

3. Analýza dat

Obsah:

1. Úspěšné rutiny v analýze dat (Gadgets)
2. Prokládání křivkou (Curve Fitting)
3. Zpracování signálu (Signal Processing)
4. Analýza píků (Peak Analysis)
5. Manipulace s daty (Data Manipulation)
6. Šablony v analýze (Analysis Templates)
7. Zpracování výběru (Batch Processing)
8. Thema v analýze (Analysis Themes)

3.1 Úspěšné rutiny analýzy dat v Originu 9 (Gadgets)

3.1.1 Pomůcka (Gadget) proložení sigmoidou

Pomůcku (**Gadget**) k rychlému proložení bodů sigmoidou lze použít k rychlému provedení sigmoidního proložení „v oblasti dat našeho zájmu“ anglicky značené **ROI (Region of Interest)**. Tutoriál ukáže, jak lze používat gadget v grafu, jak nastavit techniku proložení, jak přejít do dialogu **NLFit**, jak vysvětlit výstup, jak najít hodnoty **X/Y** na proložené křivce.

Kroky:

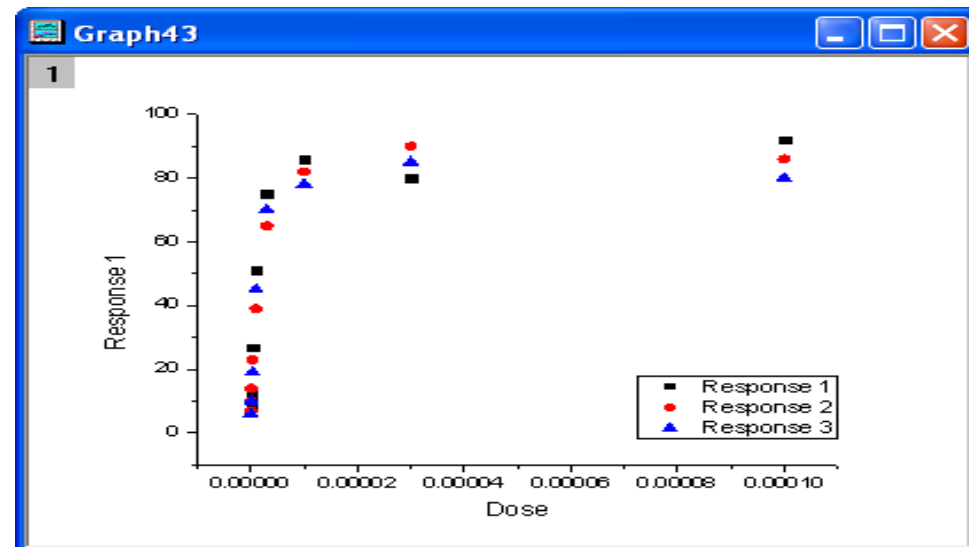
1. Klikněte na **File, Open, Sample**, a pokračujte v **Project Explorer** na **Analysis, Quick Sigmoidal Fit Gadget** v rámci projektu **Analysis.opj**.

A. Rychlé proložení

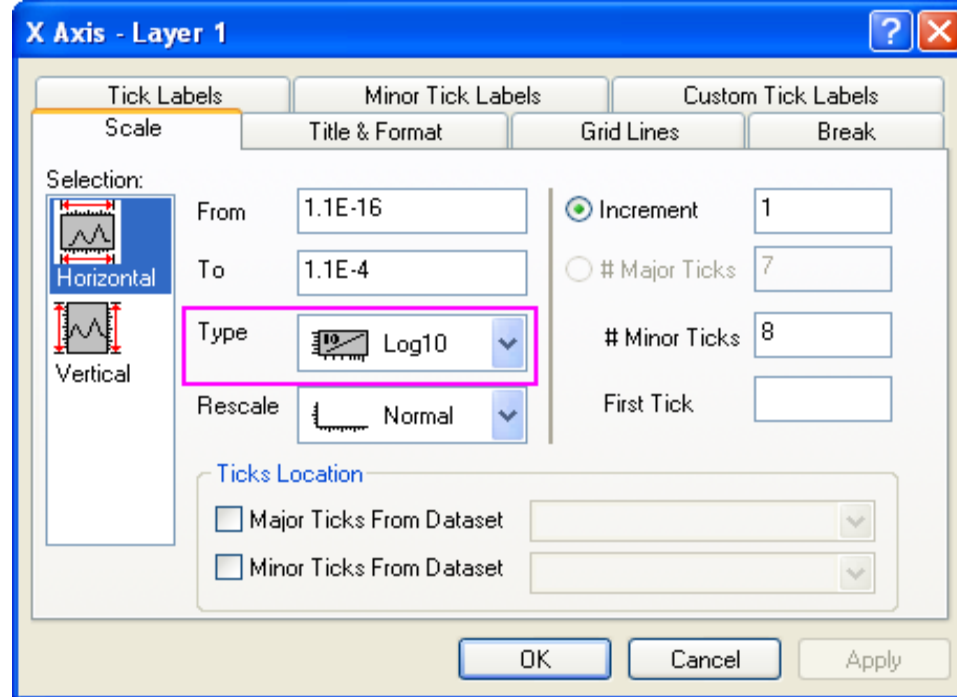
1. Zvýrazněte **Col(A)** až **col(D)** v sešitu a vytvořte bodový graf příkazem **Plot, Symbol, Scatter** dle obrázku vpravo.

Vysvětlení: **Move/Resize** roztahuje obdélník žluté oblasti zájmu (ROI) a vybírá rozsah vstupních dat pro sigmoidální proložení. Červené vodorovné čáry v ROI poli jsou pak asymptoty grafu.

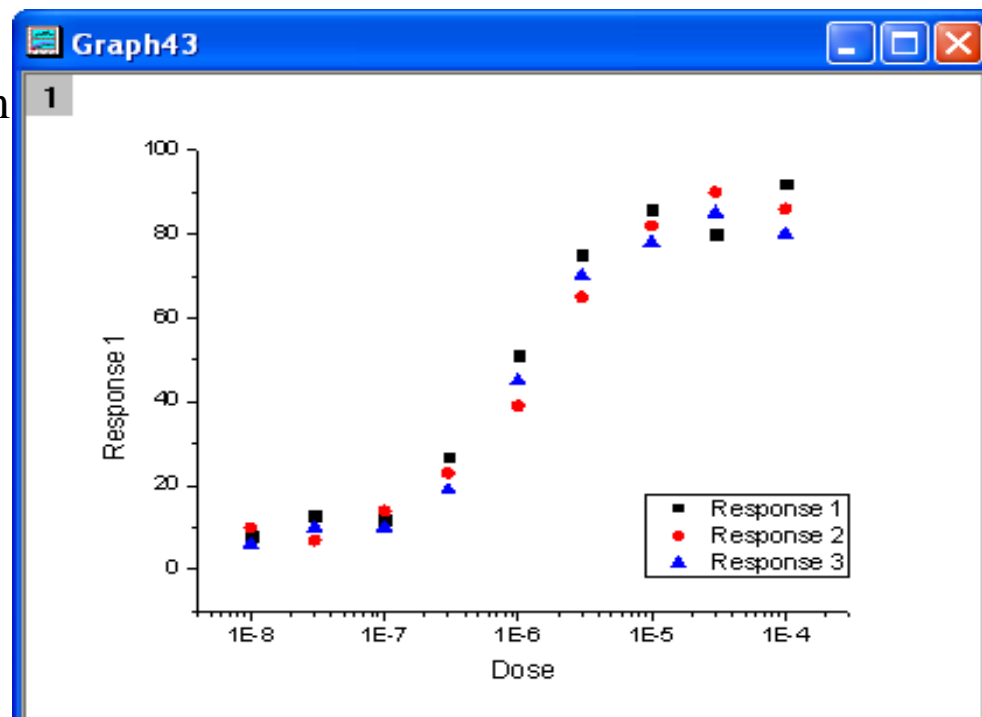
Při analýze klikněte ve vzoru na šipku v pravém horním rohu ROI-oblasti a vyberete zobrazovanou oblast, a tím můžete nastavit či ovlivnit regresní analýzu.



2. Dvoj-klikem na osu **X** se otevře dialog **Axis**.
Nastavte **Type** na **log10** a klikněte na **OK**.

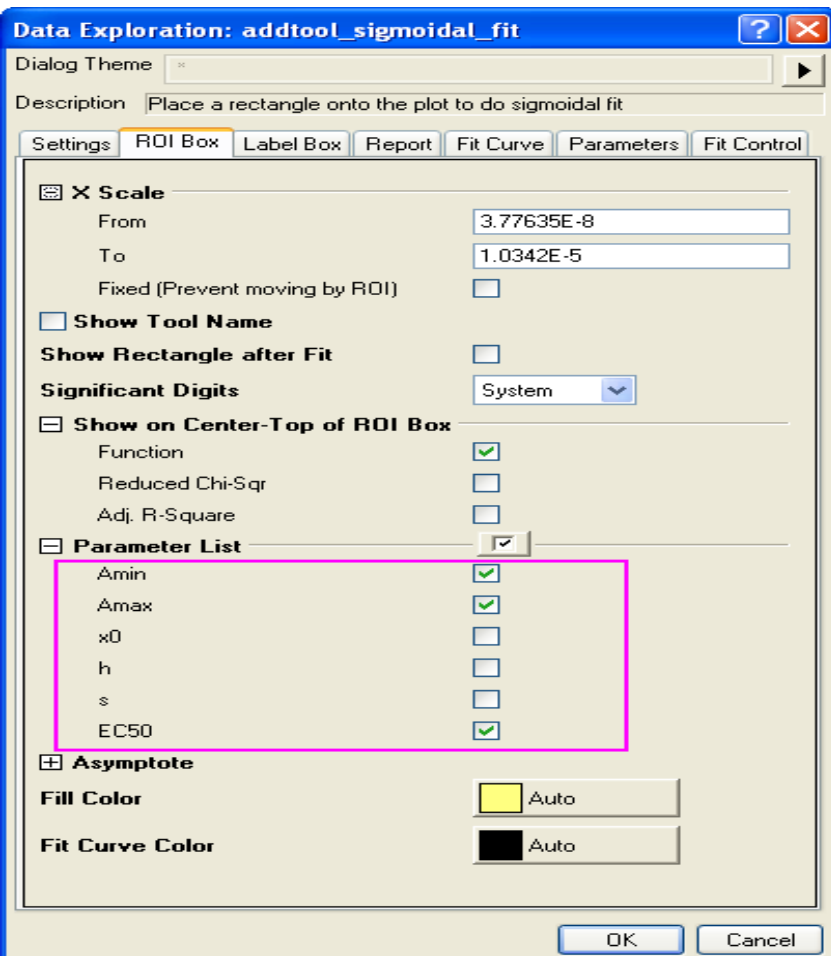
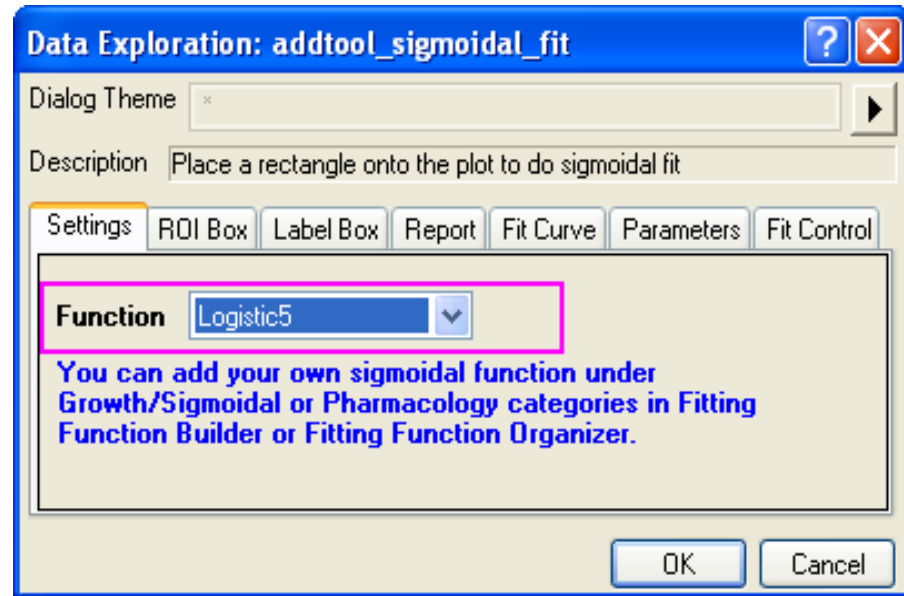


3. Změňte měřítko grafu kliknutím na **Graph**,
Rescale to Show All, aby byl graf ve správném
měřítku.



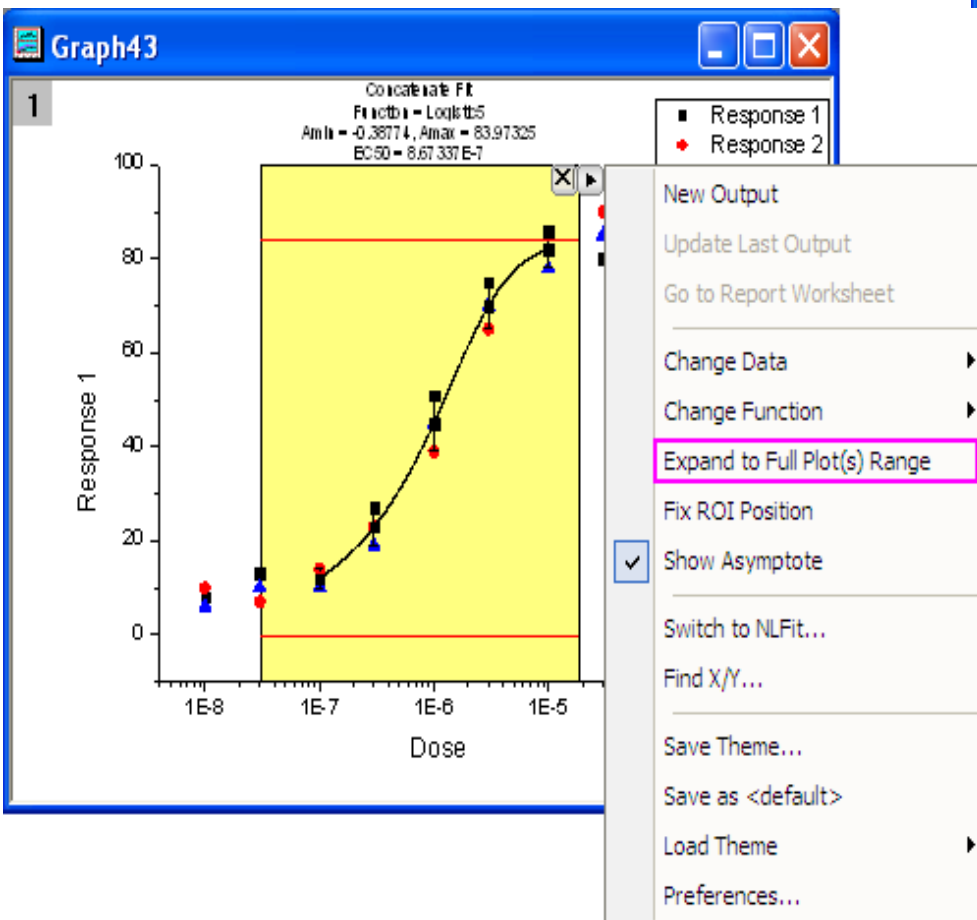
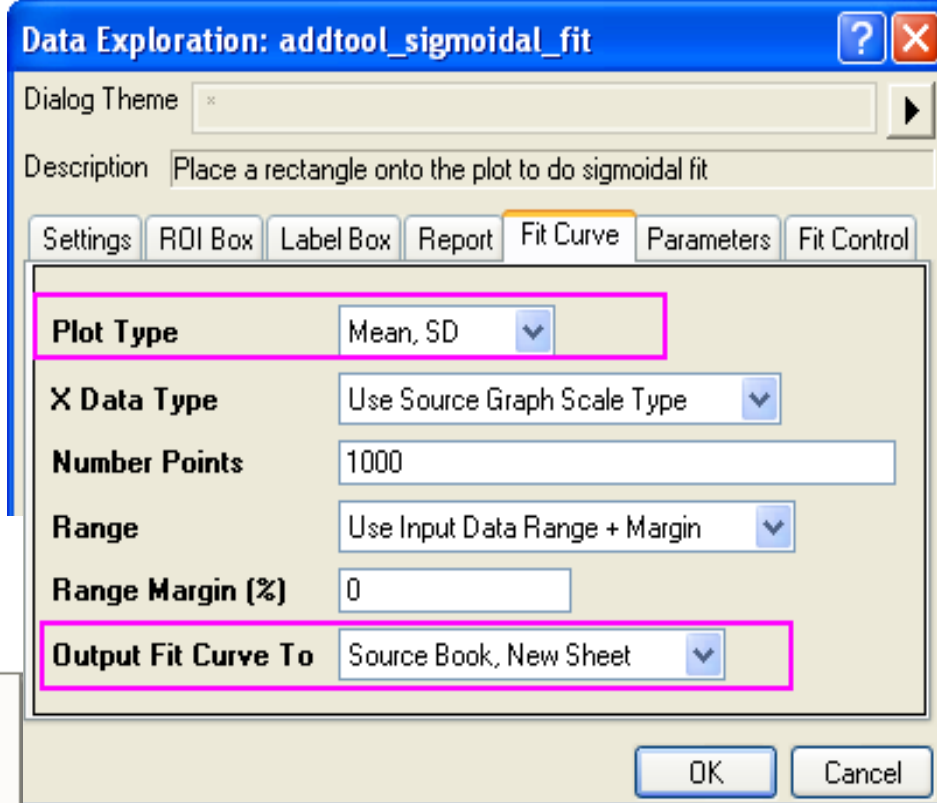
4. Vyberte **Gadgets, Quick Sigmoidal Fit...** z hlavního menu a otevře se dialogové okno **Data Exploration:addtool_sigmoidal_fit**.

V první záložce **Settings** vyberte v řádku **Function** funkci **Logistic5** dle obrázku vpravo a zatím neuzavírejte okno a pokračujte v dalším kroku.



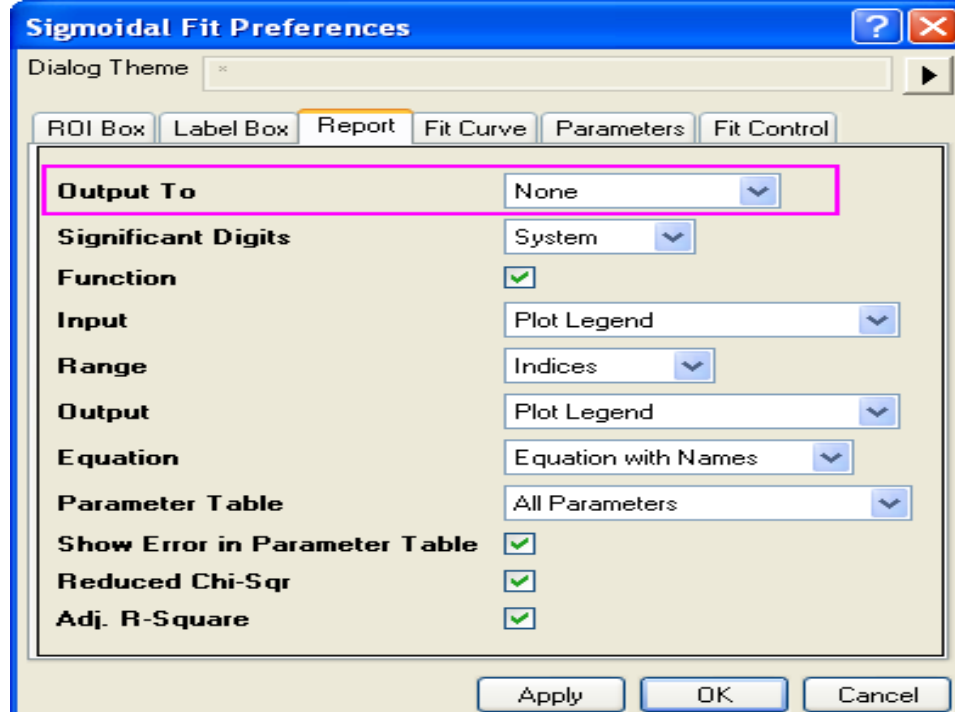
5. Pokračujte v otevřeném okně **Data Exploration** a klikněte zde na záložku **ROI Box** a otevřete uzel **Parameter List**, ve kterém zrušte zaškrtnutí parametru x_0 , h , a s dle obrázku vlevo a zatím neuzavírejte okno a pokračujte v dalším kroku.

6. Pokračujte kliknutím na záložku **Fit Curve**, zvolte v roletce **Plot Type** volbu **Mean, SD** a v posledním řádku **Output Fit Curve To** zvolte **Source Book, New Sheet** a zatím neuzavírejte okno a pokračujte v dalším kroku.

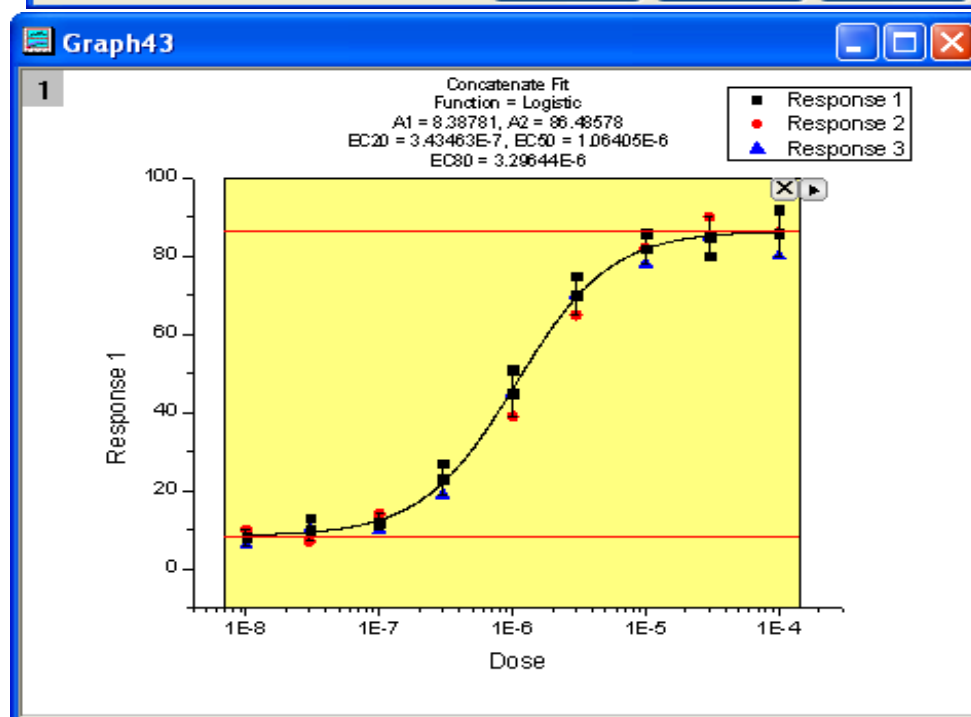


7. Kliknutím na **OK** se přidá žlutý **ROI box** do grafu. V pravém horním rohu ROI boxu klikněte na tlačítko trojúhelníkové šipky **Arrow**, a v roletce vyberte **Expand to the Full Plots Range** dle obrázku vlevo. ROI box se bude nyní vztahovat na celou škálu dat na grafu.

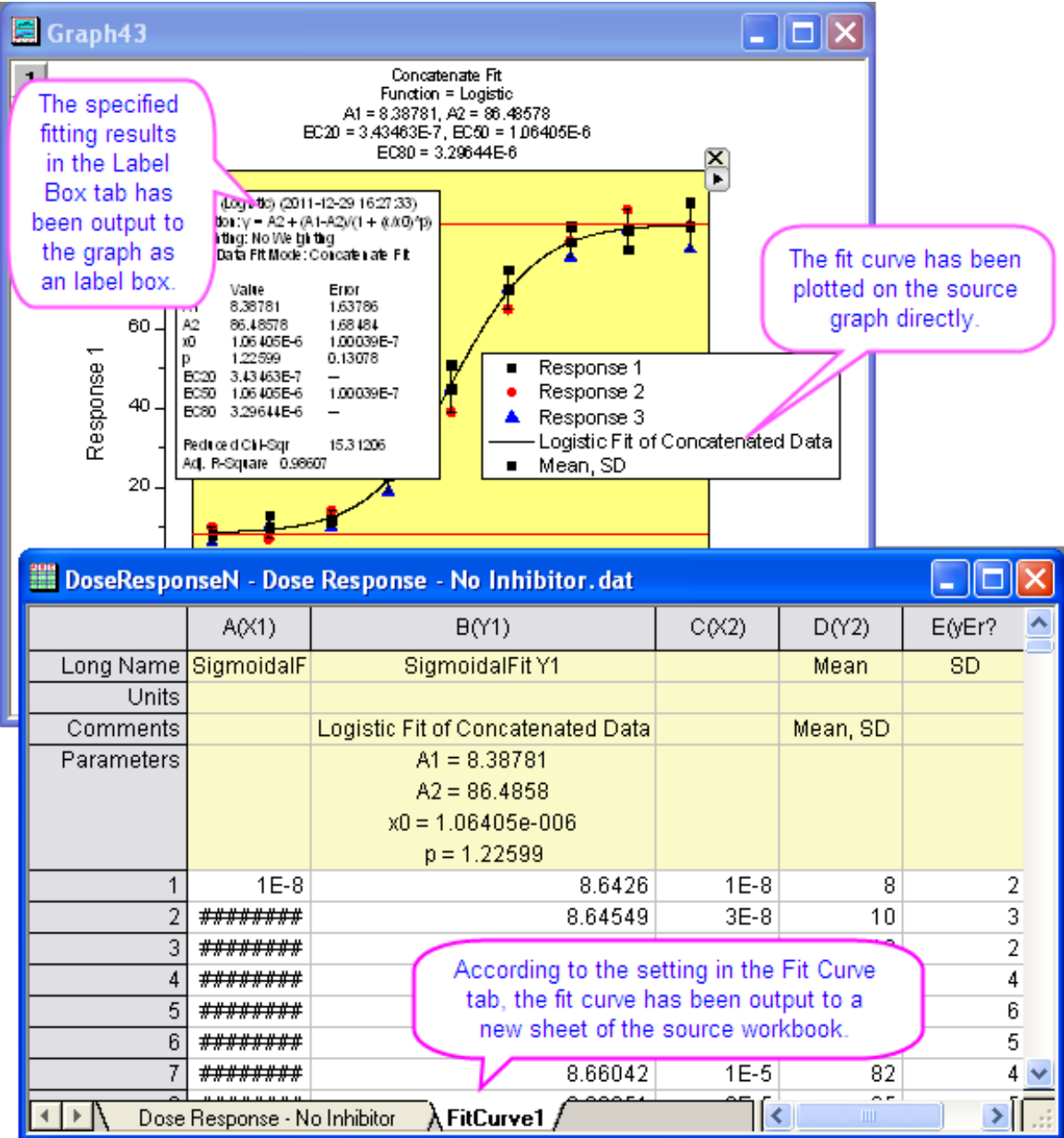
8. Klikněte znovu na tlačítko trojúhelníkové šipky vyberte **Preferences ...** Otevře se okno **Sigmoidal Fit Preferences** a zde klikněte na záložku **Report** a nastavte v řádku **Output To** na **None**, a to dle obrázku vpravo.



9. Kliknutím na **OK** zavřete dialogové okno. Poté opět klikněte na tlačítko trojúhelníkové šipky a zvolte **Change Function, Logistic** pro změnu prokládací funkce na typ **Logistic**. Text protokolu ke grafu nad obrázkem ROI pole se bude nyní sám automaticky aktualizovat.



10. Poté opět klikněte na tlačítko trojúhelníkové šipky a vyberte **New Output** a obdržíte výstup na listu a grafu dle obrázku níže.

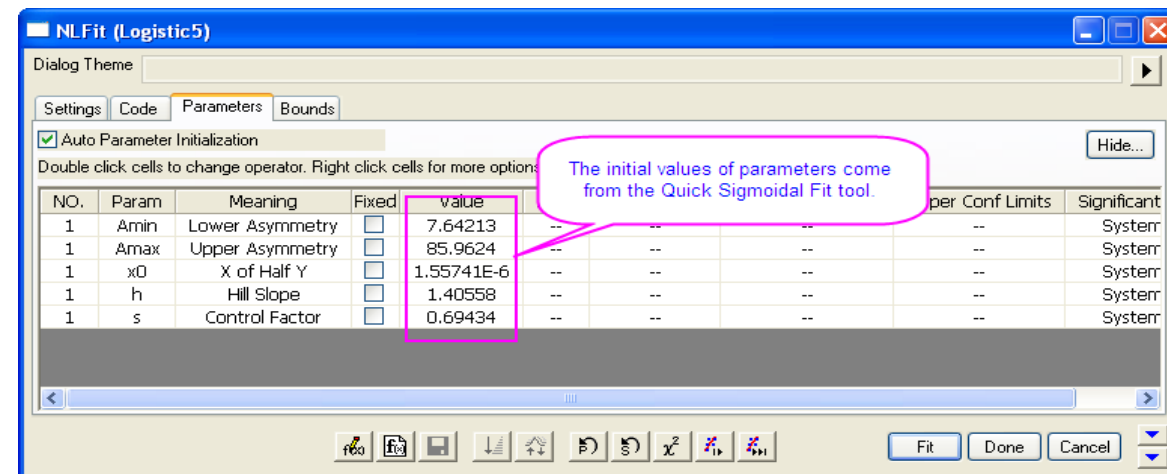
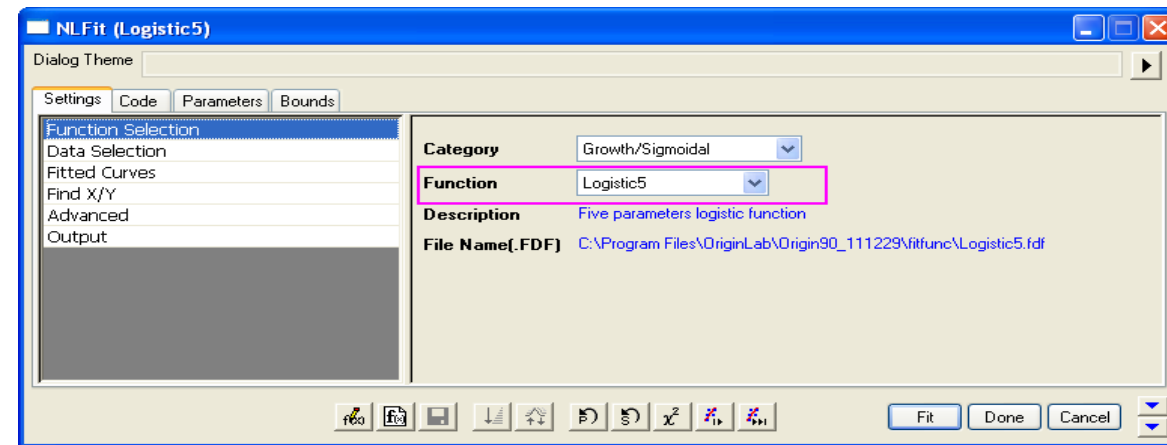


B. Propojení metodou NLFIT

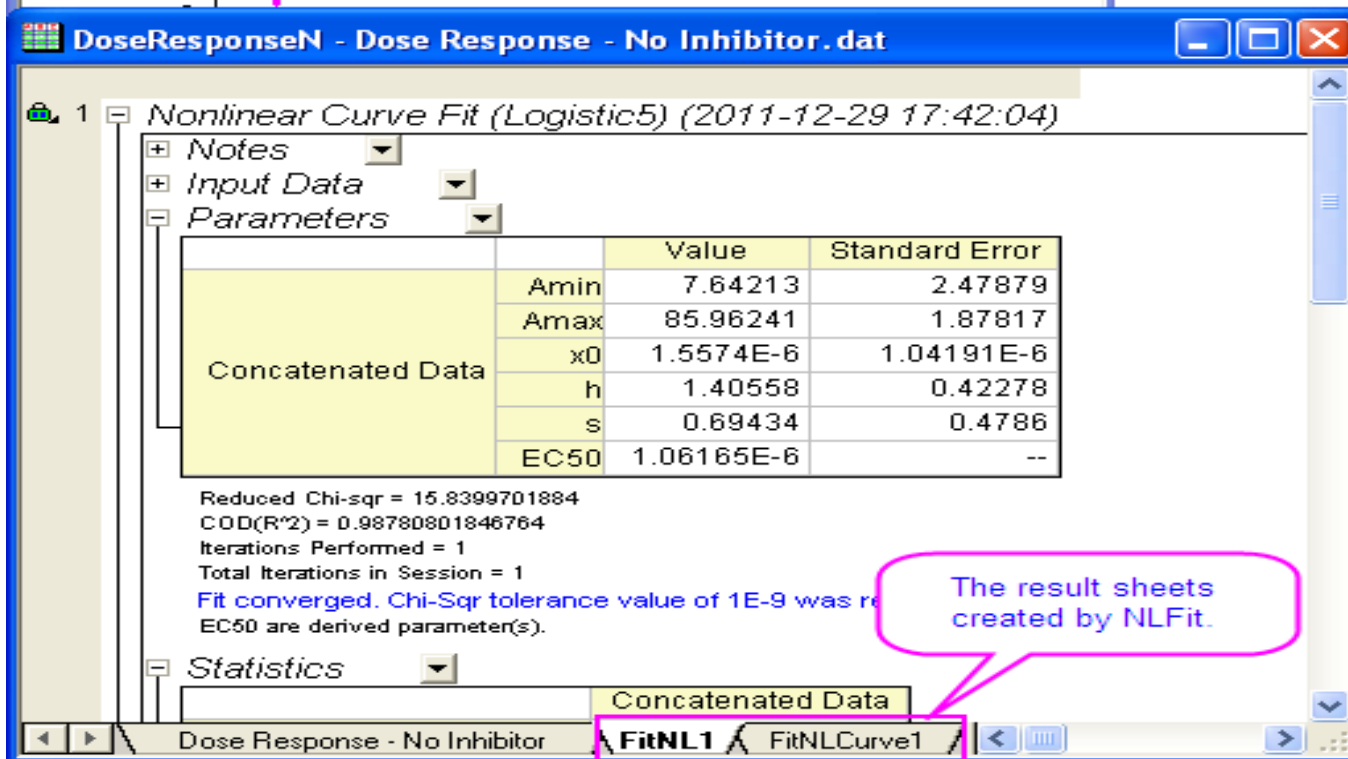
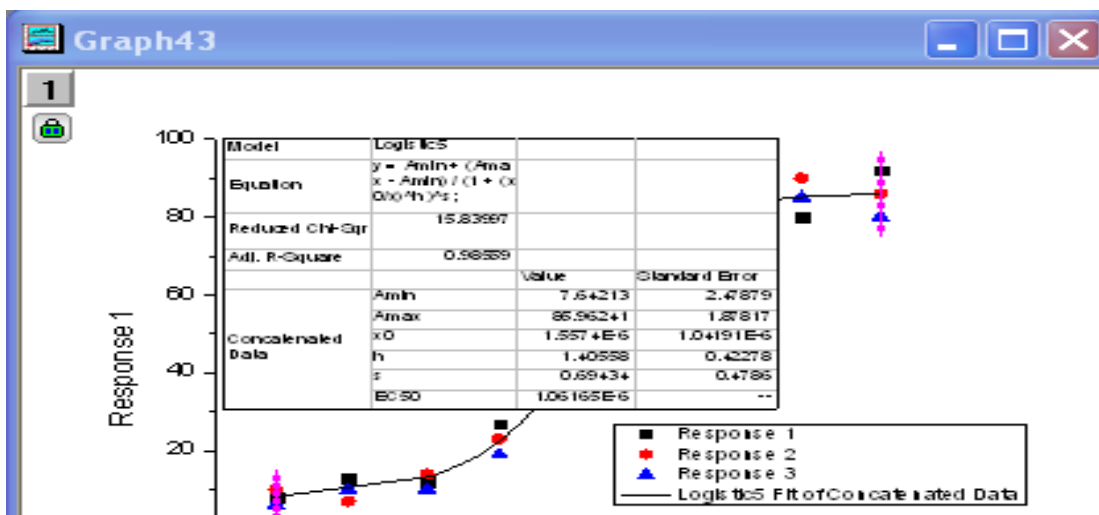
Pomůcka **Quick Sigmoidal Fit** umožňuje přepnout na metodu **NLFit**. Touto metodou lze získat podrobnou zprávu o proložení při aktuálním nastavení proložení dat zvolenou funkcí.

Kroky:

1. Znovu zopakujte krok 1 až krok 8 dle předešlého postupu.
2. Kliknutím na trojúhelníkové tlačítko šipky vyberte **Switch to NLFIT...** a otevře se dialogové okno NLFit s předešlým nastavením.



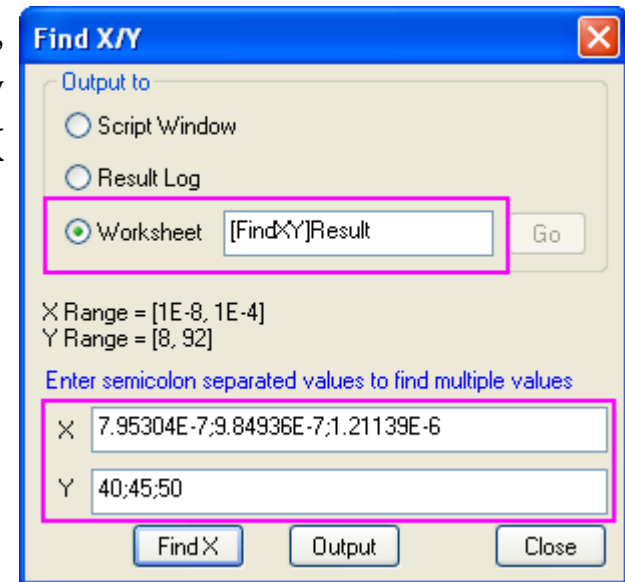
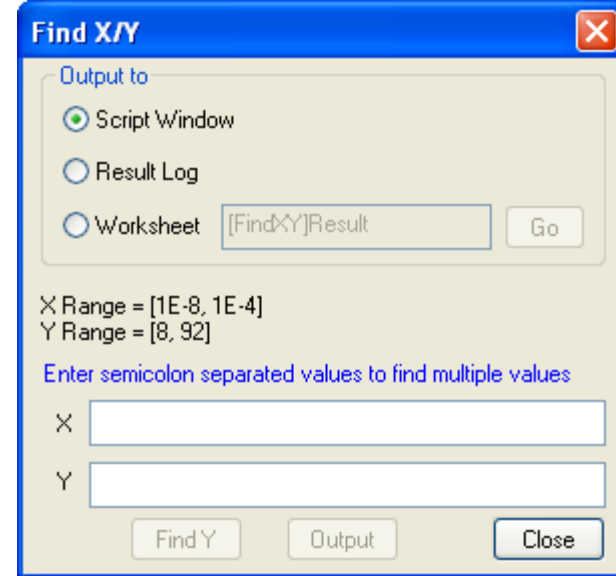
3. Klikněte na tlačítko **Fit** a provede se proložení křivkou. Výsledky budou ve výstupu listu a také se zdrojem grafu.



C. Nalézt X/Y

Tato pomůcka poskytuje způsob jak rychle najít hodnoty X/Y daty proložené křivky.

1. Opakujte znovu kroky 1 až 8 dle předešlého postupu.
2. Kliknutím na trojúhelníkové tlačítko šipky zvolte **Find X/Y...** a otevře se dialog **Find X/Y**.
3. Vyberte políčko v **Worksheet** a zadejte **40, 45, 50** pro **Y**, klikněte na **Find X** a ukážou se odpovídající hodnoty **X** v prázdném poli **X**. Poté klikněte na tlačítko **Output** a hodnoty **X** a **Y** budou ve výstupu zadaného listu.



	A(X)	B(Y)
Long Name	Found X	Specified Y
Units		
Comments		FindX of Logistic5 Fit on "Response 1"
1	7.95304E-7	40
2	9.84936E-7	45
3	1.21139E-6	50
4		
5		
6		

Result

4. Klikněte na **Go** záložky **Worksheet** a otevře se **Find X/Y** sešit. Poté klikněte na **Close** a zavře se dialogové okno **Find X/Y**, viz obrázek vlevo.

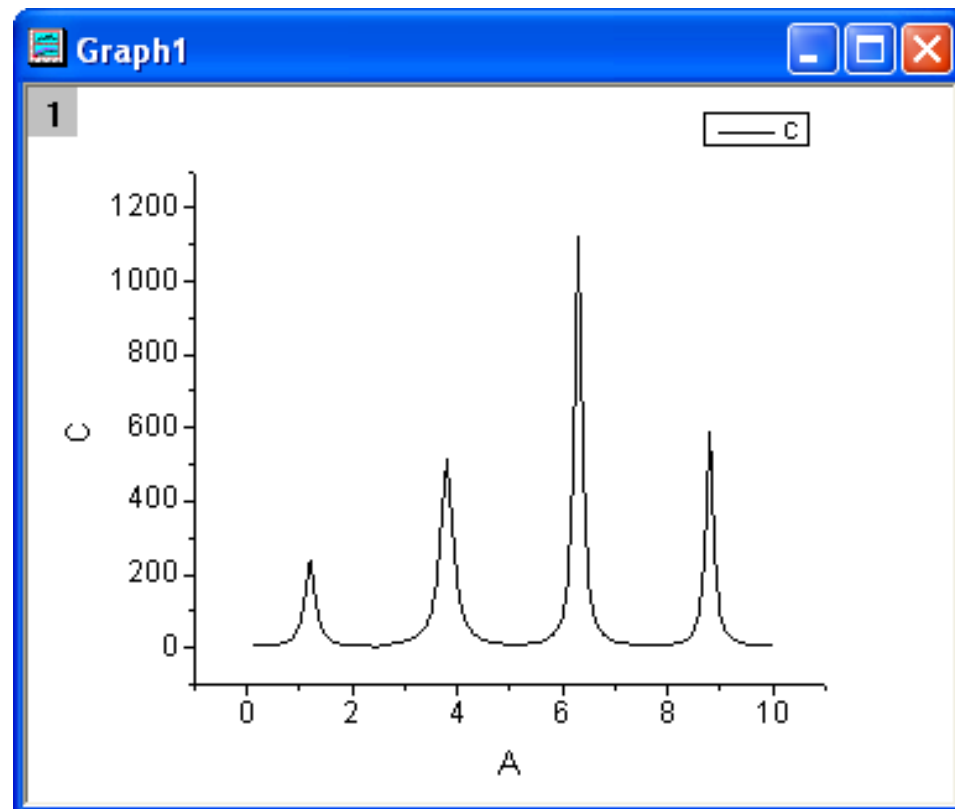
3.1.2 Integrační pomůcka (Integrate Gadget)

Integrační pomůcka (**Integrate Gadget**) provádí numerickou integraci dat grafu při výpočtu plochy pod křivkou. Můžete si vybrat libovolný rozsah dat grafu pomocí zadané oblasti vašeho zájmu **ROI (Region of Interest)** a objekt se zobrazí v grafu. Tutoriál ukáže, jak snadno integrovat datový graf na obdélníkové oblasti, jak určit integrační meze a základní, jak zobrazit integrální křivky uvnitř ROI, jak vypočítat množství, včetně: píku, píku výšky, špičkové centrum, a FWHM.

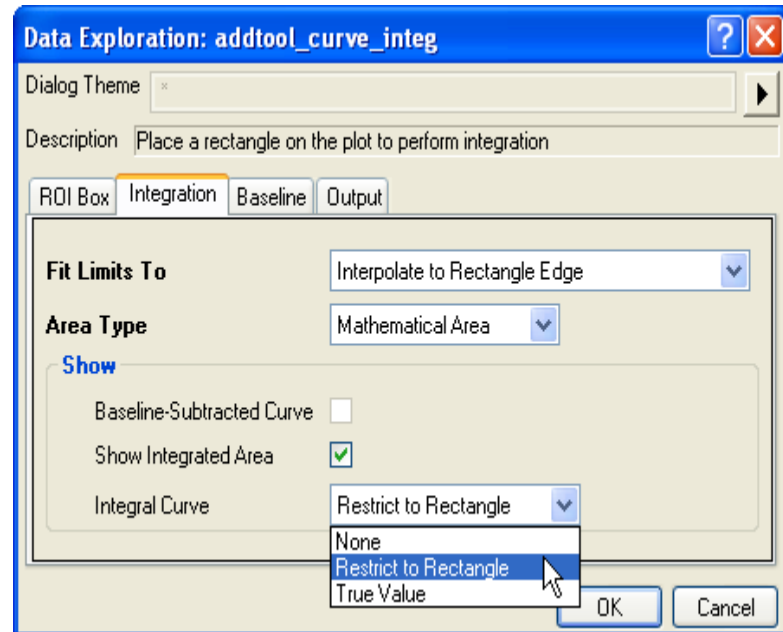
A. Integrovaní a výstup hodnot

Kroky:

1. Začněte s novým sešitem **File, Import, Import Wizard, ..., \Samples\Curve Fitting** a importujte data **Multiple Peaks.dat, Add File(s), OK** a ukončíte **Finish**.
2. Zvýrazněte **Col(C)** a vyberte **Plot, Line, Line** z menu, aby se nakreslil graf dle obrázku vpravo.

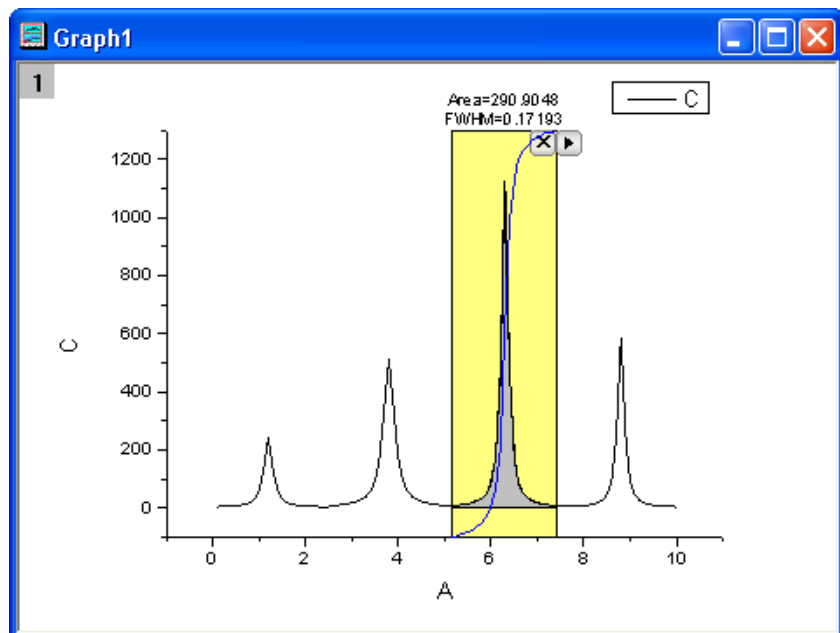
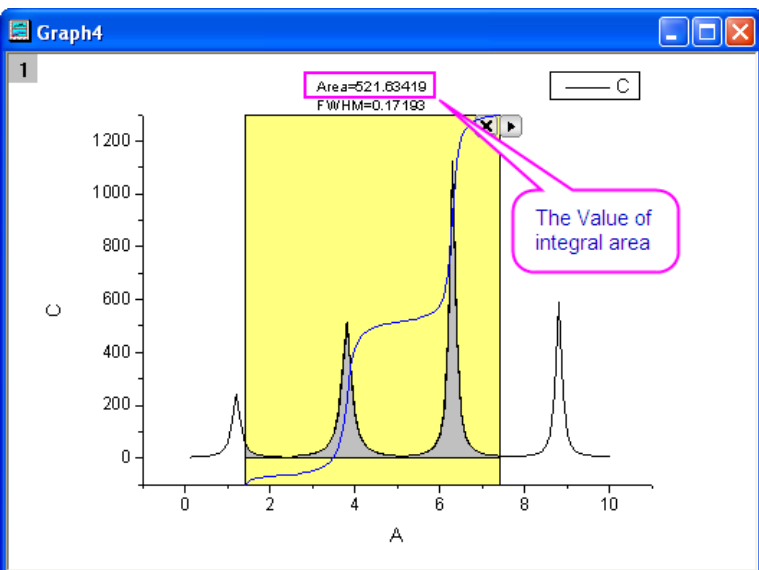


3. Vyberte **Gadget**, **Integrate** v menu a otevře se dialogové okno **Data Exploration: addtool_curve_integ**. V záložce **Integration** vyberte v bloku **Show** v jeho posledním řádku **Integral Curve** volbu **Restrict to Rectangle** dle obrázku vpravo, aby se vyčíslil integrál plochy pod obdélníkem.

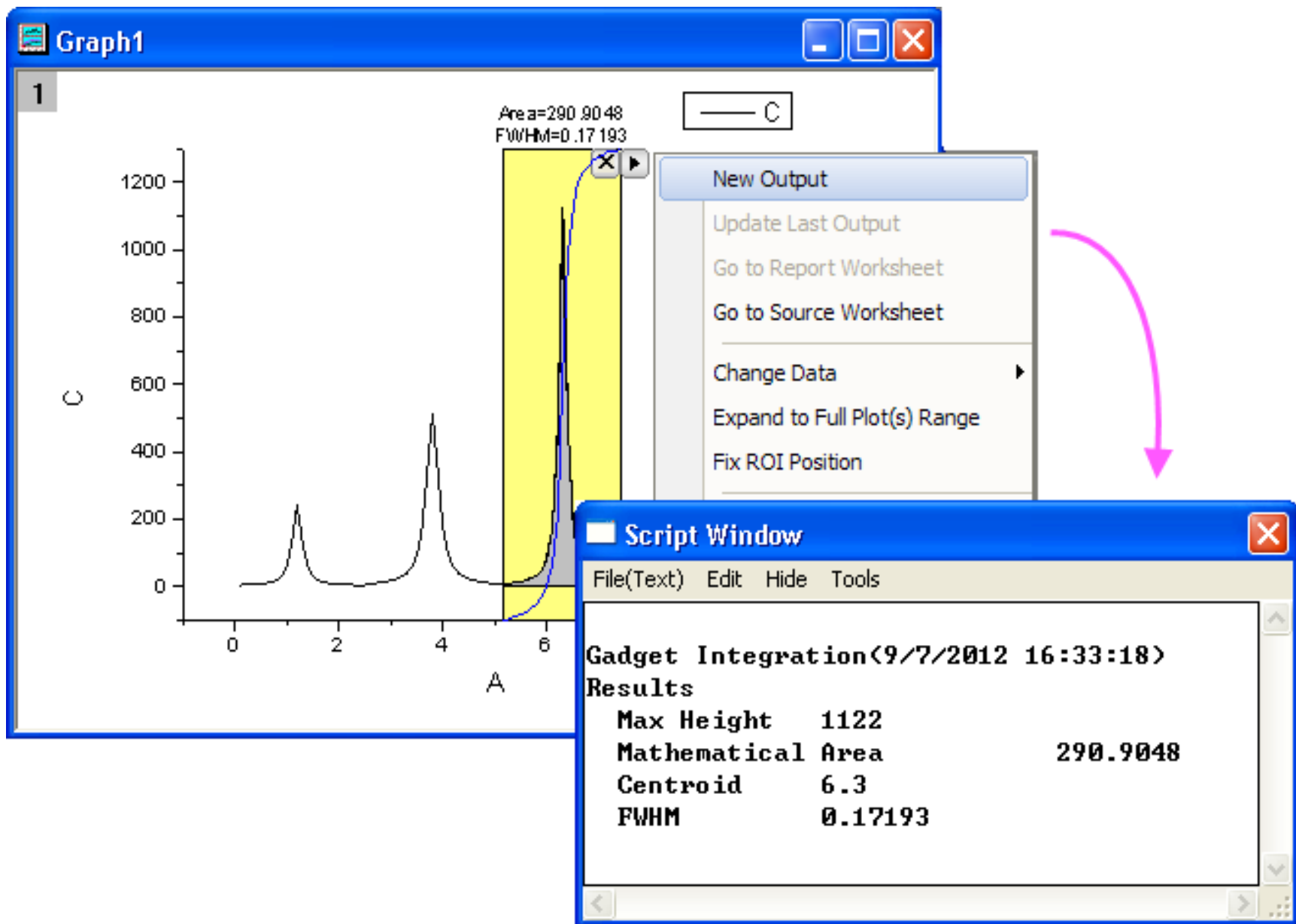


4. Klikněte na tlačítko **OK**. Žlutý obdélník a modrá tenká integrální křivka jsou nyní přidány do obrázku. Důležitou oblastí je šedá výplň pod křivkou a číselná hodnota integrálu této plochy je nad obdélníkem.

5. Tažením stran obdélníka myší přesuňte žlutou oblast do oblasti třeba jednoho píku, který chcete integrovat.



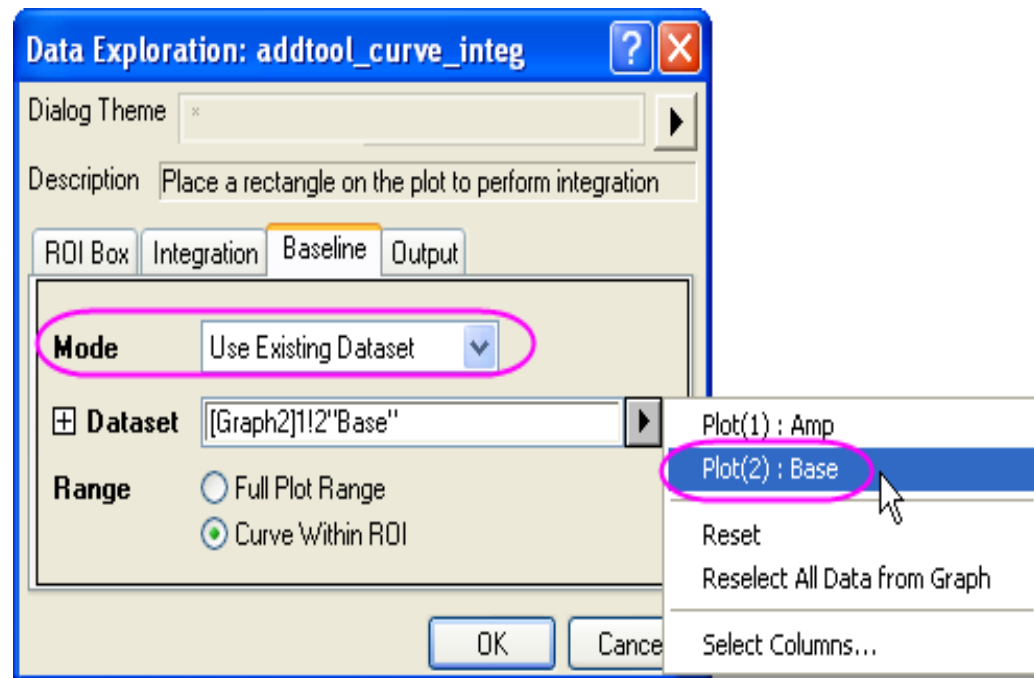
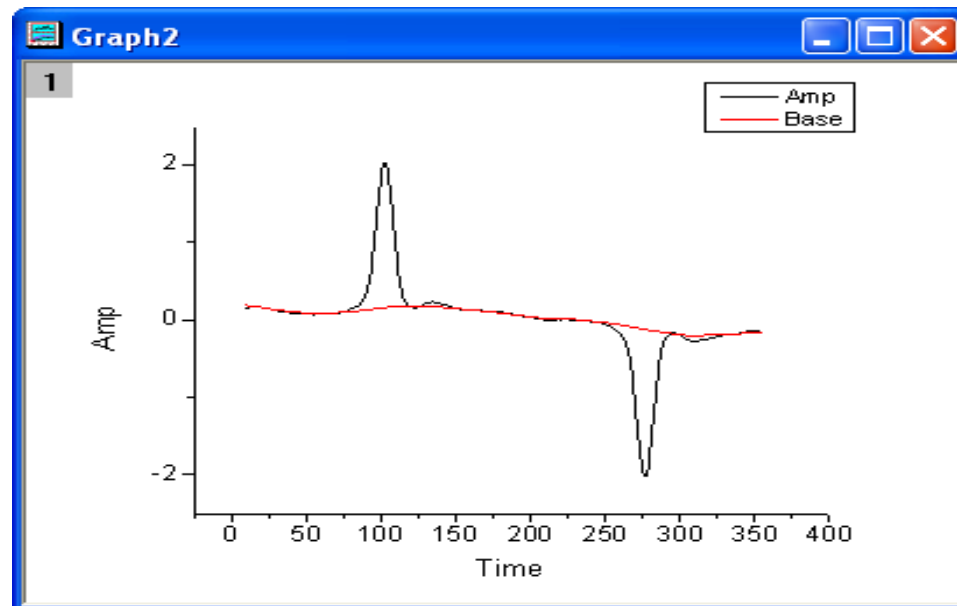
6. Kliknutím na trojúhelníkové tlačítko v pravém horním rohu ROI nástroje zvolte **New Output**. Pak výsledky integrace **Gadget Integration Results** se zobrazí v okně skriptu **Script Window**.



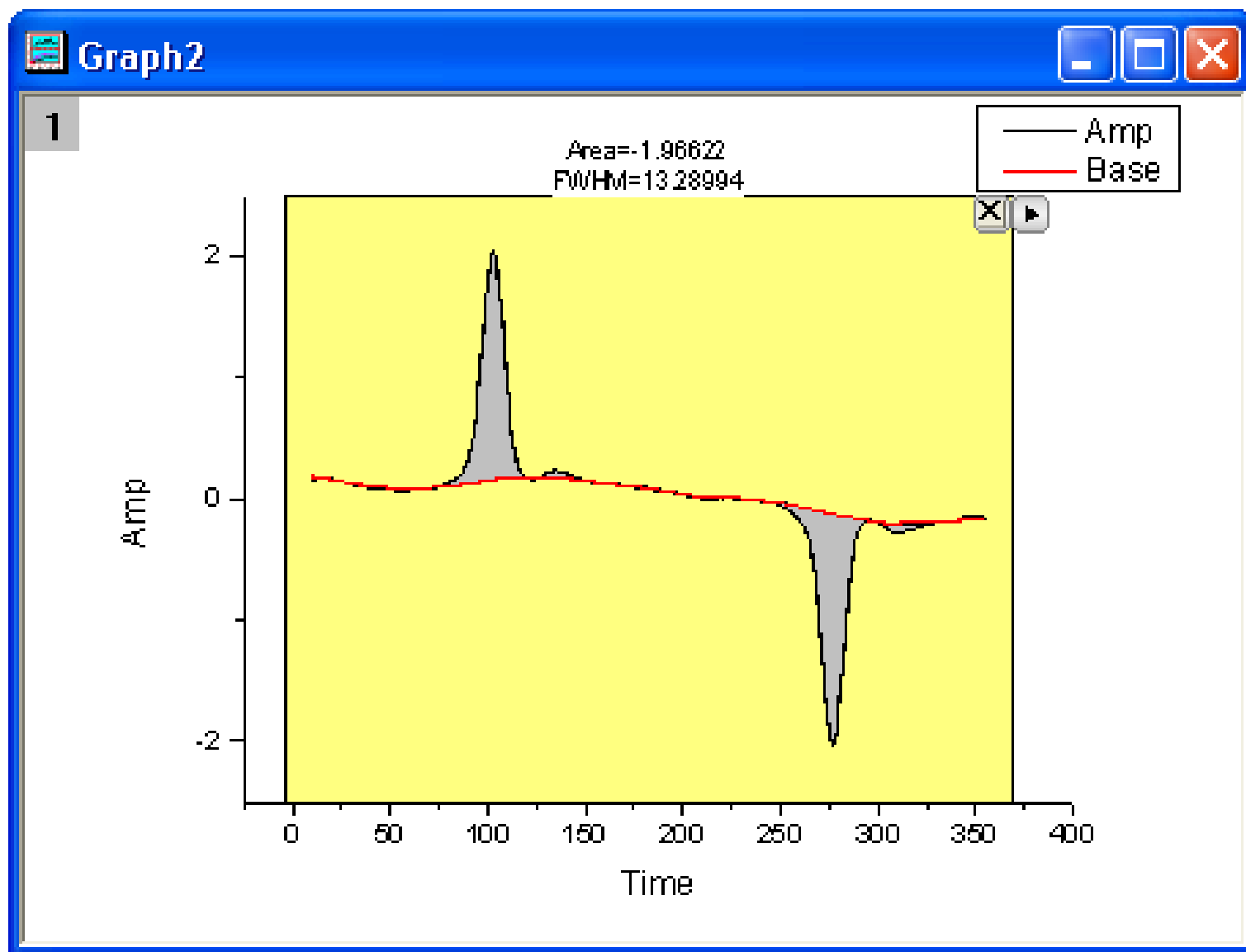
B. Integrovaní s pozadím datové křivky

Kroky:

1. Začněte s novým sešitem **File, Import, Import Wizard** a nainportujte soubor ve **\Samples\Spectroscopy\Peaks with Base.dat, Add File(s), OK, Finish.**
2. Zvýrazněte **Col(B)** a **Col(C)** a zvolte **Plot, Line, Line**, který nakreslí graf.
3. Vyberte **Gadgets, Integrate** v nabídce, když je graf aktivní. Otevře se okno **Data Exploration: addtool_curve_integ**.
4. V záložce **Baseline** zvolte v řádku **Mode** volbu **Use Existing Dataset**. Poté zvolte v uzlu **Dataset** volbu **Plot(2): Base** a klikněte dole na **OK**.



5. Kliknutím na trojúhelníkové tlačítko a zvolte **Expand to Full Plot(s) Range** v nabídce menu, aby se integrovala celková plocha pro křivkou.

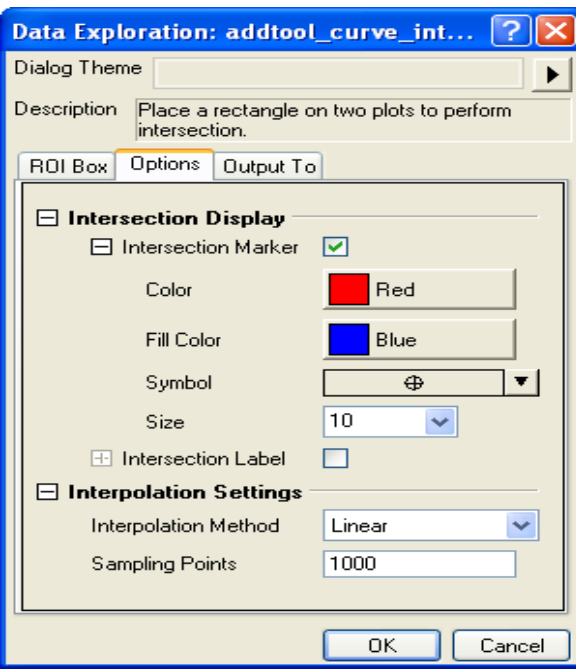
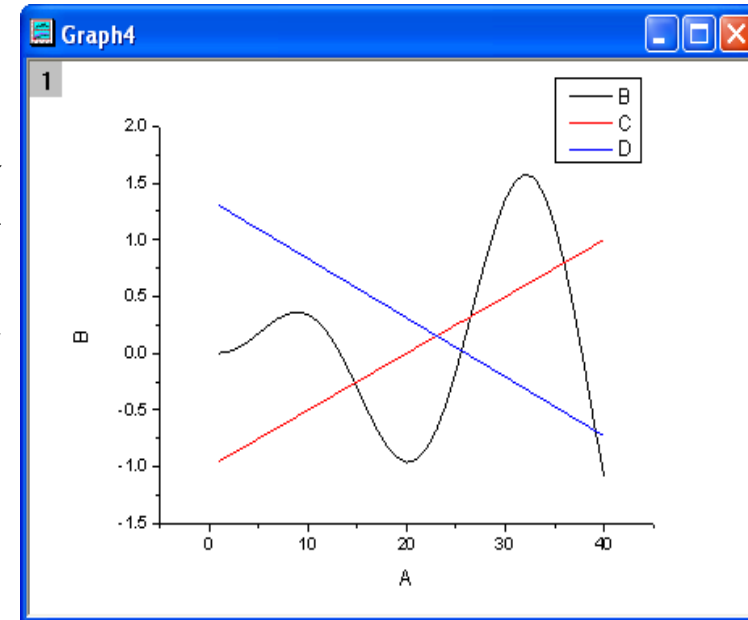


3.1.3 Pomůcka k určení průsečíků s křivkou

Pokud existuje více než jedna křivka v grafu čili ve vrstvě, je často potřeba vypočítat průsečíky datových bodů protínajících se křivek.

Kroky:

1. Otevřete **File, Open, Sample, Analysis.opj** z menu a v Project Explorer pak **Analysis, Curve Intersection Gadget**. Zvýrazněte **Col(A)** až **col(D)** v sešitu **Book6**, a potom klikněte na **Plot, Line, Line** a nakreslí se křivky grafu.

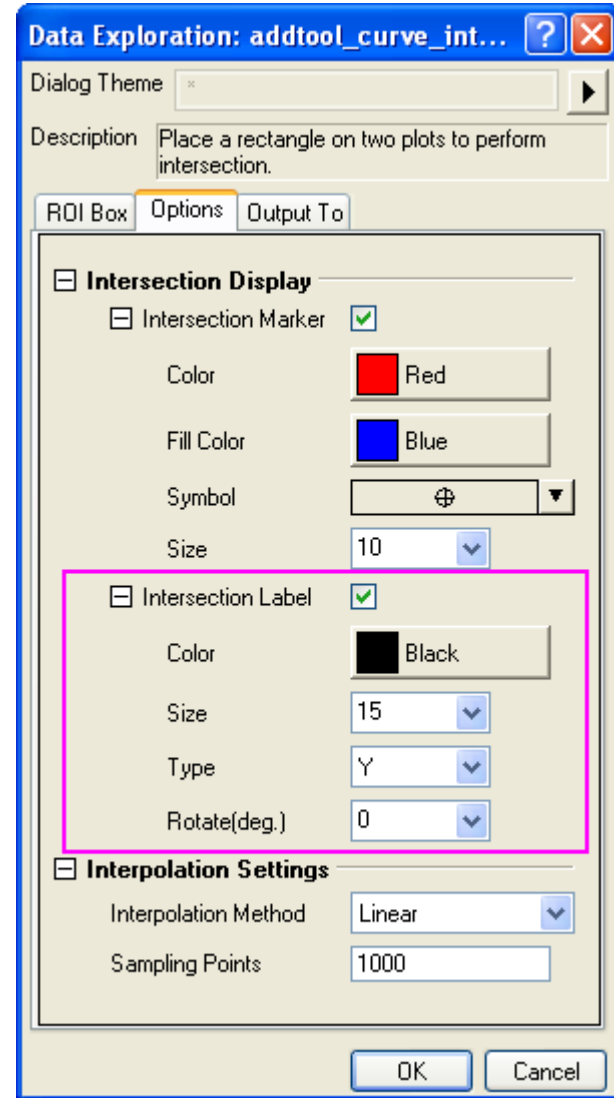
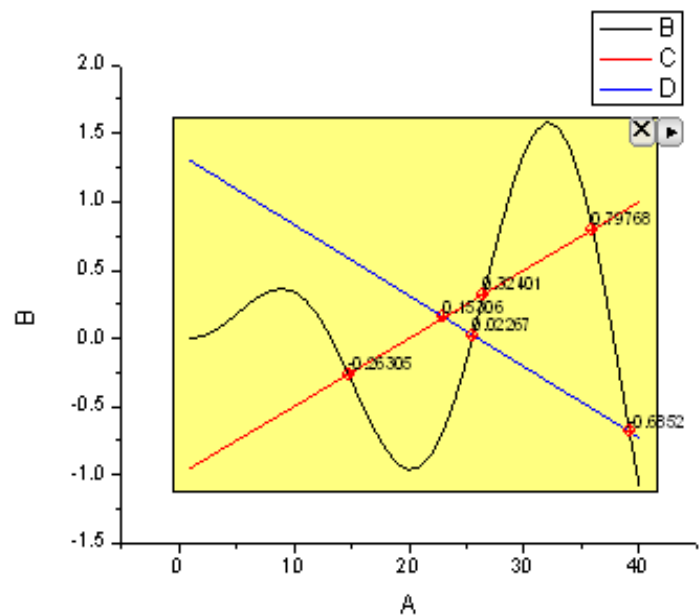
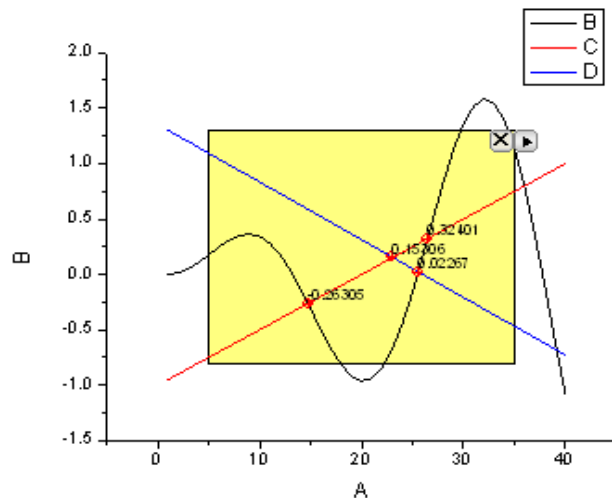


2. Vyberte **Gadgets: Intersect ...** z hlavního menu a otevře se dialog. Přejděte na kartu **Options** dle obrázku vlevo.

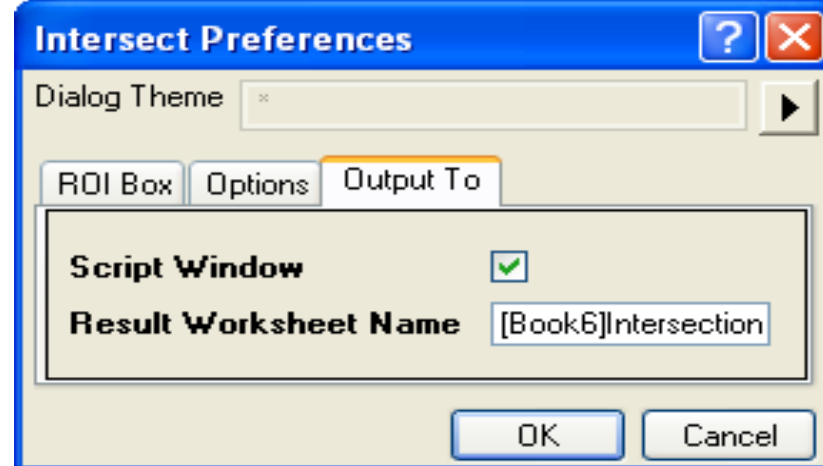
3. V záložce **Options** v uzlu **Intersection Display** zaškrtněte dvě okénka, **Intersection Maker** a **Intersection Label**. Pak nastavte **Size** na **15**, nastavte **Type** na **Y** a nastavte **Rotate(deg.)** na **0** dle obrázku vpravo.

4. Kliknutím na **OK** se vrátíte do okna grafu. Žlutá ROI plocha bude přidána do grafu.

5. Klikněte na tlačítko se šipkou v pravém horním rohu ROI pole, zvolte možnost **Expand to Full Plot(s)** z kontextového menu. ROI box bude rozšířen na plný rozsah grafu, jak je uvedeno na obrázku vpravo.



6. Klikněte na tlačítko se šipkou v pravém horním rohu ROI pole a vyberte **Preferences...** a otevře se okno **Intersect Preferences**. Přejděte na záložku **Output To** a v řádku **Results Worksheet Name** zadejte **[Book6] Intersections**.



7. Kliknutím na tlačítko **OK** se vrátíte do okna grafu. Klikněte na tlačítko se šipkou v pravém horním rohu ROI vyberte **New Output** z kontextového menu.

8. Výsledky budou ve **Script Window**. Znovu klikněte na tlačítko se šipkou a vyberte **Go To Report Worksheet** z menu. Souřadnice **X** a **Y** průsečíků budou uvedeny v listu **Intersections**.

The screenshot shows an Excel spreadsheet titled 'Book6' with a table of intersection data. The table has columns for 'Long Name', 'A(X)', 'B(Y)', 'C', and 'D'. The data rows show intersection points and the curves they belong to.

	A(X)	B(Y)	C	D
Long Name	Intersection X	Intersection Y	Curves	Intersection Method
1	14.73898	-0.26305	Book6_B vs. Book6_C	Linear
2	26.4802	0.32401		
3	35.95356	0.79768		
4	25.56476	0.02267	Book6_B vs. Book6_D	
5	39.1559	-0.6852		
6	23.06123	0.15306	Book6_C vs. Book6_D	
7				
8				

3.1.4 Pomůcka doby náběhu (Rise Time Gadget)

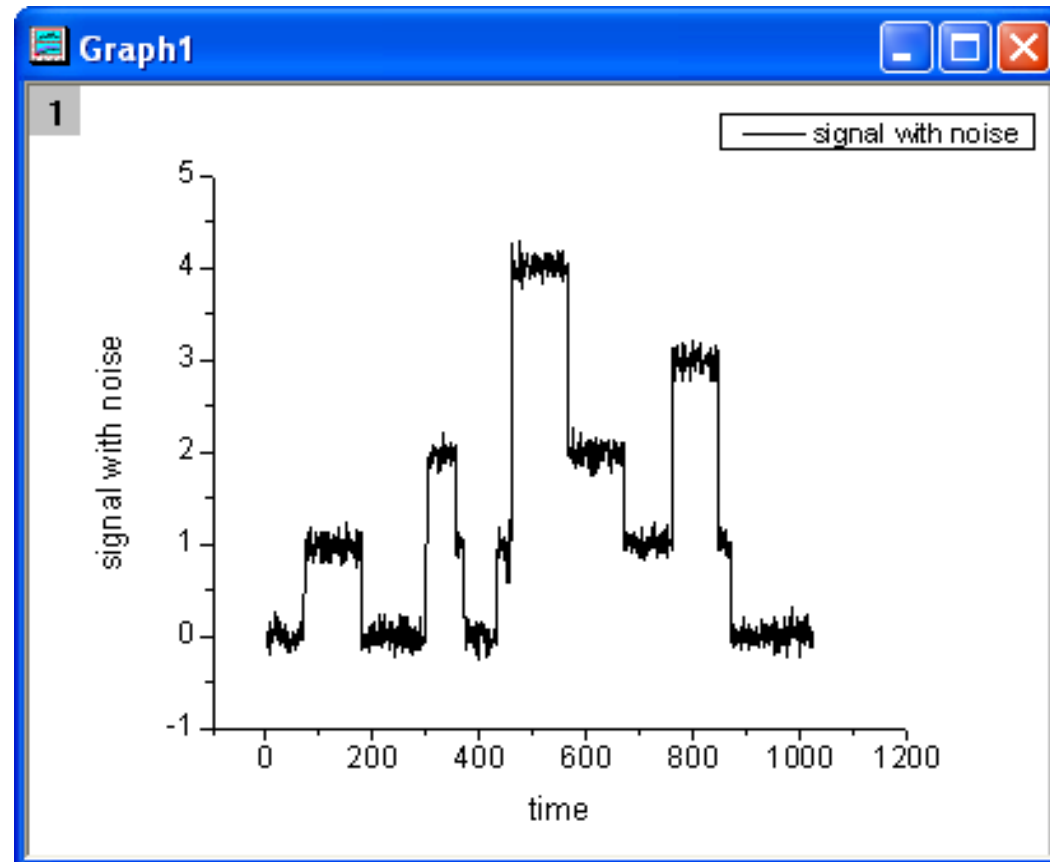
Pomůcku ke sledování doby náběhu (**Rise Time Gadget**) lze použít k analýze rostoucí nebo klesající fáze signálu v grafu. Lze zde intuitivně vybrat oblast na grafu v obdélníku a poté vypočítat čas stoupání nebo čas klesání v této oblasti. Tutoriál ukáže jak vybrat konkrétní oblast signálu přemístěním a změnou velikosti oblasti zájmu (ROI), jak označit **Rise Time** (doba stoupání) a **Fall Time** (doba poklesu) v grafu, jak přepnout mezi nástrojem **Rise Time** (doba náběhu) a **Fall Time** (doba poklesu).

Kroky:

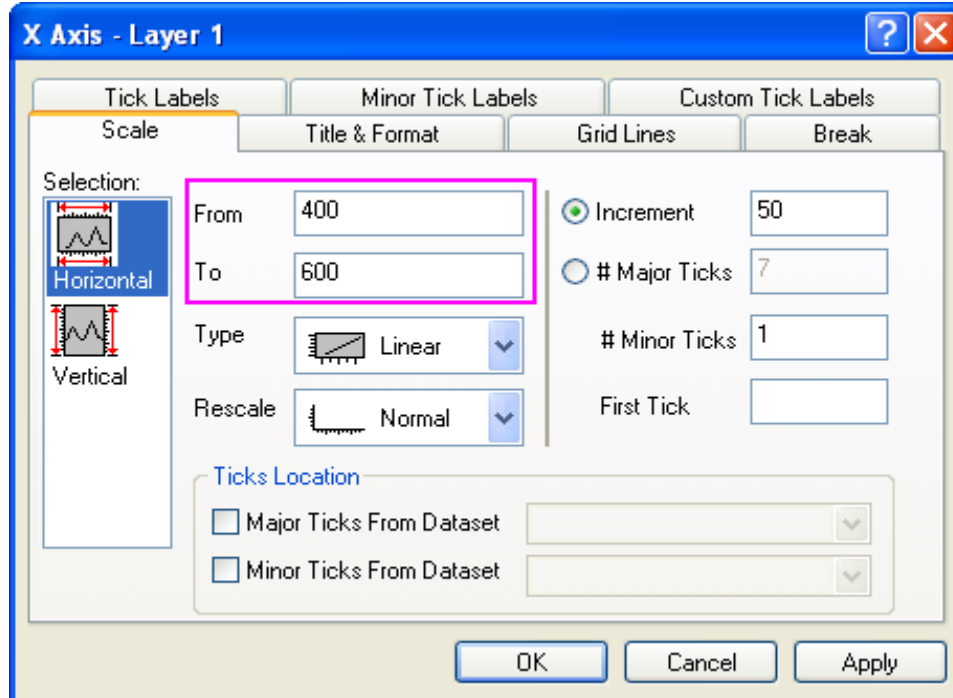
A. Analýza doby stoupání

1. Otevřete **File, Open, Sample, Analysis.opj** v hlavním menu. V **Project Explorer** zvolte **Analysis, OriginPro, Rise Time (Pro Only)**.

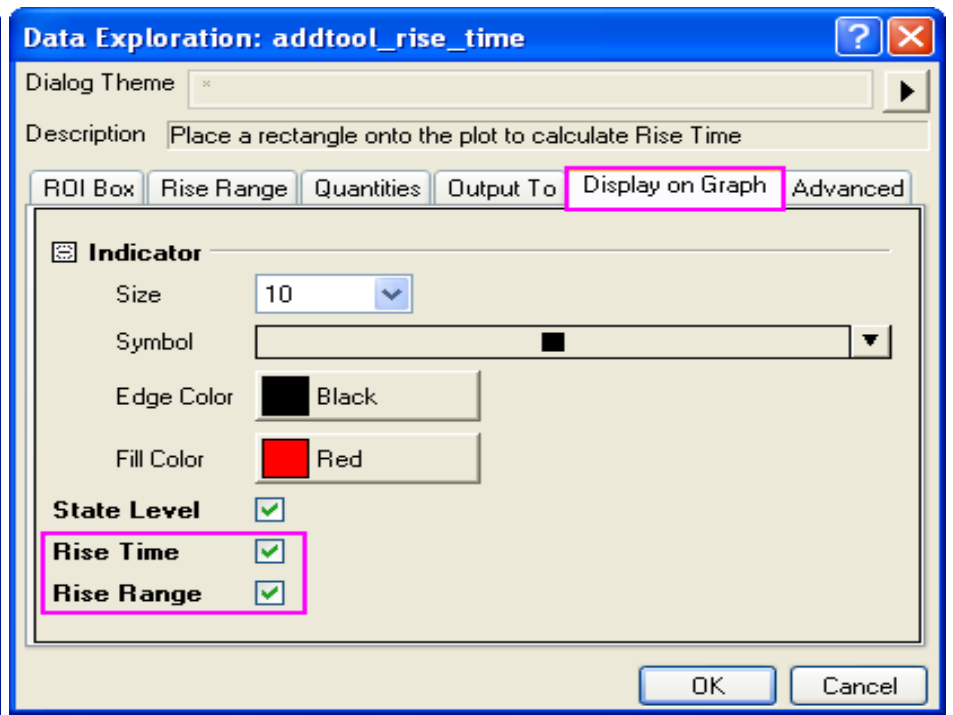
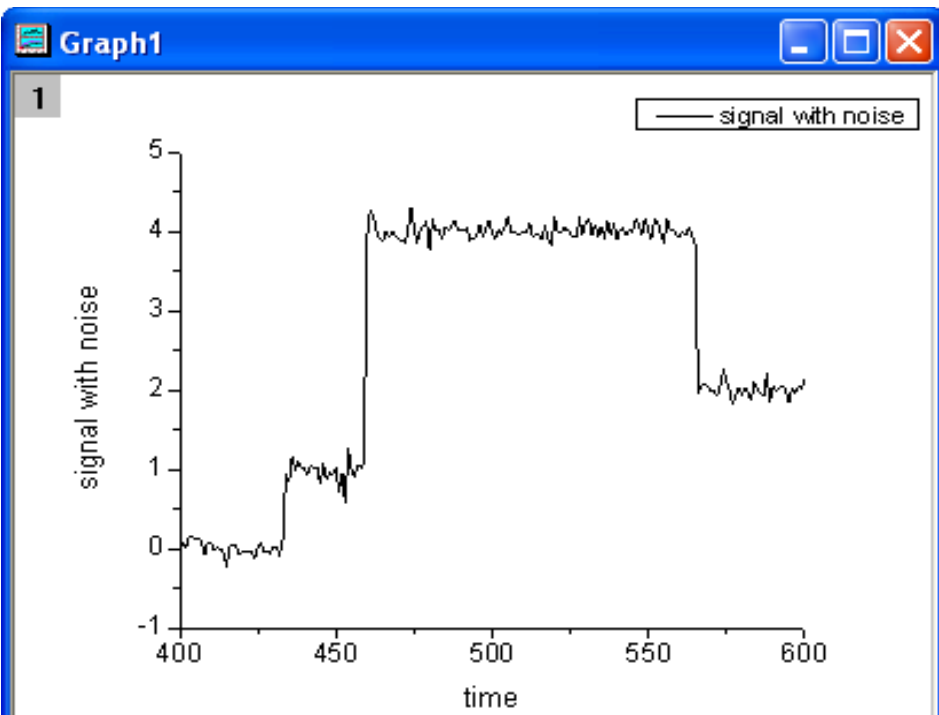
Označte sloupec **B** a zvolte **Plot, Line, Line** a vytvoří se graf.



2. Dvoj-klikem na osu **X** otevřete dialog **Axis**.
Přejděte na záložku **Scale**, vyberte ze **Selection** pole **Horizontal** a nastavit rozsah osy **400-600**.
a **Increment** na **50**. Poté klepněte na **OK**.

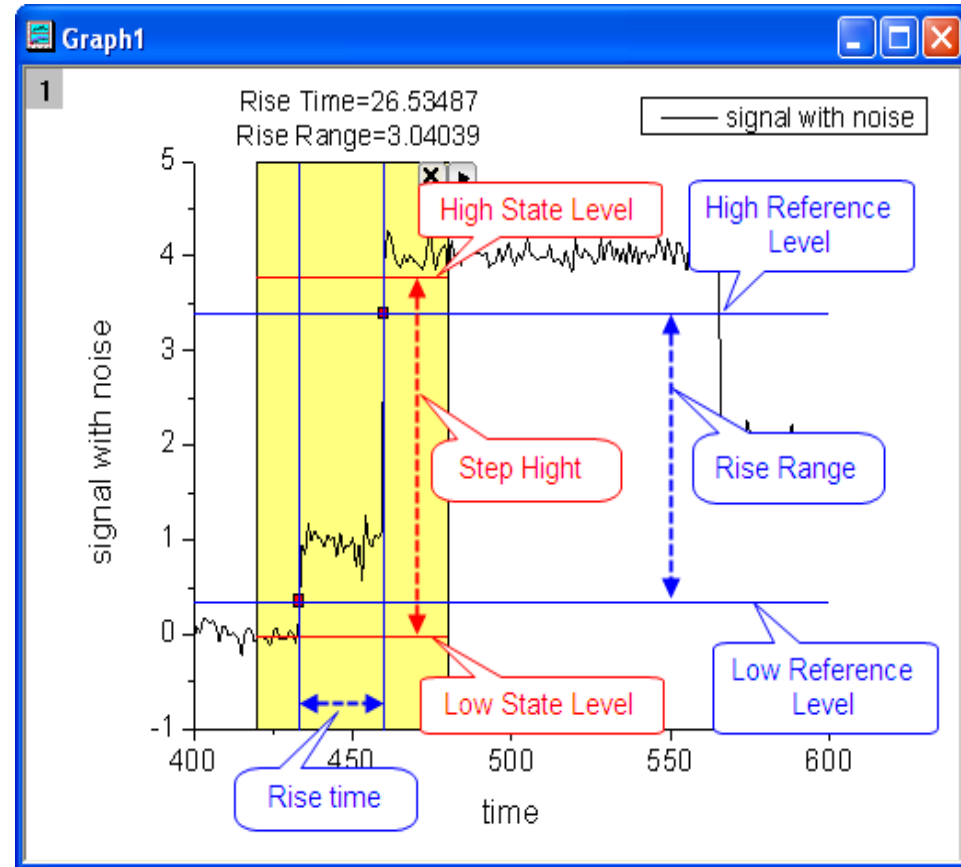


3. Vyberte **Gadgets**, **Rise Time**, a otevře se **Data Exploration:addtool_rise_time**. Přejděte na záložku **Display on Graph** a zaškrtněte políčka **Rise Time** a **Rise Range**.



4. Klikněte na **OK** a uvidíte, že žlutý obdélník byl přidán do grafu. Přesuňte nyní obdélník horizontálně na krok nárůstu signálu.

Vysvětlení: V grafu na obrázku vpravo je vidět **Rise Time** a **Rise Range** v horní části obdélníku. Dvě modré svislé čáry procházejí oběma ukazateli značícími **Rise Time**. Dvě modré vodorovné čáry zobrazují **Low Reference Level** a **High Reference Level** procházejí oběma ukazateli značícími **Rise Range**. Dvě červené vodorovné čáry zobrazují **Low State Level** a **High State Level**.



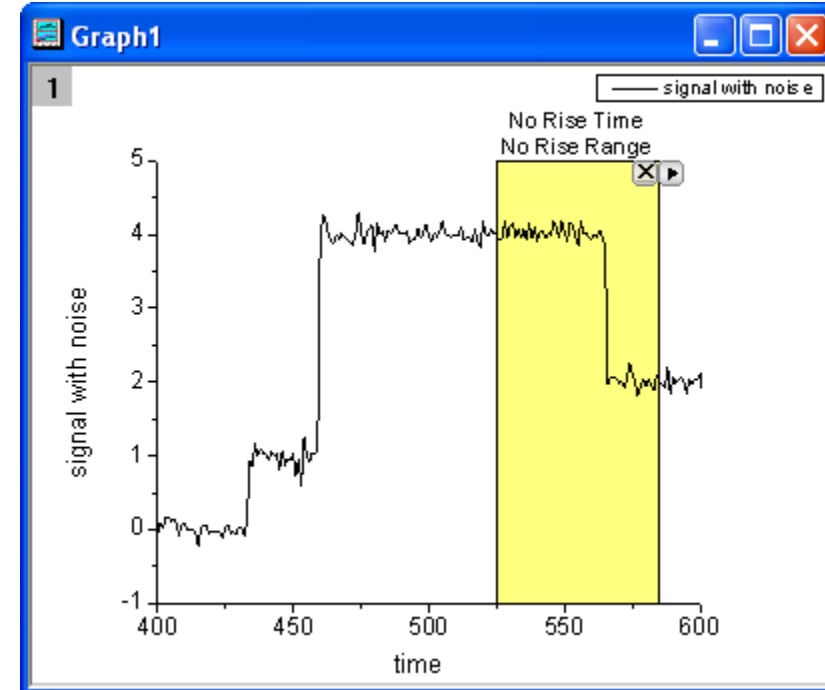
5. Klikněte na tlačítko trojúhelník v pravém horním rohu obdélníku a pak na **New Output**. Výsledky budou v **Script Window**.

```
Script Window
File(Text) Edit Hide Tools

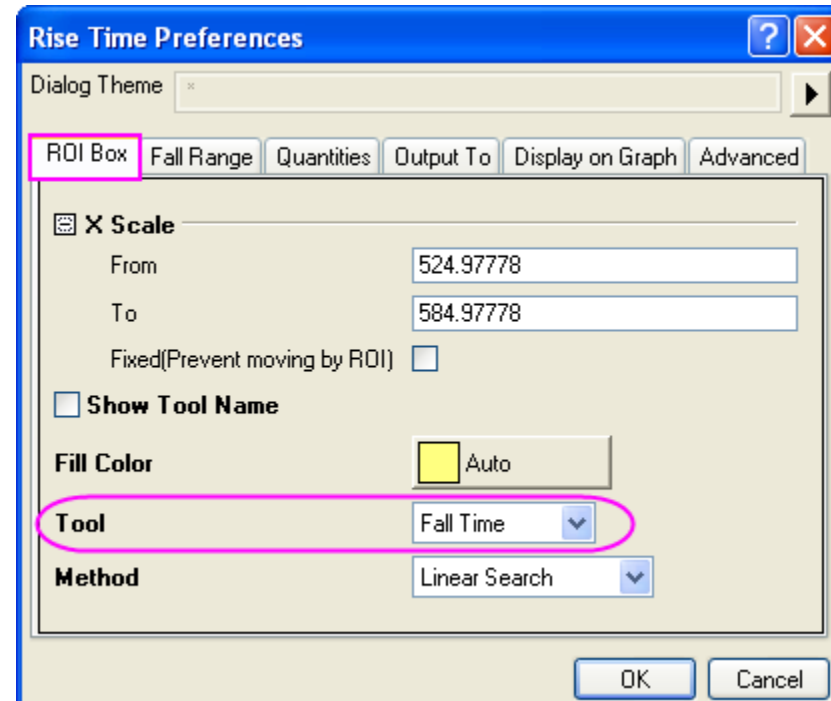
Gadget Rise Time(12/27/2011 10:06:41)
Results of Rise Time
name [StepSignalwit]"Step Signal with Random Noise"?
UMin -0.03398
UMax 3.76651
UrefMin 0.34607
UrefMax 3.38646
T1 433.269
T2 459.80387
dT 26.53487
```

B. Analýza doby poklesu

1. Tato pomůcka umožní získat dobu poklesu a rozsah poklesu v grafu. Přesuňte obdélník horizontálně na místo poklesu signálu.

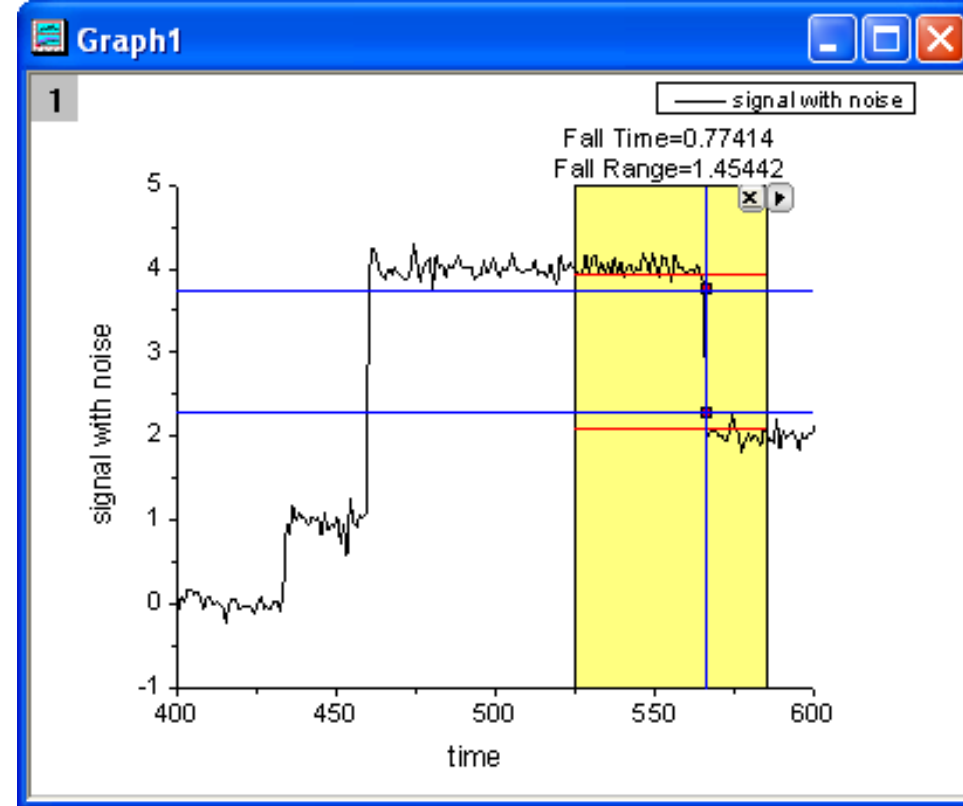


2. Kliknutím na trojúhelníkové tlačítko zvolte **Preferences** a otevře se dialog **Rise Time Preferences**. Přejděte na záložku **ROI Box** a vyberte řádku **Tool** volbu **Fall Time**.



3. Klikněte na **OK**, a doba poklesu **Fall Time** a rozsah poklesu **Fall Range** jsou číselně uvedeny nad žlutým obdélníkem.

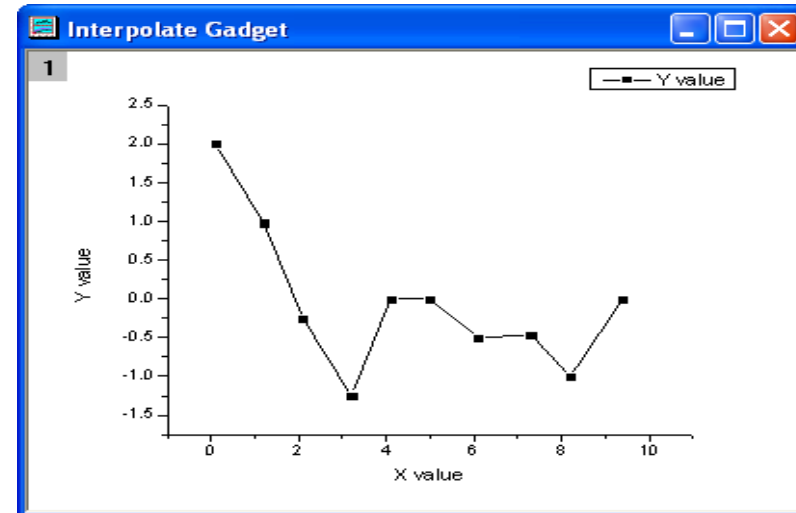
4. Klikněte na tlačítko trojúhelníku a vyberte **New Output**. Výsledky budou v otevřeném **Script Window**.



3.1.5 Pomůcka k interpolaci (Interpolate Gadget)

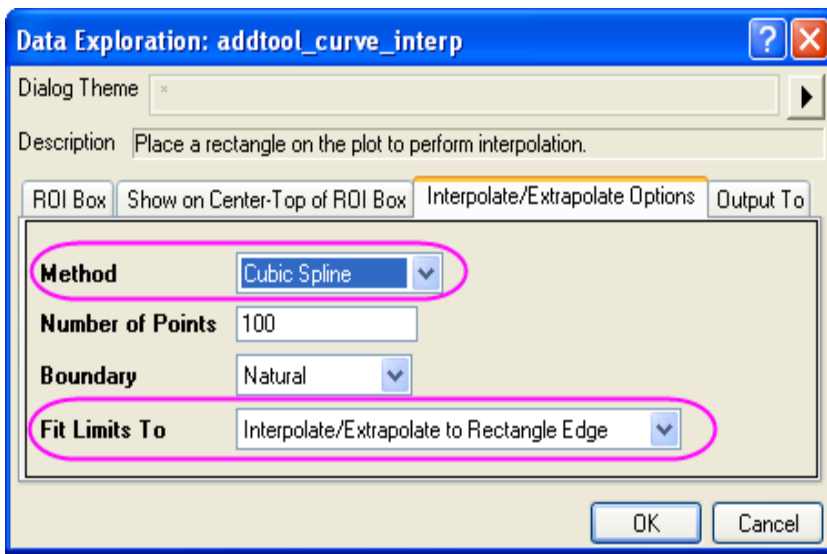
Origin má pomůcku k rychlé interpolaci v oblasti **ROI (Region of Interest)**. Lze snadno změnit interpolační rozsah pohybem **ROI**. Tutoriál ukáže, jak snadno lze interpolovat datové body v obdélníkové oblasti, jak rychle zjistit interpolovanou hodnotu Y z dané hodnoty X, jak se objeví výstup interpolované hodnoty ve skriptu okna **Script Window**, **Result Log** nebo ve specifikovaném listě.

1. Otevřete **File, Open, Sample, Analysis.opj** v hlavním menu. V **Project Explorer** zvolte **Analysis, Interpolate Gadget** a aktivujte **Book1R** a zvýrazněte **col(A)** a **col(B)** a pak nakreslete graf **Plot, Line+Symbol, Line+Symbol**.

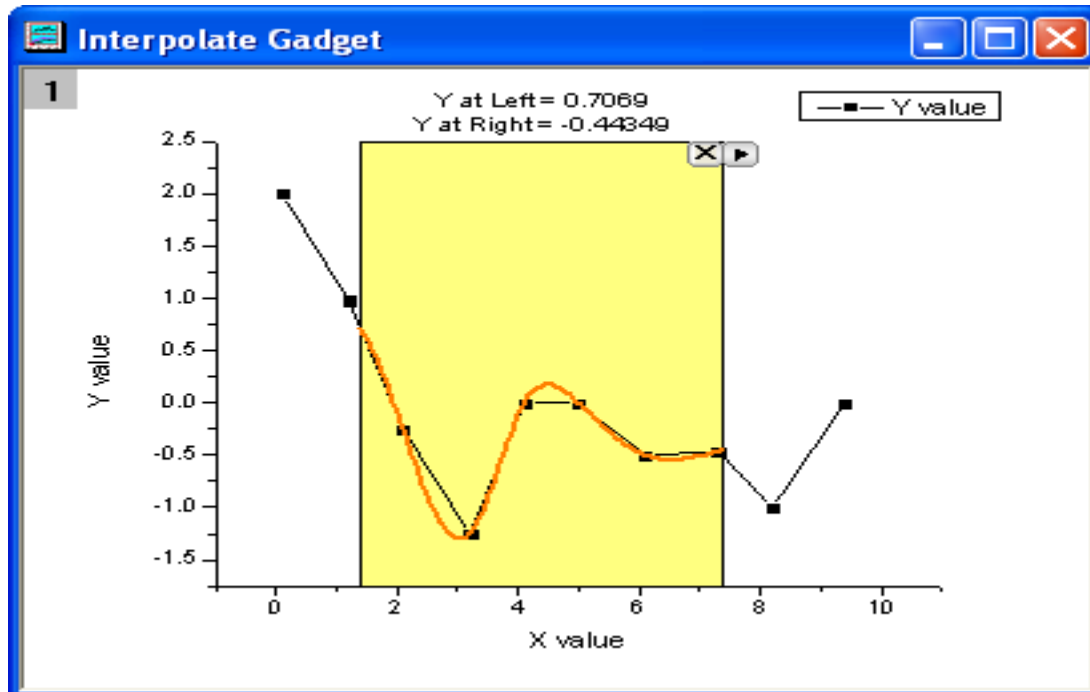


2. Vyberte v menu **Gadget, Interpolate** při aktivním grafu a otevře se dialog **Data Exploration: addtool _curve_intep**.

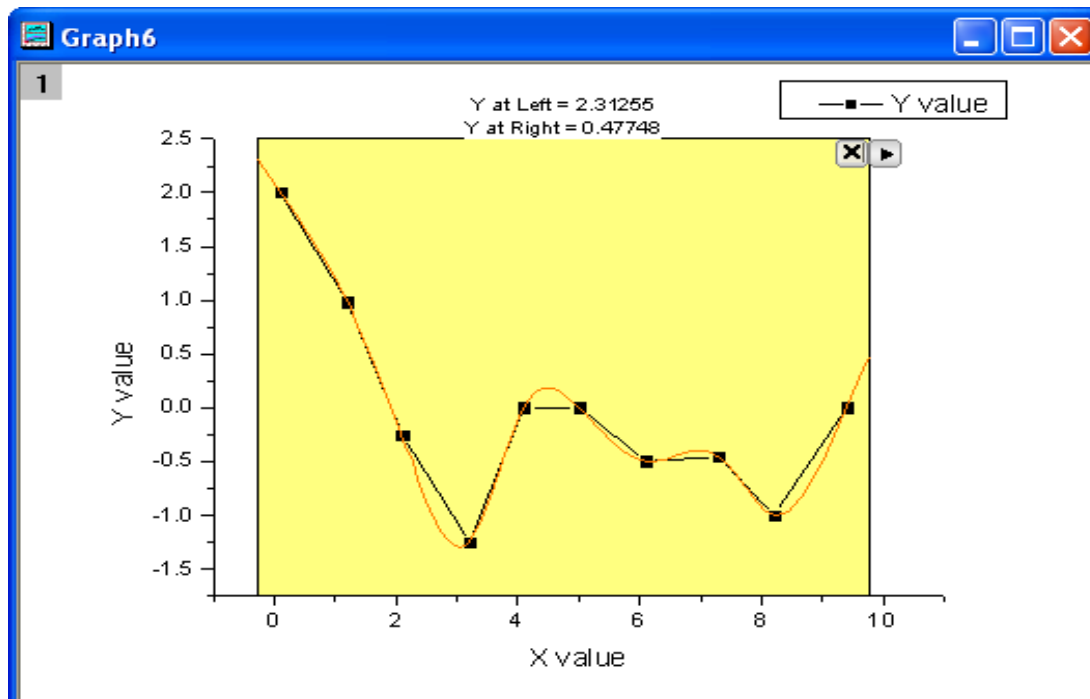
3. Přejděte na záložku **Interpolate/Exterpolate**. V řádku **Method** zvolte **Cubic Spline** a potom vyberte v řádku **Fit Limits To** volbu **Interpolate/Extrapolujete to Rectangle Edge**.



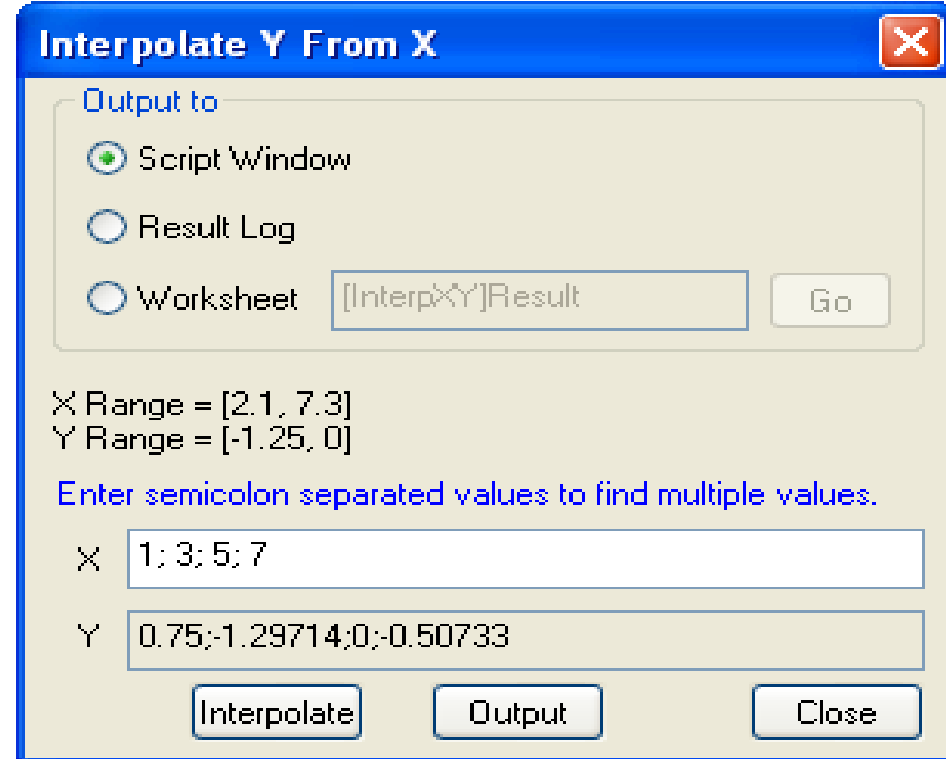
4. Klikněte na **OK**. Bude přidána interpolace křivky v grafu. **Y**-nové hodnoty interpolované křivky na pravé a levé straně jsou zobrazeny nad žlutým obdélníkem.



5. Můžete změnit rozsah dat přemístěním nebo změnou velikosti žluté oblasti obdélníka, interpolovaná křivka bude aktualizována dle přesunutí oblasti ROI. Kliknutím na trojúhelníkové tlačítko šipky zvolte **Expand to Full Plot(s) Range** a bude se interpolovat celková plocha pro křivku.



6. Tato pomůcka také umožňuje vyhledání hodnoty **Y** k dané hodnotě **X**. Kliknutím na trojúhelníkovou šipku vyberte v roletce interpolovat **X/Y** na fly-out menu otevřete **Interpolate X/Y**. Můžete zadat více hodnot **X** a pak klikněte na tlačítko **Interpolate**. Tento nástroj přinese na výstupu interpolované hodnoty **Y** pro každou hodnotu **X**.



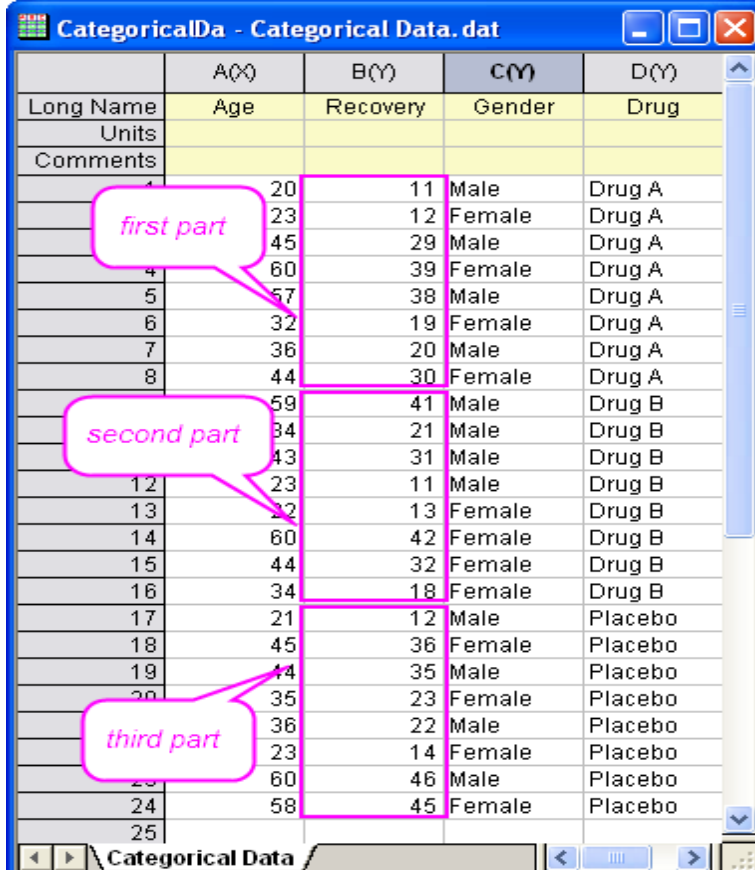
7. Interpolované hodnoty **Y** jsou ve výstupu **Script Window**, **Result Log** nebo na zvláštním listu.

3.1.6 Pomůcka shlukování (Cluster Gadget)

Origin přináší také pomůcku shlukování (Cluster Gadget) k provádění jednoduchých statistik v oblasti dat (**ROI**) na grafu. Pomůcku lze rovněž použít k editaci, mazání nebo maskování bodů. Výsledky statistik jsou dynamicky aktualizovány tak, jak je ROI objekt přesouván po ploše grafu nebo jak je měněna jeho velikost. Tutoriál ukáže, jak provést jednoduché statistické údaje o oblasti dat (ROI) v grafu, jak upravit datové body, jako vyčistit nebo maskovat body v grafu pomocí položky menu nebo tlačítka, jak zobrazit nebo výstup na statistiku pro body uvnitř i vně ROI.

A. Provedení základní statistiky

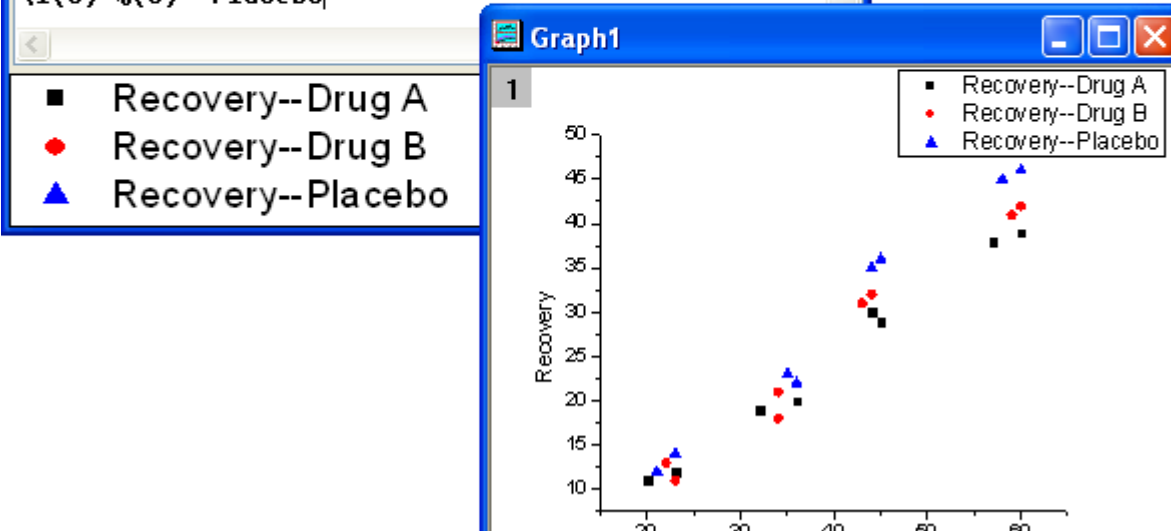
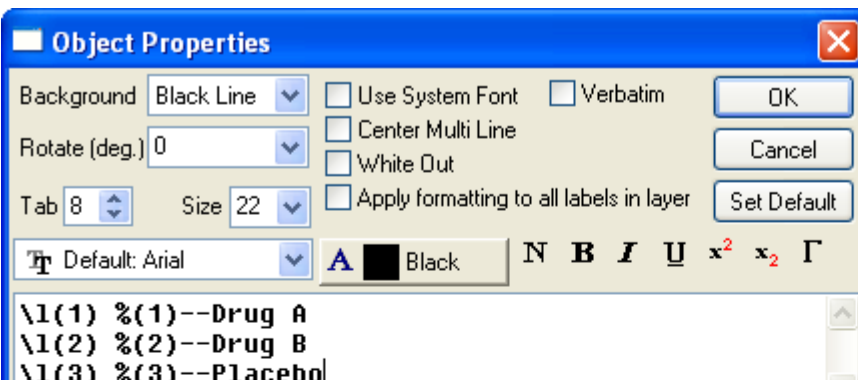
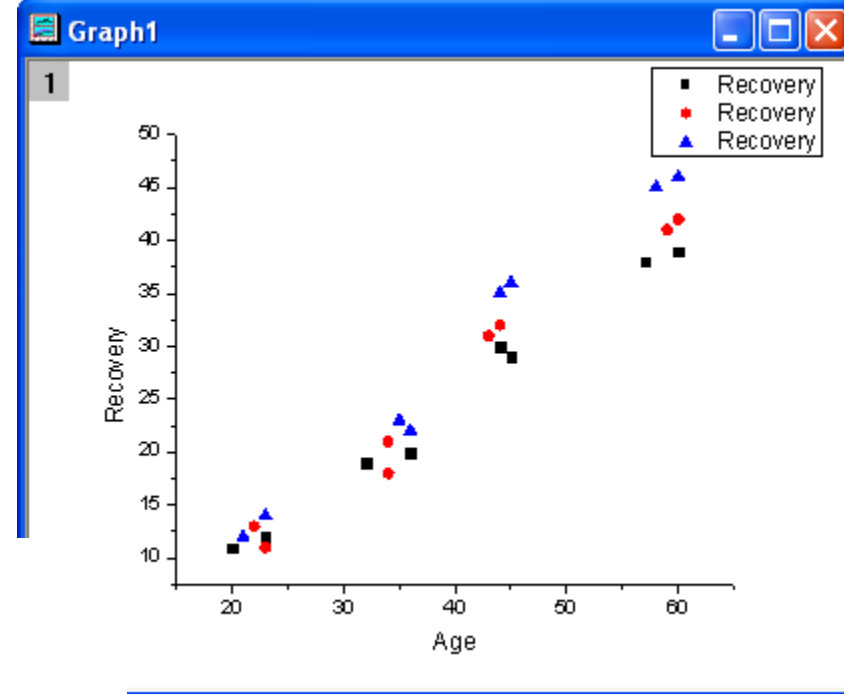
1. Začněte s novým sešitem **File, Import, Import Wizard, Samples, Graphing** a naimportujte data **Categorial Data.dat**. Označte **Col(D)** a pak klikněte pravou myší na **Col(D)** a vyberte **Worksheet, Sort Worksheet, Ascending**. Pak bude list seřazen podle kategorie **Drug**.
2. Stisknutím klávesy **Ctrl** a označte tři části **Col(B)** odděleně.



	A(D)	B(Y)	C(Y)	D(Y)
Long Name	Age	Recovery	Gender	Drug
Units				
Comments				
1	20	11	Male	Drug A
2	23	12	Female	Drug A
3	45	29	Male	Drug A
4	60	39	Female	Drug A
5	57	38	Male	Drug A
6	32	19	Female	Drug A
7	36	20	Male	Drug A
8	44	30	Female	Drug A
9	59	41	Male	Drug B
10	34	21	Male	Drug B
11	43	31	Male	Drug B
12	23	11	Male	Drug B
13	22	13	Female	Drug B
14	60	42	Female	Drug B
15	44	32	Female	Drug B
16	34	18	Female	Drug B
17	21	12	Male	Placebo
18	45	36	Female	Placebo
19	44	35	Male	Placebo
20	35	23	Female	Placebo
21	36	22	Male	Placebo
22	23	14	Female	Placebo
23	60	46	Male	Placebo
24	58	45	Female	Placebo
25				

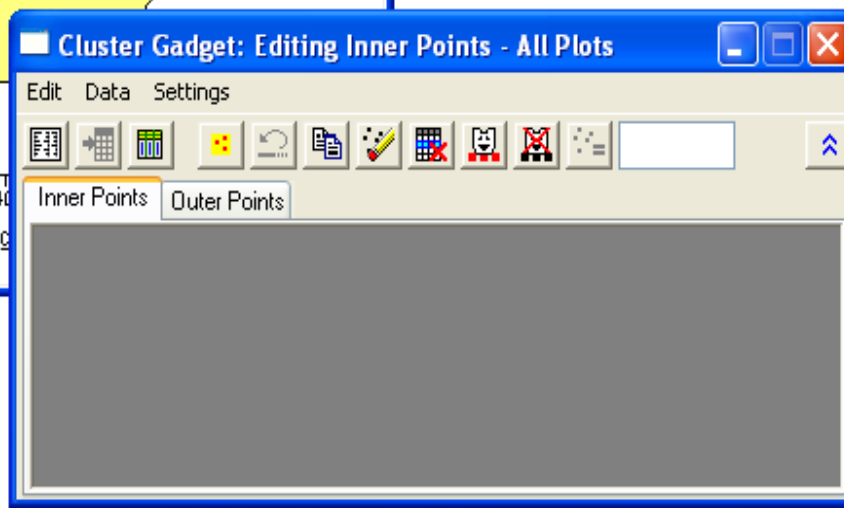
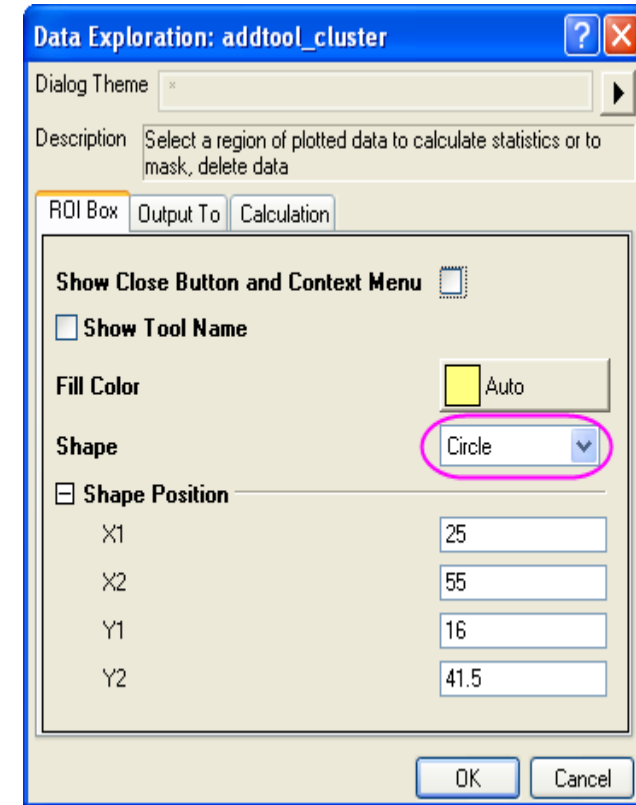
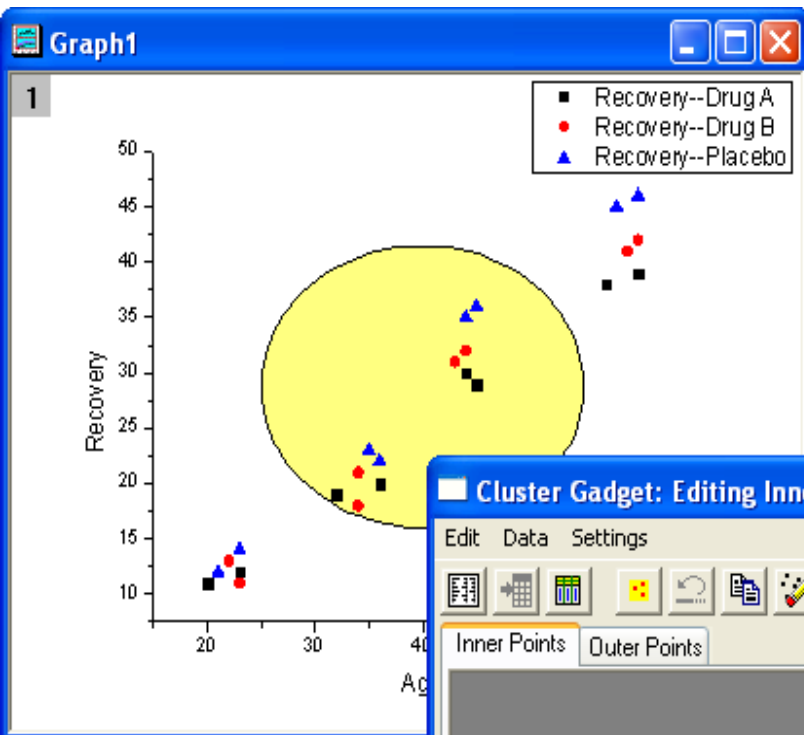
3. Zvolte **Plot, Symbol, Scatter** z hlavního menu vytvořit graf. Graf se třemi křivkami zobrazí Recovery každého léku na obrázku vpravo.

4. Klikněte pravou myší na legendu grafu a vyberte **Properties** aby se otevřel dialog **Object Properties**. Poté upravte legendu, jak je uvedeno na obrázku níže. Klikněte na **OK**.



5. Vyberte **Gadgets, Cluster** z menu, když je aktivní graf a otevře se **Data Exploration:addtool_cluster**. Na záložce **ROI** zvolte v řádce **Shape** volbu **Circle**.

6. Klikněte na **OK**. Dodá se žlutý kruh pro ROI v grafu a vyvolá se dialog **Cluster Gadget**.



B. Vyloučit datové body ze shluku

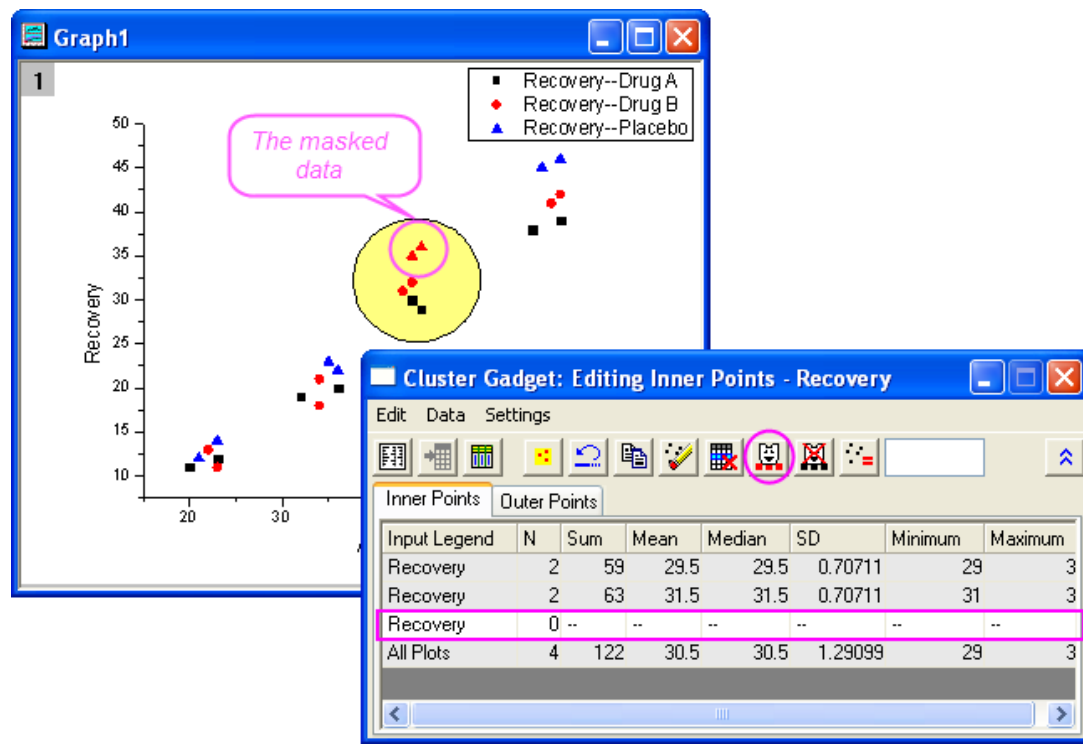
Tutoriál ukáže, jak vyloučit konkrétní křivku ze shluku. Na výše uvedeném příkladu se vyčíslí jednoduché statistiky o **Recovery of Drug A** a **Recovery of Drug B** s výjimkou **Recovery of Placebo**.

1. Klikněte na **Data** v dialogovém okně **Cluster Gadget** a zrušte zaškrtnutí **Plot(1)** a **Plot(2)**. První a druhý řádek se stal šedým ve spodním panelu a nelze již s nimi manipulovat pomocí tlačítek dialogu.

2. Klikněte v menu na **Edit, Mask Data Points**. **Recovery of Placebo** datových bodů v ROI jsou v grafu maskovány a jejich barva zčervenala. Současně chybí výsledky statistiky pro **Recovery of Placebo**.

3. Klikněte na první ikonku zleva **Output Statistics Report**.

Výsledky jsou výstupem na **Results Log, Script Window, a Cluster Workbook**.

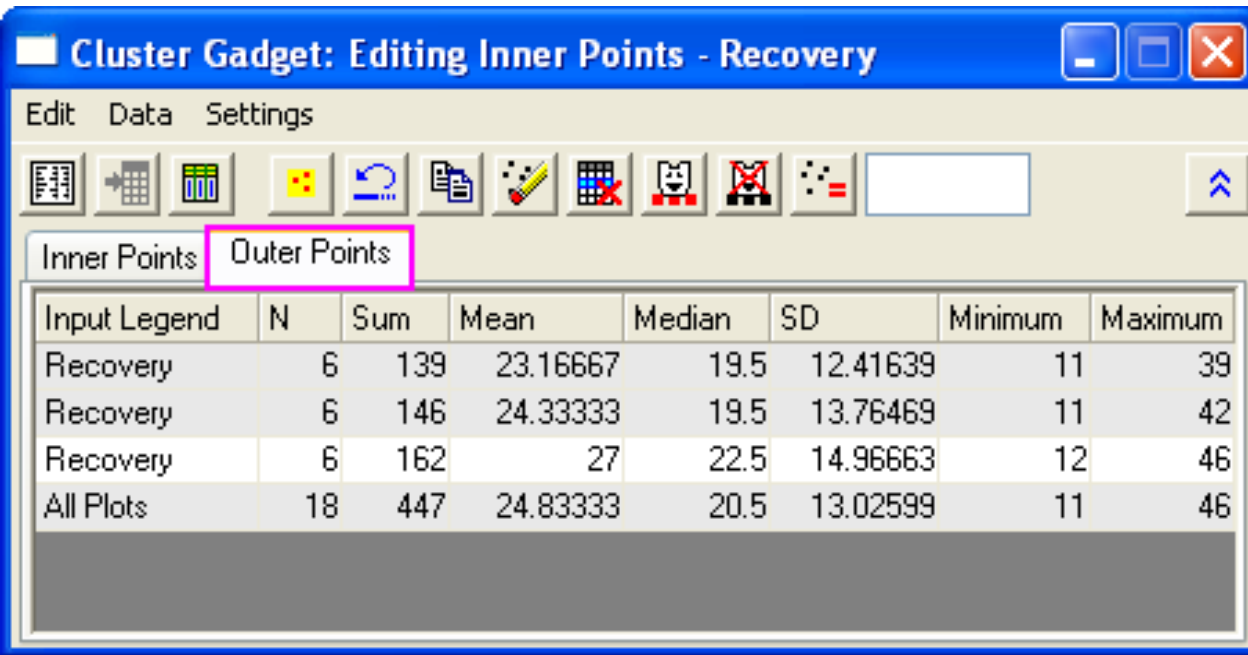


C. Získat výsledky statistiky pro body mimo ROI

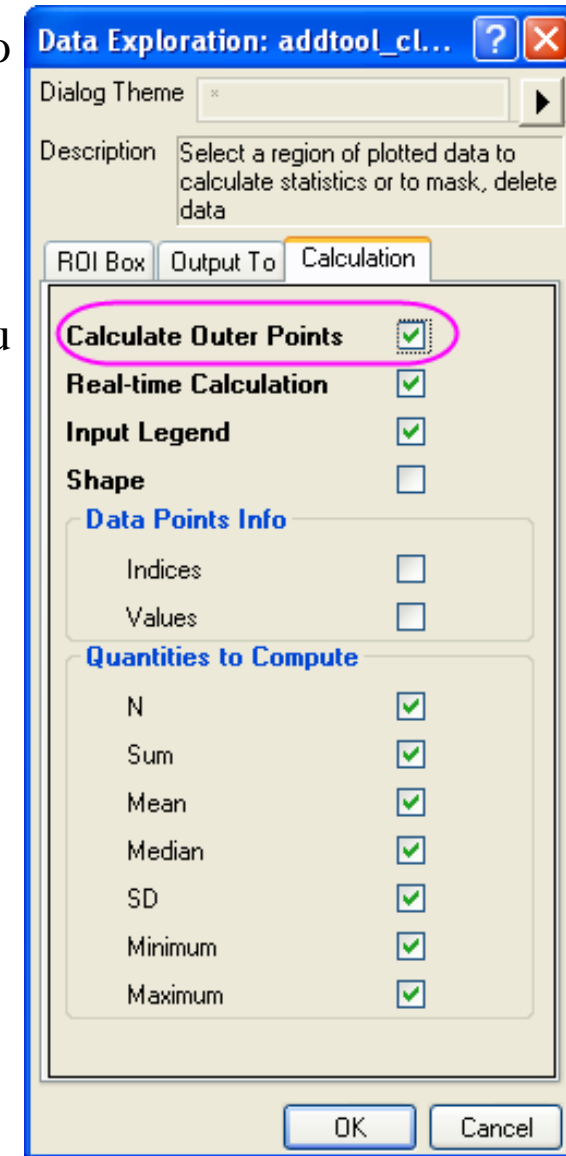
1. Klikněte na **Settings, Preferences** a otevře se dialogové okno **Cluster Manipulation Preferences**.

2. Přejděte na **Calculation** a zaškrtněte **Calculate Outer Points**.

3. Klikněte na **OK**, výsledky statistiky pro body mimo ROI jsou uvedeny na záložce **Outer Points**.



Input Legend	N	Sum	Mean	Median	SD	Minimum	Maximum
Recovery	6	139	23.16667	19.5	12.41639	11	39
Recovery	6	146	24.33333	19.5	13.76469	11	42
Recovery	6	162	27	22.5	14.96663	12	46
All Plots	18	447	24.83333	20.5	13.02599	11	46



4. Klikněte na první ikonku **Output Statistics Report**. Výsledky pro vnitřní a vnější body jsou uvedeny v **Result Log, Script Window** a **Cluster Workbook**.

