放在 Origin Basic Function 中。

选择 NLSF 菜单命令 Function| New 或单击命令按钮 , 打开 Define New Function 对话框, 如图 9.16 所示, 将鼠标放在某个文本框中, 最下面的状态栏中会出现提示。下面介绍自定义函数的步骤。



图 9.16 Define New Function/Edit Function 对话框

- Name 文本框中默认的函数名称是 User1,将其改为 Myfunction。
- 在 Type 下拉列表中有两个选项: User-Defined 和 External DLL,默认的选项是 User-Defined, External DLL 需要使用 Origin C 编译。
- 如果自己指定参数,必须选择 User Defined Param. Names 复选框,这时 Number of Parameters 处于不激活状态,但可以直接在 Parameter Names 文本框中编辑参数。
- 在 Number of Parameters 下拉列表中选择参数数量为 4,默认情况下,参数名称为 P1、P2 等,出现在 Parameter Names 文本框中,用户不能更改这些名称,这里我们选此设置。
- 分别在 Independent Var. 和 Dependent Var. 文本框中指定自变量和因变量,可以制定多个变量,中间用逗号隔开。
- Definitions 文本框中输入定义的函数, $(P1 * \exp(-x^{P2/P3}) + 1) * P4$ 。
- 单击 File 按钮,显示此函数的定义文件,要返回到编辑页面,单击 Form 按钮。
- Form 下拉列表中有 Expression, Y-Script 和 Equations 三个选项,① Expression 只允许有一个因变量,其表达式为 $(P1 * \exp(-x^{P2/P3}) + 1) * P4$; ② Y-Script 使用 LabTalk 定义函数,表达式为 $y = (P1 * \exp(-x^{P2/P3}) + 1) * P4$; ③ Equations 适合于表达多个因变量,每个表达式分行表示。
- 选中 Compile before use 复选框,激活 Check 按钮,单击该按钮可以检验编辑的表达式是否符合 Origin 语法。

最后单击 Save 按钮,函数保存为 *. FDF 格式文件,在 \FitFunc 文件夹中,并出现在 Select Function 对话框的 Origin Basic Function 类别中。

对于已有的函数,选择 Function| Edit 或单击命令按钮 ,打开 Edit Function 对话框,与 Define New Function 对话框完全相同。

9.3.2 初始化参数

选择 Scripts| Parameter Initialization 或单击按钮 ,打开 NLSF 的 Parameter Initializations 对话框,如图 9.17 所示。

Origin 自带的函数都提供了初始参数,可以从该对话框中看到,好的初始参数便于计算,易于数据收敛,在拟合过程中有效地找到近似参数。激活 Fitting Session 对话框时 Origin 自动运行参数初始路由,将这些值作为拟合迭代参数初始估计值。

用户也可以手动运行参数初始路由,单击 Check 编辑初始化路由,单击 Execute 按钮运行初始化路由,单击 Execute 按钮后,Init. Value 文本框中显示初始值。

但自定义的函数需要用户来指定初始参数,如果没有指定的话,在拟合迭代开始时,必须输入参数估计值,可以在 Parameter 常数文本框中输入参数值,也可以在参数初始设置文本框中用 Origin C 语言来设置初始路由。

在参数设置文本框中输入:

```
P4=min(y_data);
x_y_curve=ln(x_y_curve-P4);
double coeff[2];
```



图 9.17 Parameter Initializations 对话框

```
fitpoly(x_y_curve,1,coeff);  
P1=exp(coeff[0]);  
P2=1;  
P3=-1.0/coeff[1];
```

这些参数根据用户的需要的不同而设置,使用 Origin C 语言编辑时必须选中 Compile 复选框,参考第 11 章。

9.3.3 指定函数变量

指定参数变量就是把数据组和函数中的变量对应起来,选择 Action| Dataset 或单击按钮 ,打开 Select Dataset 对话框,如图 9.18 所示,指定函数变量步骤和 NLSF 基本模式指定方式类似,这里就不再赘述了。

如图 9.18 所示指定了 Y 变量对应于 Data2_B 数据列,X 变量对应于 Data2_A 数据列。

9.3.4 曲线模拟

如果不能确定拟合的初始参数值,Simulate Curves 对话框可以帮助用户选择合适的初始值。选择 Action| Simulate 或单击命令按钮 ,打开 Simulate Curves 对话框,如图 9.19 所示。

Func Dataset Name 文本框中显示了将要生成的拟合数据组名称,Dependent Variables 文本框中显示了因变量。如果因变量多于一个的话,可以从中选择进行模拟。



图 9.18 Select Dataset 对话框



图 9.19 Simulate Curves 对话框

在 Parameter 组中输入参数,单击 Create Curve 按钮生成曲线,同时生成名称为 Myfunction-Myfunction fit of B 的数据组,如果不理想,可以更改,单击“<”或“>”按钮可以浏览前面设置的参数,几组参数下的模拟曲线结果如图 9.20 所示。

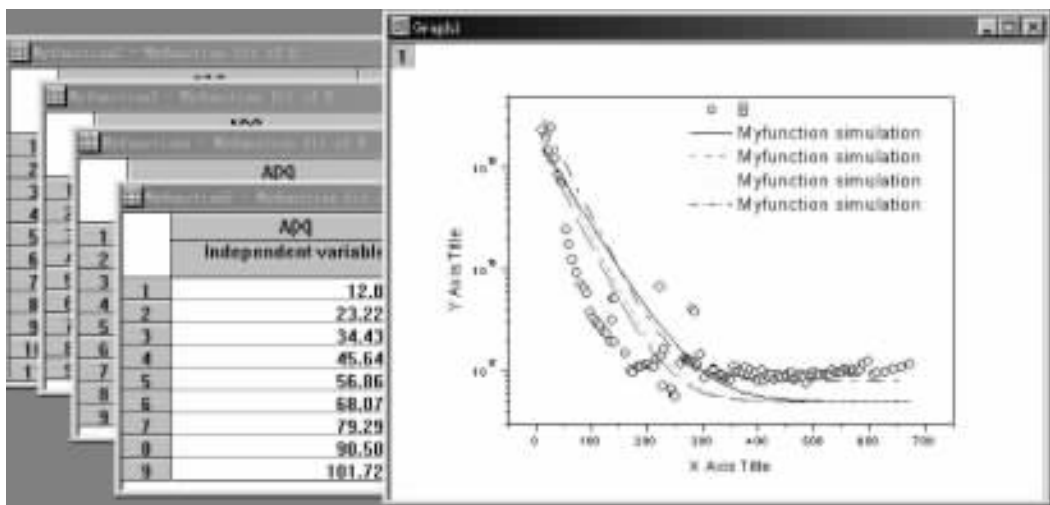


图 9.20 几组参数下模拟曲线

如果有多个自变量的话,激活 Matrix Form 复选框,如果选中的话,将在坐标网中进行拟合,这样需要更大内存。

9.3.5 拟合数据

对于 Origin 的内置函数来说,提供了参数初始值,Origin 自动路由 NLSF 的 Parameter Initializations 对话框,根据设定的变量数据组决定合适的参数初始值,这里我们使用自定义函数 Myfunction 进行拟合,初始参数取 Simulate Curves 对话框中的设置。曲线拟合步骤如下所述。

- 选择 Action| Fit 或单击命令按钮,打开 Fitting Session 对话框,如图 9.21 所示,初始参数自动显示在参数文本框中。如果没有出现,可以手动进行设置:① 打开 NLSF 的 Parameter Initializations 对话框;② 单击 Check 按钮编辑初始值路由;③ 单击 Execute 运行初始值路由。
- 单击 Chi-Sqr 命令按钮,查看窗口内显示当前参数值 χ^2 。在 NLSF 中,不论是 χ^2 还是 reduced χ^2 和 χ^2/DoF ,给出的值均为 reduced χ^2 。
- 单击 1 Iter 或 10 Iter 命令按钮进行 Levenberg-Marquardt 迭代,新参数连同误差值、可信度显示在参数列表中。在迭代过程中可以随时修改参数的初始值,以后的迭代从修改后的参数值开始。单击 10 Iter 命令按钮迭代过程中,如果达到了允许限度(参考 Control Parameters 对话框)或发生了错误,迭代次数将少于 10 次。如果 Levenberg-Marquardt 迭代方法不理想的话,可以单击 10 Simplex Iter. 按钮进行简单迭代。
- Origin 将迭代的曲线显示在 Graph 窗口中,将实际迭代的次数和 χ^2 显示在查看窗口内。



图 9.21 Fitting Session 对话框

- 每个参数后面均有 Vary 复选框,选中的话,在迭代过程中该参量可以改变,否则不变; Error 文本框中显示出了拟合函数和数据组之间的标准差;Dependency 列表中显示出了参数的可信度;
- 最后单击 Done 按钮完成迭代过程。Origin 在 Result Log 窗口中显示拟合结果,在 Graph 窗口中绘制拟合曲线,在 Project 管理器中增加几个工作表窗口。

9.3.6 拟合结果

选择好最佳的拟合参数后,在 NLSF 菜单中选择 Action| Results 或单击按钮 , 打开 Generate Results 对话框,如图 9.22 所示。从这个对话框中,可以得到各个拟合阶段的结果数据工作表窗口。

● NLSF 工作表窗口

拟合后显示拟合曲线数据,如果自变量和原数据组一一对应,则显示在原数据组的后面,如图 9.23 所示的 Data1_B1。

除了拟合曲线外,在 Generate Results 对话框中,选中 Dependent Var. 列表中的一个因变量,可以对其生成三条辅助曲线:

- 在 Confidence 文本框中指定可信度,单击 Conf. Band 按钮可以生成可信带曲线,图 9.24 中的蓝线,并将可信带数据显示在 Worksheet 窗口中,图 9.23 中的 Data1_LCL 和 Data1_UCL 分别为上下可信数据;
- 在 Confidence 文本框中指定可信度,单击 Pred. Band 按钮可以生成预测带曲线,



图 9.22 Generate Results 对话框

Data1								
	APQ	B[Y]	LCL[Y]	UCL[Y]	LPL[Y]	UPL[Y]	B1[Y]	residue[Y]
1	12.0061	2.3E19	2.16408E19	2.51041E19	2.07453E19	2.59997E19	2.33725E19	-3.72469E17
2	17.2778	1.95E19	1.97603E19	2.18989E19	1.8583E19	2.30762E19	2.08296E19	-1.32962E18
3	22.8278	1.49E19	1.67792E19	1.89075E19	1.55992E19	2.00875E19	1.78434E19	-2.94336E18
4	28.6855	2.42E19	1.35515E19	1.57218E19	1.23825E19	1.68988E19	1.46366E19	9.56336E18
5	34.5583	1.22E19	1.06364E19	1.25666E19	9.40264E18	1.38004E19	1.16015E19	5.98478E17
6	40.6795	8.55E18	7.9484E18	9.65723E18	6.6502E18	1.09554E19	8.80281E18	-2.52013E17
7	47.134	7.07E18	5.49247E18	7.21305E18	4.19781E18	8.50771E18	6.35276E18	7.17242E17
8	52.9594	2.45E18	3.70397E18	5.49624E18	2.43058E18	6.76961E18	4.6001E18	-2.1501E18
9	59.5904	1.77E18	2.22076E18	3.96878E18	9.34387E17	5.25523E18	3.09477E18	-1.32477E18
10	66.3874	1.24E18	1.24301E18	2.77624E18	-1.0967E17	4.12892E18	2.00962E18	-7.69624E17

NLSF - Exponential Fit of Data1_3			
	APQ	LPL[Y]	UPL[Y]
	Independent variable	Lower 0.95 Prediction Limit	Upper 0.95 Prediction Limit
1	12.0061	#0	#0
2	23.22035	#0	#0
3	34.43461	#0	#0
4	45.64086	#0	#0
5	56.86311	#0	#0
6	68.07736	#0	#0
7	79.29162	#0	#0

图 9.23 NLSF 拟合曲线数据

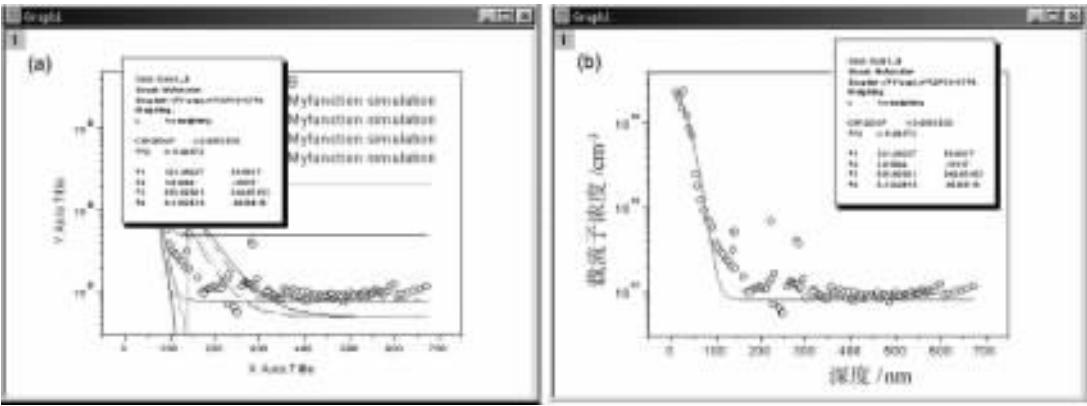


图 9.24 NLSF 拟合曲线

图 9.24 中的浅蓝线,并将预测带数据显示在 Worksheet 窗口中,图 9.23 中的 Data1_LPL 和 Data1_UPL 分别为上下预测数据;

- 单击 Residue Plot 按钮,将剩余误差制图,图 9.24 中的绿线,并将剩余误差数据显示在 Worksheet 窗口中,图 9.23 中的 Data1_residual,剩余误差反映了数据组和拟合曲线之间的不同。

如果拟合曲线自变量的数据点和原数据点不是一一对应的,该设置在 After Fitting 对话框中进行,Origin 生成新 NLSF 窗口显示拟合数据,如图 9.23 所示,是使用 ExpDecay1 函数拟合后的 4 个数据工作表。

● 参数工作表窗口

单击 Param. Worksheet 按钮,生成名为 Parameters(该名称可以在 Param. Worksheet 按钮后面的文本框内更改)的工作表窗口,如图 9.25 所示,保存拟合过程中涉及到的各参数值,包括参数、reduced chi² 和误差等,每个参数列出其名称、数值、误差值、Vary(拟合过程中可变即 Floating,还是不变即 Fixed)、LLimit(下可信度)和 ULimit(上可信度)等参数。

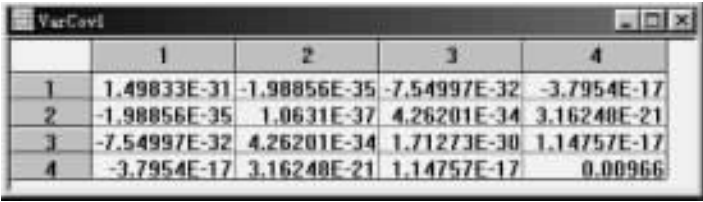
	Name	Value	Err	Vary	LLimit	ULimit	Depend	Confintv
1	P1	347.73567	452.89157	Floating	—	—	0.9997	897.34843
2	P2	1.93013	0.32722	Floating	1.78256	—	0.99873	0.64835
3	P3	1218.7599	1571.50555	Floating	-1894.67052	—	0.99899	#####
4	P4	7.35585E16	9.50449E16	Floating	—	—	0.99969	1.8032E17
5								
6	Chi²/DoF	9.37738E35						
7	SSR	1.05027E38						
8	Correlation	0.97129						
9	COD(R²)	0.9434						
10	MuFinal	1E-3						
11	MuMin	1E-4						
12	DerivStep	0.005						
13	ParaChang	1						
14	Tolerance	0						

图 9.25 Parameters 工作表

● Var-Cov Matrix

在 Var-Cov Matrix 按钮后的文本框内输入窗口名称,单击该按钮,生成方差—协方差矩阵(Variance-Covariance Matrix),如图 9.26 所示。该矩阵依赖于拟合函数、参数个数和数据组,定义为

$C=(F' \times F)^{-1}$,其中 F 是 Jacobian 行列式, $F_{i,j}=\partial f(x_{1i},x_{2i},\cdots,p_1,p_2,\cdots)/\partial p_j$ 。



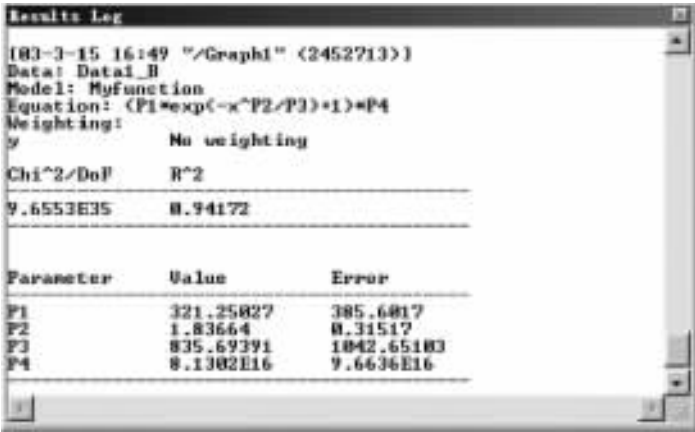
	1	2	3	4
1	1.49833E-31	-1.98856E-35	-7.54997E-32	-3.7954E-17
2	-1.98856E-35	1.0631E-37	4.26201E-34	3.16240E-21
3	-7.54997E-32	4.26201E-34	1.71273E-30	1.14757E-17
4	-3.7954E-17	3.16240E-21	1.14757E-17	0.00966

图 9.26 Var-Cov 窗口

● Results Log 窗口

单击 Display Parameters in Results Log 按钮,在 Results Log 窗口中显示拟合后的主要参数,显示分析拟合结果,包括日期、数据组、函数名称和参数值等,如图 9.27 所示。Results Log 窗口是一个不可编辑文本窗口。

单击 Paste Parameters to Plot 按钮,在 Graph 窗口中生成文本框,显示拟合结果,如图 9.24 所示的标签。



Parameter	Value	Error
P1	321.25827	385.6817
P2	1.83664	0.31517
P3	835.69391	1042.65183
P4	8.1382E16	9.6636E16

图 9.27 Results Log 窗口

● Graph 窗口

拟合完成后,Graph 窗口会自动显示拟合曲线,还会根据拟合过程中的需要显示其他曲线,如模拟曲线、误差曲线和可信度曲线等,此外还会自动添加包含拟合结果参数的文本框,如图 9.24(a)所示,为此我们可以利用 LayerN 对话框将其他不必要的曲线去掉,只显示拟合曲线,如图 9.24(b)所示。

修改了函数或其参数,结束了拟合过程后,关闭 Origin 时,会弹出提示对话框,如图 9.28 所示,问是否保存该函数的修改。

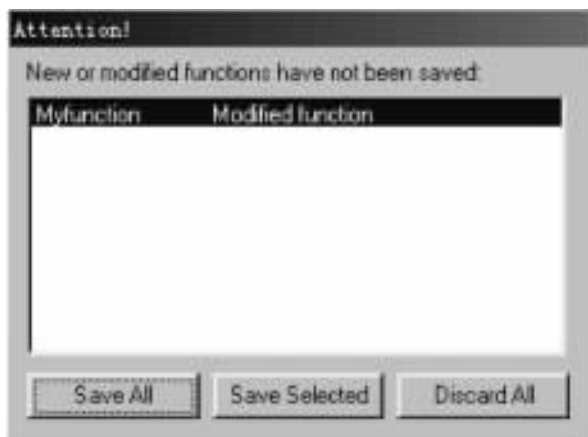


图 9.28 “保存函数提示”对话框

9.4 峰拟合模板

从事色谱学、光谱学和药理学等领域研究的用户经常遇到多峰拟合。如果峰之间相互重合或带有噪音的话,拟合是件很麻烦的事,峰拟合模板 PFM(Peak Fitting Module)是个强有力的研究工具。

PFM 是 Originpro 的一个组件。该工具提供了峰拟合向导,执行高级峰分析功能,包括自动/手动获得曲线的基线和峰位置,数据过滤,大量的内置函数和用户自定义函数,高精度的 NLSF,直观的输出界面,可以拟合 240 个峰等功能。PFM 提供了灵活的拟合方法,峰拟合向导可以在拟合过程中保存设置,等下次拟合时继续使用。

9.4.1 安装卸载 PFM

在安装 Origin7.0 PFM 之前,先查看文件中是否安装了旧版本的 PFM,如果有的话,需要卸载,方法如下:

- 选择 View| Toolbars,打开 Customize Toolbars 对话框;
- 在 Toolbars 选项卡的 Toolbars 列表中选中 PFM,单击 Delete 按钮,从列表中删除 PFM;
- 单击 Button Groups 标签,在 Groups 列表中选中 PFM,单击 Delete 按钮,删除 PFM。

安装 Origin7.0 PFM 执行下列操作:

- 选择 Tools| Pack/Unpack OPK Files,打开 Origin Pack 对话框;
- 单击 Open 按钮 ,从 Origin Pack Files 文件夹中找到 PFM. OPK 文件,单击“打开”按钮,Origin 将文件解包到 Origin Pack 对话框的列表中,如图 9.29 所示;
- 单击 Origin Pack 对话框中的 Extract 按钮 ,将文件导入 C:\Program Files\OriginLab\OriginPro70 文件夹中。

安装完毕后,PFM 工具条被添加到 Customize Toolbars 对话框 Button Groups 选项卡的



图 9.29 安装 PFM, OPK 文件

Groups 列表中, 并且 PFM 工具条  显示在 Origin 工作区中, 该工具条只有一个 Enter Peak Fitting Session 按钮。

执行下列操作卸载 Origin7.0 PFM:

- 确定没有运行 Peak Fitting 向导, 如果运行的话, 退出向导, 并关闭 Origin, 然后重启 Origin;
- 选择 Tools | Uninstall OPK Files, 打开 Uninstall Opack 对话框, 如图 9.30 所示;

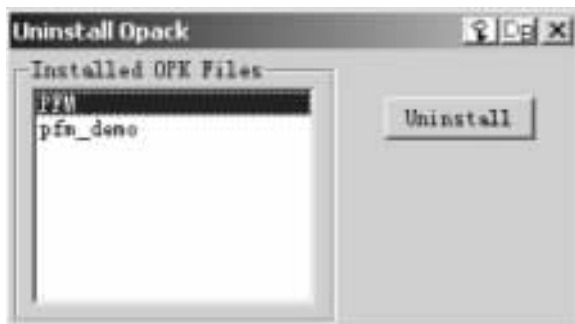


图 9.30 卸载 PFM, OPK

- 从列表选中 PFM, 单击 Uninstall 按钮。

注意: 用户可以从 http://www.originlab.com/www/products/PFM/pfm_demo_download.asp 中下载 PFM, OPK 文件测试版。

下面我们以 \OriginLab\OriginPro70\PdFM_Examples.OPJ 为例, 说明该向导的用法。

9.4.2 Choose Data 页面

打开 PFM_Examples.OPJ 文件, 从 Project 管理器中选中 Chromatography Data 文件夹,

在该文件夹中选中 Graph1-GPC Single Channel Chromatogram 子窗口,单击工具条 PFM 上的 Enter Peak Fitting Session 按钮 ,打开 Peak Fitting 向导,如图 9.31 所示。

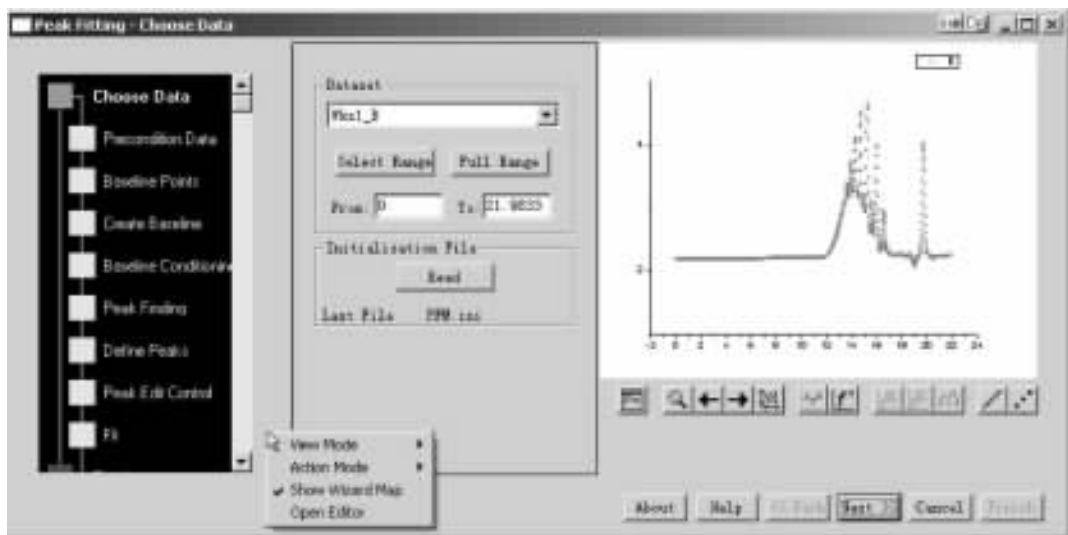


图 9.31 Peak Fitting 向导

注意:当打开 Peak Fitting 向导时,不能进行 Origin 的其他操作,要返回到 Origin 操作界面的话,需关闭 Peak Fitting 向导。

在向导黑框外的灰色区域处右击鼠标,如图 9.31 所示,显示快捷菜单命令,其中各项命令简介如下。

- View Mode 有两个选项:Normal 和 Full。Normal Mode 是默认的显示方式,Full Mode 向导设置显示方式,允许用户个性化 Peak Fitting 向导。
- Action Mode 也有两个选项:Active 和 Passive。Passive 允许用户没有进行初始化操作的情况下切换页面。
- 取消选择快捷菜单命令 Show Wizard Map 的选择,隐藏向导对话框左边黑色区域的向导指示部分,可以扩展图形的显示空间,这时使用 Next 和 Back 按钮切换页面。
- 选择 Open Editor 命令,打开 Peak Fitting 向导的脚本文件,建议用户不要修改这些文件。

单击右上角的  按钮,隐藏中间黑框内的数据选择。

打开 Peak Fitting 向导后,可以通过单击 Next 和 Back 更换页面,也可以直接单击左边的向导图标更换。向导图标中,当前的页面为绿色,访问过的页面为棕色,未访问的页面为黄色,结果页面为红色。

● 数据范围的选择

首次打开 Peak Fitting 向导时,激活的是 Choose Data 页面,且在 Dataset 显示的是当前激活的数据组。也可以从 Dataset 下拉列表中选择其他数据组,选择后,自动更新后面的 Graph 图形。

该页面提供了设置数据范围和选择初始化文件的功能,下面首先设置数据分析范围。

➤ 单击 Select Range 按钮,数据选择标志显示在 Peak Fitting 向导图形的两端,且

Current Marker Position 组显示激活的数据选择标志的 X, Y 坐标值,如图 9.32 所示。

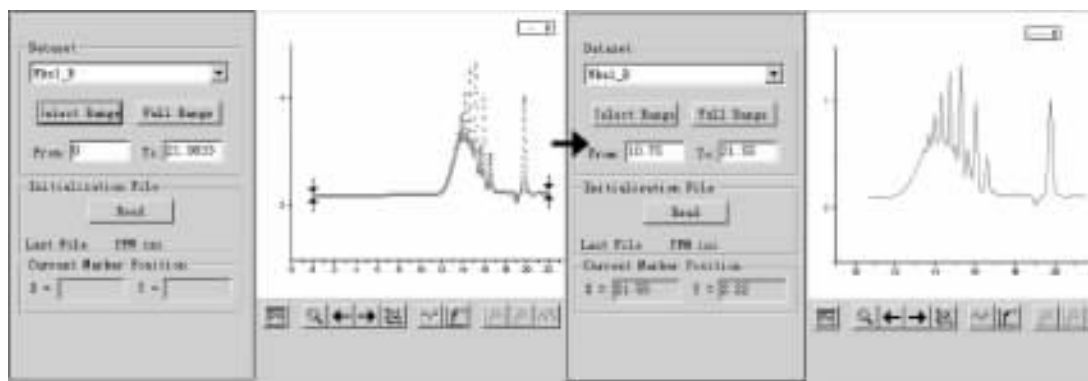


图 9.32 设置曲线显示范围

- 将坐标的数据选择标志拖动到 $X=10.75$,将右边的数据选择标志拖动到 $X=21.55$ 。
- 按 Enter 键,确定数据范围的选择,并退出数据范围选择模式。

这时,Peak Fitting 向导更新曲线显示范围,同时 From 和 To 文本框更新 X 的起始、结束值,如图 9.32 所示。实际上,用户可以直接在 From 和 To 文本框中键入 X 的起始、结束值,进行设置数据范围。

如果想显示出整个数据组,单击 Full Range 按钮。但如果在设置 Worksheet 时使用了 Edit|Set As Begin 和 Set As End 命令,或在 Graph 窗口使用 Data Selector 工具限制了数据显示范围的话,单击 Full Range 按钮是不会超出原来的显示范围的。

● 初始化文件导入

启动 Peak Fitting 向导时,会自动读入初始化文件 PFM.INI,该文件包括峰、基线参数的设置,拟合特征,结果输出等设置,也可以单击 Read 按钮,读入其他文件。

注意:向导窗口中的图形也可以像 Graph 窗口的图形一样进行个性化,以突出图形的显示。为了突出曲线的变化关系,单击图形下面的 Line Plot 按钮,将散点图转换为直线图。

9.4.3 Precondition Data 页面

单击 Next 按钮,进入 Precondition Data 页面。该页面允许用户对数据曲线进行预处理及平滑处理,如图 9.33 所示。

● 预处理方法的选择

单击 View Options 按钮,打开 Precondition Fitting Dataset 对话框进行拟合前数据的处理。在 Methods 列表中包括 15 种处理方法,选择不同的处理方法,后面会出现不同的文本框进行设置,并在下面的说明框中给出该方法的说明。

- Subtract an offset from data,用数据组减去 Y_0 ;
- Subtract mean (1) from data,用数据组减去 $R1$ 行和 $R2$ 行之间数据的平均值;
- Subtract mean (2) from data,用数据组减去 $X1$ 和 $X2$ 之间数据的平均值;
- Subtract mean (3) from data,用数据组减去前 N 行数据的平均值;

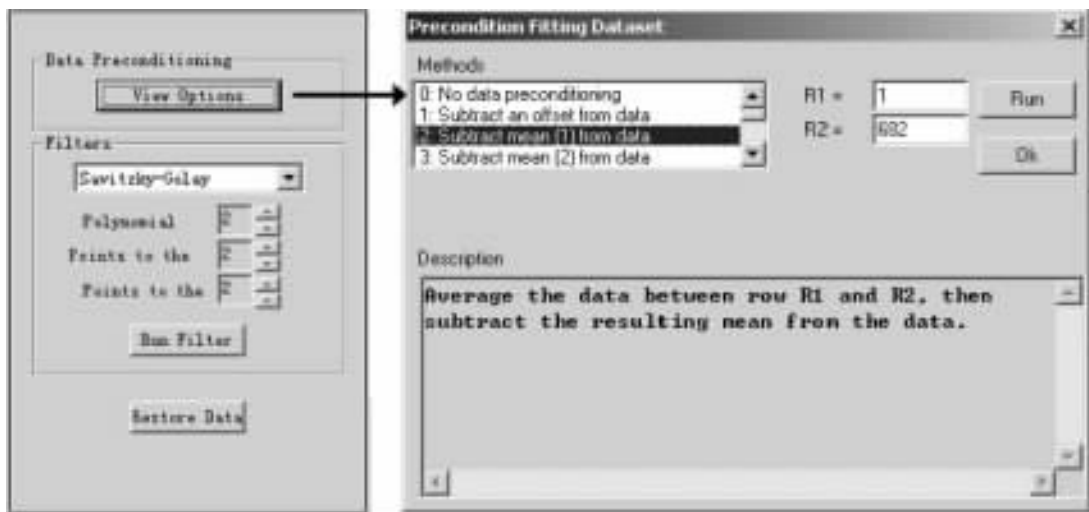


图 9.33 Precondition Data 页面的平滑预处理选项

- Subtract mean (4) from data, 用数据组减去后 N 行数据的平均值;
- Subtract mean (5) from data, 用数据组减去 X 左边数据的平均值;
- Subtract mean (6) from data, 用数据组减去 X 右边数据的平均值;
- Shirley baseline subtraction(1), 用 Shirley 方法处理数据, $R1$ 和 $R2$ 分别是最小行数和最大行数, $N0$ 是最终的基线;
- Shirley baseline subtraction(2), 用 Shirley 方法处理数据, $E1$ 和 $E2$ 分别是设计的数据范围, $N0$ 是最终的基线;
- Tougaard baseline subtraction(1), 用 Tougaard 方法处理数据, $R1$ 和 $R2$ 分别是最小行数和最大行数, $B0$ 是可调参数;
- Tougaard baseline subtraction(2), 用 Tougaard 方法处理数据, $E1$ 和 $E2$ 分别是设计的数据范围, $B0$ 是可调参数;
- Tougaard baseline subtraction(3), 用 Tougaard 方法处理数据, $R1$ 和 $R2$ 分别是最小行数和最大行数, $N0$ 是最终的基线;
- Tougaard baseline subtraction(4), 用 Tougaard 方法处理数据, $E1$ 和 $E2$ 分别是设计的数据范围, $N0$ 是最终的基线;
- Straight-line baseline subtraction(1), 用直线方法处理数据, $R1$ 和 $R2$ 分别是最小行数和最大行数, $N0$ 是最终的基线;
- Straight-line baseline subtraction(2), 用直线方法处理数据, $E1$ 和 $E2$ 分别是设计的数据范围, $N0$ 是最终的基线。

● 平滑方法的选择

从 Filters 下拉列表中可选择 Savitsky-Golay, Adjacent Averaging 和 FFT Filter 3 种平滑方法。平滑方法的具体含义参考 10.4 节, 选择好后单击 Run Filter 按钮进行平滑操作。单击 Restore Data 按钮, 撤消前面的所有预处理操作和平滑过滤。

针对本节中的例子, 在该页面不作任何处理直接进入下一个页面。

9.4.4 Baseline Points 页面

单击 Next 按钮,进入 Baseline Points 页面,如图 9.34 所示,该页面提供了选择基线上点的方法,共有 4 种基线点的选择方法:

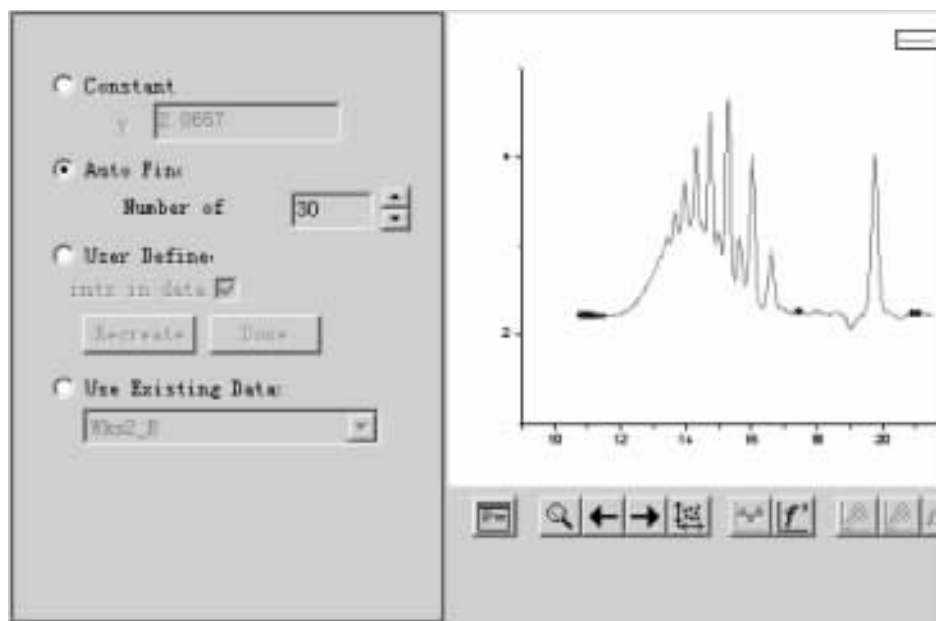


图 9.34 Baseline Points 页面选项

- 选择 Constant 复选框,然后在后面的文本框中输入常数值 $Y=$ 。如果选择该选项,则不出现 Create Baseline 页面。
- 选择 Auto Find 复选框,这种方法自动寻找一阶导数和二阶导数在 0 点范围内的点,后面的正三角和倒三角按钮调节基线的点数,单击一次正三角按钮,点数增加一倍,单击一次倒三角按钮,点数减少一半。
- 选择 User Defined 复选框,激活 Current Marker Position 组,使用 Screen Reader 工具来定义基线点的位置。在向导 Graph 窗口选择数据时,在 Current Marker Position 组中显示鼠标的坐标值,双击鼠标确定点,完成点的定义后,单击 Done 按钮确定。为了保证基线的点在图形的数据点上,选中 Points in Data 复选框,定义完点后单击 Done 按钮确定,Origin 从图形的数据组寻找最近的 X 值,并与其对应的 Y 值一起作为基线上的坐标点。如果删除当前定义的基线点的话,单击 Recreate 按钮,再次进入基线定义状态。
- 选择 Use Existing Dataset 复选框,从相应的下拉列表中选择 Y 数据组(不包含当前的图形数据组和生成拟合数据组),这时在后面的向导 Graph 窗口中显示选中的基线数据组图形。

选择 Auto Find 复选框,如果有的点在峰上,则单击 Number of Point 后面的倒三角按钮,减少点数,获得新的阈值。基线的定义选择参考 10.5 节。选择好了基线的点后,就需要设置根据这些点来生成基线了。

9.4.5 Create Baseline 页面

单击 Next 按钮,进入 Create Baseline 页面,如图 9.35 所示。这里可以修改基线的点,设置基线函数,默认的是直线,用选定的基线点进行线性拟合绘制直线。

● 修改基线的点

选择 Modify Baseline Points 复选框,开始使用基线修改工具,方法如下所述。

- 单击 Add button 按钮,激活 Current Marker Position 组,激活 Screen Reader 工具来定义基线点的位置。在向导 Graph 窗口选择数据时,在 Current Marker Position 组中显示鼠标的坐标值,双击添加点,完成点的添加后,单击 Done 按钮确定。同样,为了保证基线的点在图形的数据组中,选中 Points in Data 复选框。
- 单击 Modify 按钮,激活 Data Reader 工具,可以移动基线上点的位置,完成后单击 Done 按钮确定。
- 单击 Delete 按钮,激活 Data Reader 工具,选中要删除的点,双击删除。



图 9.35 Create Baseline 页面选项

注意:修改完基线后,必须选择 Create Baseline 复选框,指定基线的生成方法。

● 根据定义的点设置基线

选中 Create Baseline 复选框,指定基线点的连接方式,有下列几种方式。

- 选中 Use Function 复选框,然后从下拉列表中选择要拟合的函数,包括:Line, Poly5, ExpGrow2, Parabola, ExpDec1, Hyperbl, Cubic, ExpDec2, Poly4 和 ExpGrow1,这些函数的具体含义可以参考 Origin 的帮助文件。
- 选中 Connect points with line 复选框,基线点之间用直线相连,作为基线。
- 选中 Connect points with spline 复选框,基线点之间用立方样条线相连,作为基线。如果原曲线的数据点数超过 900,则该选项不起作用。

在该例中选择了 Use Function 的 Line 选项,Origin 根据选定的点自动进行线性拟合。

9.4.6 Baseline Conditioning 页面

单击 Next 按钮,进入 Baseline Conditioning 页面,如图 9.36 所示,该页面有 Scale Baseline 按钮和 Subtract Baseline 按钮。

- 单击 Scale Baseline 按钮,鼠标变成 Screen Reader 工具,在向导图形中合适的地方双击鼠标,Origin 找到基线上与 X 坐标对应的点,计算二者的 Y 坐标差值,将差值加在整个基线上,作为新基线。
- 单击 Subtracting Baseline 按钮,用曲线减去基线作为新曲线。是否减去基线,需要根

据曲线和基线的特征来定:如果曲线上有许多峰,基线也比较复杂,拟合前最好用曲线减去基线,否则在拟合过程中,接近基线的小峰会导致基线偏离原来的位置。但减去基线再拟合,会影响到结果参数。

本页面中我们不作任何操作,直接进入下一页面。

9.4.7 Peak Finding 页面

单击 Next 按钮,进入 Peak Finding 页面,如图 9.37 所示。在该页面可以设置峰拟合函数和估计峰的位置。

● 峰函数的选择

从 Peak Type 下拉列表中选择合适的函数进行拟合,在这里也可以修改、自定义函数。

单击 Set/Modify 按钮,打开 Select Fitting



图 9.36 Baseline Conditioning 页面选项

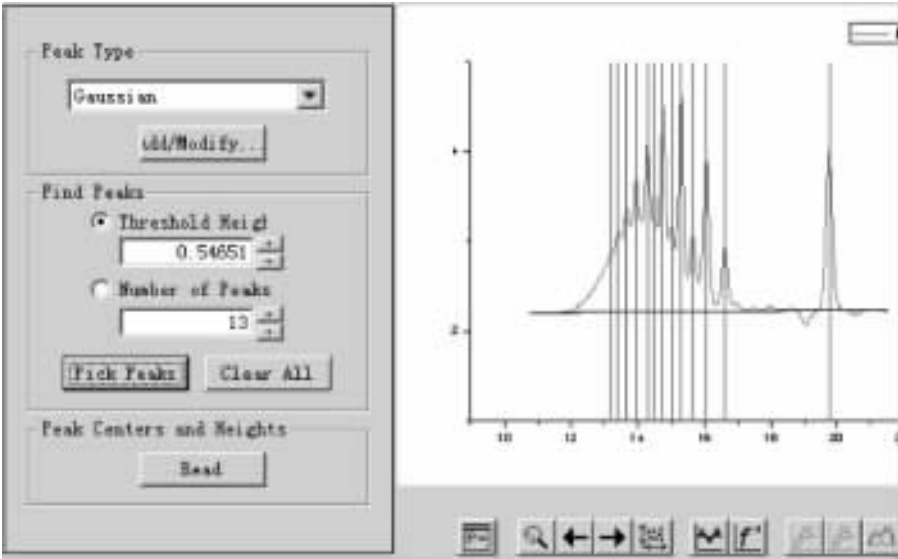


图 9.37 根据默认设置确定峰位

Function 对话框,如图 9.38 所示。在 Available Functions 列表中列出了一些 Origin 内置函数,选中函数,单击 Modify 按钮修改函数;单击 Define New Function 按钮自定义函数。这两个命令打开类似的 Define Peak Function 对话框,如图 9.38 所示。根据提示进行函数定义,参考 9.3 小节,这里就不再赘述了。

我们选择默认的 Gaussian 函数。

● 自动找峰

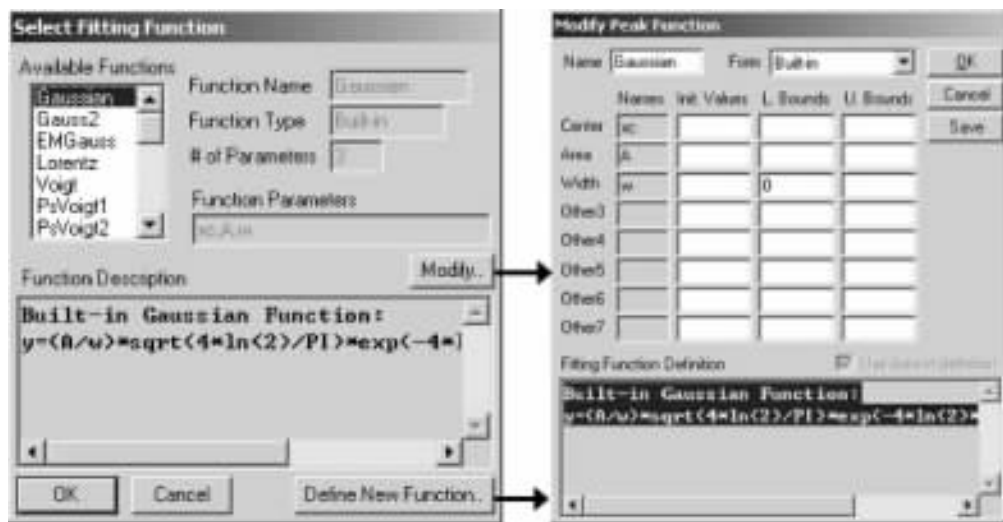


图 9.38 修改自定义函数

在 Find Peaks 组中,单击 Pick Peaks 按钮,自动找正的和负的峰,并用紫色的垂线在向导图中标出来,如图 9.37 所示。

图 9.37 如果选中 Threshold Height 复选框,则确定峰位的方法是:Origin 计算曲线的二阶导数,如果某处的导数值大于 Threshold Height 复选框中的阈值的话,就确定为峰。显然,阈值越大,找到的峰越少。

图 9.37 如果选中 Number of Peaks 复选框,则在下面的下拉列表中设置峰的数目 n , Origin 计算曲线的二阶导数,将前 n 个最大的二阶导数所处的位置作为峰位。

上述这两种方法会遗漏一些较平缓的峰,需要手动设置。

单击 Peak Centers and Heights 组中的 Read 按钮,打开 Read Peak Centers and Heights 对话框,从文件中读取数据,指定峰的位置。该选项对拟合类似的数据曲线是很有用的。

这里选择 Threshold Height 复选框,按照默认的设置,自动找到 13 个峰,如图 9.37 所示。

注意:对每条数据曲线,Peak Finding 向导最多可找到 240 个峰。

● 确定隐藏的峰

由于阈值设置不合适,有的峰难以找到,为此需要进一步找出隐藏的峰,方法如下:

- 单击向导中的 2nd Derivative 按钮 ,显示二阶导数和基线,如图 9.39(a)所示,显然,峰位在二阶导数极值处;
- 单击向导中的 Enlarger 按钮 ,放大 $X=12$ 和 $X=17$ 之间的图形,如图 9.39(a)和图 9.39(b)所示,如果显示的范围不合适,使用 Scroll Left 按钮  和 Scroll Right 按钮 ,移动 X 坐标轴显示位置,发现在 $X=13$ 处二阶导数有一个负极小值;
- 单击 Threshold Height 的倒三角按钮,减小阈值,再单击 Pick Peaks 按钮,在 $X=13$ 处添加一个峰位,如图 9.39(c)所示;
- 单击 Rescale 按钮 ,返回到向导原始尺寸页面;

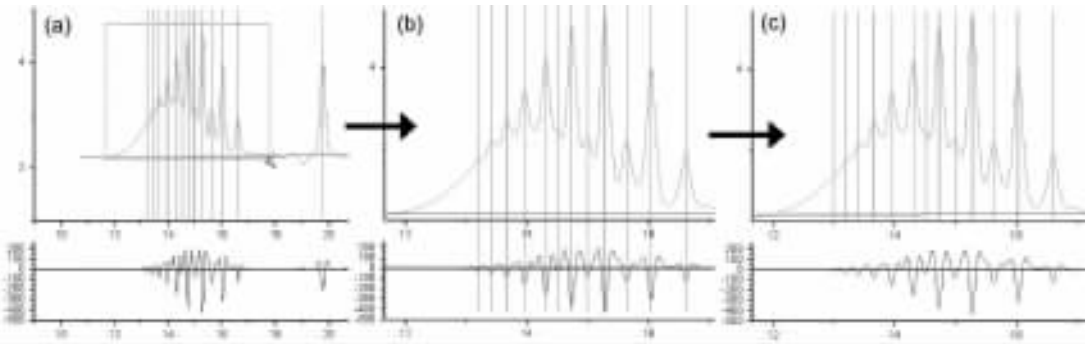


图 9.39 确定隐藏的峰

➤ 单击 2nd Derivative 按钮, 关闭二阶导数图。

9.4.8 Define Peaks 页面

单击 Next 按钮, 进入 Define Peaks 页面, 如图 9.40 所示。在这里可以手动添加、删除和修改向导图形中的峰, 具体操作如下:

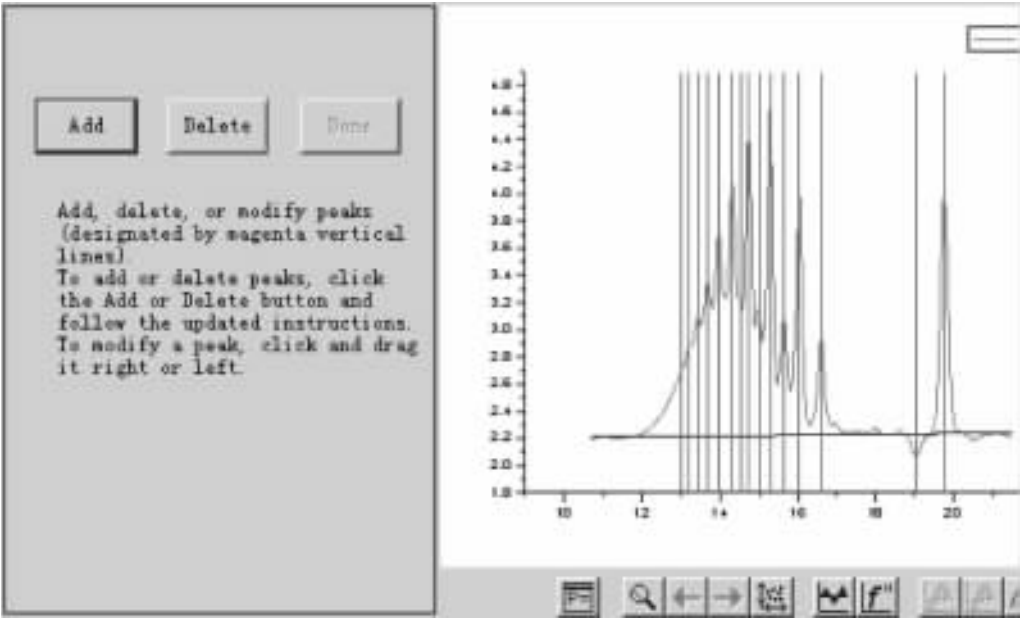


图 9.40 Define Peaks 页面及手动确定 X=19 附近的峰位

- 单击向导中的 Enlarger 按钮, 放大在 X=19 附近的峰;
- 单击 Add 按钮, 激活 Screen Reader 工具, 向导中显示 Current Marker Position 组, 用于显示鼠标在图形中的位置, 在 X=19 附近的峰处双击鼠标确定峰位;
- 单击 Done 按钮确定设置;
- 单击 Rescale 按钮, 返回到向导原始尺寸页面。

注意: 在向导图形窗口中, 可以直接用鼠标拖动紫色竖线来修改峰的位置。

9.4.9 Peak Edit Control 页面

单击 Next 按钮,进入 Peak Edit Control 页面,如图 9.41 所示。在这个页面里,指定峰拟合函数及初始化参数,不同的峰可以用不同的函数进行拟合,可以直观地设置函数的初始化参数。

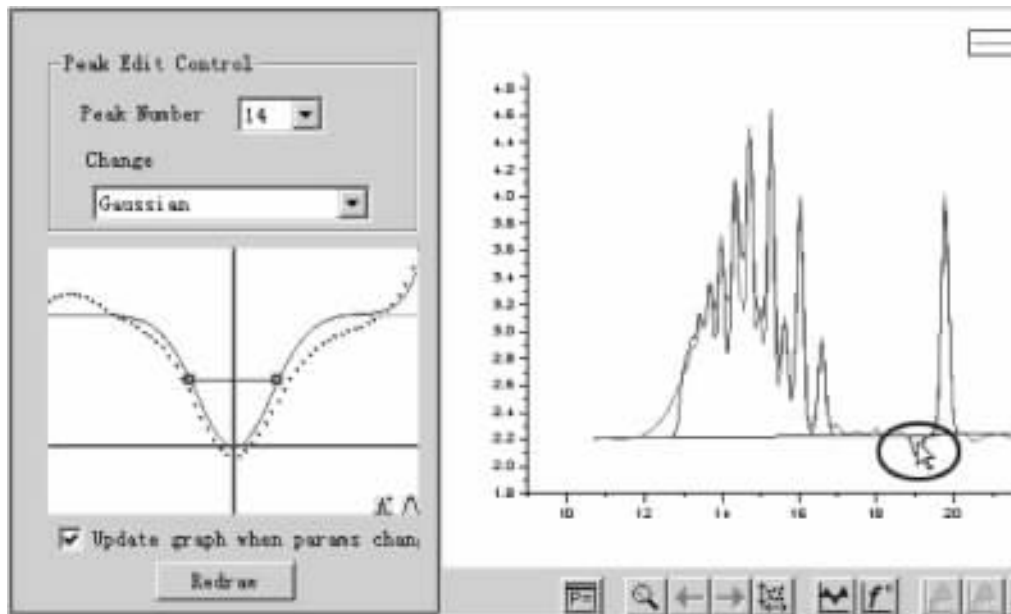


图 9.41 Peak Edit Control 页面

该页面提供了一个峰编辑预览框,选择激活单个峰,设置其拟合函数(拟合函数可参考第 10 章),进一步调节峰参数的功能。

在峰预览框中,数据曲线用黑色散点表示,整个理论计算的曲线是红色,单个激活峰的理论曲线是绿色的,大部分情况下在红色曲线的下面,两条曲线的理论计算参数是可以在这里修改的,包括峰位置、峰高度和峰的宽度。

● 调节拟合函数参数

从 Peak Number 下拉列表中选择峰号码或直接在向导图形中用鼠标单击峰,查看拟合效果,对不合适的进行修改,如第 14 号峰,如图 9.41 所示,该峰位置、高度及宽度不准,需要进行调节。

- 将鼠标放在横线上,等鼠标变成 $\updownarrow$,拖动红线调节峰高度,如图 9.42(a)所示;
- 将鼠标放在竖线上,等鼠标变成 $\leftrightarrow$,拖动红线调节峰位置,如图 9.42(b)所示;
- 将鼠标放在峰宽短线的端点上,拖动鼠标,调节峰宽,如图 9.42(c)所示;
- 最后的调节效果如图 9.42(d)所示。

Origin 根据调节后的结果更新该峰的初始化参数。

注意:单击峰预览框右下角的 ,可扩展峰的显示范围,使峰变窄;单击 ,可缩小峰的显示范围,使峰变宽。

● 更改峰的拟合函数

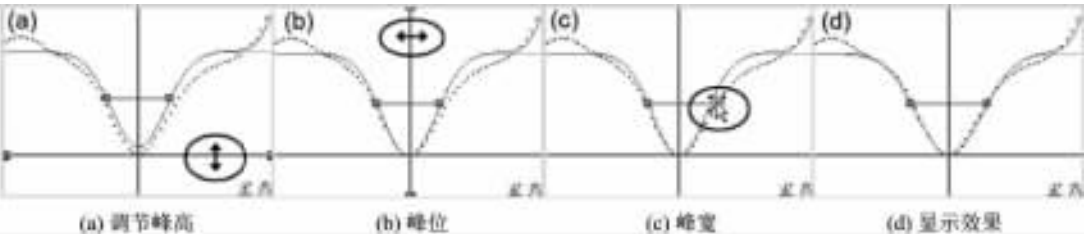


图 9.42 调节峰的参数

改变峰的拟合函数,从 Change Function 下拉列表中选择新函数,下面峰预览框中的理论曲线作相应的更新,该选项只对当前选中的峰起作用,不影响其他峰的拟合函数。

选中 Update Graph when Params. Change 复选框,在峰预览框中做的任何修改都会在向导图形中显示出来。如果取消选择该复选框,可单击 Redraw 按钮,更新向导图形。

● 设置参数属性

单击 Parameter Display 按钮,打开 Peak Parameters Display 对话框。在这个对话框中,可以更改拟合函数,设置函数的参数上下限,固定参数值,设置几个峰共享同一参数等。

如防止迭代过程中峰 2 的积分面积变为负数,可设置其面积下限为 0,选中峰 2Area 的 Lbound 复选框,并双击 Lower Bound,打开文本框,输入 0,如图 9.43 所示,在这里也可设置其他参数。

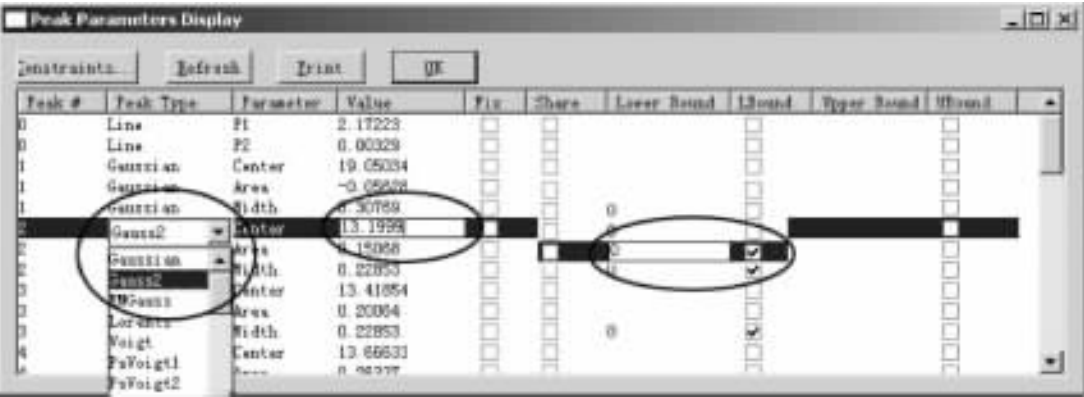


图 9.43 Peak Parameters Display 对话框

改变峰的拟合函数,在某个 Peak Type 列上双击鼠标,出现下拉列表,从中可以选择不同的拟合函数;改变初始化参数,在某个 Value 列上双击鼠标,可以修改参数;要返回到原来的设置,单击 Refresh 按钮,如图 9.43 所示。

在迭代过程中,不让参数变化,选中该参数的 Fix 复选框。如果曲线中的峰较多,基线比较复杂,又没有减去基线的话,最好固定参数值。

要共享峰参数的话,选中几个峰相应参数后面的 Share 复选框。

9.4.10 Fit 页面

单击 Next 按钮,进入 Fit 页面,如图 9.44 所示。在该页面,允许用户编辑拟合过程中的

部分参数,如置信水平、预测水平和迭代次数等。

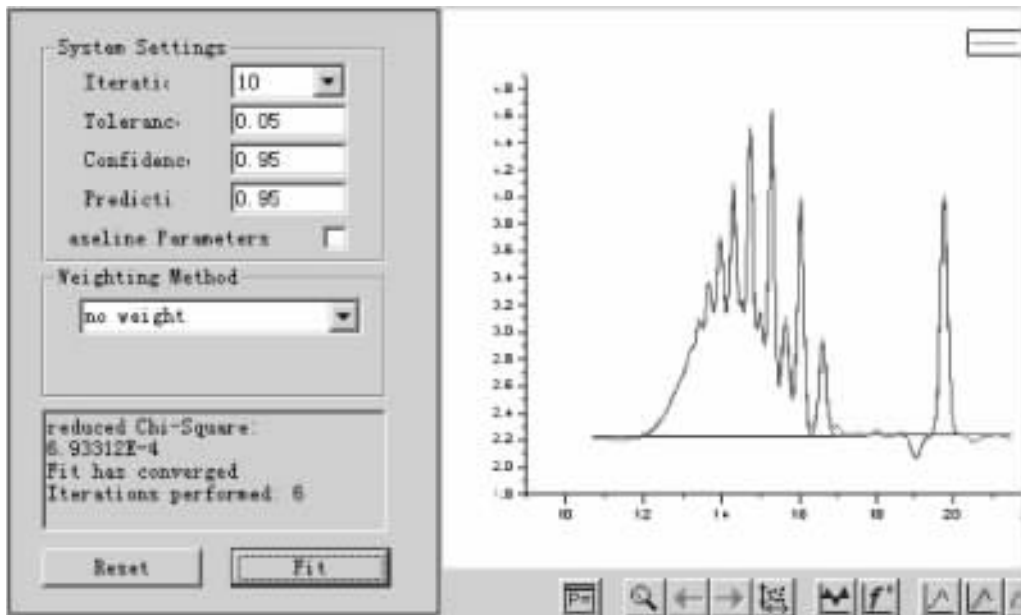


图 9.44 Fit 页面及拟合结果

在 Number of Iterations 下拉列表中指定要进行 Levenberg-Marquardt 迭代的次数 n ,如果在迭代 n 次前迭代达到了容错限度(在 Tolerance 文本框中设置容错值,两次连续迭代 reduced chi² 的相对变化),则迭代次数少于 n ,并会在结果预览框中输出实际迭代的次数。

在 Confidence 和 Prediction 文本框中分别设置可信度和预测度,单击向导图形下面的 Confidence Bands 按钮  和 Prediction Bands 按钮 ,显示可信带和预测带曲线,再次单击相应按钮,则不显示。

选中 Fix Baseline Parameters 复选框,固定基线参数,可避免峰过多时造成的基线偏移。

在 Weight Method 下拉列表中可指定迭代过程中计算 reduced chi² 时的权重方法,包括:

- No weight, 每个点的权重相同,为 $w_i=1$, $\chi^2 = \sum (y_i - f_i)^2$;
- Statistical, i 点的权重为 $w_i=1/y_i^{1/2}$, $\chi^2 = \sum |(y_i - f_i)^2 / y_i|$;
- Instrumental, 如果数据曲线对应的 Worksheet 含有 y 误差列时,出现该选项, i 点的权重为 $w_i=1/\sigma_i$, $\chi^2 = \sum [(y_i - f_i)/\sigma_i]^2$, 其中 σ_i 为指定误差列中相应的误差值;
- Specified Dataset, 如果数据曲线对应的 Worksheet 含有 Y 误差列时,出现该选项, i 点的权重为 $w_i=1/d_i$, $\chi^2 = \sum [(y_i - f_i)/d_i]^2$, 其中 d_i 指定的数据点值。

选择默认设置,单击 Fit 按钮,进行拟合,在结果预览框中输出了迭代的次数和 reduced chi²,并更新预览框中的图形,如图 9.44 所示。

拟合完毕后,单击 Residuals 按钮 ,绘制剩余曲线,检验拟合效果(也可以在前面的页面中进行检验,以便随时更改函数参数),剩余曲线代表拟合曲线和数据曲线的差。隐藏的未标

出的峰在剩余曲线中表现为峰,如图 9.45 所示,标出隐藏的峰可减少剩余曲线中的峰值。

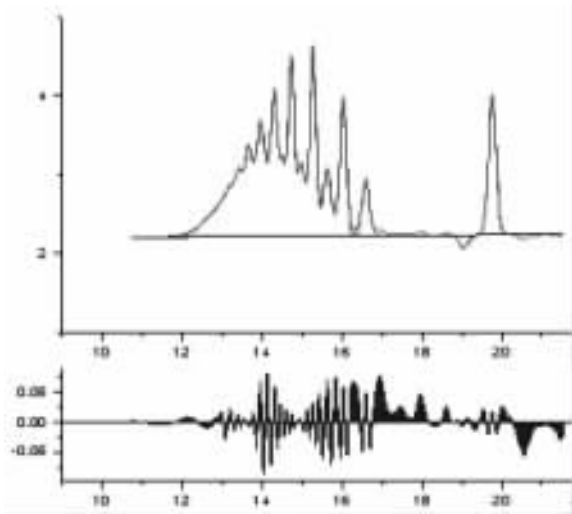


图 9.45 显示剩余曲线

单击 Individual Peaks 按钮,可以查看单个峰的拟合效果,为绿色拟合线,如图 9.46 所示。

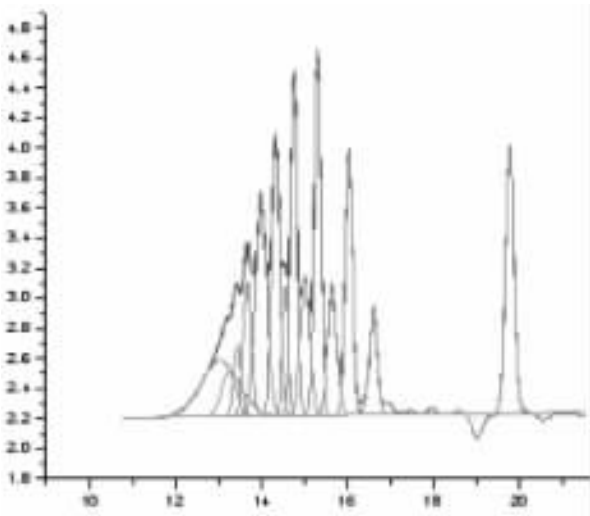


图 9.46 显示单个峰拟合曲线

9.4.11 Results 页面

单击 Next 按钮,进入 Results 页面,如图 9.47 所示。该页面控制拟合结果的输出情况,如输出参数、函数和图形,保存当前图形的峰位和参数等。

在 Peak Characterization Report 组中,单击 Plot 和 Worksheet 按钮后面的 Options 按钮,打开 Peak Characterization Report Field Details 对话框,如图 9.48 所示,可以选择输出的参数。

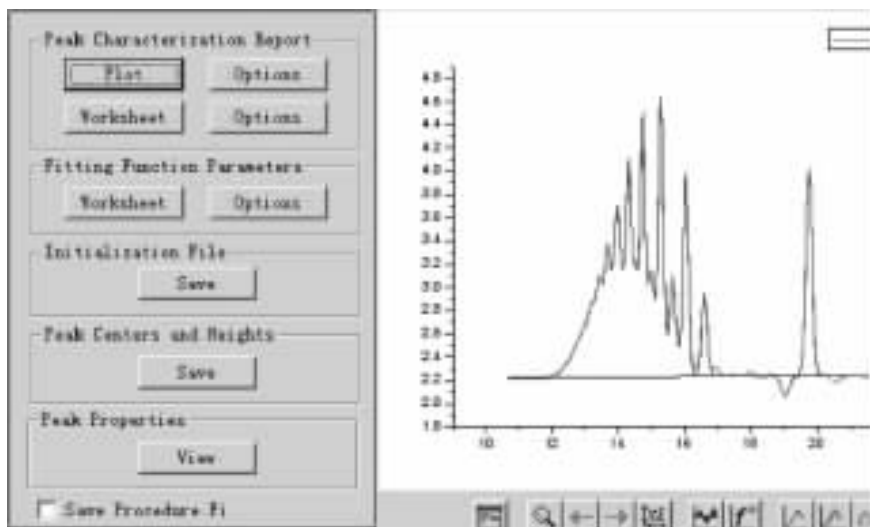


图 9.47 Results 页面

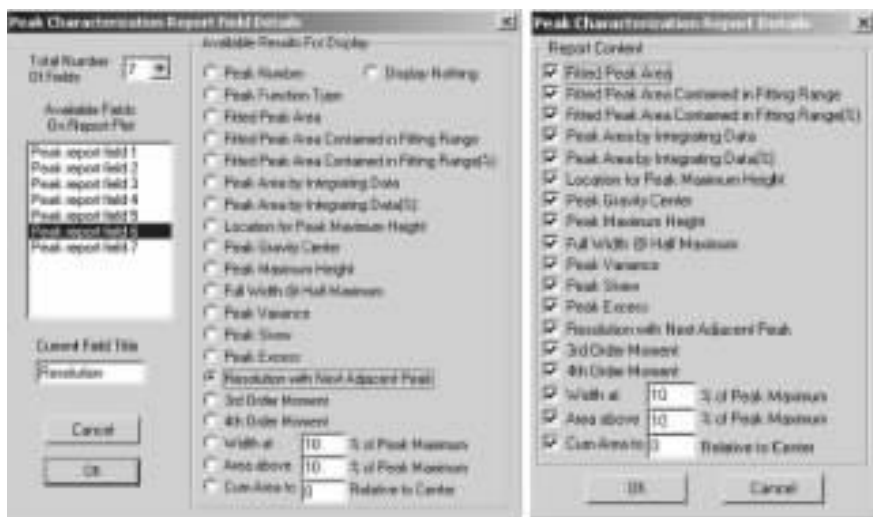


图 9.48 Plot 和 Worksheet 的 Peak Characterization Report Field Details 对话框

● Graph 窗口输出拟合结果

如图 9.47 所示,单击 Peak Characterization Report 组中的 Plot 按钮,生成 Graph 拟合结果,如图 9.49 所示。该页面的输出内容是由图 9.48(左)控制的,在该对话框中可以进行下列设置:

- 首先从 Total Number of Fields 下拉列表中选择要输出的内容数目;
- 在 Available Fields On Report Plot 列表中显示这些数目;
- 选中其中一个,然后从 Available Results For Display 组中选择其输出的具体内容。

如果选中了 7 个 Fields,设置 Field1 ~ Field7 分别显示 Peak Number, Peak Function Type, Fitted Peak Area, Peak Gravity, Full Width @ Half Maximum, Resolution with Next

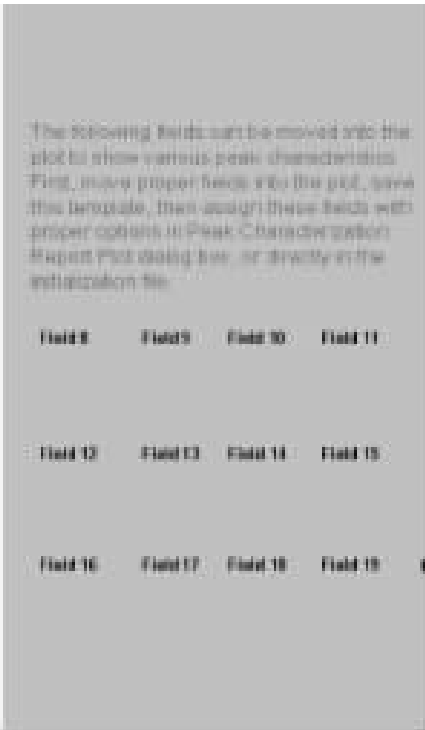
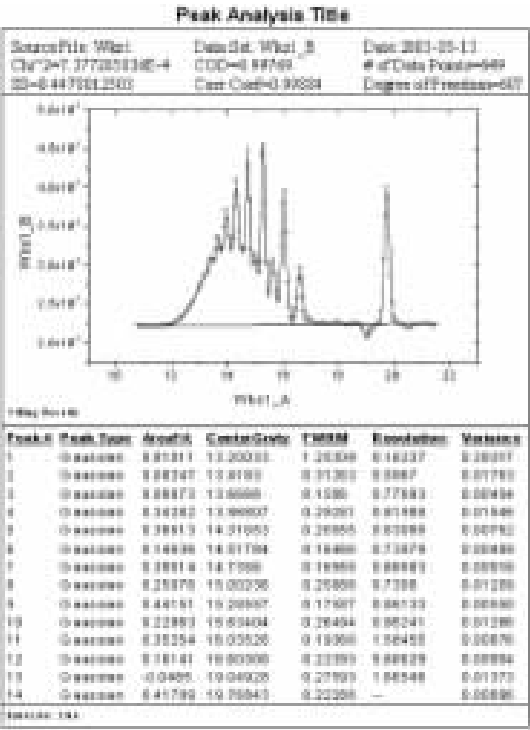


图 9.49 Peak Fitting Graph 结果

Adjacent Peak 和 Peak Variance, 在 Graph 窗口中只显示这 7 列内容, 其他 Field 为空白, 显示在旁边的灰色区域中。

注意: 单击向导图形下面的 Confidence Bands 按钮  和 Prediction Bands 按钮 , 显示可信带和预测带曲线。如果向导图形中显示置信带、预测带和单个峰拟合曲线, 则输出 Graph 图形时会一起输出。

除了输出 Peak Characterization Report Field Details 对话框中指定参数外, Graph 窗口还自动输出下列参数: ① Source File, 数据组的 Worksheet 名称; ② Data Set, 数据组的 Y 列名称; ③ Date, 日期; ④ Chi², reduced chi² 值; ⑤ COD, 系数 R²; ⑥ # of Data Points 拟合过程的数据点; ⑦ SS, 数据曲线和拟合曲线差的平方和; ⑧ Corr Coef, 相关系数; ⑨ Degree of Freedom, 自由度, 数据点数目减去变化的参数数目。

注意: SS 的计算方法 $S(P) = \sum_{i=i_{begin}}^{i_{end}} w_i (f_i - y_i)^2$, Origin 计算使得 S 最小的参数 P。
reduced chi² 的计算方法为 $\chi^2(P) = \frac{S(P)}{n-p}$, n 是拟合过程中的数据点数, p 是变化的参数数目。

● Worksheet 窗口输出拟合峰的特征参数

这些参数也可以在 Worksheet 窗口输出, 如图 9.50 所示。图中的选项由图 9.48(右)的 Peak Characterization Report Field Details 对话框控制, 需要输出哪些参数, 选中即可。然后单击 Peak Characterization Report 组中的 Worksheet 按钮, 将参数输出到 Worksheet 中。

● Worksheet 窗口输出拟合函数参数

	Dataset	Peakname	PeakType	AreaFit(Y)	AreaFit(Y)	AreaFit(Y)	CenterMax	CenterConvY	PeakHeight	FWHM(Y)
1	Wks1_B	1	Gaussian	0.81811	0.82785	13.91126	13.28033	13.28033	0.68734	1.25309
2	Wks1_B	2	Gaussian	0.00247	0.00429	1.87	13.4183	13.4183	0.24781	0.31263
3	Wks1_B	3	Gaussian	0.00873	0.12131	2.68133	13.8668	13.8668	0.52555	0.1588
4	Wks1_B	4	Gaussian	0.34282	0.35854	7.95653	13.96087	13.96087	1.8999	0.29281
5	Wks1_B	5	Gaussian	0.36813	0.442	9.8058	14.31653	14.31653	1.87335	0.29555
6	Wks1_B	6	Gaussian	0.14638	0.19034	4.3558	14.51784	14.51784	0.83584	0.16468
7	Wks1_B	7	Gaussian	0.29514	0.52238	11.58817	14.7268	14.7268	2.18846	0.16955
8	Wks1_B	8	Gaussian	0.25878	0.2748	6.8985	15.08236	15.08236	0.98937	0.25888
9	Wks1_B	9	Gaussian	0.44151	0.57328	12.71847	15.28557	15.28557	2.35844	0.17587
10	Wks1_B	10	Gaussian	0.22863	0.24831	5.58874	15.63488	15.63488	0.8187	0.26494

图 9.50 在 Worksheet 窗口输出拟合峰的特征参数

单击 Fitting Function Parameters 组中的 Options 按钮,打开 Fitting Function Parameter Report Details 对话框,如图 9.51(左)所示。该对话框除了选择输出拟合参数值外,还可选择参数值的标准误差、参数的依赖性和参数的可信带。

单击 Fitting Function Parameters 组中的 Worksheet 按钮,将拟合函数的参数输出到 Worksheet,如图 9.51(右)所示。

	Function	Parameter	Value	Error	Depend	Correlat
1	Line	A 0	2.17223	0	0	0
2		B	0.00229	0	0	0
3	Gaussian	xc 1	13.28033	0.09129	0.9578	0.17886
4		A 1	0.81811	0.13113	0.98865	0.257
5		w 1	1.25309	0.09133	0.99113	0.17901
6	Gaussian	xc 2	13.4183	0.02346	0.94553	0.84699
7		A 2	0.00247	0.03635	0.98607	0.87517
8		w 2	0.31263	0.08195	0.97111	0.12142

图 9.51 拟合曲线参数输出设置及输出结果

● 峰相互作用特征

在 Results 页面,除了输出拟合结果外,还可计算特定峰和其他峰的重合特征。

单击 Peak Properties 组中的 View 按钮,打开 Peak Characteristics 对话框,如图 9.52 所示。

Peak Characteristics

Peak 12: Gaussian Prev Peak Next Peak Compute

Operations

Cumulative area
Area between x1 and x2
Area above a given width
Area above a given height
Area above P% of maximum
X1 & X2 at given height

W = 11 Close

The area above a horizontal line whose end on the peak are W apart.

计算结果

The area above width 11.00000000:
0.1173898770

The area is between 11.10387999 and 22.10387999:
0.1173898770

图 9.52 Peak Characteristics 对话框及其计算结果

单击 Prev Peak 或 Next Peak 按钮,选择合适的峰,从 Operations 列表中选择要计算峰的选项,在下面的文本框中显示该选项的说明。如果必要,输入参数,单击 Compute 按钮进行计算,Origin 将计算结果输出到下面的文本框中。

在该窗口可计算的关于特定拟合峰的参数如下:

- Cumulative area, 计算 $-\infty \sim X$ 的累计面积, X 是相对于峰中心的量;
- Area between X_1 and X_2 , 计算 $X_1 \sim X_2$ 的累计面积;
- Area above a given width, 给定宽度 W , W 为水平线且两端在拟合曲线上, 计算峰与该线之间的面积;
- Area above a given height, 计算水平线 H 以上部分的积分面积;
- Area above $P\%$ of maximum, 计算峰高度的 $P\%$ 以上部分面积;
- X_1 and X_2 at given height, 给出高度为 H 的水平线与峰交点的 X 值;
- X_1 and X_2 at $P\%$ of maximum, 给出峰高度 $P\%$ 处的水平线与峰交点的两个 X 值;
- Peak resolution, 计算两个峰之间的分辨率;
- Peak 0-4th order moments, 计算 0~4 阶峰矩;
- Peak inflection points, 计算峰的左右拐点;
- Peak maximum point, 计算峰的最大值, 可能不在峰的中心位置;
- Overlap area, 计算两峰之间的重叠面积;
- Dataset area between R_1 and R_2 , 计算数据组和基线之间的面积, 只计算行 R_1 和 R_2 之间部分;
- Dataset area between X_1 and X_2 , 计算数据组和基线之间的面积, 只计算 X_1 和 X_2 之间部分。

● 保存峰位和初始化参数

如果要用 Peak Fitting 向导分析类似数据组的话, 可以将当前峰位保存为 ASCII 文件。单击 Peak Centers and Heights 组中的 Save 按钮, 打开 Save Peak Centers and Heights 对话框进行保存。

要保存峰和基线等参数设置的话, 单击 Initialization File 组中的 Save 按钮, 保存为 *.ini 文件, 保存下列参数:

- 峰和基线的特征, 包括峰的数目、拟合峰的函数、基线函数、初始化参数和共享参数等;
- 结果输出设置, 包括图 9.48 和图 9.51 中设置的参数。

保存后的文件可单击 Peak Fitting 向导中的 Read 按钮读取。

最后单击 Finish 按钮退出 Peak Fitting 向导。

9.4.12 个性化 Peak Fitting 向导

在使用 Peak Fitting 向导过程中会发现: 一些向导页面是用不着的, 如 Precondition Data 页面, 而另一些页面也许常用, 如 Baseline Points 页面。对于不用的页面可以隐藏起来, 以简化使用过程。

打开 Peak Fitting 向导, 如图 9.31 所示, 选择右击鼠标弹出的快捷菜单命令 View Model Full, 在左边向导指示中显示图标, 如图 9.53(a)所示。如果想隐藏哪个页面, 就将相应图标中

的“√”去掉,那么在执行拟合过程中,该页面不起作用。但是 Peak Edit Control, Fit 和 Results 页面是不能隐藏的。

然后保存个性化设置,按下述方法进行操作。

在 Results 页面中选中 Save Procedure File 复选框(参考图 9.47),重新选择快捷菜单命令 View Mode| Normal,向导指示更新显示,如图 9.53(b)所示。

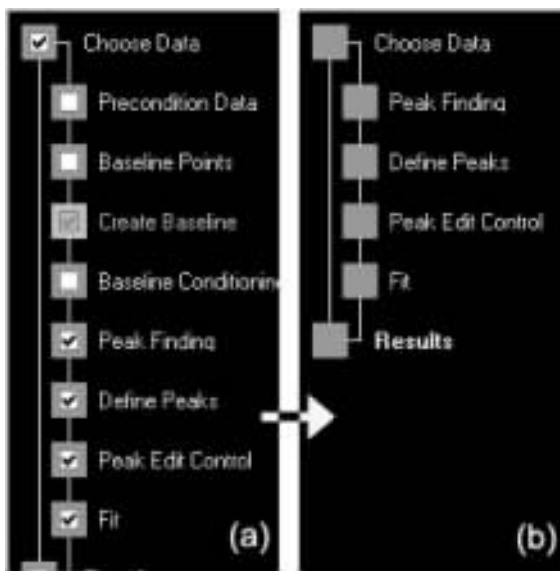


图 9.53 个性化 Peak Fitting 向导

单击 Finish 按钮,打开 Button Settings 对话框,如图 9.54 所示。已经自动选中了左上角第一个按钮,在 Tool Tip 文本框中输入 My PFM,在 Status Bar 文本框中输入 Find Peaks,单击 OK 按钮,关闭对话框和 Peak Fitting 向导,就会在 Origin 界面中出现一个新的工具条 PFMWiz,带有一个 My PFM 按钮。单击该按钮,就进入自己定制的 Peak Fitting 向导页面。



图 9.54 Button Settings 对话框

第 10 章 数据分析

通过前面章节的介绍,我们已经能够将数据导入 Worksheet 和 Matrix,并根据数据绘制各种曲线和图形,进行必要的管理、变换及拟合;不过要进一步分析数据,这些是远远不够的,我们可以使用 Origin 提供的数据分析功能(Data Analysis)。

Origin 的数据分析功能强大,操作简单,易于掌握,实际上就是对 Worksheet 和 Graph 窗口的 Analysis 菜单命令的操作。对数据进行分析,首先选择对象,数据分析的对象可以是处于激活状态的 Worksheet 中的行和列,也可以是图形中的曲线。在 Worksheet 中,单击要选择的行或列标题栏,即可将相应的行或列激活,或用鼠标选择行或列中的一部分;在 Graph 窗口中,首先选择相应的图层,然后选择菜单命令 Data,在其下拉菜单底部的列表中显示该层的全部曲线,单击选中要分析的曲线。

在数据分析过程中,许多命令或工具会改变 Worksheet 的数列,有的命令会在 Worksheet 中添加新列,如相减(Subtract)和平滑(Smoothing)。

本章的主要内容:

- 数学运算;
- 统计;
- 快速傅里叶变换;
- 数据的平滑和过滤;
- 基线和峰值分析。

个别分析过程对数据有特殊要求,除了指出数据的出处外,本章使用的数据大部分是某样品不同深度的 XPS 谱线,如图 10.1 所示。在下文的讨论中主要对这组数据进行分析运算。

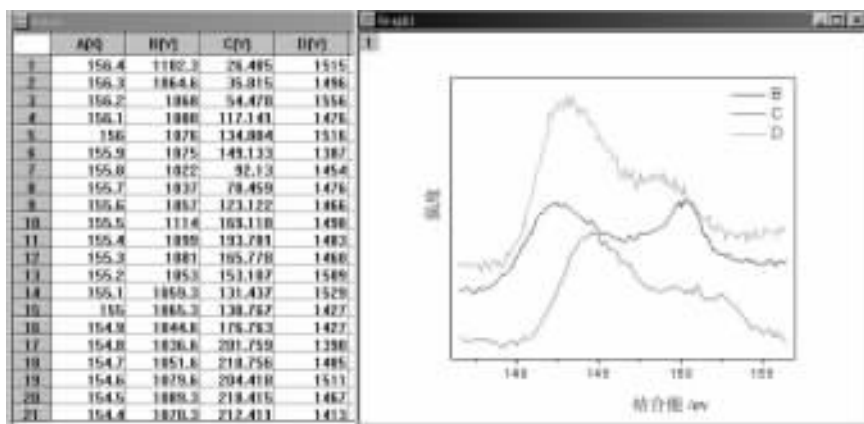


图 10.1 三组实验结果

10.1 数学运算

数学运算是 Origin 的基本功能,包括基本算术运算、移动、平均、插值、微分和积分等。

10.1.1 算术运算

算术运算(Math Operations)是执行 $Y=Y1(+ - \times \div \wedge)Y2$ 的运算,其中 Y 和 $Y1$ 是数列, $Y2$ 可以是数列,也可以是数字,二者之间进行算术四则运算,操作步骤如下:

- 激活 Graph 窗口,选择 Analysis| Simple Math,打开 Math on/between Data Set 对话框,如图 10.2 所示;

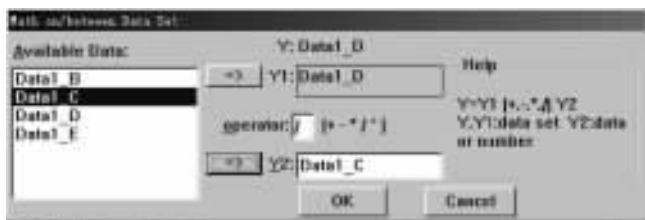


图 10.2 Math on/between Data Set 对话框

- 从 Available Data 列表中选择要运算的数据组,单击上面的 **=>** 按钮,将其设置为 $Y1$,默认的设置 Graph 窗口中选中的数据组;
- 在 $Y2$ 文本框中键入数字或使用 **=>** 按钮输入列;
- 在 operator 文本框中键入代数符号,单击 OK 按钮。

单击 OK 按钮后,数据 Data1_D 中的数据除以 Data1_C 中相应的数据,将结果放在 Data1_D 中并制图,如图 10.3 所示。

如果 $Y2$ 和 $Y1$ 对应的 X 点不对应的话,采用内插法或外插法来确定 $Y2$ 值。

如果选择 Analysis| Subtract| Reference Data,也会打开同样的对话框,在 Operator 文本框中直接显示减号,这样就可以减去参考列了。

注意:如果激活的是 Worksheet 窗口,选择 Column| Set Column Values 进行运算,参考 3.2.10 小节。

算术运算会更改 Worksheet 中的数据,在运算前应该将 X 列按照顺序排列。

除了使用 Math on/between Data Set 对话框进行运算外,Origin 还提供了 LabTalk 来执行运算操作,可以是行行对应的运算,也可以使用线性插值法计算。

如在 Script 窗口中键入 $\text{data1_C}=\text{data1_A}^2+\text{data1_B}$,然后按 Enter 键,data1_A 中的数据平方,加上 data1_B 中相应的数据,将结果输出到 data1_C,如图 10.4 所示。

注意:如果等号前的数据组在等号后出现,如 $\text{data1_A}=\text{data1_A}^2$,则用运算结果代替原来的数据。

这种方法只考虑数据所在的行,与是自变量还是因变量没关系。

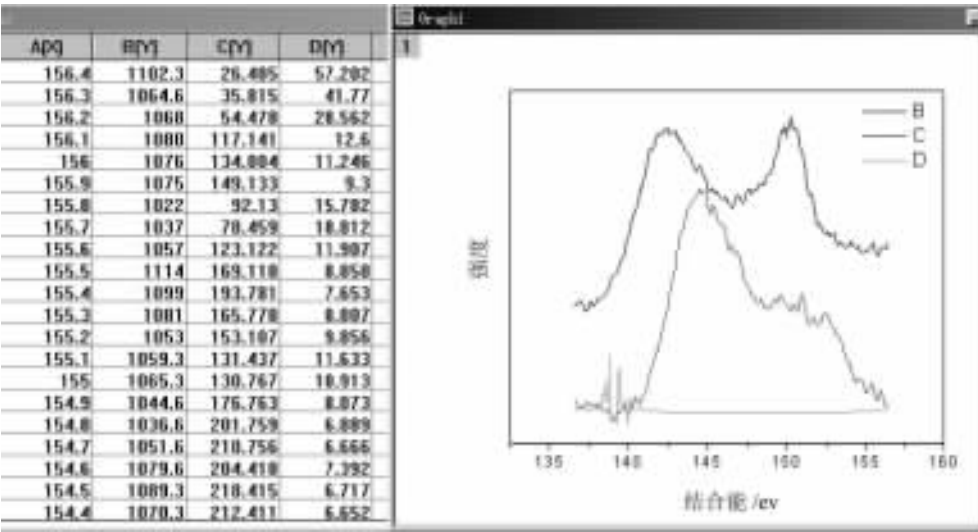


图 10.3 执行 Data1_D=Data1_D/ Data1_C 运算结果

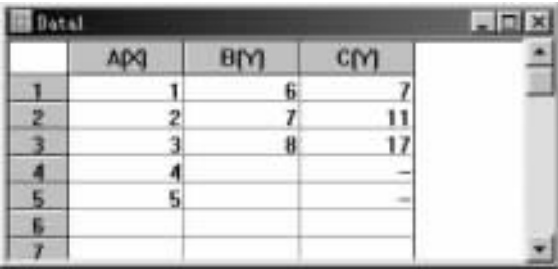


图 10.4 使用 LabTalk 执行运算操作

10.1.2 减去参考直线

减去参考直线就是用数据曲线值减去一条自定义直线相应点的值,运算结束后,Origin 更新工作簿中该数列的值和 Graph 窗口中的图形,操作步骤如下:

- 激活 Graph 窗口,选中数据曲线 D;
- 选择 Analysis| Subtract| Straight Line,Origin 自动启动 Screen Reader 和 Data Display 工具,光标变为 $\oplus$ 形状;
- 借助于 Data Display 工具,用鼠标在 Graph 窗口中双击确定两点,这两点确定一条直线,如图 10.5 所示。

这样,Worksheet 中 D 列的数值变为 D 列的值减去直线对应点的值,同时 Graph 窗口中 D 曲线也相应地发生变化,如图 10.5 所示。

10.1.3 垂直或水平移动

垂直移动是选定的数据曲线沿 Y 轴方向竖直移动,操作步骤如下:

- 选中 Graph 窗口中的数据曲线 D;

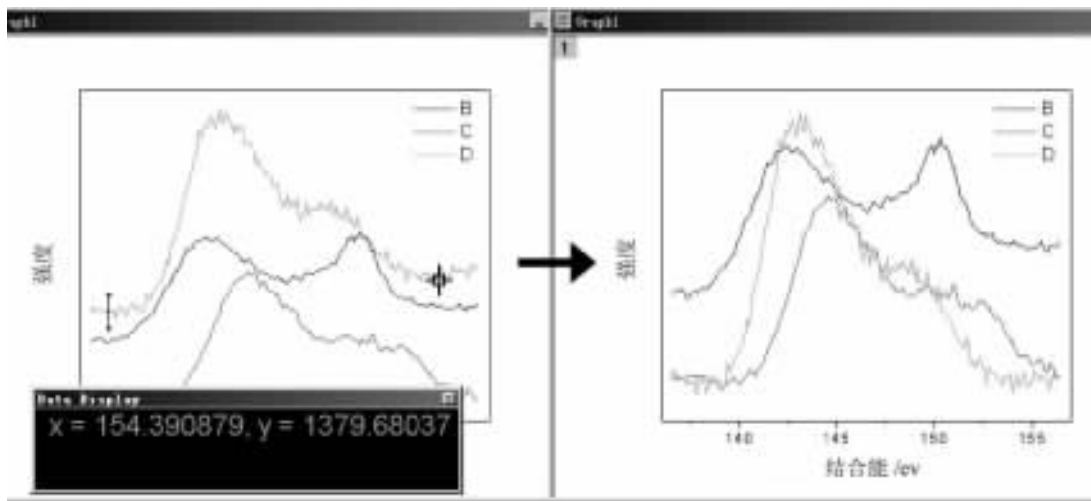


图 10.5 减去参考直线前后的 Graph 图形

- 选择 Analysis| Translate| Vertical, Origin 启动 Screen Reader 和 Data Display 工具, 光标变为  形状;
- 在数据曲线 D 上选一个数据点双击, 或选中数据点后按 Enter 键, 将其设置为起点;
- 这时光标变为 , 在 Graph 窗口的合适位置双击, 将其设置为终点。

这时, Origin 计算终点和起点之间的纵坐标差, 然后用 Data1_D 数据减去差值, 作为 Data1_D 数值, 同时 Graph 窗口中的曲线 D 也做相应的更新, 如图 10.6 所示。

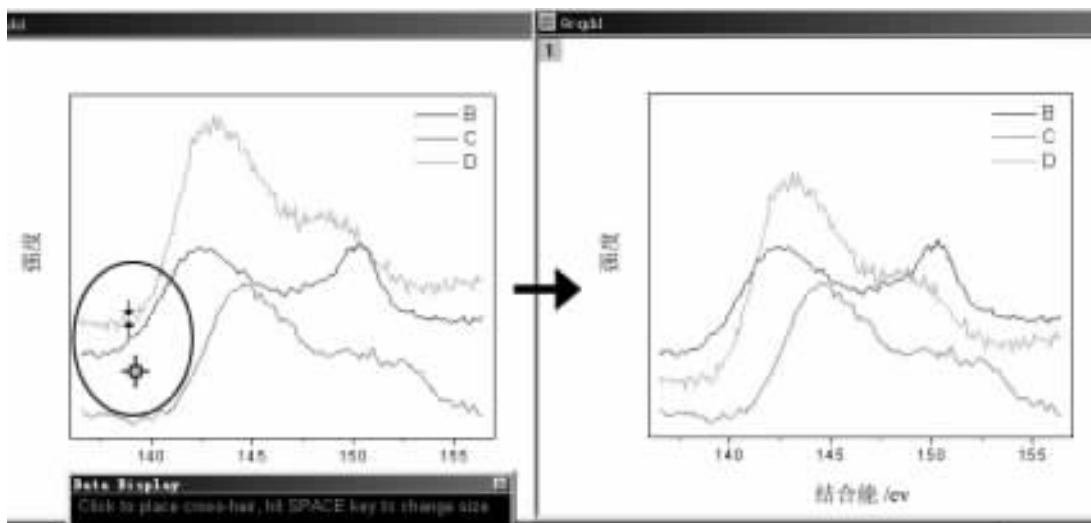


图 10.6 曲线 D 垂直移动示意图

此操作相当于 $\text{Data1_D} = \text{Data1_D} - \text{Constant}$, 其中 Constant 为常数。

水平移动的方法和效果与垂直移动类似, 区别仅仅在于计算横坐标的差值, 改变曲线对应 Worksheet 中横坐标的值, 曲线在水平方向上移动, 如果几条曲线共有一组 X 值, 则它们一起移动。

10.1.4 多条曲线平均

多条曲线的平均是对每一个 X 值,计算当前激活的图层内的所有数据曲线 Y 的平均值。选择 Analysis| Average Multiple Curves,Origin 平均图层内的所有 Y 值,将结果保存在名称为 Average1_Average of Graph1 Layer1 的 Worksheet 窗口中,默认为隐藏,并在当前的激活层中绘制出平均值曲线,如图 10.7 所示。

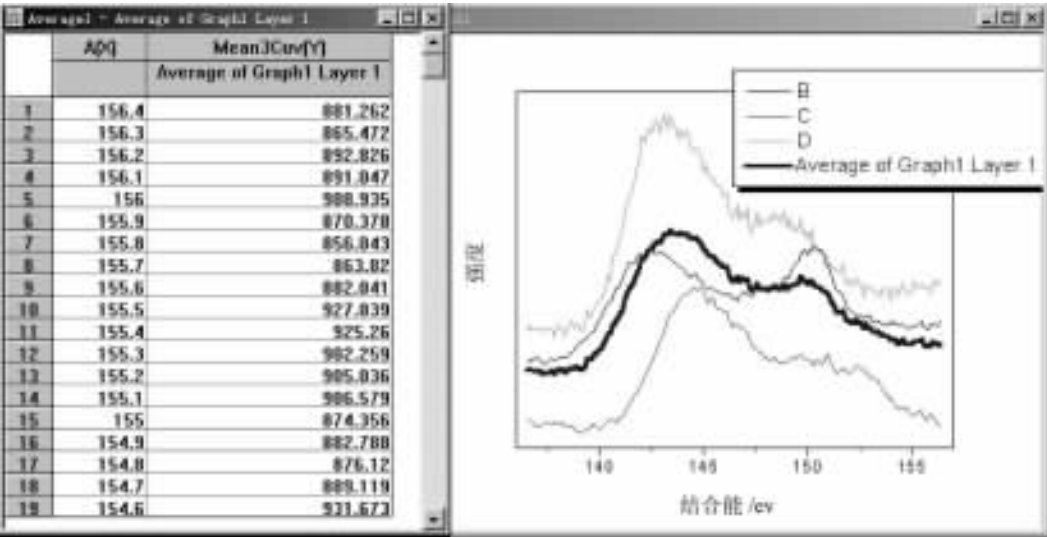


图 10.7 多条曲线平均

如果几组曲线对应的 X 值不同的话,Origin 采用插值法确定 Y 值。

10.1.5 插 值

插值是指在当前激活的数据曲线的数据点之间利用某种算法估算出新的数据点。

激活 Graph 窗口,选择 Analysis| Interpolate/Extrapolate,打开 Make Interpolated Curve from Data1_D 对话框,如图 10.8 所示。

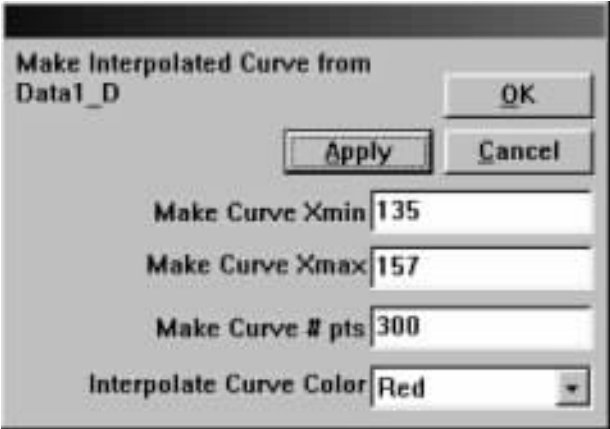


图 10.8 插值选项对话框

- 分别在 Make Curve Xmin 和 Make Curve Xmax 文本框中键入插值运算时 X 的最小值和最大值,默认值为当前数据曲线的最小和最大值。如果选择的 X 值可以超出曲线的范围,这时,Origin 进行外插运算。
- 在 Make Curve # pts 文本框中输入插值曲线的点数,在 Interpolate Curve Color 下拉列表中选择插值曲线的颜色。
- 单击 Apply 按钮,可以预览当前设置的插值曲线,但单击 OK 按钮后才最终输出插值结果。

插值运算结束后,将结果输出到 InterExtrap1_Interpolation of Data1_D 的 Worksheet 中,默认为隐藏,并在当前的激活层中绘制出插值曲线,如图 10.9 所示。

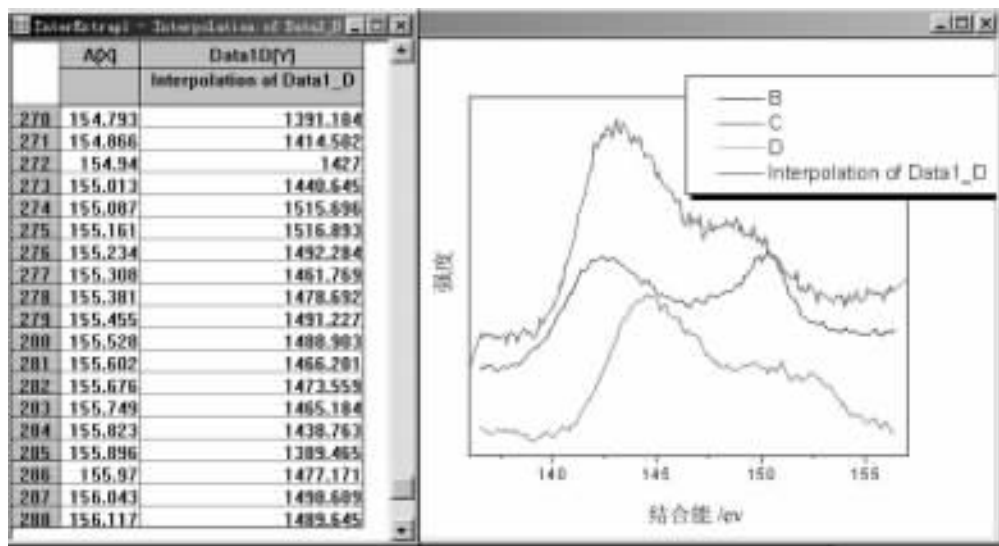


图 10.9 插值数据及其曲线

10.1.6 微分

选中 Graph 窗口中的曲线 D,选择 Analysis| Calculus| Differentiate,Origin 计算出该曲线各点的导数值,将导数值保存在名称为 Derivative1-Derivative of Data1_D 的 Worksheet 中,默认为隐藏,并生成一个名称为 DerivPlot1-Derivative of Data1_D 的 Graph 窗口,根据 DERIV.OTP 模板绘制出微分曲线,如图 10.10 所示。

微分值的计算方法为: $\frac{1}{2} \times \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \right)$,该方法只能计算一阶微分。

要计算二阶微分的话,一个简单的办法是激活一阶微分窗口,再进行一次微分,不过 Origin 提供了直接二次微分的方法。

选择 Graph 窗口中的曲线 D,选择 Analysis| Calculus| Diff/Smooth,打开 Smoothing 对话框,如图 10.11 所示。在 Polynomial Order 文本框中指定多项式的阶(1~9),在 Points to the Left 和 Points to the Right 文本框中选择平滑的点数,然后单击 OK 按钮。

如果指定 Polynomial Order 为 1,直接微分制图;如果大于 2,则打开 Derivatives on

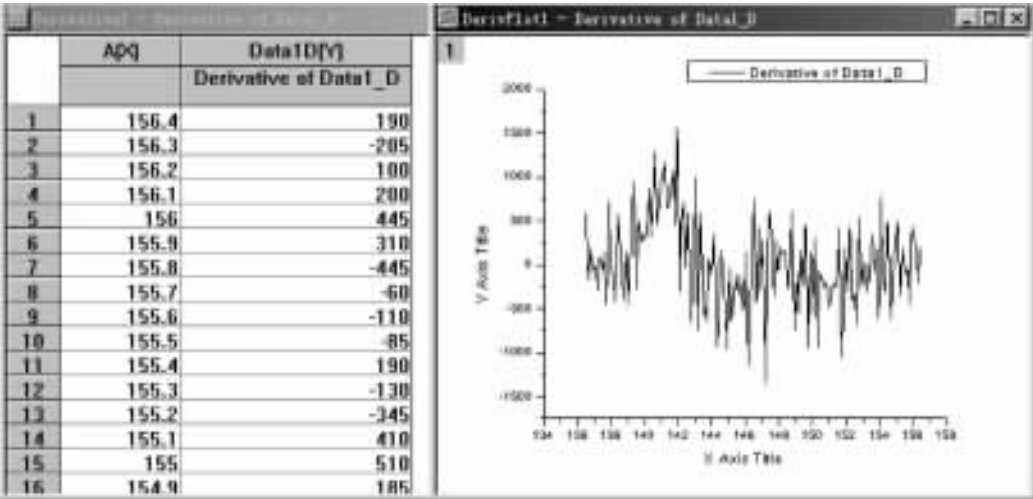


图 10.10 数据组 Data1_D 微分数据及其导数曲线

Data1_D对话框,如图 10.11 所示,在指定 Order of Derivative 中指定微分的阶(1~2),单击 OK 按钮,根据 DERIV.OTP 模板绘制出微分曲线,如图 10.12 所示的选择一阶(a)和二阶(b)的微分曲线。

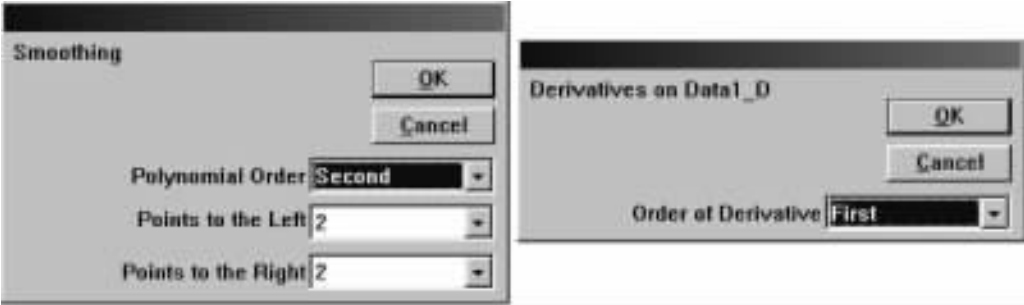


图 10.11 Smoothing 和 Derivatives on Data1_D 对话框

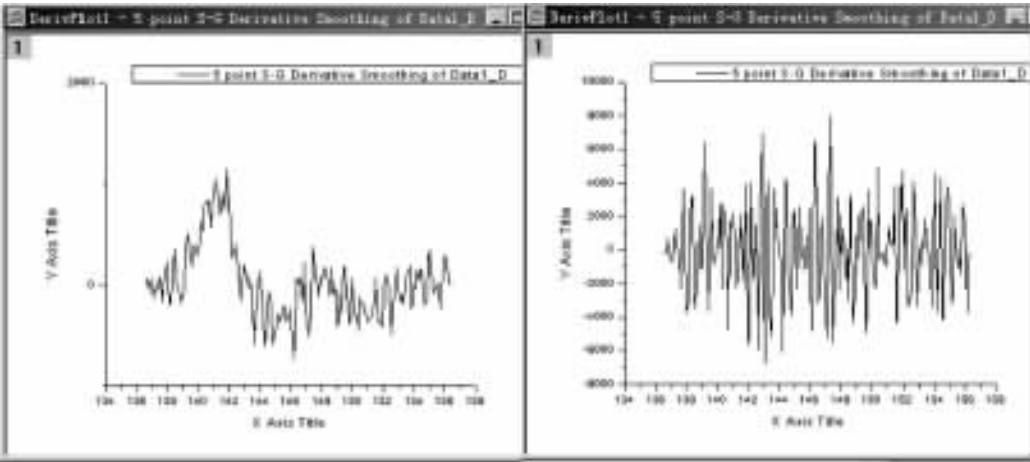


图 10.12 数据组 Data1_D 的 Savitzky-Golay Smoothing 一阶和二阶微分

Diff/Smooth 命令采用 Savitzky-Golay 平滑理论运算每点的多项式收敛值,因而提供了足够信息来计算数据组的微分,精确到指定的多项式阶。

10.1.7 积 分

选择 Graph 窗口中的曲线 D,选择 Analysis|Calculus|Integrate,用梯形法则计算曲线到基线($Y=0$)的积分值,并弹出 Result Log 窗口,给出积分计算结果,如图 10.13 所示,其中:

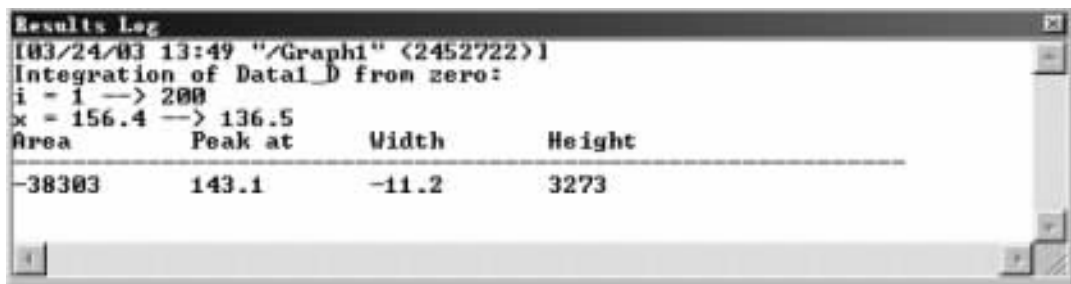


图 10.13 积分结果

- $i=1 \rightarrow 200$ 表示曲线是从第 1 点到第 200 点积分的;
- $x=156.4 \rightarrow 136.5$ 表示曲线的 X 值为 156.4~136.5 积分的;
- $\text{Area}=-38\ 303$ 表示曲线和 X 轴之间区域的面积,即积分值为 -38 303;
- $\text{Peak at}=143.1$ 表示曲线峰值的位置,即在 $X=143.1$ 处;
- $\text{Width}=-11.2$ 表示曲线峰的宽度,为 -11.2;
- $\text{Height}=3\ 273$ 表示曲线峰值,即曲线峰处 Y 的坐标值为 3 273。

注意:通常情况下,改变有限积分方向会改变积分值的符号。如在区间 $[a, b]$ 上积分时,是假定 $a < b$ 的,如果 $a > b$ 的话,由于 X 组数值是降序排列的,该积分值为负。

Origin 支持 3D 积分,计算 Matrix 表面图下面的体积。激活 Matrix 窗口,选择 Matrix|Integrate,进行二重积分,计算表面图下面的体积。

积分后的数据保存在 _integ_area 数据组中,这是一个临时文件,保存 Project 或关闭 Origin 时,临时文件就被删除了。要对其进行操作的话,必须复制到非临时文件中,我们复制到 Data1_E 中,在 Script 窗口中键入 copy-x _integ_area Data1_E,然后按 Enter 键,即可完成复制;若要对其编辑,键入 edit Data1_E,然后按 Enter 键,即可激活数据 Data1_E 进行编辑。

基于基线的积分,参考 10.5.2 小节。

10.2 统 计

在科学实验和调查研究时,数据统计是必不可少的手段之一。

Origin 提供了丰富的统计功能,包括平均值(Mean)、标准差(Standard Deviation, SD)、平均值的标准误差(Standard Error of the Mean, SE)、最小值(Minimum)、最大值(Maximum)、百分点(Percentiles)、直方图(Histogram)、t 检验(t-test for One or Two Populations)、方差分析(Analysis of Variance, ANVOA)和回归分析(Regression Analysis)等。

10.2.1 描述性统计

描述性统计(Descriptive Statistics)根据数据组在 Worksheet 中输出统计结果,包括列统计、行统计、频数统计和正态统计。

● 列统计/行统计

选中 Worksheet 的某数列或其中一部分,这里我们同时选中数据 Data1_C 和 Data1_D,选择 Statistics| Descriptive Statistics| Statistics on Columns 或单击 Worksheet Data 工具条上的 Statistics on Column(s)按钮,即可实现对该列的统计,该命令打开一个新 Worksheet 窗口,给出统计结果,如图 10.14 所示。

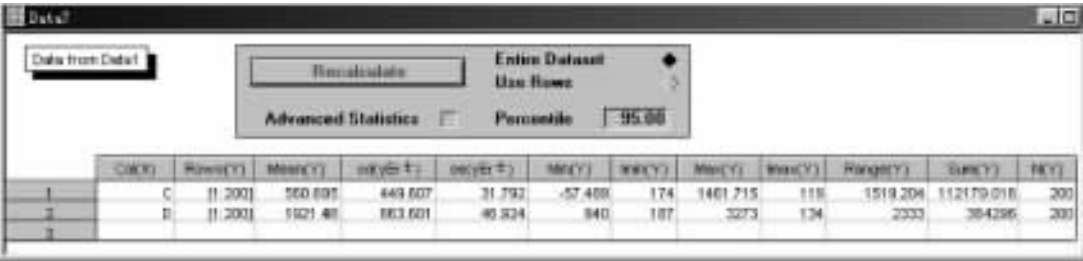


图 10.14 Data1_C 和 Data1_D 列的统计结果

对于选中的每列,统计的数据包括平均值(Mean)、标准差(SD)、平均值的标准误差(SE)、最小值(Min)、最大值(Max)、值域(Range)、总和(Sum)和点数(N)等。

标准差为 $SD = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$, 其中 n 是样本的大小, $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 是平均值。

平均值的标准误差为 $SE = \frac{SD}{\sqrt{n}}$ 。

在统计结果窗口上方有一个 Recalculate 按钮,如果原数据有变化,则单击此命令按钮,可重新计算各项统计结果。如果选中 Advanced Statistics 复选框再单击 Recalculate 命令按钮,那么重新计算后生成的结果中增加中位数(Median)、第 25 和第 75 百分位数(高和低四分位数,P25 和 P75)、自定义百分位数(用户在 Percentile 文本框中指定)、四分位数间距(Inter Quartile Range)、平均值的 95%置信区间(95% confidence limits on the mean)和 Kurtosis 值等。

本例选择的是整个列,在窗口中自动选中了 Entire Dataset 复选框;如果选择的是列的一部分,则自动选中 Use Rows 复选框。

注意:如果列为无关列或文本标签,则不能进行统计操作,参看 3.4.1 小节。

Median 中位数指的是将数据排序后处于序列中间的数;如果数据组中数据的个数为偶数,则指的是靠近中间的两个数的平均数。

行统计和列统计的方法类似,这里就不再介绍了。

● 频数统计

频数统计(Frequency Count)是统计一个数列(或其中的一部分)中数据出现的频数。选中数据组 Data1_D,选择 Statistics| Descriptive Statistics| Frequency Count 或从右击鼠标弹

出的快捷菜单中选择 Frequency Count 命令,打开 Count 对话框,如图 10.15 所示。在该对话框指定最大值、最小值和步长(默认情况下,Origin 会根据选择的数据组自动设置),Origin 根据这些信息,将数据范围分成相等的数据区间,统计各个数据区间中的点数,如果某个数据点恰好在数据区间的边界上,则统计到较高的数据区间中。

单击 OK 按钮后,Origin 生成一个名称为 Count1 的 Worksheet 窗口,包含 4 列,第 1 列(BinCtr)给出数据区间的中间值,第 2 列(Count)为数据区间中的计数,第 3 列(BinEnd)为数据区间的上边界,最后一列(Sum)为累计计数。同时在 Result Log 窗口中显示平均值(Mean)、标准差(SD)、累计数据点数(Size)和中位数(Median),如图 10.15 所示。

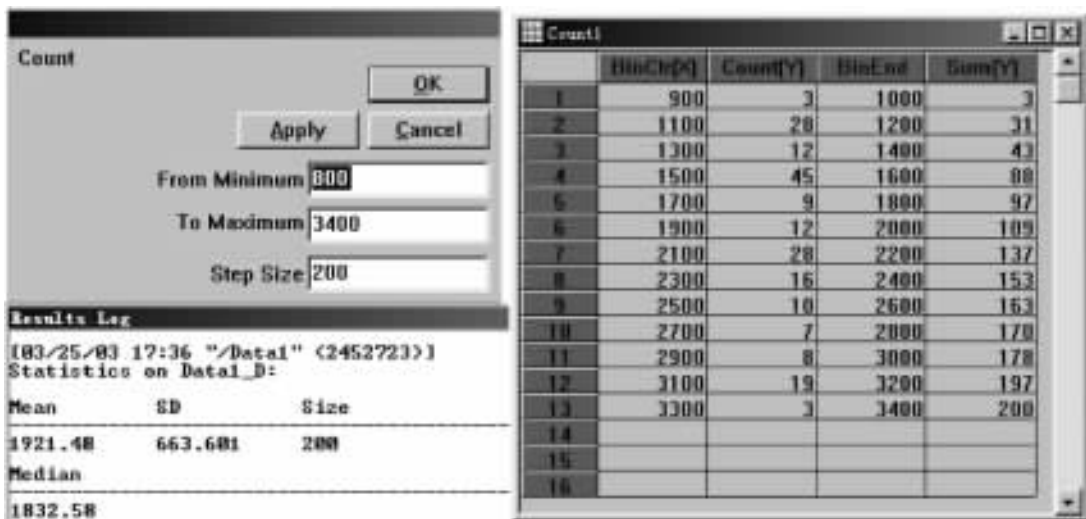


图 10.15 频数统计对话框及其统计结果

● 正态统计

正态统计是用 Shapiro-Wilk 正态检验法检验一组数据是否符合正态分布,正态统计在统计学中是非常重要的。

选中数据组 Data1_B, Data1_C 和 Data1_D,选择 Statistics| Descriptive Statistics| Normality Test (Shapiro-Wilk),Origin 执行正态统计。计算每组数据的名称、个体总数、W 统计、P 值(或 Observed Significance,观察的显著性值)和在某一显著性水平上是否是正态分布,如图 10.16 所示。

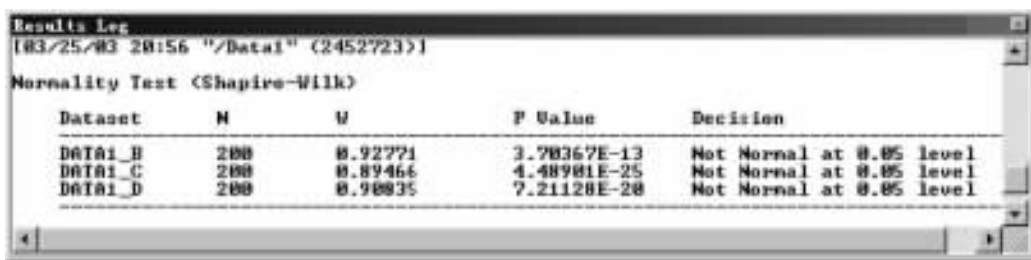


图 10.16 三组数据的正态统计结果

W 统计定义为 $W = \frac{(\sum_{i=1}^n A_i X_i)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$, 其中的 $\bar{X}$ 为平均值, A_i 为权重因子。

显著性水平的默认值是 0. 05, 要指定其他显著性水平, 如 0. 1, 在 Script 窗口中键入 ONormTestSL=10, 然后按 Enter 键, 设置的数值为 0~100, 则将显著性水平设置为 0. 1。

10. 2. 2 方框图

方框图(Box Chart)是一种重要的统计图, 我们将结合实例介绍它的绘制及特点。

选中 Data1 中的 B, C 和 D 列, 选择 Plot| Statistical Graphs| Box Chart 或单击 2D Graph Extended 工具条上的 Box Chart 按钮 , Origin 绘制方框图, 并创建名称为 Bin1-Bins for Data1 的 Worksheet 保存数据, 默认为隐藏。

在 Graph 图形中右击鼠标, 在快捷菜单中选择命令 Go to Bin Worksheet, 激活区间数据 Worksheet, 如图 10. 17 所示, 在表中给出了区间中心 X 值(BinX)、计数值(Counts)、累积和(Sum)和累积百分数(Perc)。

Bin1 - Bins for Data1										
	BinX[X]	Counts1[Y]	Sum1[Y]	Perc1[Y]	Counts2[Y]	Sum2[Y]	Perc2[Y]	Counts3[Y]	Sum3[Y]	Perc3[Y]
1	-250	0	0	0	6	6	3	0	0	0
2	250	0	0	0	81	87	43.5	0	0	0
3	750	32	32	16	73	160	80	3	3	1.5
4	1250	102	134	67	40	200	100	71	74	37
5	1750	66	200	100	0	200	100	35	109	54.5
6	2250	0	200	100	0	200	100	40	157	78.5
7	2750	0	200	100	0	200	100	21	178	89
8	3250	0	200	100	0	200	100	22	200	100
9										

图 10. 17 数据区间 Worksheet

方框图中每个方框代表 Worksheet 中的一个 Y 数列, 而图中 X 轴的标签为 Worksheet 中相应的数列标签。默认情况下, 方框由第 25 和 75 百分位数确定, 方框外的须条由第 5 和 95 百分位数决定, 如图 10. 18(a)所示。

由于该类图形是一种新的模板图形, 在这里简单介绍其个性化方法。

● 个性化方框属性

默认情况下, 方框图只显示方框, 形状为矩形, 这些都可以通过 Plot Details 对话框进行设置。

- 双击方框图或右击鼠标, 选择快捷命令 Plot Details, 打开 Plot Details 对话框, 在左边的窗口中选择数据图标, 然后单击 Box 标签, 如图 10. 19 所示。
- 在 Type 下拉列表中选择图形类型 Box[Left]+Data[Right], 方框显示在左, 数据显 示在右, 同时对话框还显示 Symbol 和 Data 两个选项卡。
- Box 组和 Whisker 组控制方框和须条的显示范围, Box 默认的百分数值为 25% 和 75%, Whisker 的默认值范围是 5~95。
- Outlier, Diamond Box, Box Labels 和 Whisker Labels 复选框供用户选择。选中 Diamond Box, 方框改为钻石形状; 选中 Box Labels, 在方框上加标签, 同时在 Plot Details 对话框中还显示 Label 选项卡。

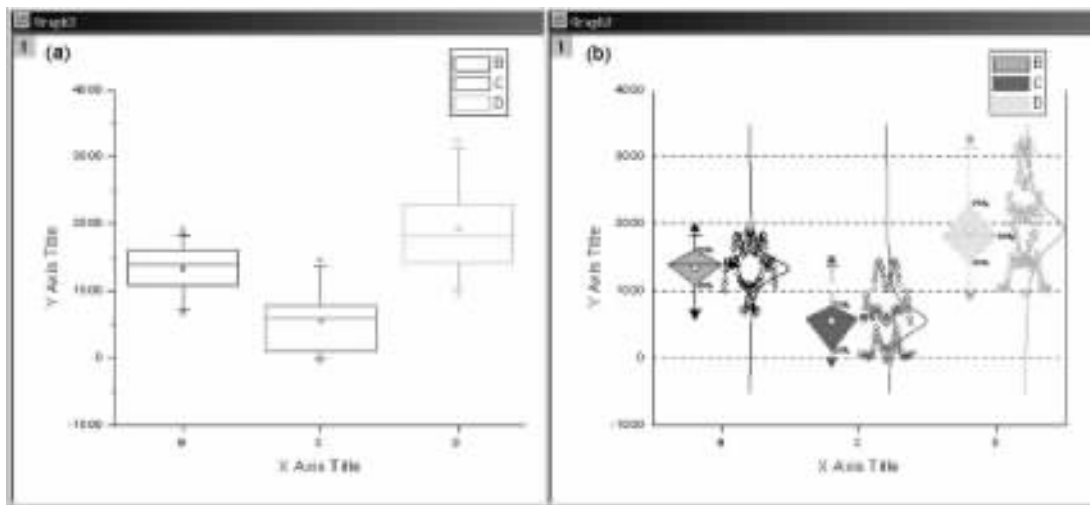


图 10.18 个性化前后的方框图

● 个性化数据点

默认情况下, Binned Data 曲线类型为 None, 只显示数据点。

- 在 Type 下拉列表中有三个数据点类型选项: Dots, Bars 和 Dots+Bars, 这里选择 Dots, 如图 10.20 所示。如果选择 Bars, 则激活 Single Block Bar Plot 复选框, 选中该复选框, 删除区间方框之间的线条。
- 选中 Snap Points to Bin 复选框, 将分区数据点排列在同一水平线上。
- Automatic Binning 复选框用来设置数据分区属性, 包括区间大小、开始值和结尾值, 选中 Automatic Binning 复选框, Origin 根据数据自动分区。
- 从 Curve 组的 Type 下拉列表中选择曲线类型为 Lorentz, Scale 下拉列表设置 X 方向的曲线宽度, 选择 150。
- Bins Alignment 组设置曲线的位置。

这些设置都可以在 Preview 框内预览。

● 其他属性设置



图 10.19 Plot Details 对话框的 Box 选项卡



图 10.20 Plot Details 对话框的 Data 选项卡

- 在 Percentile 选项卡中,设置不同百分比位置的符号形状及其大小颜色等属性。
- 在 Group 选项卡中,选中 Border Type,不仅各方框的颜色不同,而且边框的类型也不同。
- 在 Line 选项卡中,将颜色设置为 Automatic,则分区数据点、数据线的颜色和相应的方框颜色相同。
- Pattern 选项卡中,将 Border 组内的颜色设置为 Black,把 Fill 组内的 Fill 设置为 Cyan,则出现内部填充色,按照次序变化,B,C 和 D 分别为 Cyan 和 Magenta 和 Yellow。
- 在 Symbol 选项卡中设置合适的符号类型和大小,例如选择空心圆,大小为 5。
- 个性化坐标轴设置,显示右边纵坐标和显示水平网格线。

这样就完成了个性化方框图,结果如图 10.18(b)所示。

10.2.3 直方图

直方图(Histogram)统计给出各个数据区间中的数据个数,然后绘制出统计结果的直方图,实际是根据频数统计结果绘制柱状图,如图 10.15 中的 Count(Y)数据。

● 单层直方图

选中 Worksheet 中一个或多个 Y 列,选中数据 Data1_B 和 Data1_D,选择 Plot| Statistical Graphs| Histogram 或单击 2D Graph Extended 工具条上的 Histogram 按钮,Origin 自动计算出区间大小,根据图形模板 Histogram. OTP 绘制出直方图,并创建名称为 Bin1-Bins for Data1 的 Worksheet 窗口保存数据,如图 10.21 所示。

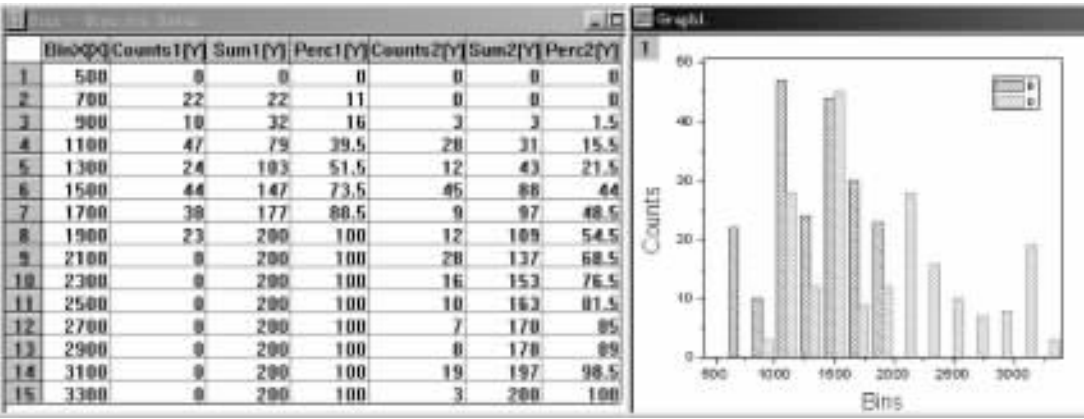


图 10.21 统计结果及直方图

Worksheet 窗口保存统计结果,包括 X 值(BinX)、计数(Counts)、计数累积(Sum)和累积百分数(Perc1),其中 D 组数据的统计结果和图 10.15 中的完全相同。

Graph 窗口中的直方图已经个性化了,添加了右边和顶部坐标轴(坐标轴未显示刻度),给直方图之间添加了间距。

● 多层直方图

绘制多层直方图(Stacked Histogram),选中数据 Data1_B 和 Data1_D,选择 Plot| Statis-

tical Graphs| Stacked Histograms 或单击 2D Graph Extended 工具条上的 Stacked Histogram 按钮 , 创建多层直方图, 如图 10.22 所示, 同时生成两个 Worksheet 窗口(名称分别为 Bin1-Bins for Data1 和 Bin2-Bins for Data1), 保存统计数据。

如果在 Worksheet 选择一个 Y 列, 绘制一层图形, 和单层直方图没什么区别; 选中了多个数列, 单层直方图是绘制在同一图层内, 统计结果保存在一个 Worksheet 中; 多层直方图绘制在不同的图层中, 统计结果保存在不同的 Worksheet 中。

● 概率直方图

绘制概率直方图(Histogram with Probabilities), 只能选中 Worksheet 中的一列或其中一部分。这里选择 Data1_D, 然后选择 Plot| Statistical Graphs| Histogram + Probabilities 或单击 2D Graph Extended 工具条上的 Histogram + Probabilities 按钮 , 进行制图, 如图 10.23 所示, 并将统计结果保存到 Worksheet 中。

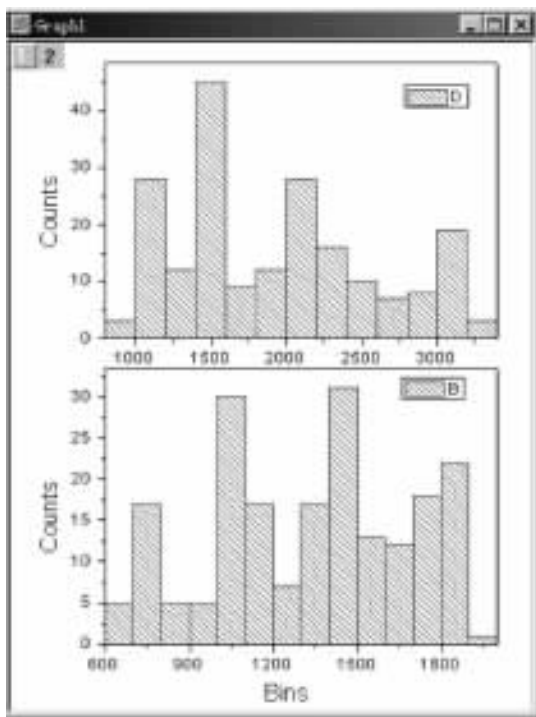


图 10.22 多层直方图

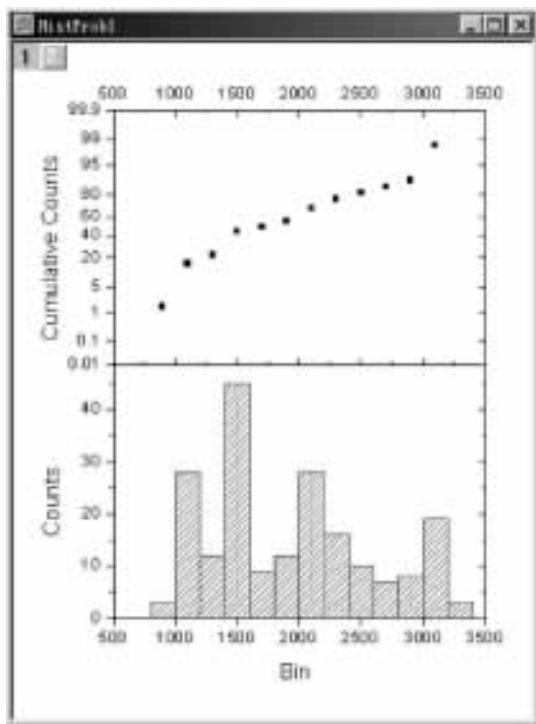


图 10.23 概率直方图

概率直方图与单/多层直方图是不同的:

- 绘制时调用的模板不同, 绘制单/多层直方图调用的模板是 Histogram. OTP, 绘制概率直方图调用的模板是 HistCumulative. OTP;
- 概率直方图有两层, 一层就是单层直方图, 另一层是计数累积的数据曲线;
- 绘制概率直方图时的统计结果显示在 Result Log 窗口中, 包括平均值、标准差、最大值、最小值和数据点数, 如图 10.24 所示。

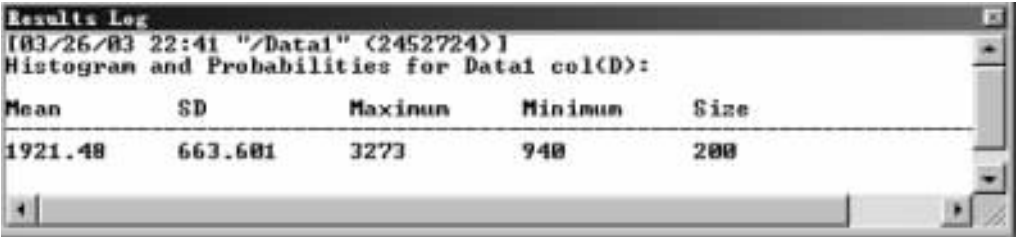


图 10.24 概率直方图的 Result Log 窗口

10.2.4 质量控制图

质量控制图(QC, Quality Control)是用来研究连续过程中数据的波动情况的。

选择 Worksheet 窗口中的一个或多个 Y 列,这里选中 Data1_D 列,选择 Plot| Statistical Graph| QC(X bar R) Chart 或单击 2D Graph Extended 工具条上的 QC(X bar R) Chart 按钮,打开 X bar R Chart 对话框。指定子集大小,默认值为 3,由于数据较多,共 200 个,这里输入 5,那么将数据分成 40 个子集,生成 QC 图,并创建 Worksheet 保存数据。

对每个子集,Worksheet 给出平均值、值域和标准差,同时,在窗口的右面给出了一些参数,包括原数据位置、子集大小、Num σ 、列范围和 Graph 窗口。这些参数可以即时修改,然后单击 Make QC Chart 按钮,更新 Graph 图形,如图 10.25 所示。

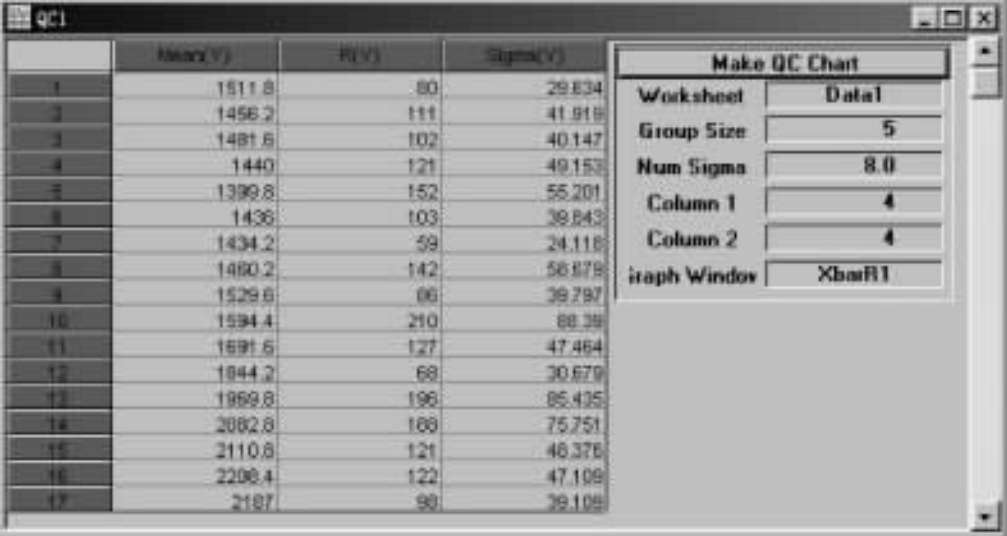


图 10.25 QC 图统计结果

QC 图(图 10.26 所示)中有两个图层,上面的是 X BAR 图,X 轴位置在总体数据的平均值处(X Bar)。Origin 使用每个子集的平均值绘制成垂线图,在图中同时显示了两个 Num σ 标准差限制线。

QC 图(图 10.26 所示)下面的图层是 Range 图,该层中将每个子集的值域绘制成柱状图,X 轴位置在各个子集值域的平均值处(RBar),本层中也限制两条限制线:UCL 和 LCL。

如果同时选中多个 Y 列绘制 QC 图,则 Origin 默认地将每行中的值作为一个子集进行制

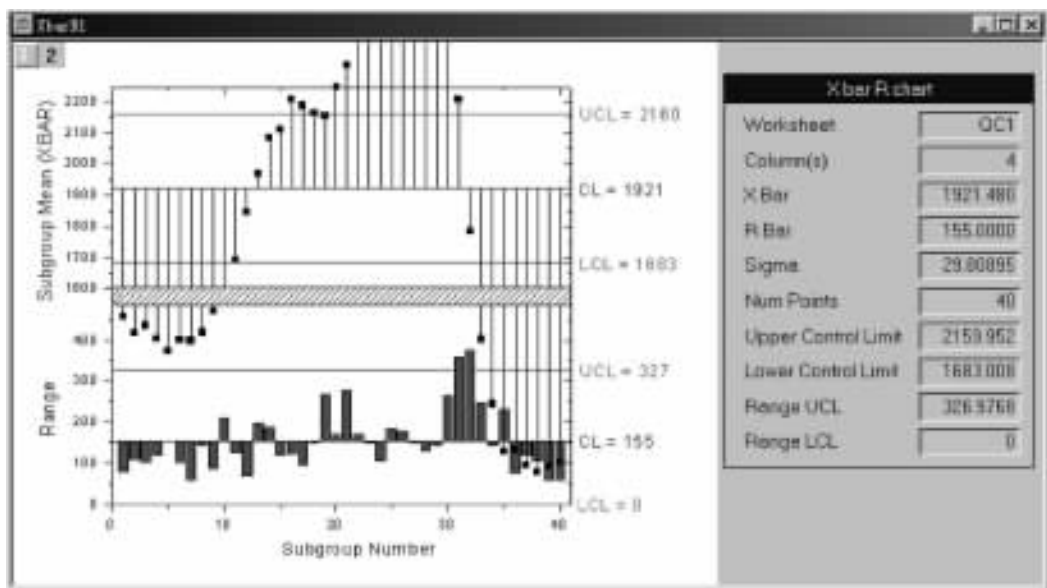


图 10.26 QC 图

图,其他不变。如上面我们选中数据 B,C 和 D 列的话,子集的大小为 3,共有 200 个子集。

10.2.5 t-检验

t-检验(t-Test)是统计中一个重要的显著性检验方法,分为单体和双体 t-检验。

● 单体 t-检验

对于服从正态分布的母体来说,检验母体平均值是否等于指定的常数,要检验的假设为 $H_0: \mu = \mu_0$ 。

根据实验对象的特征,单体 t-检验又分为单边(one-tailed)和双边(two-tailed)t-检验,根据样本提出一个假设 H_0 ,检验是否和另一个假设 H 兼容。根据键入的参数计算的结果,拒绝或接受假设 H_0 ,单边 t-检验满足: $H_0: \mu \leq \mu_0$ 且 $H_1: \mu > \mu_0$,或者 $H_0: \mu \geq \mu_0$ 且 $H_1: \mu < \mu_0$; 双边 t-检验服满足: $H_0: \mu = \mu_0$ 且 $H_1: \mu \neq \mu_0$,这些参数依赖于直接检验结果。

Origin 计算统计参数 $t = \frac{(\bar{X} - \mu_0)}{SD} \sqrt{n}$, 其中母体平均 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$, $SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n-1}}$, 参数 t 服从自由度为 $v = n-1$ 的 t-分布。

给出显著性水平 α , 如果 t 大到使观察到的显著性水平小于给出的 α , 就拒绝假设 H_0 ; 如果观察到的显著性水平大于给出的 α , 就接受假设 H_0 。

可信度区间的上下限分别为 $\bar{X} \pm \frac{t_{1-\alpha/2}(v)SD}{\sqrt{n}}$, 其中的 $t_{1-\alpha/2}(v)$ 是自由度为 $n-1$ 的 t-分布中一个重要的参数, $\alpha = 1 - \text{可信度水平}/100$ 。

样本的概率(Power)是测量灵敏度的,对于三种不同的假设,概率的定义为:

$$\mu = \mu_0: P[t \leq -t_{1-\alpha/2}(v) | \mu] + P[t \geq t_{1-\alpha/2}(v) | \mu]$$

$$\mu = \mu_0: P[t \geq t_{1-\alpha}(v) | \mu]$$

$$\mu = \mu_0: P[t \leq -t_{1-\alpha}(v) | \mu]$$

关于这方面的详细知识参考相关统计书籍。

进行单体 t-检验时,首先选中要检验的列,如果选中 Data1_D 列,然后选择 Statistics|Hypothesis Testing| One Sample t-Test,则打开 One Sample t-Test 工具框,如图 10.27 所示,要求输入检验的样本数据及其他检验参数。

- 从 Sample 下拉列表中选择要进行 t-检验的数据组,并假定该数据组服从正态分布。如果已经选择了数据列,则自动出现在该处。
- 在 Hypotheses 组的 Null Mean 中输入要检验的平均值 μ_0 ,选择 Alternate Hypothesis 合适的选项执行单边或双边 t-检验,在 Significance 文本框中输入显著性水平,大于 0 小于 1,那么在 Power Analysis 编辑框中出现同样的数值。
- 选中 Confidence Interval 复选框,计算可信度区间,在 Level(s) in %编辑框中输入可信度区间,大于 0 小于 100,可输入多个,用逗号隔开。
- 选中 Power Analysis 复选框,计算 t-检验的实际概率;在 Power Analysis 编辑框中输入 α 值,默认情况下和 Significance 文本框中的数值相同;选中 Sample Size (s)复选框计算 t-检验的假设概率(hypothetical power),在 Sample Size(s)编辑框中输入样本的大小,根据 Power Analysis 编辑框中的 α 值计算假设概率。

选中数据 Data1_D,输入合适的参数,如图 10.27 所示。单击 Compute 按钮后,Origin 将结果输出到 Result Log 窗口中,包括数据名称、平均值($\bar{X}$)、标准差(SD)、标准误差(SE)、样本大小(n)、检验方式(t)和自由度(Df),观察到的显著性水平(P)、假设(H_0)和另一个假设(H),并将检验的结果输出,如图 10.28 所示。

● 双体独立 t-检验

对于两个样本来讲,如果他们相互独立且都服从方差为常数的正态分布,可以使用双体独立 t-检验(Two Sample Independent t-Tests)来检验两个数列的平均值是否相等。这里假定两个样本的方差是相等的。

双体独立 t-检验的参数为 $t = (\bar{X}_1 - \bar{X}_2 - d_0) / \sqrt{1/n_1 + 1/n_2}$,该参数服从自由度为 $v = n_1 + n_2 - 2$ 的 t-分布,其中 $\bar{X}_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n_1} X_{1i}, \bar{X}_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n_2} X_{2i}$,分别为两个样本的平均值, $s^2 = \frac{[(n_1-1)s_1^2 + (n_2-1)s_2^2]}{n_1 + n_2 - 2}$, $s_1 = \frac{1}{n_1-1} \sum_{i=1}^{n_1} (X_{1i} - \bar{X}_1)^2, s_2 = \frac{1}{n_2-1} \sum_{i=1}^{n_2} (X_{2i} - \bar{X}_2)^2$, d_0 是两个样本的平均值差。

可信度区间的上下限分别为 $(\bar{X}_2 - \bar{X}_1) \pm t_{1-\alpha/2}(v) \sqrt{s^2(1/n_1 + 1/n_2)}$,其中的 $t_{1-\alpha/2}(v)$ 是 t-分布中在 $1-\alpha/2$ 处一个重要的参数, $\alpha=1-\text{可信度水平}/100$ 。

● 双体关联 t-检验

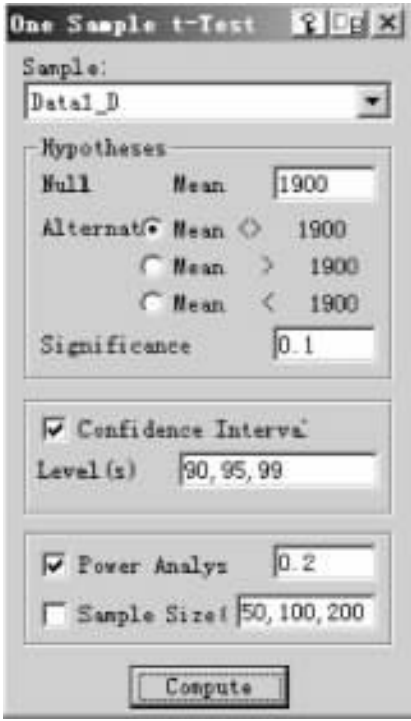


图 10.27 单体 t-检验工具框



图 10.28 单样本 t-检验结果

对于两个样本来讲,如果他们彼此不独立且都服从方差为常数的正态分布,可以使用双体关联 t-检验(Two Sample Paired t-Test)来检验两个样本的平均值是否相等,这里假定两个样本的方差是相等的。

假定两个样本具有相同的自由度 n ,双体关联 t-检验参数 $t = (\bar{D} - d_0) / SD$ 服从自由度为 $v = n - 1$ 的 t-分布,其中 $\bar{D} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_{1i} - X_{2i})$, $SD = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [(X_{1i} - X_{2i}) - \bar{D}]^2}$ 。

可信度区间的上下限分别为 $(\bar{X}_2 - \bar{X}_1) \pm t_{1-\alpha/2}(v)SD$,其中的 $t_{1-\alpha/2}(v)$ 是 t-分布中在 $1 - \alpha/2$ 处一个重要的参数, $\alpha = 1 - \text{可信度水平}/100$ 。

● 双体检验对话框

执行双体检验,选中两个数据列,选择 Statistics | Hypothesis Testing | Two Sample t-Test,打开 Two Sample t-Test 工具框,如图 10.29 所示。

- 选择 Independent Test 或 Paired Test 复选框确定检验类型,进行关联检验时要求两个样本的容量相同,要求数据配对。
- 从 Sample1 和 Sample2 下拉列表中选择进行检验的样本数据。
- 在 Mean1-Mean2= 文本框中输入两组数据平均值的差 d_0 ,选择合适的 Alternate Hypothesis 复选框,确定执行单边或双边 t-检验,在 Significance Level 编辑框中输入显著性水平。

其他几项和前面的单样本检验相同,就不再介绍了。

● 双体 t-检验举例

设置好参数,单击 Compute 按钮,Origin 将检验结果输出到 Results Log 窗口中,包括检验类型是独立的(Independent)还是关联的(Paired)、样本数据名称、平均值、标准差($SD1$ 和 $SD2$)、标准误差($SE1$ 和 $SE2$)和样本大小(n_1 和 n_2),同时输出参数 t 值、自由度(V)、观察到

的显著性水平 (P)、假设 (H_0 和 H_1) 及检验结果。

选中数据组 Data1_D 和 Data1_B, 选择 Statistics| Hypothesis Testing| Two Sample t-Test, 选中 Independent Test 复选框, 在 Mean1-Mean2= 文本框中输入 600, 选中 Confidence Interval(s)和 Power Analysis 复选框, 并保持其默认设置, 如图 10. 29 所示。单击 Compute 按钮, Origin 计算并在 Result Log 窗口中显示检验结果, 如图 10. 30 所示。

在显著性水平为 $\alpha=0.05$, 可以得出结论: 数据 Data1_D 和数据 Data1_B 平均值差为 600 是可以接受的(实际差为 587)。

选中数据组 Data1_D 和 Data1_B, 选中 Paired Test 复选框, 其他设置不变, 单击 Compute 按钮, Origin 在 Result Log 窗口中输出检验结果, 与独立双体 t-检验结果类似, 输出的结果如下:

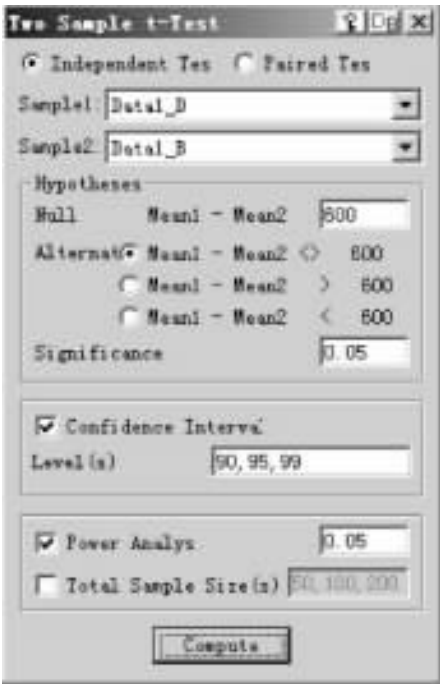


图 10. 29 双体 t-检验工具框

[2003-03-30 08:59 "/Data1" (2452728)]

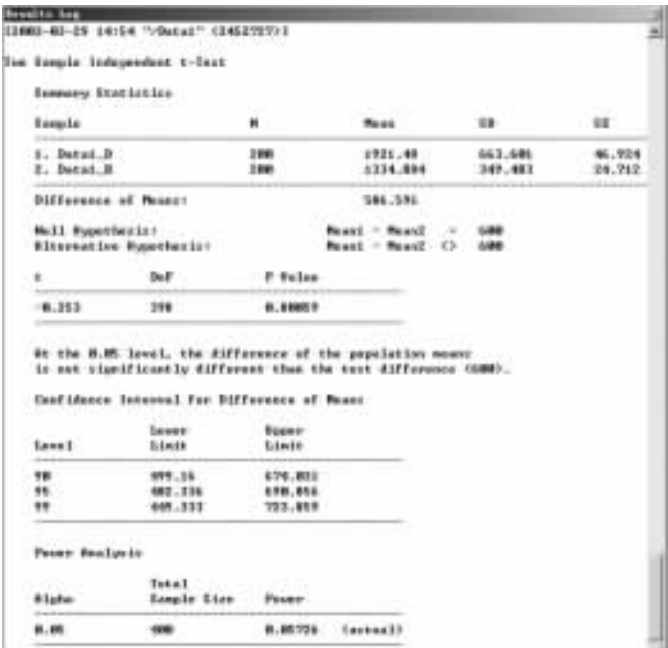


图 10. 30 独立双体 t-检验结果

Two Sample Paired t-Test

Summary Statistics

Sample	N	Mean	SD	SE
1. Data1_D	200	1921.48	663.601	46.924
2. Data1_B	200	1334.884	349.483	24.712
Difference of Means:			586.596	
Null Hypothesis:			Mean1-Mean2=600	
Alternative Hypothesis:			Mean1-Mean2<>600	
t	DoF	P Value		
-0.455	199	0.64978		

At the 0.05 level, the difference of the population means is not significantly different than the test difference (600).

Confidence Interval for Difference of Means

Level	Lower Limit	Upper Limit
90	537.886	635.306
95	528.471	644.721
99	509.937	663.255

Power Analysis

Alpha	Individual Sample Size	Power
0.05	200	0.07346 (actual)

10.2.6 方差分析

方差分析(Analysis of Variance, ANOVA)是统计中一个重要的分析方法,包括单因子方差分析(One-Way ANOVA)和双因子方差分析(Two-Way ANOVA)。

● 单因子方差分析

选择 Statistics | ANOVA | One-Way ANOVA, 打开 One-Way ANOVA 对话框, 如图 10.31 所示, 包括 One-Way Analysis of Variance (ANOVA), Levene 和 Brown-Forsythe 检验。



图 10.31 One-Way ANOVA 对话框

单因子方差分析用于检验两个或多个母体是否具有相同的平均值, 该分析假定来自母体的样本数据服从方差为常数的正态分布, 两个母体的方差不必相等。

单因子方差分析的统计参数是 $F = MSBG / MSE$, 该参数服从自由度为 $(r - 1, N - r)$ 的 F-分布, 其中 $MSBG = \sum_{i=1}^r \frac{n_i (\bar{X}_{i.} - \bar{X}_{..})^2}{r - 1}$, $MSE = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^{n_i} \frac{(X_{ij} - \bar{X}_{i.})^2}{N - r}$, r 是数据样本的数目, n_i 是第 i 个数据组中数据点的个数, $\bar{X}_{i.}$ 是第 i 个数据组的平均值, $\bar{X}_{..}$ 是所有数据的平均值, X_{ij} 是第 i 组数据组中第 j 个数据, N 是所有数据点的总数。

Origin 计算 F-统计的 P 值, 如果 P 值小于指定的显著性水平值 α , 则拒绝原假设, 断定各数据组的平均值显著不同, 或至少有一组数据平均值显著不同于其他数据组的平均值; 如果 P 值比大于指定的显著性水平值 α , 那么接受原假设, 断定各数据组的平均值没有显著不同。

Levene 检验是用来分析两个或几个母体的方差是否显著不同, 计算方法和 One-Way ANOVA 类似, 只不过用 $X'_{ij} = (X_{ij} - \bar{X}_{i.})^2$ 代替前面计算过程中的 X_{ij} 。

Brown-Forsythe 检验也是用来分析两个或几个母体的方差是否显著不同, 计算方法和 One-Way ANOVA 类似, 只不过用 $X'_{ij} = |X_{ij} - M_{i.}|$ 代替前面计算过程中的 X_{ij} , 其中的 $M_{i.}$ 是第 i 数据组中的最大值与最小值的平均数。

下面介绍 One-Way ANOVA 对话框的其他功能:

- Available 列表中列出了当前 Project 中的所有非文本数据组, Selected 列表中列出了将要进行方差分析的数据组, 选中数据组, 单击 ➡ 或 ⬅ 按钮添加或删除要进

行分析的数据,但 Selected 列表中至少有两组数据组;

- 在 Means Comparison 组中,选中 Bonferroni, Scheffé 或 Tukey 复选框,分别执行 Bonferroni, Scheffé 或 Tukey 平均值比较(关于 Bonferroni, Scheffé 或 Tukey 比较可参考相关书籍);
- 在 Tests for Equal Variance 组中,选中 Levene 或 Brown-Forsythe 复选框,分别执行 Levene 或 Brown-Forsythe 检验数据组的方差是否相等;
- 选中 Power Analysis 复选框,计算 ANOVA 的实际概率(Power),并激活后面的文本框和 Sample Size(s)复选框。ANOVA 的概率(Power)是评估分析灵敏度的。

按照图 10.31 的设置,对数据组 Data_D 和数据组 Data_B 进行分析。单击 Compute 按钮,Origin 执行 One-Way ANOVA,并将分析结果在 Result Log 窗口中输出,包括日期、数据、分析类型、假设、F 值、FFP 值和由此得到的结论、方差分析结论和比较结果等。在 Result Log 窗口中输出的内容如下:

[2003-03-31 08:03 "/Data1" (2452729)]

One-Way ANOVA

Summary Statistics

Dataset	N	Mean	SD	SE
Data1_D	200	1921.48	663.601	46.924
Data1_B	200	1334.884	349.483	24.712

Null Hypothesis: The means of all selected datasets are equal

Alternative Hypothesis: The means of one or more selected datasets are different

ANOVA

Source	DoF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	P Value
Model	1	34409467.2	34409467.2	122.34385	0
Error	398	111938344	281252.119		

At the 0.05 level, the population means are significantly different.

Levene's Test for Equal Variance

Source	DoF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	P Value
--------	-----	----------------	-------------	---------	---------

Model	1	1.00258383E13	1.00258383E13	89.10681	0
Error	398	4.47809031E13	1.12514832E11		

At the 0.05 level, the population variations are significantly different.

Brown-Forsythe's Test for Equal Variance

Source	DoF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	P Value
Model	1	7336017.39	7336017.39	87.72342	0
Error	398	33283414.5	83626.6695		

At the 0.05 level, the population variations are significantly different.

Means Comparison using Bonferroni Test

Dataset	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Data1_D	1921.48	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Data1_B	1334.884	586.596	482.336	690.856	Yes

Means Comparison using Scheffe' Test

Dataset	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Data1_D	1921.48	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Data1_B	1334.884	586.596	482.335	690.856	Yes

Means Comparison using Tukey Test

Dataset	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Data1_D	1921.48	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Data1_B	1334.884	586.596	482.335	690.857	Yes

Power Analysis

Alpha	Total Sample Size	Power
0.05	400	1.00000 (actual)

● 双因子方差分析

双因子方差分析(Two-Way ANOVA)广泛用于独立变量影响的研究,有两个独立变量因子在变化,因子间显著性不同意味着因子间相互作用。

双因子方差分析在实验过程中包括几个不同的元素,在数据分析中是重要的统计工具。

选择 Statistics| ANOVA| Two-Way ANOVA,打开 Two-Way ANOVA 对话框,如图 10.32 所示,与 One-way ANOVA 对话框类似,包括 Two-Way Analysis of Variance (ANOVA),Levene 和 Brown-Forsythe 检验。

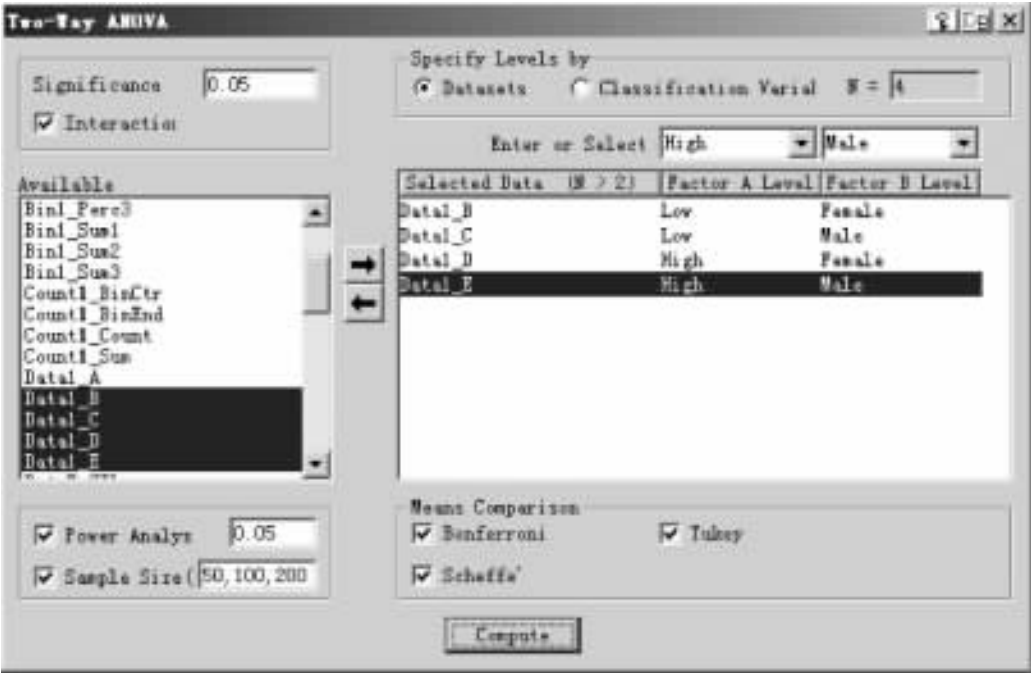


图 10.32 Two-Way ANOVA 对话框

双因子方差分析采用回归逼近,不要求几个样本有相同的数据点数,但 Origin 不支持空样本(即数据点数为 0),每个因子必须有各自的级别,必须有各自的样本数据。

Two-Way ANOVA 对话框中的功能如下:

- Significance 编辑框中输入显著性水平,用于比较 P 值,然后做出结论,该值在 0~1 范围内;
- Origin 计算因子 A 和因子 B 的概率,如果选中 Interactions 复选框,同时计算相互作用概率 $A * B$;
- 在 Specify Levels by Group 组中指定每个因子的级别,这个设置由实验数据决定,如果变量数据值针对于不同的数据组,则选择 Datasets 复选框,如果变量数据值针对于一个数据组,则选择 Classification Variables 复选框,在 N= 编辑框中显示

选中数据组的个数；

- 从 Available Data 列表中选择要分析的数据组，单击  按钮添加到 Selected Data 列表中进行分析。如果选择的是 Datasets 复选框，可以选择两个或多个数据组，Selected Data 列表中第一列是数据组的名称，第二列设置因子 A 级别，第三列设置因子 B 级别。设置方法为：选中某一数据组，然后从 Enter or Select 的两个下拉列表中选择合适的级别或直接键入其他文本，然后单击 Factor A Level 或 Factor B Level 按钮确保设置添加到数据组后面的列中。应该注意的是，不能有两个数据组的因子 A、B 完全相同，相互之间必须完全匹配。如果选择的是 Classification Variables 复选框，只能选择三个数据组，第二列为变量类型，三个数据组分别为 Dependent variable、Factor A Classification Variable 和 Factor B Classification Variable，单击列标题 Variable Type，可以将三个不同的变量类型在三个数据组之间调换，这种方式没有第三列，但单击  按钮，可以将变量类型 Factor A Classification Variable 和 Factor B Classification Variable 对换。

其他的设置和前面的类似。

按照图 10.32 中的设置对 Data1 进行分析。单击 Compute 按钮，Origin 执行 Two-Way ANOVA，并将分析结果在 Result Log 窗口中输出，包括日期、数据名称、数据组的设置、ANOVA 表、Factor A 和 Factor B 的三种比较结果，最后是数据组的概率(A、B 和 A * B)。在 Result Log 窗口中输出的内容如下：

[2003-03-31 10:27 "/Data1" (2452729)]

Two-Way ANOVA

Selected Data

Dataset	Factor A Level	Factor B Level
Data1_B	Low	Female
Data1_C	Low	Male
Data1_D	High	Female
Data1_E	High	Male

ANOVA

Source	DoF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	P Value
A	1	802969319	802969319	1737.29648	0
B	1	82721513.0	82721513.0	178.97545	0
A * B	1	401641498	401641498	868.98757	0
Error	796	367907024	462194.754		

Factor A: Means Comparison using Bonferroni Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
High	2951.598	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Low	947.89	2003.708	1909.344	2098.072	Yes

Factor A: Means Comparison using Scheffe' Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
High	2951.598	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Low	947.89	2003.708	1909.344	2098.072	Yes

Factor A: Means Comparison using Tukey Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
High	2951.598	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Low	947.89	2003.708	1909.344	2098.072	Yes

Factor B: Means Comparison using Bonferroni Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Female	1628.182	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Male	2271.305	-643.123	-737.487	-548.759	Yes

Factor B: Means Comparison using Scheffe' Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Female	1628.182	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Male	2271.305	-643.123	-737.487	-548.759	Yes

Factor B: Means Comparison using Tukey Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
-------	------	------------	--------------	----------------------	-------------

Female	1628.182	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Male	2271.305	-643.123	-737.487	-548.759	Yes

Power Analysis

Source	Alpha	Total Sample Size	Power
A	0.05	800	1.00000 (actual)
A	0.05	50	1.00000
A	0.05	100	1.00000
A	0.05	200	1.00000
B	0.05	800	1.00000 (actual)
B	0.05	50	0.90558
B	0.05	100	0.99676
B	0.05	200	1.00000
A * B	0.05	800	1.00000 (actual)
A * B	0.05	50	1.00000
A * B	0.05	100	1.00000
A * B	0.05	200	1.00000

选中 Classification Variables 复选框,使用这种分析方法要求数据之间有很强的关联关系,我们使用 Origin 提供的\OriginPro70\SAMPLES\ANALYSIS\STATISTICS\TWO-WAY ANOVA.OPJ 文件中的 ByVariables 数据,将三个数据组添加到 Selected Data 列表中,选中 Classification Variables 复选框,单击 Variable Type 和<>列标头按钮,将数据 ByVariables_TotalChol,ByVariables_Exercise 和 ByVariables_Dose 分别设置为 Dependent Variable,Factor A Classification Variable 和 Factor B Classification Variable,其他设置不变。

这里要求变量类型为 Dependent Variable 的列的显示方式为 Text & Numeric,变量类型为 Factor A Classification Variable 和 Factor B Classification Variable 的列的显示方式为 Text,列的属性设置参考 3.1.2 小节中的图 3.4 和 3.4.5 小节。

单击 Compute 按钮,Origin 执行 Two-Way ANOVA,并将分析结果在 Result Log 窗口中输出,包括日期、数据名称、数据组的设置、ANOVA 表、Factor A 和 Factor B 的三种比较结果,最后是数据组的概率(A、B 和 A * B)。在 Result Log 窗口中输出的内容如下:

[2003-03-31 11:23 "/ByVariables" (2452729)]

Two-Way ANOVA

Selected Data

Dataset	Variable Type
ByVariables_Dose	Factor B Classification Variable
ByVariables_Exercise	Factor A Classification Variable
ByVariables_TotalChol	Dependent Variable

ANOVA

Source	DoF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	P Value
A	1	4401.04167	4401.04167	8.05867	0.01089
B	2	7567.75000	3783.87500	6.92859	0.00587
A * B	2	196.583333	98.2916667	0.17998	0.83677
Error	18	9830.25000	546.125000		

Factor A: Means Comparison using Bonferroni Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Light	211.167	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Moderate	184.083	27.083	7.04	47.127	Yes

Factor A: Means Comparison using Scheffe' Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Light	211.167	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Moderate	184.083	27.083	7.04	47.127	Yes

Factor A: Means Comparison using Tukey Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
Light	211.167	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
Moderate	184.083	27.083	7.039	47.127	Yes

Factor B: Means Comparison using Bonferroni Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
100 mg	220.25	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
200 mg	195.75	24.5	-6.338	55.338	No
300 mg	176.875	43.375	12.537	74.213	Yes
200 mg	195.75				
300 mg	176.875	18.875	-11.963	49.713	No

Factor B: Means Comparison using Scheffe' Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
100mg	220.25	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
200mg	195.75	24.5	-6.655	55.655	No
300mg	176.875	43.375	12.22	74.53	Yes
200 mg	195.75				
300 mg	176.875	18.875	-12.28	50.03	No

Factor B: Means Comparison using Tukey Test

Level	Mean	Difference	Simultaneous	Confidence Intervals	Significant
100 mg	220.25	between Means	Lower Limit	Upper Limit	at 0.05 Level
200 mg	195.75	24.5	-5.321	54.321	No
300 mg	176.875	43.375	13.554	73.196	Yes
200 mg	195.75				
300 mg	176.875	18.875	-10.946	48.696	No

Power Analysis

Source	Alpha	Total Sample Size	Power
A	0.05	24	0.76571 (actual)
A	0.05	50	0.97965
A	0.05	100	0.99992
A	0.05	200	1.00000
B	0.05	24	0.87353 (actual)
B	0.05	50	0.99801
B	0.05	100	1.00000
B	0.05	200	1.00000
A * B	0.05	24	0.07374 (actual)
A * B	0.05	50	0.10655
A * B	0.05	100	0.17396
A * B	0.05	200	0.31709

10.2.7 存活率分析

存活率分析(Survival Analysis)通常用于研究生物科学中的母体生存状况。Origin 有两种分析方法:Kaplan-Meier Product-Limit Estimator 和 Cox Proportional Hazards 模型,这两种方法都计算存活率函数(给定时间内的存活几率),两个模型的对话框如图 10.33 和 10.34 所示。



图 10.33 Kaplan-Meier Estimator 对话框

● Kaplan-Meier Estimator 和 Cox Proportional Hazards Model 对话框

- 在 Available Data 列表内,列出了当前 Project 文件中的所有数据组,可以将他们设置为 Time 变量、Censor 变量或 Covariates(只用于 Cox Proportional Hazards Model 模式)。

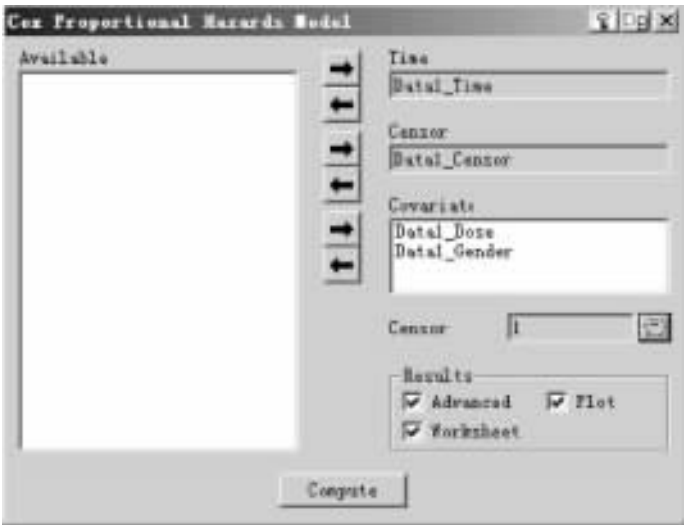


图 10.34 Cox Proportional Hazards Model 对话框

- Time 变量是失败事件的样本和检查时间，Time 变量必须是正数并表述为相对于研究开始的时间，不能表示为日历或钟表等绝对时间。Time 变量数据和 Censor 变量的数据点个数必须相等、对应，Censor 变量只能包含两个数值，文本或数值均可。
- Covariates 可以包含一个或多个数据组，每个数据组中的点数必须和 Time 变量的数据点个数相等、对应，该变量为实数。
- Censor 文本框中的数据为 Censor 两个变量中的一个，表示在某一时刻是否检验到该数据，单击编辑框后的  按钮可以在 Censor 中的两个数值之间切换。
- Results 组中，选中 Advanced 复选框，在 Results Log 窗口中输出存活率函数；选中 Worksheet 复选框，将参数显示在 Worksheet 窗口中；选中 Plot 复选框绘制图形；选中 Errors 复选框，将误差值绘制在 Graph 窗口中作为可信带。

这里使用 Origin 提供的 \ OriginPro70 \ SAMPLES \ ANALYSIS \ STATISTICS \ SURVIVAL ANALYSIS. OPJ 文件中的 Data1 为例来说明存活率分析。

选择 Statistics| Survival Analysis| Kaplan-Meier Estimator，打开 Kaplan-Meier Estimator 对话框。按照图 10.33 中的设置，将 Data1_Time 设置为 Time 变量，将 Data1_Censor 设置为 Censor 变量，单击  按钮设置 Censor 值为 1，在 Confidence 文本框中设置可信度水平为 0.9，选中 Results 组中的所有复选框，然后单击 Compute 按钮，Origin 计算 Kaplan-Meier Estimator，将存活率函数和可信带绘制 Graph 窗口中，将事件总结、Censor 值、存活率函数和质量估计等分别显示在 Worksheet 和 Results Log 窗口中，如图 10.35 所示。

在 Result Log 窗口中输出如下分析结果：

[2003-04-01 11:33 "/Data1" (2452730)]

Kaplan-Meier Estimator
Time Variable: Data1_Time

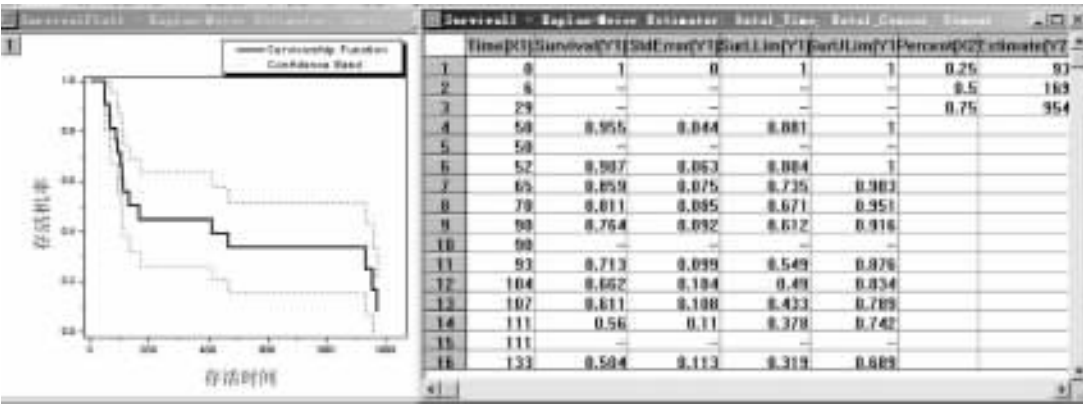


图 10.35 Kaplan-Meier Estimator 分析结果

Censor Variable: Data1_Censor
Censor Value: 1

Summary of Event and Censored Values

Total	Events	Censored	Percent Censored
24	16	8	33.33%

Survivorship Function

Time	Survival	Error
0	1.00000	0
6	--	--
29	--	--
50	0.95455	0.04441
50	--	--
52	0.90682	0.06280
65	0.85909	0.07548
70	0.81136	0.08505
90	0.76364	0.09247
90	--	--
93	0.71273	0.09934
104	0.66182	0.10448
107	0.61091	0.10813
111	0.56000	0.11046
111	--	--
133	0.50400	0.11272

169	0.44800	0.11325
414	0.39200	0.11209
468	0.33600	0.10917
482	--	--
846	--	--
930	0.25200	0.10953
954	0.16800	0.10018
972	0.08400	0.07770
983	--	--

Note: -- Indicates censored observation

Quartile Estimates

Percent	Estimate	90% Confidence Interval	
		Lower Limit	Upper Limit
25.0	93	65	111
50.0	169	104	930
75.0	954	414	972

选择 Statistics | Survival Analysis | Cox Proportional Hazards Model, 打开 Cox Proportional Hazards Model 对话框如图 10.34 所示。按照图中的设置, 将 Data1_Time 设置为 Time 变量, 将 Data1_Censor 设置为 Censor 变量, 将 Data1_Dose 和 Data1_Gender 设置为 Covariate, 单击  按钮设置 Censor 值为 1, 选中 Results 组中的所有复选框, 单击 Compute 按钮, Origin 计算 Cox Proportional Hazards, 将存活率函数绘制 Graph 窗口中, 将事件总结、Censor 值、存活率函数和质量估计等分别显示在 Worksheet 和 Results Log 窗口中, 如图 10.36 所示。

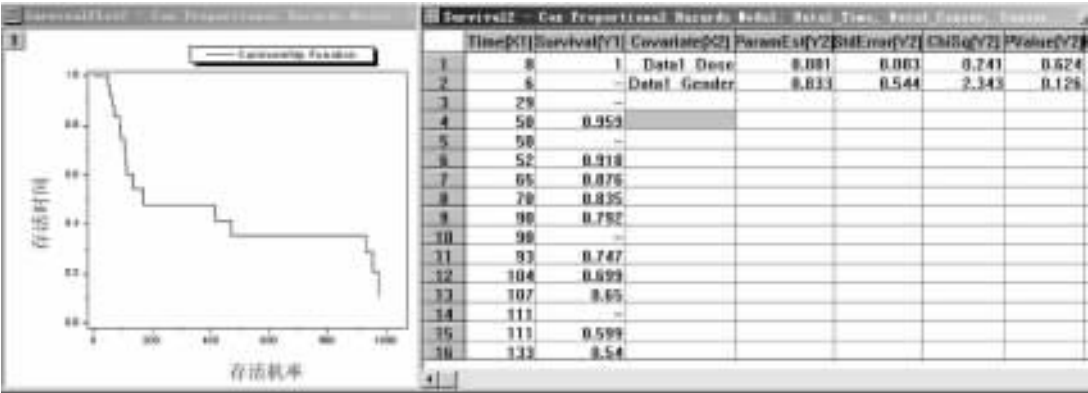


图 10.36 Cox Proportional Hazards 分析结果

在 Result Log 窗口中输出如下分析结果：

[2003-04-01 11:46 "/Data1" (2452730)]

Cox Proportional Hazards Model

Time Variable: Data1_Time
 Censor Variable: Data1_Censor
 Censor Value: 1

Summary of Event and Censored Values

Total	Events	Censored	Percent Censored
24	16	8	33.33%

Parameter Estimates

Covariate	Parameter Estimate	Standard Error	Chi-Square Statistic	P Value	Hazard Ratio
Data1_Dose	0.001	0.003	0.241	0.62355	1.001
Data1_Gender	0.833	0.544	2.343	0.12588	2.299

$-2 \ln L$: 70.761

Survivorship Function

Time	Survival
0	1.00000
6	--
29	--
50	0.95950
50	--
52	0.91834
65	0.87610
70	0.83467
90	0.79204
90	--
93	0.74686
104	0.69937

107	0.64997
111	--
111	0.59917
133	0.54044
169	0.47609
414	0.41356
468	0.35466
482	--
846	--
930	0.28468
954	0.20798
972	0.10072
983	--

Note: -- Indicates censored observation

从以上两个例子可以看出,在 Worksheet 窗口中和 Result Log 窗口中输出的内容基本相同。

10.3 快速傅里叶变换

傅里叶变换把周期函数描述成有限周期函数的叠加,尤其是正弦或余弦函数的叠加,是信号处理中最重要和最基本的工具之一。对于离散信号采用离散傅里叶变换(Discrete Fourier Transforms, DFT),但 DFT 计算量随着数据点的增加,按幂增长。快速傅里叶变换(Fast Fourier Transforms, FFT)是离散傅里叶变换的一种快速算法,大大减少了运算时间,被广泛应用于滤波、卷积和频谱分析等领域。

10.3.1 FFT 数学原理简介

● 离散傅里叶变换(DFT)

要说到 FFT,首先应该介绍 DFT。

对于周期性函数 $x(k)$,可以用傅里叶展式表示成

$$x(k) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n) \exp(-i2\pi kn/N)$$

其中 $x(n)$ 可以是实数也可以是复数, $0 \leq n \leq N$,成为傅里叶变换。相应地,傅里叶逆变换为

$$x(n) = \sum_{k=0}^{N-1} x(k) \exp(i2\pi kn/N)$$

其中 $0 \leq k \leq N$ 。这两个变换是互逆的。

● 快速傅里叶变换(FFT)

Origin 采用 Danielson-Lanczos 方法进行 FFT 运算,如果数据点的总数 N 为 2 的整数幂

的话,DDF 可以写成两个 DDF 的和:

$$x(k) = \sum_{j=0}^{N/2} x(2j) \exp\left(-i \frac{2\pi k j}{N/2}\right) + W^k \sum_{j=0}^{N/2-1} x(2j+1) \exp\left(-i \frac{2\pi k j}{N/2}\right)$$

其中 $W = \exp(-i2\pi/N)$, 这样的话, 计算时间降低为 $N \lg N$ 。

如果数据点的总数 N 不是 2 的整数幂, 则补 0 使数据点的总数为 2 的整数幂。

● FFT 的功率谱估计

一组样本通过 FFT 获得数据不是真正的傅里叶变换数据, 而是通过窗函数 $w(n)$ 从连续信号中获得的有限的离散数据, 样本数据为:

$$v(n) = w(n)x(n), (0 \leq n \leq N-1, \text{其中 } N \text{ 是选择的有限长度或样本总量})$$

$$w(n) = 0, (\text{其他情况}).$$

FFT 样本数据为:

$$V(k) = \sum_{n=0}^{N-1} w(n)x(n) \exp(-i2n\pi F_k), (0 \leq n \leq N-1)$$

功率谱(Power Spectrum)估计为:

$$P(k) = \frac{1}{\sum_{n=0}^{N-1} w(n)^2} |V(k)|^2$$

该函数也称作周期谱。

一些常用的窗函数(Window Function)如下:

➤ Rectangular 窗函数, $0 \leq n \leq N-1$ 时 $w(n) = 1$, 其他情况 $w(n) = 0$, 该函数主要用于 Origin4.0 以前的版本, 建议不要选择此项, 选择其他选项有助于谱的分解;

➤ Welch 窗函数, $w(n) = 1 - \left[\frac{n - \frac{1}{2}(N-1)}{\frac{1}{2}(N+1)} \right]^2$;

➤ Hanning 窗函数, $w(n) = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{N-1}\right) \right]$;

➤ Hamming 窗函数, $w(n) = 0.54 - 0.46 \cos\left(\frac{2n\pi}{N-1}\right)$;

➤ Blackman 窗函数, $w(n) = 0.42 - 0.5 \cos\left(\frac{2n\pi}{N-1}\right) + 0.08 \cos\left(\frac{4n\pi}{N-1}\right)$ 。

10.3.2 FFT 运算及 FFT 工具

要进行 FFT 计算, 首先要在 Worksheet 窗口中选中数据, 或在 Graph 窗口中选择数据曲线, 然后选择 Analysis| FFT, 打开 FFT 工具, 如图 10.37 所示, 包括 Operation 和 Settings 两个标签。该工具允许用户设置数据组, 选择实数、虚数和时间参数, Origin FFT 假定自变量是时间, 因变量是幅度, 进行快速傅里叶变换。

● Operation 选项卡

该选项卡包括两组内容, 如图 10.37 所示。

➤ FFT 组中有两个复选框, 选中 Forward 复选框表示进行正 FFT 运算, 选中 Backward 复选框表示进行逆 FFT 运算。

- Spectrum 组中也有两个复选框,选中 Amplitude 复选框生成幅度(Amplitude)和相位(Phase)谱,选中 Power 复选框生成功率(Power)和相位(Phase)谱。

● Settings 选项卡

单击 Settings 标签,进入 Settings 选项卡,如图 10.38 所示,共包含 7 部分。

- 在 Sampling 文本框中输入提供时间或频率信息的数据列,默认情况下为选定数据组或曲线对应的 X 数据列。
- 在 Real 文本框中输入 FFT 计算的实分量,默认值为选定的 Y 数据组或曲线的 Y 列。
- 在 Imaginary 文本框中输入 FFT 复数计算的虚分量,如果为空,则做实 FFT 计算。
- Sampling Interval 文本框中输入 FFT 计算的时间或频率间隔,如果傅里叶分解错误的话,增加该值。
- Window Method 组中包含了几种 FFT 数据计算用的窗函数,包括 Rectangular 窗函数、Welch 窗函数、Hanning 窗函数、Hamming 窗函数和 Blackman 窗函数。
- Output Options 是输出选项,包括三个复选框:①选中 Normalize Amplitude 复选框,对幅度规格化,将 FFT 结果分成 AC 和 DC 两个部分,显示原始数据的真正幅度,将 DC 分量除以 2 即为数据组的平均值;②选中 Shift Results 复选框,以 0 为中心,显示正负相位,类似于 $-180^{\circ} \sim +180^{\circ}$ 相位范围,对称显示效果较好,清除则只显示正相位,如 $0^{\circ} \sim 360^{\circ}$;③选中 UnWrap Phase 复选框,保持原始相位数据,清除则 will 将相位转换到 $-180^{\circ} \sim +180^{\circ}$ 内。
- Exponential Phase Factor 组用于设置 FFT 运算的指数相位因子,Science 选择为 +1,Electrical Engineering 选择为 -1,二者得到的实分量相同,虚分量相位相反。

● FFT 运算

下面以 Data1_D 为例说明 FFT 运算过程。首先使用 Nested Sort 工具将 X 列按升须排列(参考 3.5.1 小节),然后选择 Analysis|FFT,打开 FFT 工具,按照图 10.37 和图 10.38 中的设置,将 Data1_A 设置为时间量,将 Data1_D 设置为实分量,采样间隔设置为 0.1,选中



图 10.37 FFT 的 Operation 选项卡

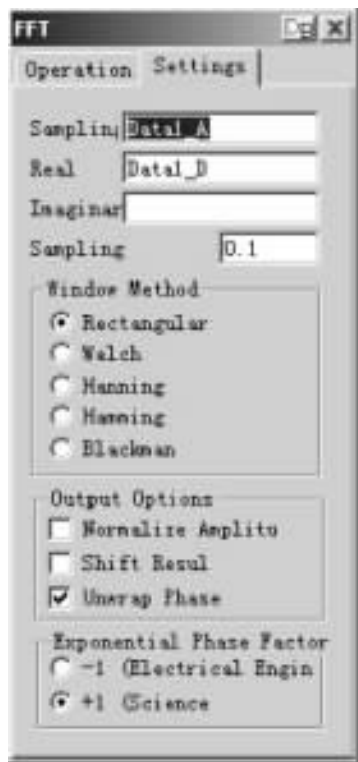


图 10.38 FFT 的 Settings 选项卡

Rectangular 窗函数,取消 Normalize Amplitude 和 Shift Results 复选框的选择,指数相位因子设置为 1,进行 FFT 计算。

Origin 计算的结果包括频谱图、FFT Worksheet 数据结果和 Results Log 结果。

① 频谱图。该窗口包括两个层,上面层为相位谱,下面层为幅度谱,如图 10.39 所示。该图已经个性化了,如将幅度谱的纵坐标改为对数坐标。Origin 假定自变量 X 数据组为时间(单位为 s),因变量 Y 数据组为幅度,所以图中横坐标单位是 Hz。

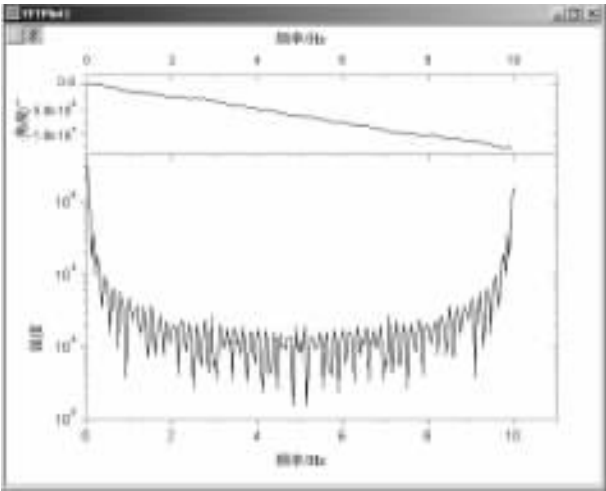


图 10.39 FFT 频谱图

② FFT worksheet 窗口包括频率(Freq)、变换数据的实分量(Real)和虚数分量(Imag)、幅值(r)、相位(Phi)及功率(Power),如图 10.40 所示。

	Freq[Hz]	Real[Y]	Imag[Y]	r[Y]	Phi[Y]	Power[Y]
1	0	384296	0	384296	0	5.769E8
2	0.039	-110462.169	117503.158	161272.697	133.231	1.016E0
3	0.078	-49786.523	22419.74	54601.672	155.757	1.165E7
4	0.117	16053.893	-5751.724	17053.146	-19.711	1.136E6
5	0.156	35226.634	457.067	35229.599	0.743	4.040E6
6	0.195	-7249.999	6510.018	9743.861	138.078	370870.394
7	0.234	-9950.680	14897.314	17914.97	123.741	1.254E6
8	0.273	-860.038	14249.693	14275.672	93.457	796073.425
9	0.313	8292.882	2299.36	8605.751	15.497	289292.769
10	0.352	2407.246	-2410.331	3412.200	-45.132	45401.090
11	0.391	-5286.249	3225.921	6192.010	-211.394	149008.576
12	0.43	-1991.562	9041.688	9258.425	-257.578	334837.631
13	0.469	4124.034	5901.004	7199.795	-304.953	202408.40
14	0.508	4733.091	-28.466	4733.177	-360.345	87511.583
15	0.547	-1450.032	-429.339	1519.93	-523.592	9024.173
16	0.586	-3070.642	4781.103	5682.234	-597.29	126124.171
17	0.625	737.032	6203.123	6246.05	-636.783	152434.101

图 10.40 FFT 计算结果

如果两个相连的时间间隔是 Δt 的话,那么第 n 个频率数据为:

$$f_n = \frac{n}{N\Delta t}$$

频率最大值为:

$$f_{\max} = \frac{N-1}{N\Delta t}$$

其中 N 是补 0 后的数据点数。

如果 FFT 工具框中 Settings 选项卡中选中 Shift Results 复选框,则频率转换到 $-\frac{f_{\max}}{2} \sim$

$\frac{f_{\max}}{2}$ 范围内;如果清除该复选框,则频率范围为 $0 \sim f_{\max}$ 。

③ 在 Results Log 窗口中输出:

[2003-04-08 19:51 "/FFTPlot1" (2452737)]

Original Dataset: 200

Actual Dataset: 256

Results Log 窗口给出原始数据的点数(Original Dataset)和实际 FFT 运算的点数(Actual Dataset),本例中原始数据的点数为 200,实际 FFT 运算的点数 256。因为快速傅里叶变换(FFT)要求数据点数为 2 的整次幂,要补 0 到 256 个数据点。

● IFFT 运算

原则上讲,Origin 可以将 FFT 计算结果(Freq, Real 和 Imag)通过快速傅里叶逆变换(Inverse FFT, IFFT)转换回到原始数据,但这要受到许多限制:在 FFT 运算时不能选 Normalize Amplitude 和 Shift Results 复选框,而且数据点的总数也必须是 2 的整数次幂。

下面使用图 10.40 中的数据进行 IFFT。选中 Real(Y) 和 Imag(Y) 列,选择 Analysis|FFT, 打开 FFT 工具。在 Settings 选项卡中, Sampling 文本框中出现 Freq(X), Real 文本框中出现 Real(Y), Imaginary 文本框中出现 Imag(Y); 在 Operation 选项卡中选中 Backward 复选框,其他选项不变,单击 OK 按钮,IFFT 运算的结果如图 10.41 所示。幅度谱和图 10.1 曲线 D 的形状相似,但横坐标发生整体位移,因为 FFT 只关心相对变换,而不关心整体位置,在第 200 个数据点后面数据为 0,这是在 FFT 运算时补的。

● FFT 遇到的问题

在进行 FFT 运算时经常遇到下列问题:

① 选定数列,选择 Analysis|FFT 后出现提示框,如图 10.42 所示,提示内容为:采样间隔测试失败,请检查数据,并在 FFT 的设置里调整采样间隔。

出现该错误的原因在于采样间隔(X 数据组的数据间隔)不一致,而 FFT 要求 X 数据必须是等间距的。遇到这种情况,如果单击“确定”按钮,也可以进行 FFT 运算,但结果是不可靠的。

采样间隔的轻微变化可能是由于数据采集时仪器不稳定造成的,这种波动不会显著影响到 FFT 的计算结果,但如果采样间隔波动较大,出现了数据堆积现象,那么结果就不可靠了。

数据间距不相等的情况下运算 FFT,FFT 运算过程中采样间隔是由前几个 X 数据决定的,如果在这个范围内的采样间隔和其他地方的差别较大,运算的结果会产生很大的误差,这

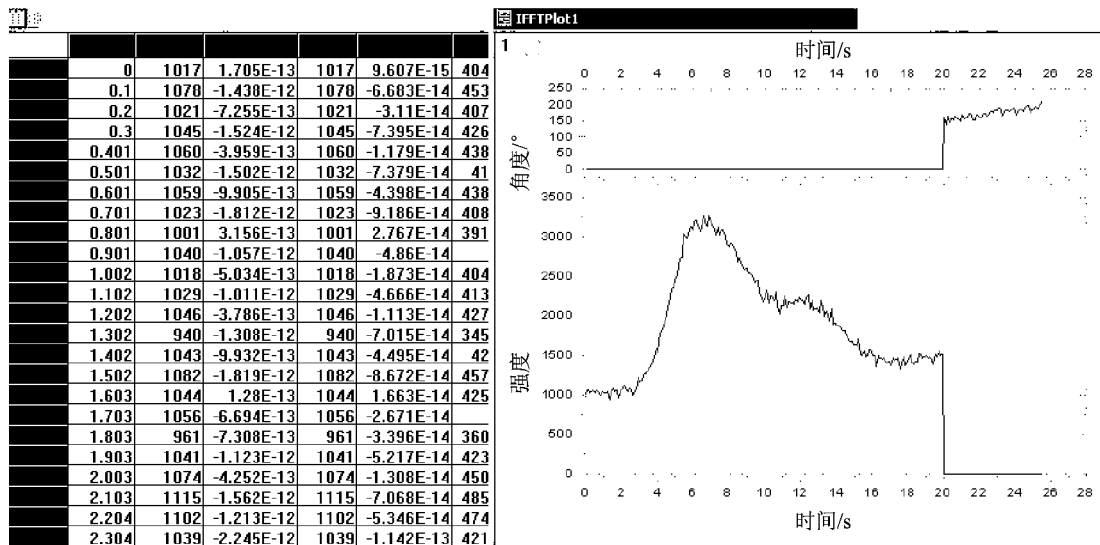


图 10.41 IFFT 结果及图形



图 10.42 提示信息

时就需要在 FFT 工具框的 Sampling Interval 文本框中输入正确的采样间隔,以得到尽可能精确的计算结果。

② 在作正弦波 FFT 时,在某个频率中不能得到好的幅度峰。

改变栅周期会有所改进,但要想得到理想的结果,数据点个数必须是 2 的整次幂,出现完整的周期。

③ 当作 IFFT 时,不能完全得到原始数据。

要完全得到原始数据,可进行下列操作:

- 在进行 FFT 计算时,不选中 FFT 工具 Settings 选项卡中的 Normalize Amplitude 和 Shift Results 复选框;
- 进行 IFFT 计算时,从 FFT 结果中选中 Real 和 Imag 两个 Y 列,仍然不选择 Normalize Amplitude 和 Shift Results 复选框;
- 那么 IFFT 结果的实数列就是原始数据,如果必要的话,则会在数据的后面添加 0。

10.3.3 相关、卷积和去卷积

这三种运算都是基于 FFT 的。

● FFT 相关

相关(Correlation)是用来研究两个信号的相似形的,对于两个信号 $f(x)$ 和 $h(x)$,输出响应为

$$g(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x')h(x+x')dx'$$

此积分称作函数 $f(x)$ 和 $h(x)$ 的相关积分。

下面通过一个例子来说明相关的操作步骤。

选中数据组 Data1_C 和 Data1_D,然后选择 Analysis| Correlate,就完成了相关运算。

运算结果自动填写到原来的 Worksheet 末尾,一列是延时量(Lag),另一列是相关量(Corr),为了理解相关运算,绘制相关曲线,如图 10.43 所示。

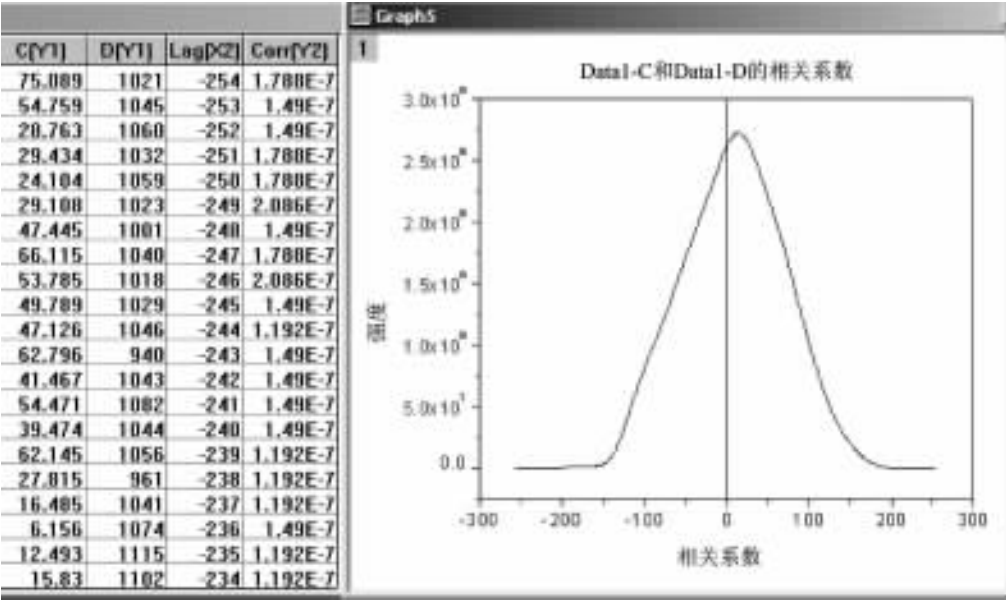


图 10.43 相关运算结果

图 10.1 中的曲线 C 和 D 的数值分布大体相同,但曲线 C 比曲线 D 滞后,所以二者的相关曲线峰值出现在延时量大于 0 处。

● FFT 卷积

卷积(Convolution)是研究输入和输出关系的,输入信号 $S(x)$ 和系统空间脉冲响应 $R(x)$ 的卷积就是输出信号 $C(x)$:

$$C(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} S(x')R(x-x')dx'$$

对两个数据组的卷积运算有着广泛的应用,如数据的平滑、信号处理和边缘检测等。

在卷积运算过程中,对系统响应的数据组有下列要求:

- 响应的数据组中数据点的个数必须为奇数,能表达为某个对称函数;
- 响应 $R(x)$ 的数据点个数 r 必须小于输入信号 $S(x)$ 数据点个数的二分之一;
- 为了保持输入信号的幅度不变,响应 $R(x)$ 的数据组中数据的总和为 1。

下面以 \OriginPro70\ SAMPLES\ANALYSIS\FFT\FFT CONVOLUTION.OPJ 文件中的 ConvData 数据为例来说明卷积运算过程。

选中 Signal(Y1)和 Response(Y1)列,分别作为输入信号和系统的响应信号,然后选择 Analysis| Convolute,完成卷积运算。

运算的结果自动填写在原来的 Worksheet 末尾,一列是数据点序号(Index),另一列是卷积值(Conv)。为了便于理解卷积运算,将三组数据 Signal(Y1),Response(Y1)和 Conv(Y2)制图,如图 10.44 所示。

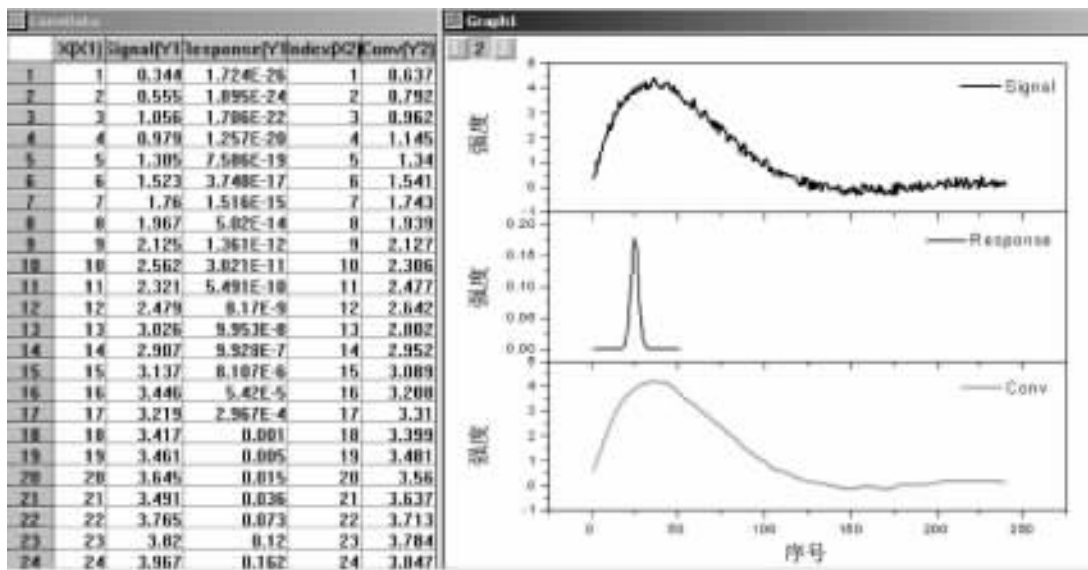


图 10.44 卷积运算结果

从图中可以看出,输入信号 Signal 中包含噪声,通过系统响应进行卷积后,得到平滑的输出信号。

● 去卷积

去卷积(Deconvolution)是卷积计算的逆过程,根据输出信号和系统响应来确定输入信号。

原则上讲,输入信号经过卷积后的结果,再经过去卷积就可以返回到原来的输入信号,但这要求选择合适的系统响应,我们以 \OriginPro70\ SAMPLES\ ANALYSIS\ FFT\ FFT DECONVOLUTION.OPJ 为例来说明去卷积的操作步骤。

如图 10.45 所示,输入信号是 Signal,系统响应是 Resp,二者卷积是 Conv,然后将 Resp 数据复制到 Resp2,选中 Conv 和 Resp2 数据组,再选择 Analysis| Deconvolute,进行去卷积运算,得到 Deconv 数据组。为了便于理解,将这四组数据制图,如图 10.45 所示,最后去卷积的曲线和输入信号曲线基本相同。

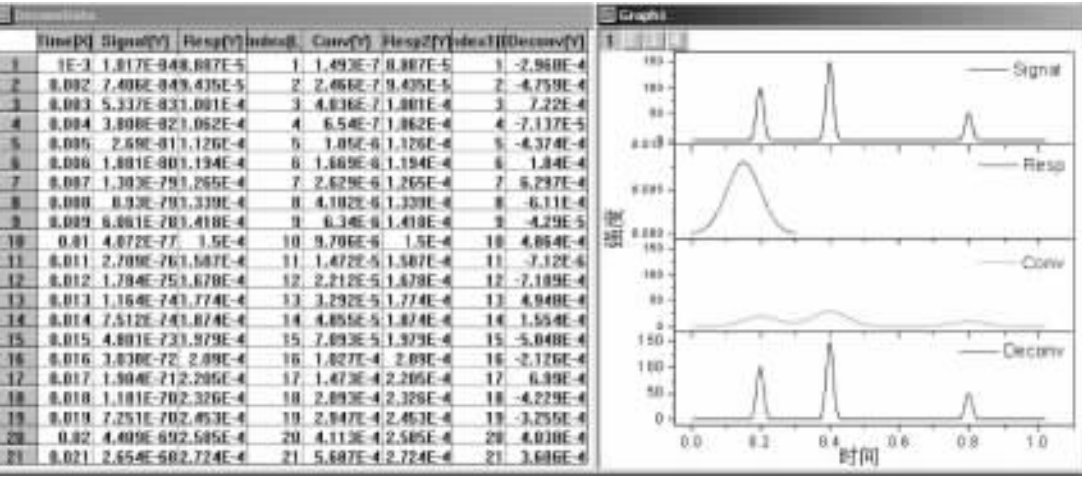


图 10.45 信号、响应、卷积和去卷积运算

10.4 数据的平滑和滤波

对于给定的数据曲线来说,Origin 提供了下面几种方法进行平滑和滤波:

- 用 Savitzky-Golay 滤波器平滑;
- 相邻平均法平滑;
- FFT 滤波器平滑;
- 数字滤波,包括低通(Low pass)、高通(High pass)、带通(Band pass)、带阻(Band block)和阈值(Threshold)滤波器。

10.4.1 使用菜单命令平滑

实现平滑的方法有两种:选择 Analysis| Smoothing 或平滑工具 Tools| Smooth,二者的功能是不同的,只是形式上有所差别。

- 相邻平均法(Adjacent Averaging)

这种方法是对指定点数的相邻数据求平均。激活 Graph 窗口,选中 Data1_D,选择 Analysis| Smoothing| Adjacent Averaging,打开 Smoothing 对话框,如图 10.46(a)所示。在 Enter Number of Points 文本框中指定要平均的点数,默认值为 5,如果输入的为奇数 n ,那么 n 个点用于计算平均数;如果输入的是偶数 m ,那么 $m+1$ 个点用来计算平均数;第 i 个数据点的平滑值为区间 $[i-(n-1)/2, i+(n-1)/2]$ 内数据点的平均。

- 使用 Savitzky-Golay 滤波器平滑

Savitzky-Golay 滤波器是对每个数据点应用局部多元回归算法,计算出平滑后的值,需要三个参数,即多项式的阶、左侧点数和右侧点数。

选择 Analysis| Smoothing| Savitzky-Golay,打开 Smoothing 对话框,如图 10.46(b)所示。多项式阶的默认值为 2,最大可设置为 9,该值会影响到平滑曲线和原数据曲线之间的区

别,从 Points to the Left 和 Points to the Right 下拉列表中选择平滑的点数。

Savitzky-Golay 滤波方法通过多项式收敛确定每点的数值,优于相邻平均法,因为它尽量保持原始曲线的特征,如峰高度和宽度,而在相邻平均法中峰的高度和宽度可能被平均掉了。

● FFT 滤波器平滑

这种方法是对数据做 FFT,去除频率高于 $1/n\Delta t$ 的高频成分,达到平滑的目的,其中 n 是某时 FFT 的数据点数,默认值为 5, Δt 是相邻两个数据点之间的时间间隔。

选择 Analysis| Smoothing| FFT Filter,打开 Smoothing 对话框,如图 10.46(a)所示,在 Enter Number of Points 文本框中输入平滑过程中所考虑的点数。

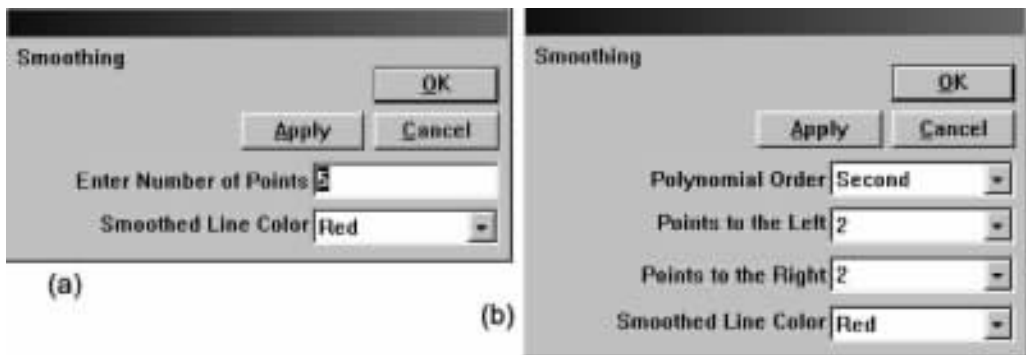


图 10.46 Smoothing 对话框

在 Smoothing 对话框中设置完,单击 OK 按钮,则在原数据曲线上给出平滑曲线,同时将数据输出到名称为 Smoothed n 的隐藏的 Worksheet 窗口中,其中 n 为平滑处理的顺序号。这些平滑曲线和原数据曲线重合在一起,为了清楚地表现其特征,单击 Graph 工具条上的 Extract to Layers 按钮 ,将它们分开,图 10.47 是原始数据曲线和分别使用上述三种平滑方法处理后的结果。

10.4.2 平滑工具

平滑工具是将三种平滑方法集中在一个对话框内,使用灵活方便,操作简单,激活 Graph 窗口,选择 Tools| Smooth,打开 Smoothing 对话框,如图 10.48 所示,该对话框有两个标签。

在 Operations 选项卡中单击不同的按钮可进行相应的平滑,在 Setting 标签中除了提供上面介绍过的所有功能外,还添加了 Results 组,提供了是否删除原数据曲线和生成 Worksheet 选项。

10.4.3 数字滤波

Origin 提供了 5 种 Fourier 转换方面数字滤波器,包括低通 (Low pass)、高通 (High pass)、带通 (Band pass)、带阻 (Band block) 和阈值 (Threshold) 滤波器。

低通滤波器只允许低频部分通过,高通滤波器只允许高频部分通过,分别用来消除高频或低频部分噪音,带通滤波器用来消除特定频带以外的噪音,带阻滤波器用来消除特定频带以内的频率成分,阈值滤波器用来消除特定阈值以上的频率成分。

● 低通和高通滤波器

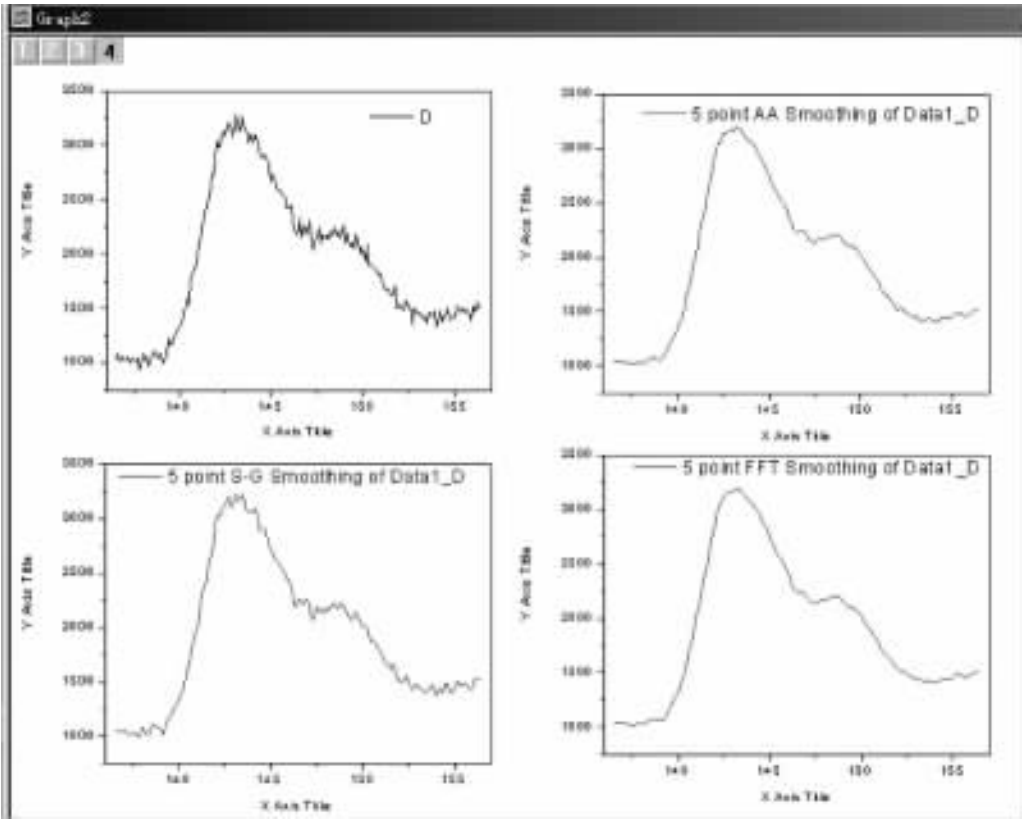


图 10.47 三种平滑方法的结果比较

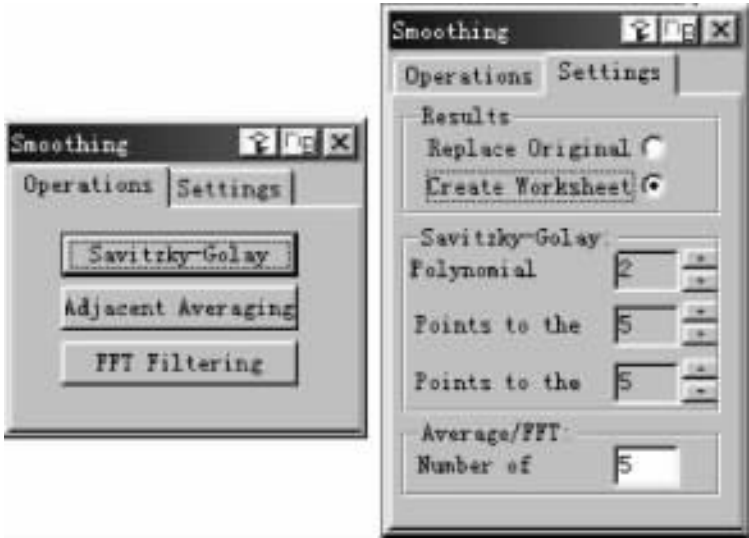


图 10.48 Smoothing 对话框

激活 Data1_D 的 Graph 图形,选择 Analysis| FFT Filter| Low Pass/High Pass,打开 Frequency Cutoff 对话框,如图 10.49 所示,在 Fc 文本框中输入截止频率(Frequency

Cutoff), Origin 默认的截止频率是 $F_c=10/\text{period}$, 其中 period 是 X 数据组范围, 在本例中, X 的范围是 20, 作 FFT 补 0 到 25.6, 所以截止频率 $F_c=0.4\text{Hz}$ 。

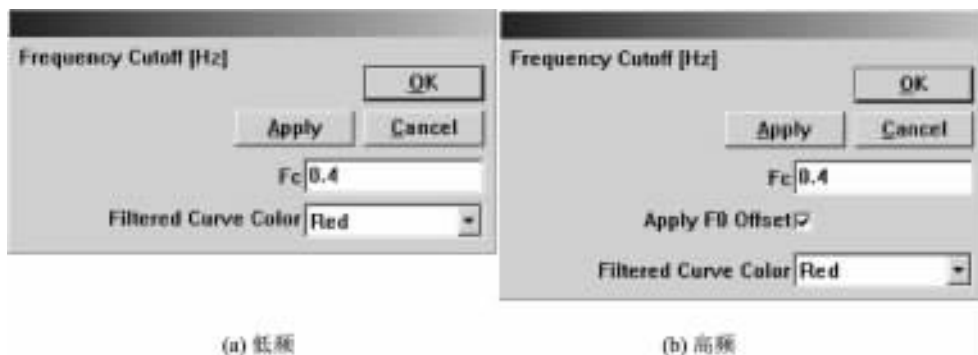


图 10.49 截止频率对话框

单击 OK 按钮, Origin 进行低通/高通数字过滤运算, 过滤高于/低于截止频率部分。在进行高通运算时, 要给高频部分叠加一个直流 F_0 , 以将其和原始数据显示在一个相近的数据范围内, 选中 Apply F0 Offset 复选框。

运算的结果存贮在一个新建的隐藏的 Worksheet 窗口, 激活该窗口如图 10.50 所示, 保存过滤后的数据, 同时在当前的 Graph 窗口中绘制出滤波后的曲线, 为了便于区分三条曲线, 单击 Graph 工具条上的 Extract to Layers 按钮 , 将它们分开, 个性化图形后得到的图形如图 10.51 所示。

FFTFilter1 - 0.4 Hz Low Pass Filter on Data1_D			FFTFilter2 - 0.4 Hz High Pass Filter on Data1_D		
	Time[s]	Data1D[Y]		Time[s]	Data1D[Y]
Independent 0.4 Hz Low Pass Filter on Data1_D			Independent 0.4 Hz High Pass Filter on Data1_D		
1	136.5	551.033	1	136.5	1967.124
2	136.6	626.99	2	136.6	1952.166
3	136.7	701.516	3	136.7	1020.64
4	136.8	773.257	4	136.8	1772.899
5	136.9	840.916	5	136.9	1720.24
6	137	903.297	6	137	1629.859
7	137.1	959.354	7	137.1	1600.002
8	137.2	1000.231	8	137.2	1515.925
9	137.3	1049.293	9	137.3	1452.063
10	137.4	1002.156	10	137.4	1459.001
11	137.5	1106.7	11	137.5	1412.456
12	137.6	1123.079	12	137.6	1407.077
13	137.7	1131.711	13	137.7	1415.446

图 10.50 低通、高通滤波后的数据

从图中可以看出, 信号的频率成分基本以低频为主, 基本在 0.4 Hz 以下。以 0.4 Hz 为截止频率, 低频滤波有效地过滤了高频噪音, 相对地, 高频滤波则去除了信号成分, 保留了噪音。

● 带通(Band pass)和带阻(Band block)滤波

要清除特定频率以外的频率成分, 使用带通滤波器; 要特定频率内外的频率成分, 使用带阻滤波器。

带通和带阻滤波参数有上限截止频率(high cutoff frequency, F_h)和下限截止频率(low cutoff frequency, F_l), 默认的计算方式分别为 $F_h=20 \times (1/\text{period})$ 和 $F_l=10 \times (1/\text{period})$,

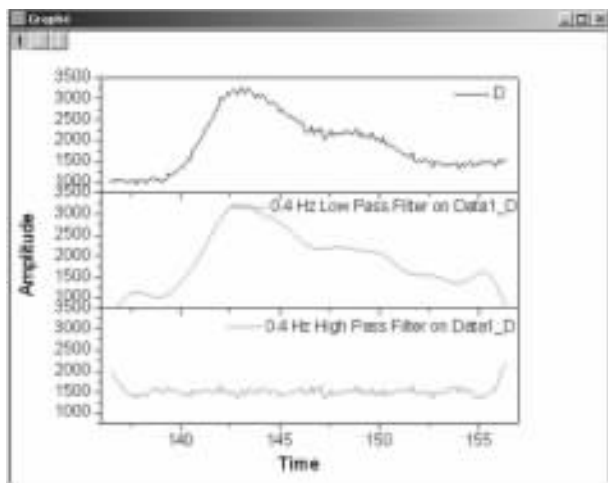


图 10.51 低通、高通滤波后的数据曲线

其中 period 是 X 数据组范围。仍然以 Data1_D 为例, X 的范围是 20, 作 FFT 补 0 到 25.6, 所以上限截止频率 $F_h=0.8$ Hz, 下限截止频率 $F_l=0.4$ Hz。

激活 Graph 窗口, 选择 Analysis| FFT Filter| Band Pass/Block, 打开截止频率对话框, 如图 10.52 所示。单击 OK 按钮后, Origin 生成隐藏的 Worksheet 窗口, 保存过滤后的数据, 同时在当前的 Graph 窗口中绘制出滤波后的曲线, 个性化图形后得到的图形如图 10.53 所示, 获得的图形基本和低通、高通滤波后的数据曲线相同。

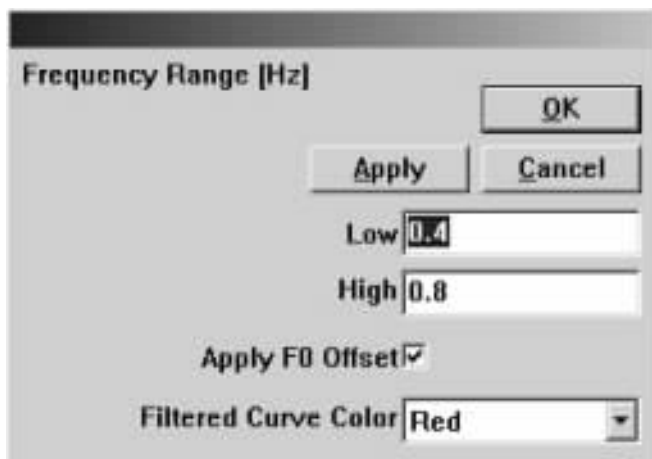


图 10.52 带通和带阻滤波的截止频率对话框

● 阈值滤波

阈值滤波用于消除数据曲线中低于某个指定阈值的频率成分。阈值滤波的操作步骤如下:

- 激活数据 Data1_D 的 Graph 窗口, 选择 Analysis| FFT Filter| Threshold;
- Origin 对数据进行 FFT 运算, 显示幅度谱图形, 图中有一个可以移动的阈值水平线, 为了清楚地分辨不同成分的频率, 把 Y 轴改为对数坐标, 如图 10.54 所示;
- 拖动阈值水平线到合适的位置或直接在 Threshold 文本框中输入合适的阈值;

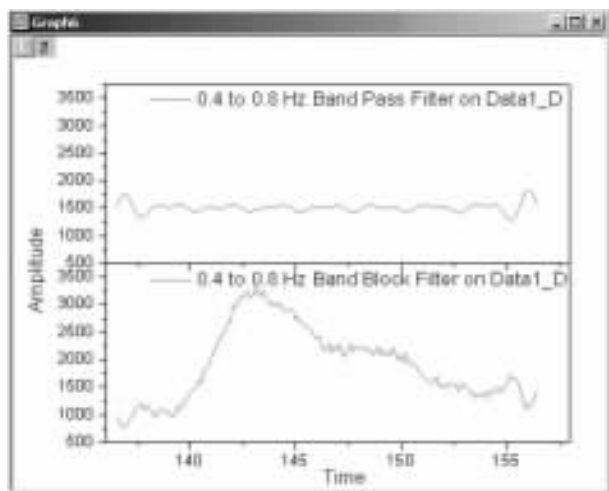


图 10.53 带通和带阻滤波后的数据曲线

➤ 单击 Filter threshold 命令按钮,完成阈值滤波操作。

Origin 过滤掉阈值水平下面的频率成分,并利用过滤后的频率谱进行 IFFT 计算,新建一个隐藏的 Worksheet 窗口保存过滤后的数据,并在当前的 Graph 窗口中绘制滤波后的曲线,如图 10.54 所示,选择不同阈值过滤后的数据曲线,其平滑程度是不同的。

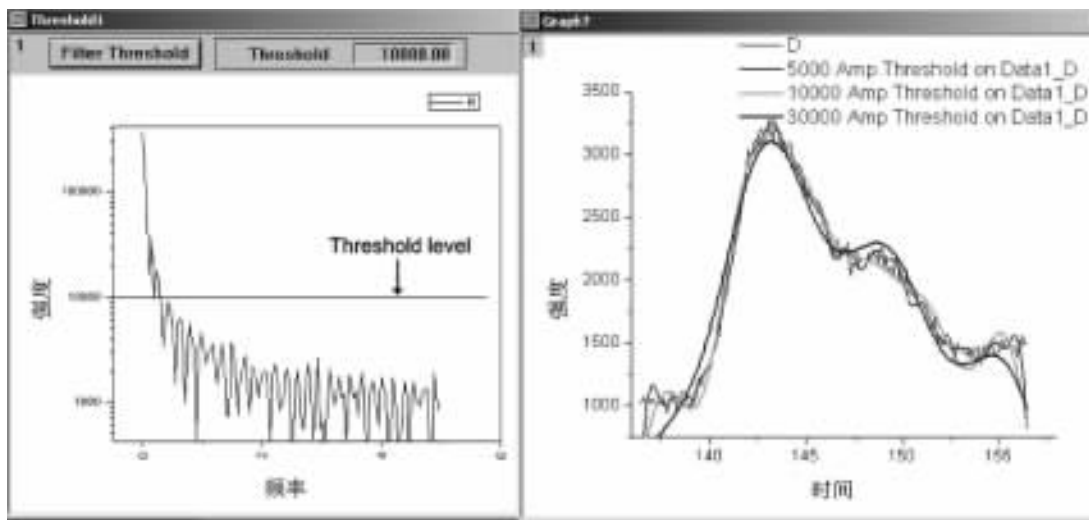


图 10.54 阈值选择图和选择不同阈值过滤后的 Graph 图形

10.5 基线和峰值分析

10.5.1 拾取峰工具

激活 Graph 窗口时,可以使用拾取峰工具(Pick Peaks)来寻找曲线的峰值,并标注在曲线

上。该工具不依赖于是否定义了基线,不依赖于平滑曲线,而是依赖于原始数据。

拾取峰工具是通过在曲线上移动搜索矩形来实现的,认定一个数据为峰值点的必要条件是:

- 矩形宽度范围内曲线的最大值和矩形宽度两端曲线值的差大于矩形高度;
- 峰值点数据值大于预定的最小值。

选择 Tools| Pick Peaks,打开 Pick Peaks 工具框,如图 10.55 所示,包括下述选项。

- Pick Peaks 组用来选择拾取峰的类型,包括正值峰和负值峰。
- Search Rectangle 组设置搜索矩形的,文本框中的数据是以百分比形式定义的,Height 文本框中的数值是数据曲线幅度范围(最大 Y 值和最小 Y 值的差)的百分比,默认值为 5;Width 文本框中的数值是曲线数据点的范围(X 值范围)的百分比,默认值为 5。通常来说,高度值和宽度值越小,则越可能找到更多的峰值点,但矩形必须包括一定的数据,宽度值不宜太小。
- 在 Minimum Height 文本框中指定峰值的最小高度,其中的数值是数据曲线幅度范围的百分比,默认值为 5,峰的数据值必须大于此数值乘以数据幅度,此数值越小,则越可能找到更多的峰值。
- 在 Display Options 组中,选择 Show Center 复选框标注峰值的中心位置,选择 Show Label 复选框在峰值的中心位置标注峰的横坐标值。

选择数据组 Data1_B,按照图 10.55 中的设置,单击 Find Peaks 按钮,Origin 根据设置自动找到峰值点,标注在数据曲线上,并将数据保存到一个隐藏的 Worksheet 窗口中,如图 10.56 所示。

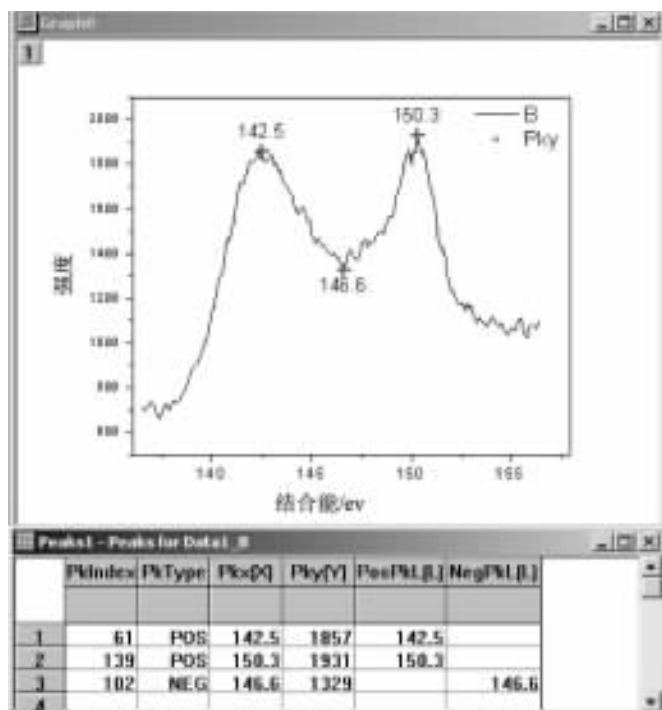


图 10.55 Pick Peaks 工具框

图 10.56 数据 Data1_B 的拾取峰值结果

图中的峰中心位置的符号标注和文本标注可以在 Plot Details 对话框的 Symbol 和 Label 选项卡进行个性化,包括符号标注的形状、大小、颜色和位置,文本的字体、颜色和位置等。

10.5.2 基线工具

分析峰的积分面积时,基线工具是非常有用的,该工具除了得到峰到基线或到 X 轴的积分面积外,还具有拾取峰功能、可以获得峰的宽度以及基线的数据。

选择 Tools| Baseline 打开 Baseline 对话框,包括 Baseline, Peaks 和 Area 三个选项卡。

● 设置基线工具

Baseline 选项卡用于设置基线参数,找到最佳基线,包括三组选项,如图 10.57 所示。

Create Baseline 提供了三种基线生成方式。

- 选择 Automatic 复选框,在后面的 # Pts 文本框中输入基线的点数, Origin 根据设置方式计算基线,在相应的下拉列表中包括四种基线计算方法: ① End weighted, 首先确定两边的端点, 默认情况下, 将原始数据两端的 1/8 处数据作为基线两端的坐标, 然后将很多点数使用相邻平均法 (Adjacent Averaging) 得到平滑数据组, 最后根据平滑数据组和端点数据使用内插法确定基线数据组; ② Entire Data w/o Smooth, 将很多点数使用相邻平均法 (Adjacent Averaging) 得到平滑数据组, 根据平滑数据组和原始数据组使用内插法确定基线数据组; ③ Entire Data w/ Smooth, 用 Savitzky-Golay 滤波器平滑原始数据, 然后用 Entire Data w/ Smooth 运算法则确定基线; ④ Positive Peak Algorithm, 假定只有正峰, 先确定正峰的位置, 将每个峰连接起来构成基线。
- 选中 User - Defined Equation 复选框, 在相应的文本框中输入基线方程, 单击 Create Baseline 按钮, 根据基线方程生成基线。
- 如果基线在不同数据组中, 选中 Use Existing Data Set 复选框, 在相应的文本框中输入数据组名称, 单击 Create Baseline 按钮生成基线。



图 10.57 Baseline 对话框的 Baseline 选项卡

单击 Create Baseline 按钮后, 生成的基线数据保存到隐藏的名称为 Base# 的 Worksheet 中。在 Edit Baseline 组中包括三个按钮:

- 单击 Subtract 命令按钮, 用数据曲线减去基线;
- 单击 Undo Subtraction 命令按钮, 撤消相减操作;
- 单击 Modify 命令按钮, 自动启动 Data Reader 工具, 拖动基线上的数据点或使用

上下左右键,实现对基线的修改,同时对应的 Worksheet 数据也作相应的修改。
选中 Data1_B,按照图 10.57 中的设置生成基线,单击 Modify 命令按钮,对基线进行修改,如图 10.58 所示。

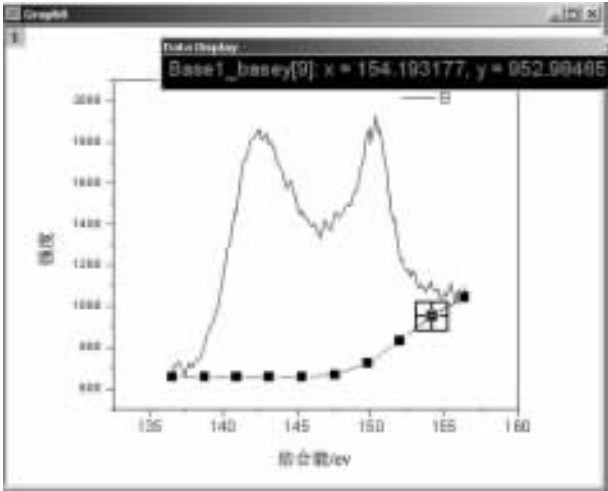


图 10.58 自动生成并修改基线

● 基于基线的拾取峰工具

基于基线的拾取峰工具(Pick Peaks on the Baseline)和拾取峰工具(Pick Peaks)类似,区别仅在于它是以基线为依据的,Peaks 选项卡如图 10.59 所示。

- Peak Properties 组中,Minimum Width 和 Maximum Width 文本框中的数字为源数据范围(X 值范围)的百分比,峰必须落在这个范围里面,Minimum Height 文本框中的数字为源数据幅度(Y 值范围)的百分比,此值越小,可能获得的峰越多。
- Display Options 组中选中 Labels,Base Markers 和 Center Markers 分别显示峰的中心的横坐标值、标记峰的边缘和峰的中心。

对图 10.58 中的数据组 Data1_B,按照图 10.59 中的设置,单击 Find Peaks 按钮(单击该按钮之前最好定义基线),Origin 寻找正峰和负峰,将峰值保存在一个名称为 BsPeak# 隐藏的 Worksheet 中,并在 Graph 窗口中显示峰位,如图 10.60 所示。

● 面积工具

面积工具主要用于计算数据曲线对基线或对 X 轴的积分面积,Area 选项卡如图 10.61 所示。

- 在 Integral Curve 组中,设置积分曲线的显示方式:选中 Not Created 复选框,不显



图 10.59 Baseline 对话框的 Peaks 选项卡

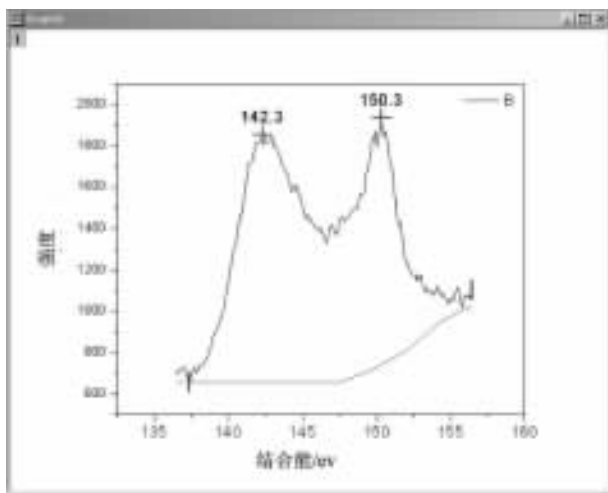


图 10.60 根据基线拾取的峰值

示积分曲线;选中 Add to Graph 复选框,在 Graph 窗口中绘制积分曲线;选中 Make New Graph 复选框,在新 Graph 窗口中绘制积分曲线。

- 选中 Use Base Markers 复选框,只对峰边缘里面的部分积分,这时在 Integral Curve 组中的几个复选框处于不激活状态。
- Integrate 组中,有两个按钮:单击 Use Baseline 按钮,计算数据曲线和基线之间的积分面积;单击 From Y=0 命令按钮,计算数据曲线和 $Y=0$ (X 轴)之间的积分面积。

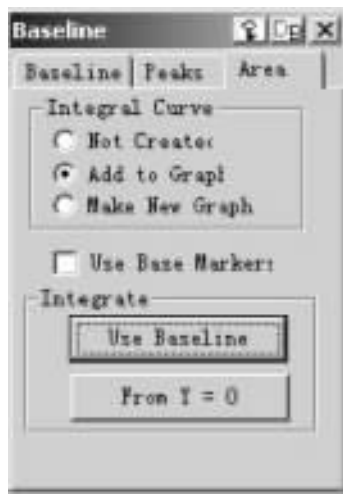


图 10.61 Baseline 对话框的 Area 选项卡

对图 10.60 中的数据组 Data1_B, 按照图 10.61 中的设置,先后单击 Use Baseline 和 From Y=0 命令按钮后,Origin 计算积分面积,在 Graph 窗口中绘制积分曲线,如图 10.62 所示,在 Worksheet 窗口 Data1_B 列后面保存积分曲线数据。

并在 Result Log 窗口中输出下列积分结果,包括积分面积、中心和高度。其中上面的结果是单击 Use Baseling 计算的积分面积;下面的结果单击 From Y=0 计算的积分面积。

[2003-04-14 20:01 "/Graph8" (2452743)]

Area	Center	Height
11998.41021	142.5	1198.66667

11998.41021	142.5	1198.66667
-------------	-------	------------

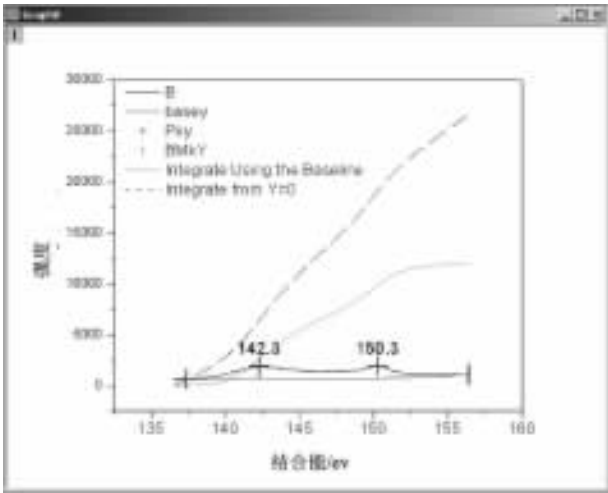


图 10.62 用基线和 X 轴积分

[2003-04-14 20:02 "/Graph8" (2452743)]

Area	Center	Height
26607.06833	150.3	1931.66667

第 11 章 Origin 中的程序

Origin 除了提供使用方便的工具和菜单命令外,还提供了程序语言,满足高级用户(如从事科学、工程等领域的用户)进行自定义操作,执行常用工具不能完成的功能,包括添加命令生成新的数据导入、分析、制图方式和导出路由,自动完成部分工作。

Origin6.1 以前的版本中的程序语言叫做 LabTalk,是 OriginLab 的程序语言,运行 Origin 时由 LabTalk 脚本解释执行。Origin7.0 程序语言进行很大地升级,称作 Origin C,Origin C 支持几乎所有的 ANSI C 语法,支持包括内在的、增强的 DLL C++ 特征,本章就 LabTalk 和 Origin C 的结构方法做简单介绍。

如果读者学过 C 或 C++ 语言的话,使用 Origin C 时会很方便的。

本章的主要内容:

- LabTalk 语法;
- LabTalk 结构;
- Origin C 及其代码编辑器;
- 编辑 Origin C 函数;
- 调用 NAG 函数。

11.1 LabTalk 语法

LabTalk 是一种功能完整的程序语言,是通过 Script 窗口来实现的,前面的章节中已经涉及到简单的 Script 程序,本节重点对变量字符串等作简单介绍,只介绍其一般用法。

选择 Window| Script Window 或单击 Standard 工具条上的 Script Window 按钮,打开 Script 窗口。

LabTalk 支持 5 种类型声明 (Statement) 语句:赋值 (Assignment)、宏 (Macro)、命令 (Command)、算术 (Arithmetic) 和函数 (Function)。

注意:若要执行一个程序,程序窗口必须处于 Script Execution 模式,在 Script 窗口的 Edit 菜单中选中 Script Execution,进入 Script Execution 模式。

在 Script 中可以执行所有 Origin 内置函数和用户自定义函数。

11.1.1 赋值声明

赋值声明 (Assignment) 的格式为 `dataObjectName = expression`,将 `expression` 赋值给

dataObjectName, 如果 dataObjectName 不存在, 则生成。赋值声明包括下列类型:

- 如果 dataObjectName 为 %A~%Z 的话, 是字符串变量;
- 如果 expression 是数, 则生成变量;
- 如果 expression 为数据范围的话, 生成数据组。

当新值赋给数据对象时, 遵从下列规则:

- 如果 dataObjectName 是数据组, expression 是数, dataObjectName 中的数值均设置为 expression;
- 如果 dataObjectName 是变量, expression 必须是数值, 如果 expression 是数据组, dataObjectName 获得数据组的第一个元素;
- 如果 dataObjectName 和 expression 都是数据组, 将 expression 中的数据赋给相应 dataObjectName 的位置上。

例如: “B=2; Test=B*3”最后的结果是 Test=8, “%A=Austin TX”将 Austin TX 赋给字符串 %A; “Data1_B=4”将 Data1_B 列所有值为 4; “Data1 ! wks. rhw=100; doc-uw;”将 Data1 行标头的宽度设置为 100。

11.1.2 算术声明

Script 窗口可以用来执行简单的算术计算, 算术(Arithmetic)声明的格式为:

dataObject1 operator dataObject2

其中的 dataObject1 是数据组或数据变量, dataObject2 是数据组、变量或常数, 运算符 operator 可以是“+”, “-”, “*”, “/”, “^”。

在 Script 窗口中输入完程序后按 Enter 键, 此时从该行开始处到光标处的文字被作为一个程序输到编辑器, 执行程序命令, 按 Enter 键后, Origin 会在行末尾自动添加分号, 表示该程序已经被执行。

如在 Script 窗口中输入“2+20=<Enter>”, 则显示为:

```
2+20=;
2+20=22
```

注意: 在 Script 窗口输入程序时, 不要在结尾加分号, 只需按 Enter 键, Origin 会自动添加分号, 否则 Origin 会认为该程序已经执行过了。

如果输入多行命令, 而又不想每次都执行, 在每行末尾加分号, 换行时用 Ctrl+Enter 组合键, 最后选中所有命令行, 如图 11.1 所示, 按 Enter 键, 执行多行命令。

本章中程序语句末尾的<Enter>表示按 Enter 键。

11.1.3 Origin 的宏

添加新命令需要用到宏(Macro), 定义了一个宏后, 这个宏就和一个完整的脚本相联系, 宏的名称也就变成了脚本命令, 可以通过其他命令来调用了。

使用宏有以下优点:

- ① 对于重复操作, 可以重复调用一个宏命令来完成而不必重复程序, 节省空间;
- ② 便于阅读修改程序, 只需修改宏定义即可, 不必重复修改模块代码;

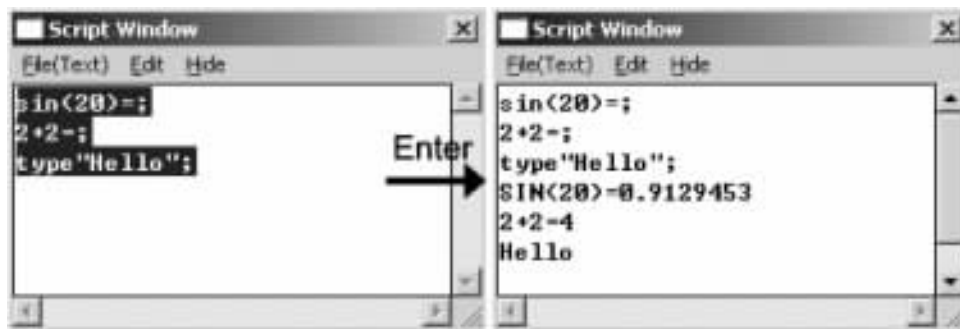


图 11.1 Script 窗口执行多行命令

③ 可以通过生成相同名称的宏来修改 LabTalk 命令, 因为删除宏时, 可以恢复 LabTalk 命令的功能。

● 宏的定义

宏命令的定义格式是:

```
def macroName
{
script
}
```

开头为宏的名称, 括号中为宏的具体描述, 如在 Script 窗口中输入:

```
def morning
{
type-b "Good morning";
}
```

那么在 Script 窗口中输入 morning <Enter>, 则弹出 Good morning 提示框。

宏最多可以包含 5 个循环, 用 %1, %2……表示。循环可以是数字、字符串、变量、数据组、函数, 甚至可以是脚本命令。循环对于 Origin 宏来说, 类似于 MS-DOS 中的批处理循环, 如含有循环的 goodbye 宏定义:

```
def goodbye
{
  %Z=%1 %2 %3 %4 %5;
  for (ii = 1; ii <= macro.nArg; ii++)
  {
    type "$ (ii). Goodbye %[%Z, # $ (ii)]";
  };
}
```

该命令用 macro.nArg 来决定循环的次数, 在 Script 窗口中输入 goodbye Ashley Megan Amanda <Enter>, Origin 执行宏命令, 并输出:

```
goodbye Ashley Megan;
```

1. Goodbye Ashley
2. Goodbye Megan

若输入 goodbye Ashley Megan Amanda <Enter>, 则输出:

```
goodbye Ashley Megan Amanda Elizabeth;
```

1. Goodbye Ashley
2. Goodbye Megan
3. Goodbye Amanda
4. Goodbye Elizabeth

最多可以输入 5 个名字, 如果多于 5 个, 只执行前 5 个循环。

定义了宏命令后, 就可以在其他窗口中像调用 LabTalk 命令一样调用了, 如在 *. OGS 文件中。

● Origin 系统定义的宏

在 Script 窗口中输入 list m <Enter>, Origin 显示系统定义的宏, 显示如下:

```
0 ARRANGELAYERS
1 BEFOREITERATE
2 BEGINSAVE
3 CHECKMARGINS
4 CHECKVAR
5 CHECKWKSSELECTION
.....
```

共 45 个宏定义。

要查看宏的具体定义, 输入 Def macroname, 如输入 Def graph <Enter>, 则显示为:

```
{
set %1-s 1; layer-i %1
}
```

要调用该函数的话, 输入 Graph data1_b, 则用数据 data1_b 在 Graph 窗口中制图。

可以重新定义 Graph 宏为:

```
def graph
{
set %1-s 1; layer-i201 %1;
set %1-c %2; set %1-k %3;
}
```

其中的 def graph 表示宏定义的开始, 语句 set dataset-s value 设置制图, dataset 为数据集, value 的值为 1(显示图形)或 0(隐藏图形); layer-igraphType dataset 设置图形类型; set-c color# 设置图形符号颜色; set-k shape# 设置图形符号的形状。

11.1.4 函数声明

函数(Function)声明包含关于函数特征的所有语句, 不同的函数类型和提供不同的循环,

返回值可以是单个数据或数据组。

这里针对图 11.2 的 Worksheet 窗口进行函数举例。

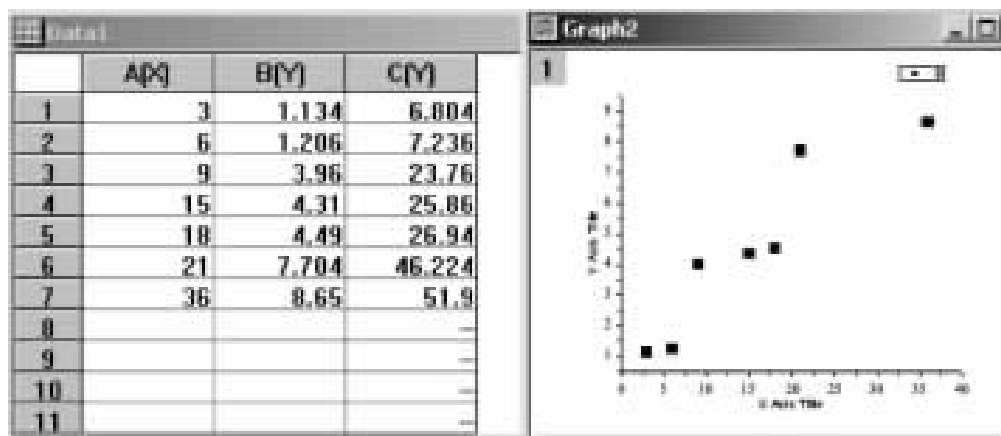


图 11.2 Worksheet 数据及其 Graph 图形

● 读取单元格数据

使用单元格表示读取数据,格式为 `cell(rowNumber,columnNumber)`,在 Script 窗口中输入 `cell(3,2)=<Enter>`,显示为:

```
cell(3,2)=;
CELL(3,2)=3.96
```

也可以使用列名称和行号读取单元格数据,在 Script 窗口中输入 `col(B)[3]=<Enter>`,Origin 返回值为:

```
COL(B)[3]=3.96
```

也可以使用完整的数据表示方法 `worksheetName_columnName[rowNumber]`,如在 Script 窗口中输入 `Data1_B[3]=<Enter>`,Origin 返回值为:

```
DATA1_B[3]=3.96
```

Origin 用字符串 %H 表示当前激活的窗口,如 `%H_B[3]=` 的返回值为:

```
%H_B[3]=3.96
```

线性插值法读取数据用 `()` 代替 `[]`,如输入 `data1_b(8)=<Enter>`,Origin 返回值为:

```
DATA1_B(8) =3.042
```

即根据图形曲线找到 $X=8$ 时的 Y 值。

赋值语句用 `%(worksheetName, columnNumber, rowNumber)` 表示,如输入 `A=%(Data1,2,3) <Enter>`,再输入 `A=<Enter>`,Origin 返回值为:

```
A=3.96
```

● 填充数据

在 Script 窗口中输入 `col(A)=data(1,50) <Enter>`, 给 A 列填充 50 个数值, 1~50; `col(A)=data(10,10,5) <Enter>` 用 10 填充 A 列前 5 行。

在 Script 窗口中输入 `col(A)={1,2,5,12,13,15,21} <Enter>`, 用括号中的数字分别填充 A 列中的前 7 个单元格。

● 数学运算

在 Script 窗口中输入 `col(C)=col(B)*col(A)[2] <Enter>`, 则 C 列的数据变为 B 列数据乘以 (`col(A)[2]` 单元格数据)。

其他合法语句如 `col(B)=col(B)*col(A)`, `col(B)=col(B)*3`, `col(A)*=3` 和 `int(7.9)=` 等。

11.1.5 命令声明

LabTalk 通过命令来控制执行大部分程序函数。每个命令 (Command) 声明从命令开始, 有惟一的、确定的缩写 (大部分情况下可以缩写到两个字母), 大部分命令声明有选项, 通常还有循环。命令的通用格式是:

```
command [option] [argument(s)]
```

如 Script 窗口输入 `type "Hello" <Enter>`, 则显示为:

```
type "Hello"
Hello
```

另一种命令声明是对象程序, 直接执行和对象名称相联系的程序, 对象程序的语法是: `ObjectName.Method([options])`

如 `wks.addcol(newcolumn)`, 在激活的 Worksheet 窗口中生成名称为 newcolumn 的新列; `repeat 3 {type-b "Hello World"}`, repeat 命令执行 3 个循环, 输出 3 次 Hello World 提示框。

又如下面的例子是修改图形特征。

首先用数据 data1_B 制图, 如图 11.2 所示。

改变符号类型: 在 Script 窗口中输入 `set %C-k 3 <Enter>`, 符号变为正三角行, 如图 11.3(左图)所示。符号类型和数字对应关系为: 1=方形, 2=圆形, 3=正三角等, 参考 4.8.1 小节的 Symbol 标签。

改变符号颜色: 在 Script 窗口中输入 `set %C-c 2 <Enter>`, 颜色由黑色变为红色。颜色和数字对应关系为: 1=黑色, 5=红色等。

改变坐标轴的刻度范围: 在 Script 窗口中输入 `X1=0; X2=30; Y1=0; Y2=10 <Enter>`, 坐标轴变为 X 轴显示 0~30 范围, Y 显示 0~10 范围, 如图 11.3(右图)所示。

输入 `Set %C -b 2 <Enter>`, 从第 2 个数据点显示数据曲线; 输入 `Set %C -e 5 <Enter>`, 曲线在第 5 个数据点处结束; 输入 `Set %C-s 0`, 隐藏数据曲线; 输入 `Set %C-s 1`, 显示数据曲线。

Origin 提供了大量的命令, 参考附录 B1 或选择 Help | Programming | LabTalk Reference。

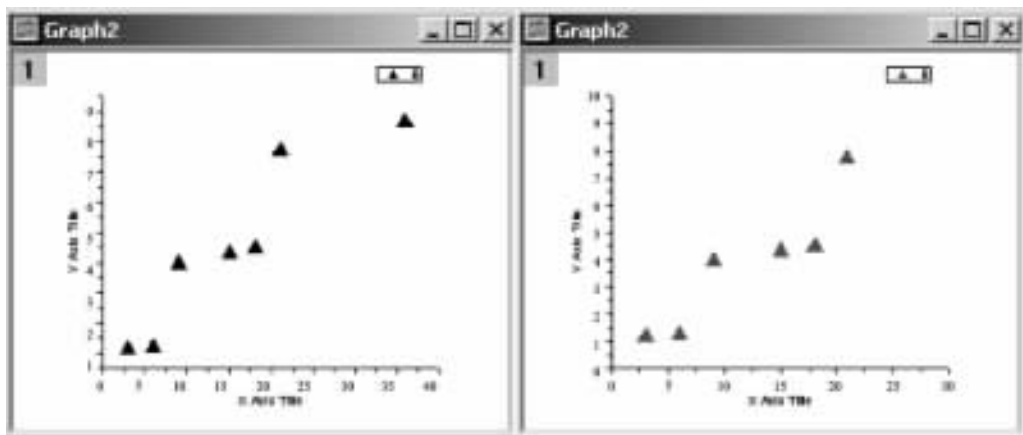


图 11.3 用 LabTalk 命令改变符号的形状、颜色和坐标轴的显示范围

11.1.6 替换表示

LabTalk 编译器在执行脚本程序时,会搜索两类特殊的替换表示,分别以 \$ 或 % 为首字符,如果发现的话,会直接被送到替换处理器,用后面的字符代替原来的字符。替换字符 \$() 和 %() 总会进行替换处理,即使其包含在引号里作为文本字符串的一部分也是如此。

● %() 替换表示

在程序执行过程中,包含在 %() 中的 Worksheet 信息被他所表示的信息所代替。

① 返回单元格内容,使用语句:

`%(worksheetName, columnNumber, rowNumber)`

如 data1 的第 4 行第 1 列的值为 15,命令“`A = %(data1,1,4);`”的结果为“`A=15`”。

要获得文本内容,用“`%A = %(data1,2,4);%A=`”语句。

② 返回数据组名称,用语句:

`%(worksheetName,columnNumber)`

如“`%A = %(data1,2);%A=`”的结果是“`Data1_B`”。

③ 返回列卷标,用下列语句:

`%(columnNumber, @L)`

如“`%N = %(2, @L);%N=`”的结果为“`B`”。

④ 要获得其他 Worksheet 列的信息,用下列语句:

`%(worksheetName, @option, columnNumber)`

如“`N= %(data1, @ #, 2);`” 结果为“`N=3`”,返回的是列的总数。

其他选项可参考 Help | Programming | LabTalk Reference | Overview of the LabTalk Language。

● \$() 替换表示

\$() 替换用来实现从数值向字符串的转换,程序运行时计算给定的表达式,将结果转换为数值字符串,然后再替换字符串本身。

这种替换表示的格式为:

\$ (expression)

这种表达式在输出计算结果时是很有用的,其中的 expression 可以是数学表达式。例如下列语句:

```
K = 9;
type "K";
type "$ (K)";
```

第一个语句里,9 被赋值给 K,第二个语句是输出给定的字符串,结果为“K”。第三个语句的替换法将 K 值表示出来,输出结果是 9。但如果赋给变量的值是负数的话,需要再加个括号,即 type "\$ (K)”。

在赋值语句中,\$ () 表示是个替换过程,不管赋值操作符在哪边,都会获得一个值。

下面的例子可以充分理解 \$ () 替换表示的功能:

```
A=2; //创建了值为 2 的变量 A
A $ (A)=3; //创建了变量 A2(因为 $ (A)的值是 2),其值为 3
type"A $ (A+1)= $ (a)+b"; //输出结果为“A3=2+b”
```

该表示法可以和 C 语法结合在一起使用,如下列程序:

```
x=1.23456; //创建变量 x,值为 1.234 6
type "x = $ (x, * 3)"; // * 3 显示 x 三位有效数字,输出结果为 x = 1.23
type "x = $ (x, . 3)"; //. 3 显示小数点后面三位数,输出结果为 x = 1.235
type "x = $ (x,S* 3)"; //S* 3 转换为科学计数法表示,有效数字为 3 位,结果为 x=1.23E0
```

用 D 可以将数值转换为时间字符串,其中的 D 后面的数字是 Worksheet Column Format 对话框中 Date Format 下拉列表中的条目索引,如返回当前的时间用下列语句:

```
type "$ (@D, D10)";
```

输出结果为“2003 - 05 - 06 10:29:56”。

11.2 LabTalk 结构

LabTalk 语言的结构和 C 相似,支持循环和判断结构。

11.2.1 循 环

循环在特定条件下重复执行,LabTalk 有四种循环命令:

- ① repeat 循环用于不需要任何改变的重复操作;
- ② loop 在执行过程中随着特定变量增加而循环;
- ③ doc-e, 当执行脚本命令影响到某一对象如 Graph 窗口时,使用 doc-e;
- ④ for 循环用于除以上所指以外的其他情况。

下面介绍上述四种循环命令。

● Repeat 命令

Repeat 命令是最简单的循环,用来重复执行固定次数的某项操作,语法结构为:

```
repeat numberTimes {script}
```

如在宏的定义中用到的循环,又如:

```
repeat 2 { win-t plot pan9; };
```

该命令是按照 pan9. OTP 模板创建两个 9 屏 Graph 窗口,运行结果如图 11.4 所示。

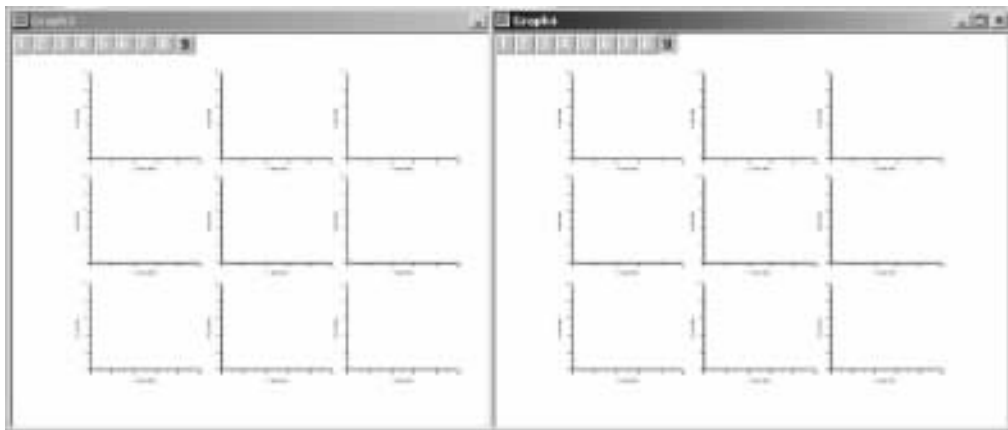


图 11.4 创建两个 9 屏 Graph 窗口

● Loop 命令

Loop 命令随着某个变量每次增加 1,执行循环程序,语法结构为:

```
loop (variable, start, end) {script}
```

括号()中用于设置变量的名称、起始值和结尾值,相当于 for 循环命令:

```
for (Variable = Start; Variable < End; Variable = Variable + 1) {script}
```

如下列循环语句用来输出 Data1 第 2 列中第 2 行到第 7 行的数值:

```
loop (num, 2, 7)
{
    data = %(Data1, 2, $(num));
    type "Row $(num) value is $(data)";
}
```

对图 11.2 中的 Worksheet 输出的结果为:

Row 2 value is 1.206

Row 3 value is 3.96

Row 4 value is 4.31

Row 5 value is 4.49

Row 6 value is 7.704

Row 7 value is 8.65

● Doc-e 命令

Doc-e 命令对特定对象执行所有操作,语法结构是:

```
doc-e objectType {script}
```

有效的 objectType 类型如下：

- ① D: 如果激活的是 Graph 窗口, 包含激活层中的所有数据曲线, 如果激活的是 Worksheet 窗口, 包含窗口中的所有数据组;
- ② DY: 如果激活的是 Graph 窗口, 包含激活层中除误差线和标签外的所有数据曲线, 如果激活的是 Worksheet 窗口, 包含窗口中的所有 Y 数据组;
- ③ G: 包含激活 Graph 窗口层中、激活的 Worksheet 窗口或 Layout 窗口中所有的标签和其他对象;
- ④ L: 激活窗口中的所有层, 对 Graph 窗口来说可以是多层, 对其他窗口来说, 只有一层;
- ⑤ LP: 所有 Graph 窗口中的所有层;
- ⑥ LW: 当前窗口中的所有层;
- ⑦ M: Project 文件中的所有 Matrix;
- ⑧ O: Project 文件中的所有非最小化窗口;
- ⑨ P: Project 文件中的所有 Graph 窗口;
- ⑩ S: Project 文件中的所有数据组;
- ⑪ W: Project 文件中的所有 Worksheet。

Doc-e 命令用来激活一个对象并执行相关程序, 循环到每个特定类型的对象都被激活, 如:

```
doc -e L
{
    layer-a;
    x1 = 0;
    type "Window: %H, layer number: $(page.active)";
};
```

该程序重新标定 Project 中所有层的坐标轴, 使得显示所有数据, 设置 X 轴初始值为 0, 并在 Script 窗口中输出窗口名称及其层数, 如某个 Project 文件的输出结果为:

```
Window: Data1, layer number: 1
Window: Graph2, layer number: 1
Window: Graph1, layer number: 1
Window: Graph1, layer number: 2
Window: Graph1, layer number: 3
Window: Graph1, layer number: 4
Window: Data2, layer number: 1
```

● For 命令

For 命令是 LabTalk 程序中灵活性最大、结构最复杂的循环, 与 C 程序中的循环一样, 其格式为:

```
for (expression1; expression2; expression3) {script}
```

expression1 是初始化表达式, expression2 是条件表达式, expression3 是执行过程中的增

长表达式。

执行程序时,先运算 expression1,然后运算 expression2;如果结果为真(非零),继续执行程序;如果表达式 expression2 为假(零),中止循环;expression3 通常是自加 1 运算。

三个表达式都可以包含多个语句,用逗号隔开,expression1 和 expression3 可以为空。

如输出 9×9 乘法口诀表的程序为:

```
for (ii = 1; ii <= 9; ii++)
{
  for (jj = 1; jj <= 9; jj++)
  {
    type "$ (ii) * $ (jj) = $ (ii * jj)";
  }
};
```

注意:如果循环无穷尽地循环运行,则按 Esc 键中止程序循环。

11.2.2 判 断

判断允许程序根据条件执行不同语句,LabTalk 包括 if,if-else 和 switch 三种判断,与 C 程序类似,这里只作简单介绍。

● if 结构

当脚本程序只在特定条件下执行时使用 if 结构命令。语法结构是:

```
if (TestCondition) {script}
```

如:

```
%M = test;
if (%M == "TEST") type-b "Yes !";
```

● if-else 结构

if-else 结构命令有两个判断分支,如果条件为真(非零),执行一个程序;如果条件为假(零),执行另一个程序。语法结构是:

```
if (testCondition) {script1} else {script2}
```

例如:

```
ii = 2;
{
  if (data1_a[ii] > 100) break;
  else ii++;
};
if (ii != $(numPoints + 1))
{
  type-b "The index number of first value >100 is $ (ii)";
  type "first value > 100 is $(data1_a[ii])" ;
}
```

注意:if-else 是一个单独的语句,不要在 if 和 else 指令之间加分号。

● switch 结构

switch 结构命令用于程序中两个以上分支的时候,比其他判断语句更灵活,更复杂。语法结构是:

```
switch (expression)
{
case 1:
script
break;
case 2:
script
break;
.....
case n:
script
break;
default:
script
break;
};
```

switch 提供多重判断,从多种选择中选取一种,执行程序,如果没有一种情况和 switch 表达式匹配,执行默认程序。

注意:在使用时,可以不选用默认情况,但一定要预先设置好默认状态。

例如:

```
GetString "Enter a string";
switch (%B)
{
case "a":
type-a "You entered an 'a.' ";
break;
case "b": CASE "c":
type-a "You entered a 'b' or 'c.' ";
break;
case "A":
type-a "You entered an 'A.' ";
break;
case "A" "B" "F" to "Z":
type-a "You entered 'A' or 'B' or between 'F' and 'Z.' ";
break;
case 1 2 5 to 7:
type-a "You entered 1 or 2 or between 5 and 7. ";
```

```

    break;
default:
    type-a "No match, this is the default case.";
    break;
}

```

switch 括号中的表达式是字符串变量。

11.3 Origin C 及其代码编辑器

Origin C 是 Origin 和 OriginPro 内置的程序语言,是 Origin7.0 的新功能,以 ANSI C 程序为基础,用 Origin C 编辑的程序链接到 Origin 中,为用户提供了分析编辑 Origin Project 文件的功能。

Origin C 支持几乎所有的 ANSI C 语法,支持包括内在的、增强的 DLL C++ 特征,Origin 将对象文件,如 Worksheets 和 Graph 等映射到 Origin C 的不同类别,可以通过 Origin C 直接处理这些对象,也可以生成新命令。

11.3.1 Origin C 的代码编辑器

单击 Origin7.0 Standard 工具条上的 Code Builder 按钮,打开代码编辑器(Code Builder),如图 11.5 所示。代码编辑器是 Origin C 的综合开发环境(Integrated Development Environment, IDE),为撰写、编辑和调试 Origin C 程序提供了标准工具。编辑了 Origin C 函数后,可以通过不同的方式来调用。

工作区(Workspace)是文件的组织工具,像资源管理器一样以树形结构显示文件,帮助用户管理程序。通过代码编辑器的菜单命令 File| Open Workspace 打开文件 *.OCW,可以包含源文件、标题文件(header 文件, *.h)、LabTalk 脚本文件(*.ogs)、C 文件(*.c)或文本文件(*.txt)。

工作区中的所有文件都在多文件界面(Multiple Document Interface, MDI)中打开、编辑和保存,并且,原代码文件也可以通过 File| Add to Workspace 添加到工作区窗口中。

工作区窗口包含原代码文件时,可以使用菜单命令或工具生成文件,标题文件是引用源文件的,不必加载到工作区窗口。

在工作区窗口只能打开一个工作区文件,双击某个函数,在 MDI 窗口中激活该窗口。

当首次打开编辑器时,显示一个默认的工作区窗口,名称为 Untitled.ocw,也可以选择 File| New Workspace 生成新工作区,或选择 File| Open Workspace 打开工作区。如果已经打开了工作区,则会弹出提示框询问是否保存已有的工作区。要保存工作区文件,则选择 File | Save Workspace As 或 File | Save。

如果想把 MDI 窗口中的文件添加到工作区中,激活该文件窗口,选择 File| Add to Workspace 或按下快捷键 Ctrl+W。如果想添加其他文件,从工作区窗口名称的右击快捷菜单命令中选择 Add Files,如图 11.5 所示。在图中,文件 Good.c 和 myfunction.c 已经添加到工作区中。



图 11.5 代码编辑器工作环境

文件也可以添加到 MDI 窗口中,但只有在工作区中的程序才能被编辑。

LabTalk 控制台是执行 LabTalk 脚本命令的窗口,多数情况下,编辑过程中可以使用 LabTalk 控制台调用 Origin C 函数,在结果输出窗口中解释导出结果。

11.3.2 Origin C 文件及其管理

MDI 窗口中,可以打开下列文件,这些文件也可以添加到工作区窗口中:

- ① 源文件(Source Files),包含 Origin C 函数,编辑后可以被 Origin 调用,其扩展名为 *.c;
- ② 标题文件(Header Files),包含 Origin C 函数原代码和宏定义,其扩展名为 *.h;
- ③ LabTalk Script 文件,包含 LabTalk 脚本命令,可以在 Origin 中运行,也可以调用 Origin C 函数,其扩展名为 *.ogs;
- ④ 文本文件,用于文件程序注释,也可以用于 LabTalk 脚本,扩展名为 *.txt。

LabTalk Script 文件有包含两类特殊的文本文件:

- ① 配置文件(Configuration files),用于定义 LabTalk 变量、宏、函数及新命令,扩展名为 *.cnf,在代码编辑器中生成的新配置文件扩展名是 *.txt,可以在资源管理器中将其扩展名改为 *.cnf;
- ② 初始化文件(Initialization files),可以预置许多 Origin 选项,如预览 Origin.ini 文件,扩展名为 *.ini,但在代码编辑器中生成的初始化文件扩展名是 *.txt,在资源管理器中可以将它改为 *.ini。

● 生成新文件

选择代码编辑器命令 File| New 或单击 New 按钮 ,打开 New File 对话框,如图 11.6

所示,单击 OK 按钮,就在 MDI 窗口中生成了一个文件。

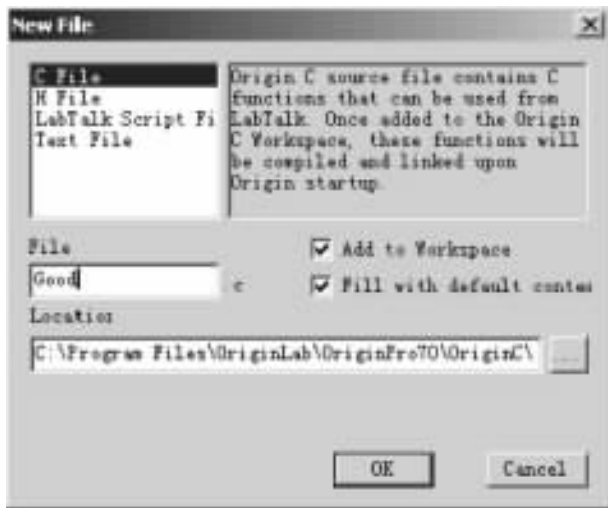


图 11.6 New File 对话框

选择合适的类型,输入文件名,这里我们输入 Good。如果选择 C 文件,则还有两个选项可以选择:

- ① 选中 Added to Workspace 复选框,直接将文件添加到工作区中,不选该复选框,则只打开文件而不添加到工作区;
- ② 选中 Fill with Default Contents 复选框,新文件将以下述方式开头。

```

/* ----- *
 * File Name: *
 * Creation: *
 * Purpose: OriginC Source C file *
 * Copyright (c) ABCD Corp. 2000, 2001, 2002, 2003, 2004, 2005, 2006, 2007 *
 * All Rights Reserved *
 * *
 * Modification Log: *
 * ----- */

```

```

////////////////////////////////////
// you can include just this typical header file for most Origin built-in functions and classes
// and it takes a reasonable amount of time to compile,
#include <origin.h>
// this file include most of the other header files except the NAG header, which takes longer to compile
// NAG routines
// #include <OC_nag.h> // this contains all the NAG headers,

```

```

////////////////////////////////////

```

```
////////////////////////////////////
```

```
// start your functions here
```

开始部分是注释语句(以“/”或“//”开头的句子),然后是预处理指示 #include <origin.h>。除了 NAG 标头文件外,所有的 origin.h 都包含 #include 预处理指示。

在提示行// start your functions here 的下面就可以编辑程序了。

编辑了函数后,要显示函数的定义(FuncDef)、声明(FuncDecl)、类别(Class)、结构(Structure)及定义类型(TupeDef)。在工作区窗口中选中该函数,右击鼠标,选择快捷菜单命令 Show| Type,如图 11.7 所示。选择 FuncDef 后,出现函数定义 void test()。双击 void test(),在 myfunction 窗口中指针指向定义的起始行。

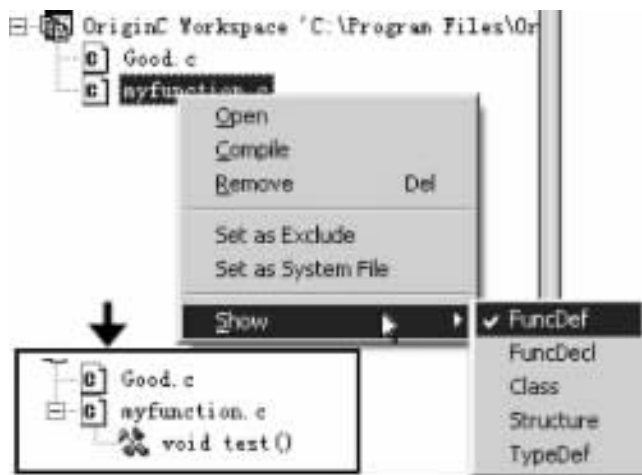


图 11.7 显示函数定义

● 文件的编辑

要编辑一个文件,在工作区窗口中选中该文件名称,选择快捷菜单命令 Compile,如图 11.7 所示;或选中该文件,单击 Compile 按钮 ,则在输出窗口中显示编辑结果:

```
compiling...
myfunction.c
```

如果程序中出现错误的话,也会在这里显示,如:

```
C:\Program Files\OriginLab\OriginPro70\OriginC\myfunction.c(29):Error, general compile error
C:\Program Files\OriginLab\OriginPro70\OriginC\myfunction.c(25):Error, error(s) found in compiling function AsyGauss
```

在错误提示语句处双击鼠标,会激活源文件,并用指针指向错误行。

在编辑过程中要停止的话,单击 Stop 按钮 ;或选择 Tools| Stop Compile;或按下 Ctrl + Break 键。

● 构造工作区

要编辑工作区中的所有文件,采用下列一种操作:

➤ 单击 Build 按钮  或 Rebuild All 按钮 .

➤ 选择菜单命令 Tools| Build;

➤ 按下组合键 Shift+F8。

然后将编辑链接结果在输出窗口中输出。构造工作区后,工作区窗口中的文件前面显示“+”符号,单击“+”号打开文件树,显示函数定义等内容。如果要取消某个文件的构造的话,右击该文件图标,从快捷菜单命令中选择 Set as Exclude。

11.3.3 Origin C 例子

下面介绍生成简单的 Origin C 程序的方法。

① 在// start your functions here 下面输入下列程序:

```
void Simplefunction()  
{  
printf("Good Morning ! \n");  
}
```

② 单击 Build 按钮,Origin 自动保存文件,编辑链接函数,并在输出区中输出下述内容,表示链接完成。

```
compiling...  
Good, c  
Linking...  
Done !
```

③ 编辑好的函数就可以调用了,在 Script 窗口中输入 Simplefunction <Enter>,Origin 输出“Good Morning !”。或者直接在 LabTalk 控制台窗口中输入 Simplefunction <Enter>,则在结果输出窗口中显示:

```
1> Simplefunction  
Good Morning !
```

④ 最后选择 File|Save Workspace As...,保存文件。

11.3.4 系统文件

Origin 用 Origin C 执行分析路由。当运行路由时,Origin C 源文件加载到工作区窗口,处于 Temporary 状态。在工作区窗口的文件名处右击鼠标,选择命令 Show System Files,查看加载的系统文件。

11.4 调用 Origin C 函数

本节不准备详细介绍 Origin C 的变量和字符串等概念,这些内容可参考相关的 C 语言教程或其他程序,重点介绍如何使用代码编辑器将程序和 Origin 的可视化功能链接起来。

注意:使用函数之前,必须将函数编辑链接到当前的 Origin 部分。

11.4.1 设置自动制图模板

现在给 Worksheet 窗口设置一个按钮,单击该按钮,按照设置的模板制图。

● 给 Worksheet 窗口添加按钮

- ① 打开一个 Worksheet 窗口,在窗口的空白处输入文本标签 Plot Data;
- ② 选中该文本标签,右击鼠标选择快捷菜单命令 Label Control 或按下 Alt 键并双击鼠标,打开 Label Control 对话框(参考图 4.84);
- ③ 在 Script, Run After 下拉列表中选中 Button Up;
- ④ 在脚本窗口中输入:

```
run, loadOC("MyPlot.c");           //调用 MyPlot.c 函数
Plot_Data ("LineSymb","data1_b");   //用模板 LineSymb 制图
```

单击 OK 按钮,文本标签变为按钮,如图 11.8 所示。单击该按钮,执行脚本窗口中的命令。

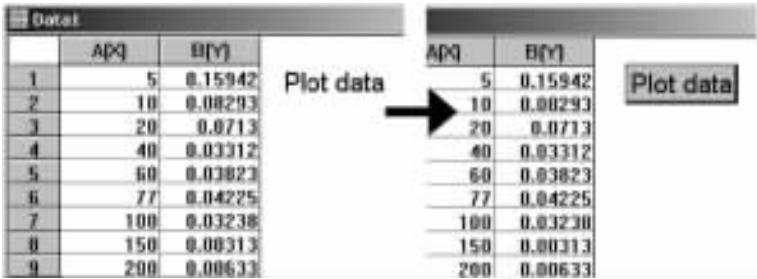


图 11.8 给 Worksheet 添加按钮

● 编辑 Origin C 程序

- ① 在代码编辑器中选择 File| New,打开 New File 对话框;
- ② 在图 11.6 的列表中选中 C 文件,在 File 文本框中输入 MyPlot,选中 Fill with Default Contents 和 Fill with Default Contents 复选框,单击 OK 按钮;
- ③ 在//start your functions here 下面输入下列程序:

```
void Plot_Data(string strTemplate, string strData)
{
    GraphPage grph;
    BOOL bOK = grph. Create(strTemplate, CREATE_VISIBLE);
    if (! bOK)
        return;           //根据模板生成 Graph 窗口
    GraphLayer grlay = grph. Layers(0);
    Curve cv(strData);     //将第一层链接到一个新 GraphLayer 对象
    int nPlot = grlay. AddPlot(cv); //将数据组链接到新曲线对象,并链接曲线对象到
                                //GraphLayer 对象
    if(nPlot>=0)
    {
```

```

grlay, DataPlots(nPlot).SetColor(3, TRUE); //设置曲线颜色为蓝色(3)
grlay, Rescale();
}
}

```

该程序中包含两个循环:模板名称和层中数据组 Y 的名称。

④ 单击代码编辑器上的 Build 按钮, Origin 保存文件, 编辑函数链接, 并在输出区中输出下述内容, 表示链接完成。

```

compiling...
MyPlot.c
Linking...
Done !

```

⑤ 回到 Origin 窗口, 单击 Worksheet Data1 窗口中的 Plot Data 按钮, Origin 根据 Label Control 对话框中的脚本命令, 调用 MyPlot.c 函数, 然后利用 LineSymb 模板将 Data1_B 绘制 Line+Symbol 图形。

11.4.2 在 Graph 窗口中设置分析按钮

在 Graph 窗口添加一个执行 Gauss 函数拟合命令按钮, 采用下述方法。

首先打开一个 Graph 图形, 如图 11.9 所示, 并在窗口中添加文本 Fit Gaussian。选中该文本标签, 右击鼠标选择快捷菜单命令 Label Control 或按下 Alt 键双击鼠标, 在 Label Control 对话框的 Script, Run After 下拉列表中选中 Button Up, 在脚本窗口中输入:

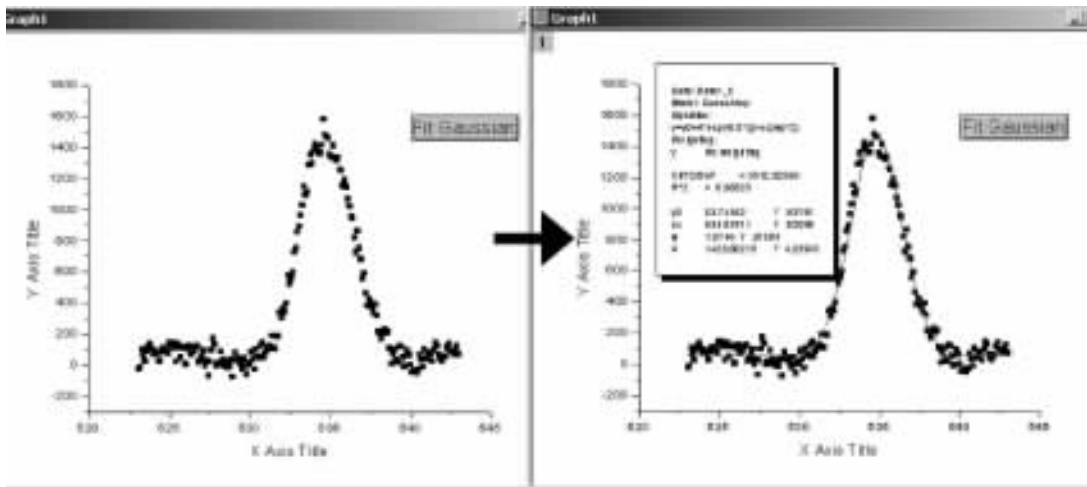


图 11.9 添加 Gaussian 拟合按钮

```

if(run, LoadOC("%xGaussian Fit.c") != 0)
{
    break, close();
    type-b "Error trying to load and compile Origin C file Gaussian Fit.c";
    break;
}

```

```
}
GaussianFit(%c);
```

该脚本命令调用 \OriginPro70\Samples\Programming\NLSF Fitting from Origin c\ Gaussian Fit. C 函数, 单击 Fit Gaussian 按钮, 执行 Gaussian 拟合, 如图 11.9 所示。如果调用不成功的话, 弹出 Error trying to load and compile Origin C file Gaussian Fit. c 提示框。

如果必要的话, 需要将程序 Gaussian Fit. C 打开并和当前 Origin 文件建立链接。

11.4.3 添加 Origin 命令按钮

Origin 的大部分主菜单命令是用 LabTalk 编写的, 每个菜单命令文本是一个 *.ogs 程序片断, 当选择该命令时就会执行该程序。

如果要查看该程序的话, 同时按 Ctrl 和 Shift 键, 选择要查看的主菜单命令或单击相应的命令按钮, 如果该命令包含了程序的话, 就会在显示在多文件界面中。如果按下 Ctrl 和 Shift 键, 选择菜单命令 Column| Add New Column, 则在多文件界面中显示 WKS. OGS 文件, 并用黄色的指针指到 [AddNewCol] 部分, 如图 11.10 所示, 这里可以改变程序, 以改变相应命令执行的操作。

通过上述的方法也可以自定义一个 Origin C 命令按钮。



图 11.10 显示菜单命令程序

● 生成 *.ogs 文件

在代码编辑器中选择 File| New, 在 New File 对话框中选 LabTalk Script File, 并输入文件名 MyButton, 打开一个空 MyButton 文件。

在窗口中输入下列程序:

```
[CreateGraph]
run, LoadOC("MyPlot, c");
Plot_Data("scatter", "data1_b");
```

然后将文件保存到主文件夹 OriginPro70 中。

● 创建命令按钮

在 Origin 中, 选择 View| Toolbars, 打开 Customize Toolbar 对话框, 参考图 2.6。

在 Customize Toolbar 对话框中单击 New 按钮,打开 New Toolbar 对话框,参考图 2.25,输入名称 MyToolbar。

单击 OK 按钮,在 Origin 工作区中添加一个 New Toolbar 工具条,但上面没有任何按钮。

单击 Customize Toolbars 对话框的 Button Groups 标签,打开 Button Groups 选项卡,参考图 2.24。

在 Groups 列表中选中 User Defined,在 Buttons 中出现如图 11.11 所示的按钮,选中第二个按钮.



图 11.11 User Defined 按钮

单击 Settings 按钮打开 Button Settings 对话框,如图 11.12 所示。

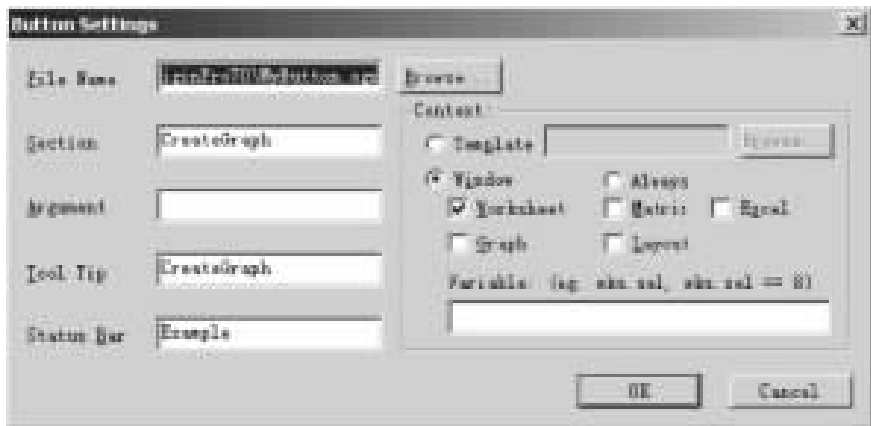


图 11.12 Button Settings 对话框

在 File Name 文本框中输入 C:\Program Files\OriginLab\OriginPro70\MyButton.ogs,在 Section 和 Tool Tip Text 文本框中输入 CreateGraph。

在 Context 组中,选中 Window 和 Worksheet 复选框,将该工具条只应用于 Worksheet,单击 OK 按钮。

用鼠标将按钮拖动到 MyToolbar 工具条上,关闭 Customize Toolbar 对话框。

注意:如果没有创建工具条,直接将按钮拖到 Origin 界面的空白处,可自动生成一个工具条。

这样就定义了一个制图按钮,单击该按钮,调用脚本命令 MyButton.ogs,脚本命令调用 MyPlot.c 函数,根据 MyPlot.c 的设置进行制图。

● 用 Custom Routine 命令按钮调用程序

在 Origin 7.0 中也可以直接使用 Standard 工具条上的 Custom Routine 按钮  来执行程序 MyPlot.c。

单击 Custom Routine 按钮, Origin 执行 Custom. ogs 文件中 [Main] 部分命令, 显示提示信息:

This button calls the [Main] section of the LabTalk file CUSTOM. OGS. You can use this button for your own purposes by editing this file.

可以修改该命令语句, 执行 MyPlot.c 程序。按下 Ctrl+Shift 键并单击 Custom Routine 按钮, 在代码编辑器中打开 Custom. ogs, 该文件在主目录 \OriginLab\OriginPro70\ 中。默认情况下, [Main] 部分程序如下:

```
type-b $General. Userbutton;
```

删除该语句, 输入:

```
run. LoadOC("MyPlot.c");
Plot_Data("scatter", "data1_b");
```

最后保存该文件。那么以后单击 Custom Routine 按钮就执行 MyPlot.c 程序, 按照设置进行制图。

11.4.4 添加菜单命令

可以通过添加菜单命令来调用 Origin C 函数。首先生成定义菜单命令的配置文件, 包括菜单命令运行的脚本文件, 还需要更新 Origin. ini 文件, 才能在运行 Origin 时读入配置文件。

在代码编辑器中选择 File| New, 在图 11.6 的文本框中选择 Text File, 输入文件名 My-menu, 生成一个新文本文件, 在 MDI 中出现空配置文件窗口, 用 LabTalk menu 命令编辑命令, 输入下列程序:

```
menu-w;                //只对 worksheet 有用
menu 4;                s //激活 Plot 菜单
menu (My Own Plot)
{
run. LoadOC("MyPlot.c");
};
```

注意: 保存后文件的扩展名是 *.txt, 必须在资源管理器中将它改为 *.CNF。

在运行 Origin 时执行脚本命令, 必须将脚本命令添加到配置文件 Origin. ini 中, 打开该文件, 在 [Config] 部分为下列语句:

```
Title1=Full Menus
File1=Macros FullMenu
; The names in this list are config file names.
; They are assumed to have the file extension .CNF.
```

- ; Config files must be ASCII files written in the LabTalk script language.
- ; MACROS.CNF; basic macros used by other config files
- ; FULLMENU.CNF; adds to the menu structure for each window

将 File1=Macros FullMenu 修改为 File1=Macros FullMenu Mymenu, 然后保存修改。那么重新运行 Origin 时就会在 Plot 菜单命令中出现 My Own Plot 命令了。

11.4.5 添加 Origin 函数

第 9 章中介绍了对称的 Lorentz 函数和 Gauss 函数, 我们在这里构造一个非对称的 Gauss 函数。

按照上面介绍的方法生成一个 NewFunction.c 函数, 在程序窗口的 // start your functions here 下面输入:

```
//-----
// Asymmetric Gaussian Function
// AsyGauss(x, y0, xc, w1, w2, A) = y0+B * exp(-0.5 * ((x-xc)/w1)^2) while x<xc
//                                     = y0+B * exp(-0.5 * ((x-xc)/w2)^2) while x>xc
//                                     = y0+B while x=xc
//where B=2 * A/((w1+w2) * sqrt(2 * pi))
//-----
double AsyGauss(double x, double y0, double xc, double w1, double w2, double A)
{
    double B;
    B=2 * A/((w1+w2) * sqrt(2 * pi));
    if(x<xc)
    {
        return y0+B * exp(-0.5 * ((x-xc)/w1)^2);
    }
    return y0+B * exp(-0.5 * ((x-xc)/w2)^2);
}
```

然后, 保存函数, 单击 Build 按钮 , 建立函数链接关系。

这时就可以在 Origin 中调用该函数了, 如在 Script 窗口或在 LabTalk 控制台中输入 AsyGauss(1,2,3,4,5,6)=<Enter>, 则会输出 ASYGAUSS(1,2,3,4,5,6)=2.46942, 也可以在其他 LabTalk 脚本命令地方调用。

利用此函数还可以设置 Worksheet 数列。打开一个 Worksheet 窗口, 将 A(X) 设置为行号, 选中 B(Y), 选择 Column | Set Column Values, 打开 Set Column Values 对话框, 参考图 3.17。在 Col(B)=文本框中键入 AsyGauss(i,1,10,2,6,10), 单击 OK 按钮, 得到数据, 将 B 列制图得到非对称 Gauss 曲线, 如图 11.13 所示, 读者可以和图 9.2(c) 比较。

注意: 如果将 w1 和 w2 数值设置相同, 则得到对称 Gauss 曲线。

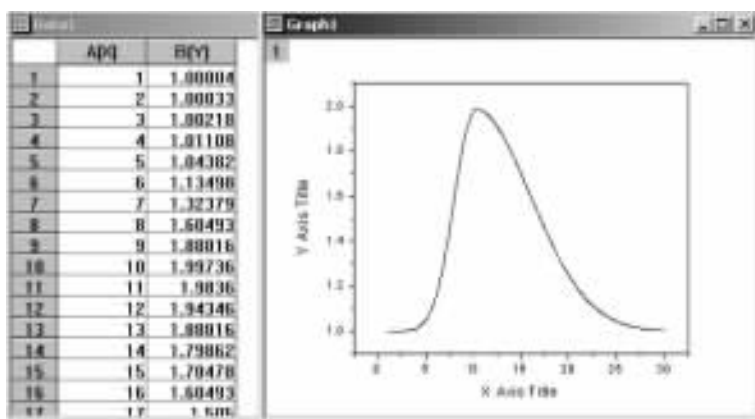


图 11.13 非对称 Gauss 数据及曲线

11.5 调用 NAG 函数

Origin7.0 中包含了大量的 NAG(Numerical Algorithms Group)数字计算路由。这些文件在 NAG C 库中,包括简单的统计、傅里叶变化、线性代数和多变量分析。

11.5.1 NAG 函数

NAG 包括下列函数库:

- a02——复数运算;
- c06——Fourier 变换;
- e01——插值法;
- e02——曲线和表面拟合;
- F——线性代数;
- f06——支持线性代数的函数;
- g01——统计数据的简单计算;
- g02——相关和回归分析;
- g03——多变量方法;
- g04——方差分析;
- g08——非参数统计;
- g11——偶然性表分析;
- g12——存活率分析;
- s——特殊函数近似。

NAG 头文件包含函数的源代码、参数类型、大小和初始值。在 Origin 中调用 NAG 函数和调用其他 Origin C 函数类似,首先熟悉要调用的函数的特征,包括函数的参数和返回值等,调用时还要服从函数调用的要求。

NAG 函数可以从 Origin C 语言参考手册中获得详细的信息,包括 NAG 函数的登录、源

代码、其他描述以及调用函数举例。选择 Help| Programming| Origin C Language Reference 打开 Origin C 语言参考手册,或在代码编辑器中选择 Help| Origin C Language Reference。在 Origin C documentation| Globals 子目录中,每个文件都含有例子,以 #include< > 开头。

另一个获得帮助的方法是打开\Origin\NAG PDF 文件夹中的文件。

11.5.2 调用 NAG 函数

必须通过 Origin C 才能调用 NAG 函数,从 Origin C 调用 NAG 函数和调用其他 Origin C 函数一样,首先熟悉要调用函数的参数及返回值。在编写程序时以 #include< *.h> 开头作为调用 NAG 函数的标志,如 #include <NAG\OCN_g01.h> 其中的 NAG\ 表示文件在\OriginC\System\NAG 文件夹中,如果没有 NAG\ 默认文件夹为\OriginC\System\。

当调用 NAG 函数时,不能直接通过数据组的名称或对象访问,而是在函数中生成一个和 Origin 数据组关联的数据组对象,再生成一个矢量对象,将数据组复制到矢量上,再传递到 NAG 函数。

如果数据组有遗漏的数据,通过矢量传递时也包含遗漏的数据,NAG 函数将不能正确处理这些数据,这种情况下,必须使用下列矢量指针:

```
vector(Dataset &ds, BOOL bRemoveMissingValues = FALSE)
```

下面以\Samples\Programming\NAG 2D FFT\NAG2DFFT.OPJ 为例来说明 NAG 函数的调试和调用过程。

11.5.3 编辑 NAG 函数调用程序

首先打开文件 NAG2DFFT.OPJ 及其程序 NAG2DFFT.c。

- 打开 NAG2DFFT.OPJ 文件,单击 Standard 工具条上的 Code Builder 按钮,打开代码编辑器;
- 选择代码编辑器命令 File| New Workspace,建立新工作区;
- 单击代码编辑器中的 Open 按钮,打开文件\Samples\Programming\NAG 2D FFT\NAG2DFFT.c;
- 在 IDE 界面中激活 NAG2DFFT.c 窗口,选择 File| Add to Workspace 或按下 Ctrl+W 组合键,将程序文件添加到工作区;
- 单击 Rebuild All 按钮,编辑、加载、链接 NAG2DFFT.c;
- 查看 View 菜单命令,确信打开 LabTalk Console 和 Local Variables 窗口;
- 选择代码编辑器命令 Tools| Customize,打开 Customize Toolbar 对话框,确信选中 Debug 和 Search 工具条。

该程序说明了如何生成数据组对象链接到 Origin 数据组,如何生成矢量对象并复制数据组到矢量,该程序调用函数包括:① nag_fft_init_trig(简称 c06gzc)函数,是傅里叶变换函数,根据离散傅里叶变换的三角系数,其详细介绍参考文件\OriginPro70\NAG PDFs\C06\c06gzc_cl05.pdf;② nag_fft_2d_complex(简称 c06fuc),用于根据双变量计算 2D 离散傅里叶变换,详细介绍参考文件\OriginPro70\NAG PDFs\C06\c06fuc_cl05.pdf;③ nag_conjugate_complex(简称 c06gcc)用于计算离散傅里叶逆变换,详细介绍参考文件\OriginPro70\NAG

PDFs\C06\c06gcc_cl05. pdf。调用这些函数的程序如下：

```

/////////////////////////////////////////////////////////////////
//
#include <origin. h>
#include <NAG\NAG_types. h>
#include <NAG\OCN_c06. h>
#include <NAG\OCN_f06. h>
//
/////////////////////////////////////////////////////////////////

int 2DFFT()
{

    // Declare Origin matrices
    Matrix<double> matDataReal("Matrix1");
    Matrix<double> matFFTReal("Matrix2");
    Matrix<double> matFFTImag("Matrix3");
    Matrix<double> matIFFTReal("Matrix4");

    // Declare a local matrix for passing data to and from the NAG function call
    // Note: The NAG function calls used in this example require the matrix data to be passed in an 1D
    // array of type double. However, we can pass the matrix itself and it
    // will be interpreted as an 1D array
    matrix<double> mX, mY;

    // Get dimensions and min/max values of the data matrix
    uint irows = matDataReal.GetNumRows();
    uint icols = matDataReal.GetNumCols();
    double dXMin = matDataReal.GetXMin();
    double dXMax = matDataReal.GetXMax();
    double dYMin = matDataReal.GetYMin();
    double dYMax = matDataReal.GetYMax();

    // Now set the dimensions and min/max values of other matrices
    matFFTReal.SetSize(irows, icols);
    matFFTReal.SetXMin(dXMin);
    matFFTReal.SetXMax(dXMax);
    matFFTReal.SetYMin(dYMin);
    matFFTReal.SetYMax(dYMax);

    matFFTImag.SetSize(irows, icols);
    matFFTImag.SetXMin(dXMin);

```

```
matFFTImag. SetXMax(dXMax);
matFFTImag. SetYMin(dYMin);
matFFTImag. SetYMax(dYMax);

matIFFTReal. SetSize(irows, icols);
matIFFTReal. SetXMin(dXMin);
matIFFTReal. SetXMax(dXMax);
matIFFTReal. SetYMin(dYMin);
matIFFTReal. SetYMax(dYMax);

// Also set the dimensions of the local matrix
mX. SetSize(irows, icols);
mY. SetSize(irows, icols);

// Now clear contents of the matrices that will hold the results
matFFTReal = 0.0;
matFFTImag = 0.0;
matIFFTReal = 0.0;

// Define vectors to hold the trigonometric coefficients.
// The coefficients will be computed by NAG calls
vector vTrigM, vTrigN;
// Set their size appropriately
vTrigM. SetSize(2 * irows);
vTrigN. SetSize(2 * icols);

// Bring up a progress box
progressBox pBox("Performing computations...");
pBox. SetRange(0,100);
pBox. Set(0);

// Now copy the data matrix to the local Real matrix and set the local Imag matrix to zero
mX = matDataReal;
mY = 0.0;

// Call NAG functions to perform 2D FFT
int ierr;
ierr = nag_fft_init_trig(irows, vTrigM);
if(ierr != 0) return ierr;
pBox. Set(10);
ierr = nag_fft_init_trig(icols, vTrigN);
if(ierr != 0) return ierr;
pBox. Set(20);
```

```

ierr = nag_fft_2d_complex(irows, icols, mX, mY, vTrigM, vTrigN);
if(ierr != 0) return ierr;
pBox.Set(50);

// NAG function returns results in the local matrices
// Copy these to the matrices Matrix2 and Matrix3
matFFTRReal = mX;
matFFTImag = mY;

// Now call NAG functions to perform the inverse FFT
ierr = nag_conjugate_complex(irows * icols, mY);
if(ierr != 0) return ierr;
pBox.Set(60);
ierr = nag_fft_2d_complex(irows, icols, mX, mY, vTrigM, vTrigN);
if(ierr != 0) return ierr;
pBox.Set(70);
ierr = nag_conjugate_complex(irows * icols, mY);
if(ierr != 0) return ierr;
pBox.Set(80);

// Copy the Real part of the inverse FFT result to Matrix4
matIFFTRReal = mX;

// Use LabTalk to set z1 and z2 values of result matrices appropriately
LT_execute("run, section( %xNAG2DFFT, c, SetZ);");
pBox.Set(100);
return 0;
}

#ifdef LABTALK
[SetZ]
    // make Matrix2 window active
    window-a "Matrix2";
    // set z1, z2 arbitrarily to -127, 127
    z1 = -127;
    z2 = 127;
    // repeat for Matrix3
    window-a "Matrix3";
    z1 = -127;
    z2 = 127;
    // for Matrix4 set min and max as z1 and z2
    window-a "Matrix4";
    sum(matrix4);

```

```

z1 = sum.min;
z2 = sum.max;
// leave Matrix1 as active window
window-a "Matrix1";
#endif

```

这个程序文件包含了 2D 傅里叶变换的 OriginC 和 LabTalk 代码,使用 NAG 函数进行变换。2D FFT 在 2D 矩阵上执行 FFT,FFT 的实部和虚部分别写到两个矩阵中,然后用实部作 2D FFT 逆变换,得到平滑的图像。

注意:在安装 Origin 时,会提示是否安装 NAG PDF 文件,选择安装,则生成\NAG PDFs 文件夹;如果不选择,则这些文件仍保留在光盘上,以后可以通过 Add or Remove Files 进行安装。

在语句 `#include <NAG\OCN_f.06.h>` 上右击鼠标,选择快捷命令 Open “NAG\OCN_f06.h”,可以打开窗口,查看 NAG 函数的源代码。

11.5.4 分步调试函数

在 NAG2DFFT.c 程序的开头部分,将鼠标放在第一行中,单击 Debug 工具条上的 Toggle Breakpoint 按钮  或按 F9 键,设置调试断点,在旁边的灰色区域出现一个棕色的小圆,如图 11.14 所示,Origin 允许设置多个断点。



图 11.14 设置调试断点及运行程序

在 LabTalk 控制台窗口中输入 2DFFT<Enter>,执行该函数,在结果输出窗口中输出 “1>2DFFT”,表示该程序进入调试状态,运行到了断点处,在该处出现黄色小箭头,如图 11.14 所示,并激活 Debug 工具条上的其他按钮。

重复单击 Debug 工具条上的 Step Into 按钮 ,Origin 一步一步地运行程序,分别调用 `nag_fft_init_trig`,`nag_fft_2d_complex` 和 `nag_conjugate_complex` 等 NAG 函数。

调试过程中,黄色箭头指示调试的位置,变量窗口显示需要的变量,如图 11.15 所示。可以重复单击 Step Into 按钮 ,一步步执行程序,直到程序运行完毕,也可以单击 Step Out 按钮  运行完程序,这时在 Origin 窗口中给出执行 2D FFT 过滤后的图形。

11.5.5 Debug 工具条上的其他按钮

上面已经介绍了 Origin 部分调试按钮,下面介绍 Debug 工具条上其他部分按钮的功能。

- 单击 Go to Origin 按钮 ,连续执行程序到下一个断点处。如果没有其他断点,则执行完该部分函数退出调试状态,返回到代码编辑器界面。
- 单击 Step Out 按钮 ,返回到完成程序执行过程,返回到 2DFFT 函数。

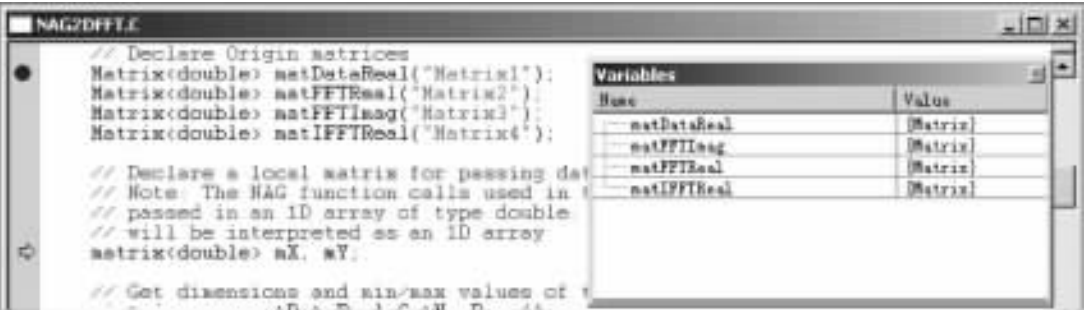


图 11.15 调试过程中箭头的移动及其调用的变量

- 单击 Step Over 按钮 , 跳过要调用的函数。
- 单击 Stop Debugging 按钮 , 强行终止程序调试。

附录 A Origin7.0 工具条一览表

表 A1 Standard(标准)工具条

图 标	名 称	功 能
	New Project	关闭当前的 Project,打开新的 Project
	New Worksheet	新建一个空 Worksheet 窗口
	New Excel	新建一个空 Excel 窗口
	New Graph	新建一个空 Graph 窗口
	New Matrix	新建一个空 Matrix 窗口
	New Function	打开 Plot Details 对话框,新建一个函数 Graph 窗口
	New Layout	新建一个空 Layout 窗口
	New Notes	新建一个空 Notes 窗口
	Open	打开 Project(*.OPJ)文件
	Open Template	打开模板(*.OTP)文件
	Open Excel	打开 Excel 工作簿(*.XLS)文件
	Save Project	保存为 Project(*.OPJ)文件
	Save Template	保存为模板(*.OTP)文件

续表 A1

图 标	名 称	功 能
	Import ASCII	将 ASCII 文件导入当前窗口
	Import Multiple ASCII	将多个 ASCII 文件导入当前窗口
	Print	打印当前激活窗口中的内容
	Refresh	刷新当前窗口
	Duplicate	复制当前窗口
	Custom Routine	运行名为 Custom. ogs 的 LabTalk 程序
	Project Explorer	显示或隐藏 Project 管理器
	Results Log	显示或隐藏结果记录窗口
	Script Window	显示或隐藏脚本程序窗口
	Code Builder *	打开编码编辑器窗口
	Add New Columns	在当前 Worksheet 中添加一个新列

表 A2 Edit(编辑)工具条

图 标	名 称	功 能
	Cut	剪切选定对象
	Copy	复制选定对象
	Paste	粘贴剪贴板上内容

表 A3 Graph 工具条

图 标	名 称	功 能
	Zoom In	放大 Graph 图形中感兴趣的区域
	Zoom Out	缩小 Graph 图形
	Whole Page	在窗口中显示整个页面
	Rescale	重设 XY 坐标
	Extract to Layers	将单层含有多组数据曲线的 Graph 图形转换为多层图形
	Extract to Graphs	将多层 Graph 图形在不同的 Graph 窗口中显示
	Merge	将几个 Graph 窗口合并为多层 Graph 图形
	Add Color Scale *	为彩色映射图添加彩色坐标
	New Legend	为 Graph 添加新图例
	Add XY Scale *	在 Graph 中生成新 XY 坐标
	Date & Time	在激活的窗口中添加日期和时间

表 A4 2D Graphs 工具条

图 标	名 称	功 能
	Line	绘制连接直线图
	Scatter	绘制散点图
	Line+Symbol	绘制标记出数据点的直线图
	Bar	绘制条状图(水平)
	Column	绘制柱状图

续表 A4

图 标	名 称	功 能
	Pie Chart	将 Worksheet 的 Y 列绘制出饼状图
	Area	绘制面积图
	Fill Area	将 Worksheet 两 Y 列绘制曲线,填充中间部分
	Polar	绘制极坐标图
	Ternary	将 Worksheet 的 XYZ 列绘制成三角图
	Smith Chart *	绘制 Smith 图
	High-Low-Close	将 Worksheet 的 3 个 Y 列制图,并连接中间和下面的点
	Vector XYAM	将 Worksheet 的 3 个 Y 列绘制矢量图(三个 Y 列分别表示位置、角度和强度)
	Vector XYYX	将 Worksheet 的 4 列绘制矢量图(两列为矢量的起始坐标,两列为矢量的终端坐标)
	Template	将选择的数据根据模板绘图

表 A5 2D Graphs Extended(2D Graphs 扩展)工具条

图 标	名 称	功 能
	Vertical Drop Line	绘制垂线图
	2 Point segment	绘制两点折线图
	3 Point segment	绘制三点折线图
	Vertical Step	绘制垂直阶梯图
	Horizontal Step	绘制水平阶梯图

续表 A5

图 标	名 称	功 能
	Spline Connected	绘制样条曲线图
	Double Y Axis	绘制双 Y 轴图
	Line Series	绘制系列线图
	Waterfall	绘制瀑布图
	Zoom	按照 Zoom 模板绘图
	Y Error	绘制 Y 列误差曲线图
	X Y Error	绘制 X,Y 误差曲线图
	Stack Bar	绘制堆叠横条图(将几列求和作为横坐标值)
	Stack Column	绘制堆叠柱状图(将几列求和作为纵坐标值)
	Floating Bar	绘制浮动条状图
	Floating Column	绘制浮动柱状图
	Bubble	绘制泡沫图(其中一 Y 列为位置,另一 Y 列为泡沫大小)
	Color Map	绘制彩色映射图(其中一 Y 列为位置,另一 Y 列为颜色)
	Bubble+ Color Map	绘制彩色泡沫图(综合上两种绘图方式)
	Box Chat	绘制方框图
	QC (X-bar R)Chart	绘制质量控制图
	Histogram	绘制特定范围数据的直方统计图
	Histogram+Possibilities	绘制直方统计和概率分布图

续表 A5

图 标	名 称	功 能
	Stack Histograms	在不同的图层中绘制直方统计图(一列一图层)
	Horizontal 2 Panel	竖直 2 板块模板绘图
	Vertical 2 Panel	水平 2 板块模板绘图
	4 Panel	4 板块模板绘图
	9 Panel	9 板块模板绘图
	Stack	竖直 n 板块模板绘图(n 为选中列数)

表 A6 3D Graph 工具条

图 标	名 称	功 能
	3D Scatter Plot	绘制 3D 散点图
	3D Trajectory	绘制 3D 投影图
	XYY 3D Bar	将 Worksheet 的 XYY 列绘制成 3D 柱状图
	3D Ribbons	将 Worksheet 的 XY 列绘制成 3D 带状图
	3D Wall	将 Worksheet 的 XY 列绘制成 3D 墙状图
	3D Waterfall	绘制 3D 瀑布图
	3D Color Fill Surface	绘制 3D 表面填充图
	3D X Constant with Base	绘制 3D X 恒定有基线表面图
	3D Y Constant with Base	绘制 3D Y 恒定有基线表面图
	3D Color Map	绘制 3D 彩色表面映射图(高度不同,颜色不同)

续表 A6

图 标	名 称	功 能
	Matrix 3D Bar	绘制 3D 柱状图
	3D Wire Frame	绘制 3D 表面框架图
	3D wire surface	绘制 3D 表面半透明框架图
	Contour-color fill	绘制 2D 彩色填充等高线图
	Contour B/W lines	绘制带标签的黑白线条等高线图
	Gray Scale Map	绘制灰度映射等高线图
	Image Plot *	将矩阵绘制成映像图

表 A7 Rotation(3D 旋转)工具条

图 标	名 称	功 能
	Rotate counterclockwise	绕竖直轴逆时针旋转指定的角度(单位为°)
	Rotate clockwise	绕竖直轴顺时针旋转指定的角度
	Tilt left	在 Graph 平面内逆时针旋转指定的角度
	Tilt right	在 Graph 平面内顺时针旋转指定的角度
	Tilt down	绕水平轴向下旋转指定的角度
	Tilt up	绕水平轴向上旋转指定的角度
	Increase perspective	增加透视效果
	Decrease perspective	减小透视效果
	Fit frame to layer	使 3D 图适合图层
	Reset Rotation	使旋转复位
	3D Rotation Angle	设定旋转角度

表 A8 Worksheet Data(Worksheet 数据)工具条

图 标	名 称	功 能
	Statistic on column(s)	对列做数值统计
	Statistics on Row(s)	对行做数值统计
	Sort	对工作表列进行排序
	Set column values	设定列的数值(弹出对话框可以进行简单的函数设置)
	Set all column values *	根据模板设置填充所有列数值
	Set column values according to row number	将行号设为列值
	Set column values with uniform random number	将列值设定为大于 0 小于 1 的随机均匀分布数值
	Set column values with normal random number	将列值设定为正态随机分布数值

表 A9 Column(列)工具条

图 标	名 称	功 能
	Set X	把选定列设置为 X 列
	Set Y	把选定列设置为 Y 列
	Set Z	把选定列设置为 Z 列
	Set as Y Error Bars	把选定列设置为 Y 误差列
	Set as Labels	把选定列设置为标签
	Set as Disregarded	设置为无关列
	Move to first	把选定列移到首位

续表 A9

图 标	名 称	功 能
	Move to left	把选定列左移
	Move to right	把选定列右移
	Move to last	把选定列移到末尾

表 A10 Layout 工具条

图 标	名 称	功 能
	Add Graph	给 Layout 页面添加 Graph 窗口图像
	Add Worksheet	给 Layout 页面添加 Worksheet 窗口图像

表 A11 Mask(屏蔽)工具条

图 标	名 称	功 能
	Mask point toggle	屏蔽单个数据点
	Mask range	屏蔽数据段
	Unmask range	取消屏蔽
	Swap Mask	屏蔽和未屏蔽的数据点相互交换
	Change mask color	改变屏蔽点的颜色
	Hide/Show mask points	显示/隐藏屏蔽点
	Disable/Enable masking	取消/激活屏蔽

表 A12 Tools(工具)工具条

图 标	名 称	功 能
	Pointer	目标选取模式
	Zoom In *	放大工具(放大显示选定的 Graph 区域,若同时按下 Ctrl 键,在新窗口中显示选中区域,双击还原)
	Zoom Out *	缩小工具
	Screen Reader	读取屏幕上点的坐标,按下空格键调整十字鼠标大小
	Data Reader	读取数据曲线上点的坐标,左右键沿数据线移动鼠标
	Data Selector	选择数据范围
	Draw Data	直接在 Graph 窗口制图,双击或按 Enter 键添加新数据点
	Text Tool	添加文本,在窗口中需添加的位置单击鼠标
	Arrow Tool	在窗口中绘制箭头线,按 Shift 键成为水平或垂直
	Curved arrow tool	绘制弯曲箭头线,单击 4 次鼠标绘制一个箭头
	Line tool	在窗口中绘制直线,同时按 Shift 键成为水平或垂直
	Rectangle tool	在窗口中绘制矩形或在 Matrix 窗口(Image 显示模式)中选择感兴趣的区域
	Circle tool	在窗口内绘制圆或椭圆
	Polygon Tool *	绘制多边形,单击取点,双击结束
	Region Tool *	在窗口中划定区域
	Polyline tool *	绘制折线工具
	Freehand Draw Tool *	自由绘线工具

表 A13 Object Edit(对象编辑)工具条

图 标	名 称	功 能
	Left	将选定对象左对齐 (按 Shift 键可以选定多个对象)
	Right	右对齐
	Top	上对齐
	Bottom	下对齐
	Vertical	垂直对齐
	Horizontal	水平对齐
	Uniform width	统一宽度
	Uniform height	统一高度
	Front	将选定对象提前
	Back	将选定对象退后
	Front(data)	选定对象在数据前面
	Back (data)	选定对象在数据后面
	Group	组合对象为一个对象
	Ungroup	取消组合

表 A14 Arrow(箭头)工具条

图 标	名 称	功 能
	Horizontal Alignment	水平排列箭头
	Vertical Alignment	垂直排列箭头
	Widen head	箭头加宽
	Narrow head	箭头变窄
	Lengthen head	箭头加长
	Shorten head	箭头缩短

表 A15 Format(字体格式)工具条 *

图 标	名 称	功 能
	字 体	调整文字型号
	字 号	调整文字大小
	Bold	加粗字体
	Italic	斜体
	Underline	加下划线
	Superscript	设置上标
	Subscript	设置下标
	SupeSubscript	设置上下标
	Greek	希腊字体
	Increase Font	增大字体
	Decrease Font	缩小字体

表 A16 style(风格)工具条 *

该工具条的按钮无名称,并且有的图标相同,工具条中从左到右的图标顺序排列如下:

图 标	名 称	功 能
		编辑线条颜色
		编辑线条类型
		编辑线条粗细
		编辑网格线类型
		编辑背景颜色
		编辑网格线粗细
		编辑网格线颜色

注意:带* 的是 Origin7.0 的新按钮或工具条。

附录 B Origin7.0 LabTalk
 常见程序命令和函数

表 B1 LabTalk 常见程序命令

命 令	使用格式	功 能
Average	average [option] dataset [range]	采用相邻平均法平滑数据,平均的点数 为 3
Axis	axis [option] [xyzdialog]	打开 Axis 对话框
Break	break[option]argument	设置循环断点
Clipboard	clipboard winName	将 winName 窗口内容复制到剪贴板
Continue	continue	跳到下一个循环或判断处
Copy	copy [option] dataset1 dataset2	将 dataset1 复制到 dataset2
Create	create name [option] [numRows]	创建一个数据组或工作表,名称为 name ,行数为 numRows
DDE	dde [option] argument	进行动态数据传递
Define	define macroName {script}	定义宏
Delete	delete [option] name	删除 name 对象
Derivative	derivative [option] dataset [range]	对数据组 dataset 求导
DLL	dll [options] dllName <dllFunctionName dllString>	执行动态链接库 dllName 中的 dllFunctionName函数
DoToolbox	dotoolbox[option] <toolNumber [message1 message2 ...]>	管理工具条上的工具,大部分选项执行 当前选中的工具函数,所以指定选项前 先选择工具
Draw	draw-n objectName [option] 或 draw-1 {X1,Y1,X2,Y2}	对 objectName 绘图或绘制直线

续表 B1

命 令	使用格式	功 能
Edit	edit [options] <datasetName>	编辑数据组
Exit	exit	退出 Origin
File	file option Path\ FileName1 Path\ FileName2	通过改变 option 实现对两个文件的不同操作
For	for (expression1; expression2;……) {script}	执行 for 循环命令
Get	get name option [variableName]	从名称为 name 的数据组、数据曲线或工作表中获取数据,存放在变量 variableName 中
GetFileName	getfilename [option] argument	读取文件
GetNumber	getnumber [options] (text1) variable1 (text2) variable2 [dialogboxtitle]	输入少于 6 B 字符串,存放到 variable1 ~variable6 中
Getpts	getpts [options] npts [(message)]	从 Graph 窗口中获取当前数据组的数值
GetSaveName	getsavename [fileName] *, extension	保存文件名
GetString	getString (message) initialValue [(dialogTitle)]	从对话框中获取字符串
GetYesNo	getyesno (message) variable [(dialogTitle)]	打开名称为 dialogTitle 的提示框,显示三个按钮 Yes, No 和 Cancel,问是否 message
Integrate	integrate[-r basedataset] dataset[range]	用梯形法对数据组 dataset 积分
Label	label[options]massage	在激活窗口中添加文本标签
Layer	layer[option]<width height xOffset yOffset>	对当前激活层进行操作

续表 B1

命 令	使用格式	功 能
Legend	legend	生成或更新 Graph 窗口中的图标
Limit	limit [option] dataset[range]	从 dataset 中找到几个限制值
List	list argument	在 Script 窗口中列出相应的对象名称
LR	lr [option] dataset[range]	对 dataset 执行线性回归分析
Mark	mark option dataset[range]	屏蔽数据
Math	math [option] dataset1 dataset2	打开 Math on/between Dataset 对话框 对 dataset1 和 dataset2 进行计算
Matrix	matrix option arguments	对 Matrix 窗口设置值或取值
Menu	menu [option] <argumentList [{script}]>	添加、删除和编辑 菜单、子菜单和菜单 命令
NLSF	nlsf [option] dataset	设置 NLSF 中的函数及其参数
Open	open option filename	打开或输入数据文件
Page	page [option]	对当前页面执行操作
Plot	plot [option] dataset	更新数据组的图形窗口
Print	print [option]	打印激活窗口中的内容
Queue	queue{script}	执行延迟程序
Repeat	repeat numberTimes{script}	执行循环操作
Return	return [value]	从当前程序中退出,从 run, section(), run, file()或 object, run() 程序中退出 时有返回值
Run	run [option] argument	执行脚本命令或窗口程序
Save	save [option]	保存当前 Project 文件
Second	second [option] [argument]	执行和时间相关的操作
Selection	select [option] value	对象选择管理
Set	set name [option] [value]	更改 name 的属性
Sort	sort [option] objects	排序

续表 B1

命 令	使用格式	功 能
Switch	switch (expression) {case 1; ... case 2; ... case n; ... [default; ...]}	执行 switch 循环
Timer	timer <cycleLength>	以 cycleLength 为时间定时执行程序
Type	type [option] string	按照指定的设置输出字符串
Undo	undo [option] [dataset]	执行 Origin 菜单命令 Edit Undo
Window	window option	对 Graph 或 Worksheet 窗口执行生成、打开、关闭和激活等操作
Worksheet	worksheet option argument	对激活的 Worksheet 窗口执行格式选项和制图等操作

注意:对不同的命令,[option]和 argument 是不同的;对同一命令,也有不同的[option]和 argument,以执行不同的操作。具体参考 Origin/Help| Programming| LabTalk Reference| Command Reference。

表 B2 Worksheet 函数

命 令	参 数	功 能
col(colName)	colName 是激活 Worksheet 的列名	获得 Worksheet 中 colName 数据组,用于计算(参考 11.14 小节),如 col(C)=1+col(A)
col(colName)[rowNum] cell(rowNum, colNum)	colName 列名, rowNum 行号	读取 rowNum 行 colName 列单元格中的数值,如 col(3)[2]=11, cell(2, 3)=11
col(colName)[rowNum] \$	colName 列名, rowNum 行号	读取 rowNum 行 colName 列单元格中的文本,如 %W=col(A)[3] \$
wcol(colNumVariable)	colNumVariable 解释为数值	获得 colNumVariable 列数据组,如 for(ii = 1; ii<=10; ii+=1){ wcol(ii) = data(ii, ii+10)}

表 B3 生成数据组函数

命 令	参 数	功 能
<code>data(<i>x1</i>, <i>x2</i>, <i>inc</i>)</code>	<i>x1</i> 第一个值, <i>x2</i> 最后一个值, <i>inc</i> 步长	生成等差数据组, 如 <code>col(A)=data(1, 20, 2)</code>
<code>{<i>v1</i>, <i>v2</i>, ..., <i>vn</i>}</code>	<i>v1</i> , <i>v2</i> , ... <i>vn</i> 是数值	给出指定的数值, 如 <code>col(A)={1, 2, 5, 15, 21}</code>
<code>fit(Xdataset)</code>	Xdataset 创建的数据名称	在非线性拟合中生成拟合曲线数据组, 如 <code>Data1_D=fit(data1_C)</code>
<code>table (Dataset1, Dataset2, Dataset3)</code>	Dataset1, Dataset2 和 Dataset3 数据组名	线性或非线形拟合后返回 X 或 Y 数据组, 如 <code>linearfit_Xnew = table (linearfit_data1b, linearfit_a, linearfit_b)</code>

表 B4 数据处理函数

命 令	参 数	功 能
<code>sort(dataset)</code>	dataset 数据组名	对数据组进行升序排列
<code>diff(dataset)</code>	dataset 数据组名	由数据组相邻元素差创建一个数据组
<code>peaks(dataset, width, minHeight)</code>	width 宽度, minHeight 最小值	按照设置给出曲线的峰
<code>corr (dataset1, dataset2, <i>k</i> [, <i>N</i>])</code>	<i>N</i> 是数据点数, <i>k</i> 是滞后关系	根据 <i>k</i> 和 <i>N</i> 给出两组数据的相关, 如 <code>col(3)=corr(col(1), col(2), data(1, 10), 50)</code>
<code>tReplace (dataset, value1, value2 [, condition])</code>	value1 和 value2 依赖于条件 condition	返回阈值代换数据组

表 B5 数据组信息函数

命 令	参 数	功 能
isMasked(index, dataset)	index 序数	index=0 给出数据组屏蔽的点数;其他值给出屏蔽状态,1 屏蔽,0 未屏蔽。如 ISMASKED(0, DATA1_C)=2
findMasks(dataset)	dataset 数据组名	返回有屏蔽数据的数据组名
hasx(dataset)	dataset 数据组名	激活 Graph 窗口,数据点与 X 列相关,返回 1;与 X 列无关,返回 0
xof(dataset)	dataset 数据组名	返回包含 X 值的字符串
errof(dataset)	dataset 数据组名	返回包含误差值的数据组
xvalue(i, dataset)	dataset 数据组名	返回数据组第 i 行相应的 X 值
xindex(x, dataset)	dataset 数据组名	返回数据组中小于等于 x 值对应的行号
xindex1(x, dataset)	dataset 数据组名	返回数据组中大于等于 x 值对应的行号
list(value, dataset)	dataset 数据组名	返回数据组中首次出现 value 的行号,如果无匹配,返回 0

表 B6 辅助函数

命 令	参 数	功 能
colnum(colName)	colName 列名	返回指定列的序号,如 colnum(b)=2
color(name)	name	返回指定的颜色在调色板中的序号,如 color(red)=2
date (MM/DD/YY HH:MM)	MM/DD/YY HH:MM 是时间	返回时间,如 col(2)[3] = date(5/7/2002);
exist(name)	name 对象名	返回值给出指定对象的类型,如 exist(graph1)=3,3 表示 Graph 窗口
hex(string)	string 字符串	用十进制返回字符串表示的十六进制值,如 hex(D)=13,g 以后的字母返回值为 0
asc(character)	character 字符	返回大写字符的 ASCII 值,如 asc(k)=75
font(name)	name 字体	返回字体的序号,如 font(arial)=37

表 B7 基本数学函数

命 令	参 数	功 能
$\text{prec}(x, p)$	x 为数值或数据集, p 为有效位数	x 保留 p 位有效数字, 如 $\text{prec}(126, 2) = 130$, $\text{data1_B} = \text{prec}(\text{data1_C}, 3)$;
$\text{round}(x, p)$	x 为数值或数据集, p 为小数位数	x 保留 p 位小数位数, 如 $\text{round}(1.2345, 2) = 1.23$
$\text{abs}(x)$	x 为数值或数据集	x 绝对值, 如 $\text{abs}(-1.23) = 1.23$
$\text{angle}(x, y)$	x, y 为点的坐标	求该点和原点之间连线与 x 轴之间的 夹角(弧度表示), 如 $\text{angle}(-3, 4) = 2.214\ 297$
$\text{exp}(x)$	x 是小于 667 的值	e 的 x 幂
$\text{sqrt}(x)$	x 是正数	求 x 的平方根
$\ln(x)/\log(x)$	x 是正数	求 x 的自然对数/常用对数
$\text{mod}(x, y)$	x, y 为整数	求 x 和 y 的模数, 即 x 除以 y 的余数, 如 $\text{mod}(8, 7) = 1$
$\text{rmod}(x, y)$	x, y 为实数	求 x 和 y 的实模数, 如 $\text{rmod}(4, 2.55) = 1.45$
$\text{int}(x)$	x 为实数	求 x 的整数部分, 如 $\text{int}(7.6) = 7$, $\text{int}(-7.6) = -7$
$\text{nint}(x)$	x 为实数	求 $\text{round}(x, 0)$, 如 $\text{nint}(-7.6) = -8$
$\sin x/\cos x/\tan x$	x 为实数	求 x 的正弦/余弦/正切
$\text{asin } x/\text{acos } x/\text{atan } x$	x 为符合函数定义 域的实数	求 x 的反正弦/反余弦/反正切
$\sinh x/\cosh x/\tanh x$	x 为实数	求 x 的双曲正弦/双曲余弦/双曲正切

注意: 除表 B7 中的基本数学函数外, 在 Origin/Help| Programming| LabTalk Reference | Fundtion Reference| Mathematical Functions 中还有许多复杂的函数, 如多变量函数、特殊函数和随机函数。

表 B8 统计函数

命 令	参 数	功 能
<code>max(values)</code>	values 数值	从数据组中返回最大值, 如 <code>max(1, 7, 6) = 7</code>
<code>min(values)</code>	values 数值	从数据组中返回最小值, 如 <code>min(1, 7, 6) = 1</code>
<code>histogram(dataset, inc, min, max)</code>	inc 步长, min 最小值, max 最大值	根据设置生成等间距数据点统计, 如 <code>data1_c = histogram(data1_B, 2, 0, 10)</code>
<code>sum(dataset)</code>	dataset 数据组名	生成总和数据组, 第 i 个数据是原数据组前 i 个数据的和, 如 <code>data1_c = sum(data1_B)</code>
<code>ave(dataset, size)</code>	size 每组元素个数	将数据组分组, 每组包含 size 个元素, 返回每组的平均值, 如 <code>data1_c = ave(data1_B, 3)</code>
<code>percentile(dataset1, dataset2)</code>	dataset1 数据组 dataset2 百分比	dataset2 给出百分点, 统计 dataset1 个数, 返回在百分点处 dataset1 中的数值
<code>ss(dataset, ref)</code>	ref 参考值	返回数据组相对于参考值的平方和
<code>cov(dataset1, dataset2, ave1, ave2)</code>	ave1 和 ave2 为数值	求数据组 dataset1 和 dataset2 的相关
<code>ttable(p, n)</code>	$0 < p < 1$, 显著性水平, n 是自由度	求 t-分布函数值, 如 <code>ttable(0.90, 20) = 1.325 34</code>
<code>invf(value, n)</code>	value 是数值, n 是自由度	t-分布函数逆函数, 计算 t-分布函数的 p 值, 如 <code>invf(1.325 34, 20) = 0.899 999</code>
<code>ftable(p, m, n)</code>	p 是显著性水平, m 和 n 自由度	计算 F-分布函数值, 如 <code>ftable(0.9, 2, 15) = 2.695 173</code>
<code>invf(value, m, n)</code>	value 是数值, m 和 n 是自由度	F-分布函数逆函数, 计算 F-分布函数的 p 值, 如 <code>invf(2.695 173, 2, 15) = 0.9</code>

续表 B8

命 令	参 数	功 能
$\text{incf}(x, m, n)$	x 积分上限, m 和 n 自由度	非完整 F-table 函数, 如 $\text{incf}(0.9, 2, 15)=0.427\ 429\ 8$
$\text{erf}(x)/\text{inverf}(x)$	x 数值	求误差函数值/误差函数逆函数值, 如 $\text{erf}(0.8)=0.742\ 101$, $\text{inverf}(0.742\ 101)=0.800\ 000\ 1$
$\text{prob}(x)/\text{invprob}(x)$	x 数值	概率密度函数/逆函数, 如 $\text{prob}(1.5)=0.866\ 385\ 6$, $\text{invprob}(0.866\ 385\ 6)=1.5$
$\text{QCD2}(n)$	n 样本大小	给出样本的标准差估计值, 假定样本服从正态分布, 如 $\text{QCD2}(10)=3.077\ 97$
$\text{QCD3}(n)$	n 样本大小	给出样本的 $3\text{-}\sigma$ 下限值, 如 $\text{QCD3}(10)=0.221\ 381\ 4$
$\text{QCD4}(n)$	n 样本大小	给出样本的 $3\text{-}\sigma$ 上限值, 如 $\text{QCD4}(10)=1.775\ 856$

注: $ss(\text{dataset}, ref)$ 函数的计算方法是: $\sum_{i=1}^N [data(i) - ref]^2$ 。

$ss(\text{dataset}, ref)$ 函数中的 ref 可以是常数, 也可以是变量, 对不同的 ref 值, 可以演化出不同的函数, ref =数据组平均值, 变为函数 $ss(\text{dataset})$, 求数据组相对于平均值的平方和; ref =数据组, 变为函数 $ss(\text{dataset1}, \text{dataset2})$; ref =函数, 变为 $ss(\text{dataset}, A+Bx)$, 其中的 $A+Bx$ 可以是直线方程 $y=A+B * x$, 也可以是其他函数。

注: 误差函数的计算方法是: $erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du$ 。

注: 概率密度函数的计算方法是 $prob(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-x}^{+x} e^{-\frac{t^2}{2}} dt$ 。

参考文献

- 1 Getting Started Manual, Version 7, OriginLab Corporation <http://www.picinfo.com.br/origin7/origin7news.pdf>
- 2 Origin7.0 帮助文件
- 3 郝红伟, 施光凯. Origin6.0 实例教程. 北京: 电力出版社, 2000
- 4 马振华主编. 现代应用数学手册·概率统计与随机过程卷. 北京: 清华大学出版社, 2000
- 5 谭浩强, 张基温, 唐永炎. C 语言程序设计教程·第 2 版. 北京: 高等教育出版社, 1998