

Zkušenosti s tvorbou náročných grafů editorem ORIGIN

Ing. Tomáš Syrový,

*Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice,
tomas.syrovy@upce.cz*

a

Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.,

*Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice,
milan.meloun@upce.cz*

Souhrn: *V dnešní době, kdy se v laboratořích z měřicích zařízení získává velké množství dat, musí experimentátor umět svá data nejen rychle a správně vyhodnotit, ale měl by zároveň ovládat i jejich rychlou a kvalitní grafickou prezentaci. Správná grafická prezentace výsledků je velmi užitečná, neboť je většinou více přehledná a lépe vypovídá než-li data umístěná v tabulce.*

Většina experimentátorů ke grafickému zpracování svých dat využívá poměrně omezených možností MS Excelu, pomocí kterého lze sice vytvořit mnohé typy grafů, avšak ty svou formou, stylem a možnostmi manipulace neodpovídají jednak současnému objemu zpracovávaných dat, a dále požadavkům redakcí odborných časopisů. Možnosti úpravy vzhledu a uspořádání grafických výstupů jsou však jednou stránkou věci. Dalším požadavkem je nutnost rychlé manipulace s grafy, měnit naráz více parametrů, a to nejen pro jedince ale i pro skupinu grafů, dále možnost vytvářet šablony a styly, které umožní velmi snadno a rychle vytvořit typograficky dokonalý obrázek. Z hlediska kompatibility a slučitelnosti s ostatními software je neméně důležitý i import, export dat a obrazových formátů.

Na dnešním trhu je mnoho firem, které nabízejí své produkty splňující tyto požadavky. Mezi tyto programy patří např.: SigmaPlot 8.0, Axum, Prisma, Microcal Origin 7.5 aj. Na základě zkušeností s předešlými verzemi a demoverzemi současných produktů nám byl po stránce rychlosti editace a snadnosti ovládaní nejvíce sympatický produkt fy Microcal Origin, který je v dnešní době nabízen v 7. generaci pod obchodním názvem Origin 7.5.

Charakteristika:

Origin 7.5 se vedle kvality uživatelského rozhraní rovněž vyznačuje velice rozsáhlými paletami typů grafů a možnostmi jejich uspořádání. V posledních verzích byly vylepšeny mnohé moduly. Velkých změn prodělal modul importu dat, který umožňuje importovat velice širokou škálu souborů, jak v ASCII kódu, tak v jiných formátech. Lze definovat vlastní podmínky importu, jako typ oddělovače, možnost definice umístění oddělovačů v datech aj. Nechybí ani podpora pro otevírání projektů konkurenčních softwarů, či možnost otevírání souborů dat nejznámějších výrobců laboratorních přístrojů. Poslední generace je vybavena i podporou importu běžných grafických formátů, u kterých lze provádět základní analýzu obrazu. Schopnosti exportu grafických výstupů originu nejsou omezeny jen na základní typy formátů jako *.wmf, *.bmp, ale jsou zde zahrnuty i profesionální postskriptové typy souborů jako *.eps, či *.pdf.

Origin podporuje již po několik verzí možnost práce se sešitem MS Excelu uvnitř originu, kdy po otevření *.xls se původní originovské menu rozšíří o menu MS Excelu. Slučitelnost mezi těmito programy je stále více prohlubována a nyní je například možné vkládat data do grafu metodou drag&drop, což nesmírně usnadňuje práci. Integrace MS Excelu v originu nabízí všem, kdo jsou zvyklí používat výpočtů a maker v MS Excelu bezproblémový přechod na tvorbu grafů v originu. Origin rovněž umožňuje běžné výpočty v sloupcích a řádcích. V rozsahu výpočtů v tabulkách, cyklických výpočtů, možnosti použití kontingenčních tabulek a jiných vymožeností není však natolik rozsáhlý jako tabulkový procesor MS Excel. Tyto uživatelsky jednodušší způsoby řešení

rozličných výpočtových úloh lze v nové verzi řešit díky zpřístupnění Origin C jazyka, v kterém si lze programovat vlastní subrutiny a výpočtové moduly, jenž lze pomocí active-X prvků lehce zpřístupnit v menu. Do matematické části lze zahrnout i statistiku obsaženou v originu. Jedná se spíše o základní statistickou analýzu jednorozměrných dat, jako identifikace rozdělení výběru dat, t -testy, jednofaktorovou a dvoufaktorovou analýzu dat aj. Mezi silnou stránku software Origin patří jeho lineární a obzvláště nelineární regrese. Ta je zde velmi kvalitně zpracována a obsahuje velké množství předpogramovaných funkcí z různých oborových odvětví. Samozřejmostí je i možnost zadání vlastní funkce, spolu s možností využití statistických vah. Je nutné podotknout, že i při velmi vzdálených počátečních odhadech nelineární regrese velmi rychle a spolehlivě konverguje. Dle potřeby lze volit mezi jednoduchými, či rozšířenými statistickými výstupy.

Menu originu je celkově velmi logicky členěno a těm, kteří byli zvyklí na starší verze 3-tí a 4-té generace by přechod na současnou verzi neměl činit žádné potíže, neboť filozofie ovládání je napříč generacemi zachována.

Paleta grafů, které origin nabízí je velmi široká, počínaje klasickými bodovými, sloupcovými, koláčovými grafy, přes mnohé typy statistických grafů, konče rozličnými typy 3D grafů. Všechny typy grafů lze libovolně modifikovat, po stránce formátu, barev, rozměrů, legend, umístění aj. Úpravy typografických parametrů lze provádět naráz, jak pro jednotlivé osy, tak i pro celý projekt. Vytvořené typografické styly je možné uložit do předvoleb, které lze velmi lehce aplikovat na čerstvě vytvořený neformátovaný graf. Předvolba stylu se může aplikovat buď celá, či jen její část. Tato vymoženost umožňuje velmi rychle graf upravit do konečné podoby. Grafy a jiné objekty lze libovolně uspořádat na stránku, do vrstev a provazovat je. Uspořádání objektů na stránce je možné uložit jako šablonu a později rychle vyvolat a vložit do ní data. Program dovoluje vkládat do polí grafů tabulky s daty, pole formátovaného textu a obrázky. Origin nabízí základní grafické nástroje na tvorbu různých obrazců, šipek, křivek, pomocí nichž lze

nakreslit např. i jednoduchá technická schémata. Všechny tyto schopnosti umožňují vytvářet uvnitř originu postery bez nutnosti použít specializované grafické programy.

Ze speciálních nadstavbových pomůcek je nutné zmínit Peak Fitting Module. Jedná se o speciální modul, navržený pro odvětví zabývající se separačními metodami jejichž experimentální výstupy mají povahu píků. Tento modul obsahuje mnoho pomůcek k vyhodnocení chromatogramů, jako výpočet ploch pod píky, vyhlazování píků a další.

Závěr:

Lze uzavřít, že Microcal Origin 7.5 patří mezi nejlepší grafické editory (ve smyslu nejkomfortnější a nejvyvinutější), co je nabízeno na dnešním trhu.

Poděkování:

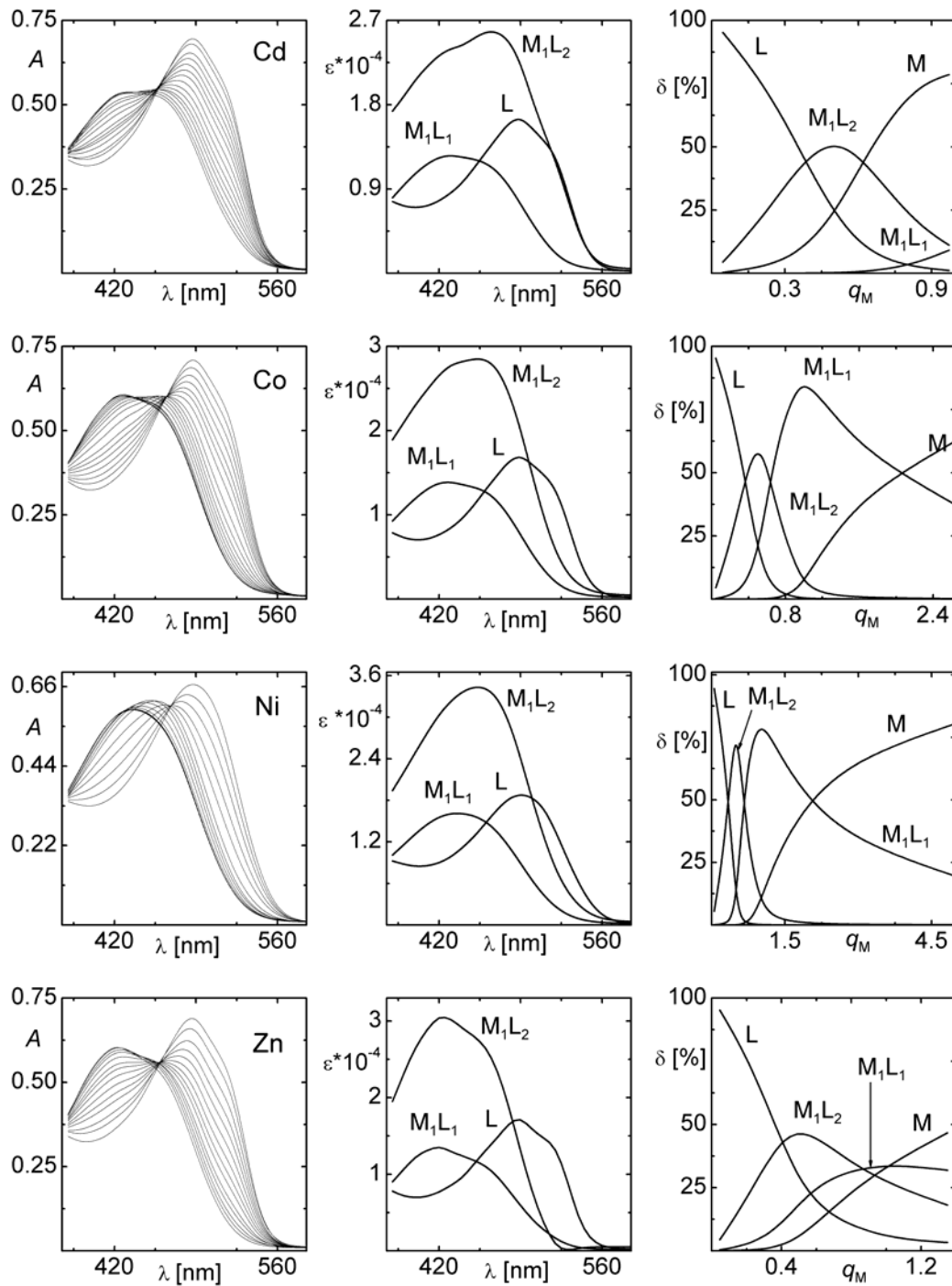
Je vyjádřen dík za finanční podporu vědeckého záměru MSM253100002 a grantu NB/7391-3.

Doporučená literatura:

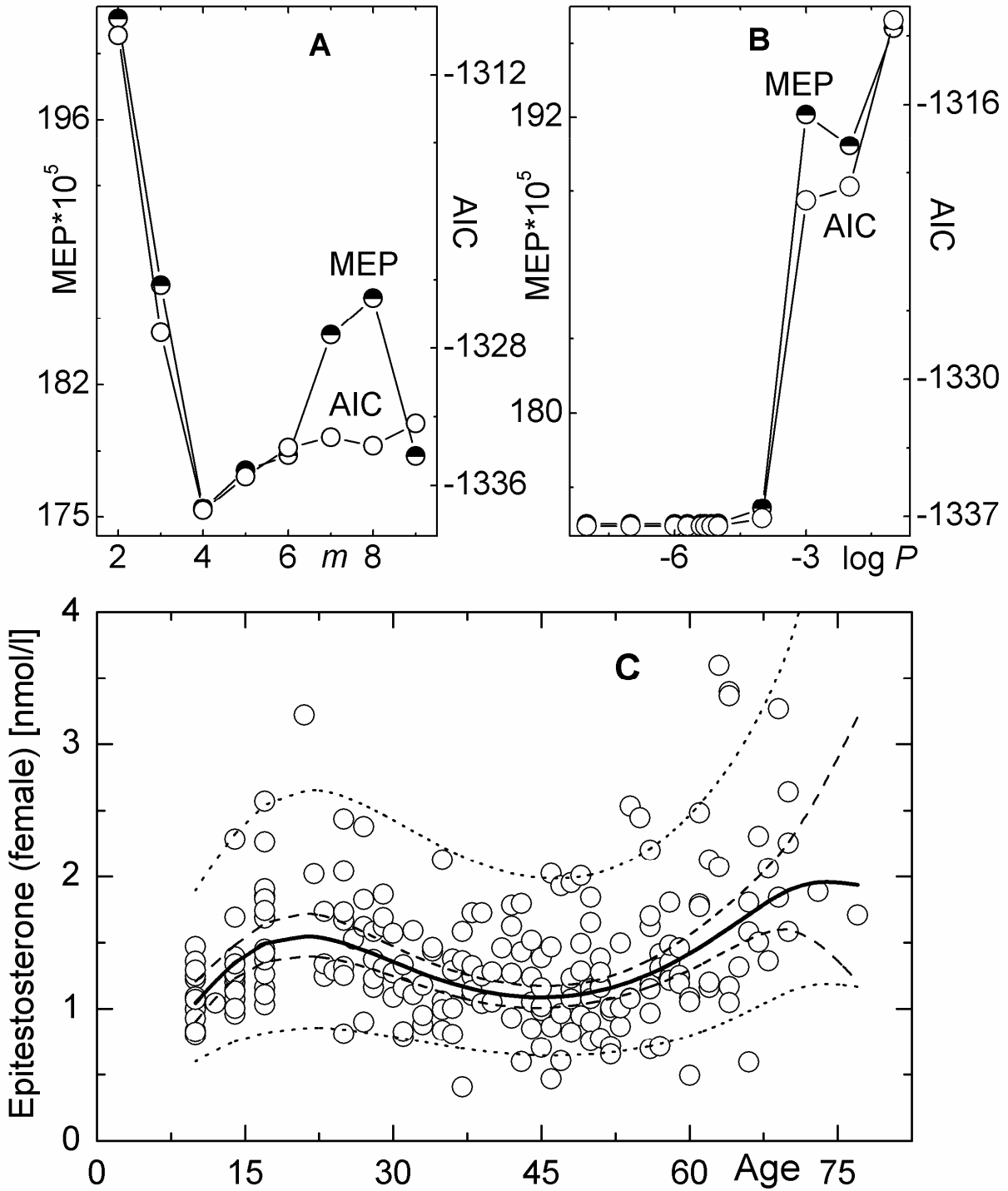
- [1] OriginLab Corporation, *Origin 7.5 – Users ' Manual*, 2003.
- [2] OriginLab Corporation, *Origin 7.5 – Getting Started Manual*, 2003.
- [3] OriginLab Corporation, *Origin 7.5 – Peak Fitting Module Manual*, 2003.
- [4] www.OriginLab.com, 2.3.2004.

Grafické ilustrace:

1. ukázka: Graf spekter, molárních absorpčních koeficientů a distribuční diagram .



2. ukázka: Hledání závislosti koncentrace epitestosteronu v krvi žen na věku.



3. ukázka: 3D graf reziduí po nelineární regresi spekter léčiva.

